PHYSIQUE

Éric AKKERMANS - Gilles MONTAMBAUX

Physique mésoscopique des électrons et des photons

SAVOIRS ACTUELS

CNRS EDITIONS

EDP SCIENCES

Éric Akkermans et Gilles Montambaux

Physique mésoscopique des électrons et des photons

SAVOIRS ACTUELS

EDP Sciences/CNRS Éditions

Illustration de couverture : Intensité réfléchie (albédo) par un échantillon de billes de polystyrène, obtenue en moyennant sur la position des billes. Elle est maximale au centre, c'est-à-dire dans la direction de rétrodiffusion. La courbe donne la dépendance angulaire de l'intensité. Elle présente le cône caractéristique de la rétrodiffusion cohérente (Photo courtoisement fournie par Georg Maret).

© **2004, EDP Sciences**, 17, avenue du Hoggar, BP 112, Parc d'activités de Courtabœuf, 91944 Les Ulis Cedex A
et
CNRS ÉDITIONS, 15, rue Malebranche, 75005 Paris.

Tous droits de traduction, d'adaptation et de reproduction par tous procédés réservés pour tous pays. Toute reproduction ou représentation intégrale ou partielle, par quelque procédé que ce soit, des pages publiées dans le présent ouvrage, faite sans l'autorisation de l'éditeur est illicite et constitue une contrefaçon. Seules sont autorisées, d'une part, les reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective, et d'autre part, les courtes citations justifiées par le caractère scientifique ou d'information de l'œuvre dans laquelle elles sont incorporées (art. L. 122-4, L. 122-5 et L. 335-2 du Code de la propriété intellectuelle). Des photocopies payantes peuvent être réalisées avec l'accord de l'éditeur. S'adresser au : Centre français d'exploitation du droit de copie, 3, rue Hautefeuille, 75006 Paris. Tél. : 01 43 26 95 35.

ISBN EDP Sciences 2-86883-712-3
ISBN CNRS ÉDITIONS 2-271-06263-2

Avant-propos

L'étude de la propagation des ondes dans les milieux désordonnés a donné lieu depuis plus de vingt ans à une somme énorme de travaux. Ceux-ci ont contribué à définir un vaste domaine aux contours de plus en plus flous qui recouvre à la fois les problèmes de localisation (faible ou forte), de physique mésoscopique, des effets de l'interaction entre électrons dans les métaux, etc. De plus, certains effets n'étant pas spécifiques à un type particulier d'ondes, des approches se sont développées indépendamment en physique de la matière condensée, en optique, en physique atomique et en acoustique.

Il existe dans la littérature de nombreuses monographies et articles de revue d'excellente qualité traitant en détail tel ou tel de ces différents aspects. Notre but, dans cet ouvrage, n'est pas de nous situer au même niveau que ces contributions mais plutôt de chercher, d'une part, un dénominateur commun à tous ces effets et, d'autre part, de permettre au lecteur non spécialiste d'avoir en main les outils nécessaires à l'étude des travaux effectués dans ce domaine.

Notre premier souci a donc été de présenter au moyen *d'un formalisme unique*, une description des phénomènes physiques importants, cette description étant indépendante du type d'onde considéré (électrons, ondes lumineuses, etc.). À cette fin, nous avons d'abord repris en détail dans le cadre du modèle dit « de désordre gaussien », le calcul des quantités moyennes à une particule : densité d'états, temps moyen de collision élastique pour les deux classes les plus importantes d'équation d'ondes, à savoir l'équation de Schrödinger et l'équation de Helmholtz scalaire. Nous avons, autant que possible, essayé de préciser l'idée, centrale dans ce domaine, de diffusion multiple sur des diffuseurs effectifs indépendants dont la section efficace peut être obtenue dans le cadre de la théorie de la diffusion à une particule.

Les propriétés physiques généralement mesurées dans les milieux diffusants dépendent pour la plupart de la probabilité quantique décrivant la propagation d'un paquet d'onde d'un point à un autre. Cette quantité est donc fondamentale et nous avons consacré tout le chapitre 4 à son étude détaillée. On voit apparaître en particulier, les contributions classique (diffuson) et cohérente (cooperon) à cette probabilité, qui sont à la base des différents phénomènes physiques observés comme les corrections de localisation faible à la conductance électronique, la magnétorésistance négative en champ magnétique, la rétrodiffusion cohérente des ondes lumineuses, mais

aussi les fluctuations universelles de conductance et de speckle ainsi que les effets mésoscopiques sur le magnétisme orbital.

Il apparaît donc que tous ces effets découlent d'un même principe qui s'exprime essentiellement à l'aide d'une seule quantité : la probabilité de diffusion quantique et son analogue optique. Par contre, en dépit de ce dénominateur commun aux phénomènes optiques et électroniques, chaque domaine a sa spécificité qui permet des approches et des méthodes d'investigation complémentaires. Ainsi, l'étude des systèmes électroniques permet, grâce à l'utilisation d'un champ magnétique ou d'un potentiel vecteur, de modifier continûment la phase relative des fonctions d'onde électroniques, ce qui n'a pas d'équivalent en optique. En revanche, en optique, il est possible de modifier l'angle des faisceaux incidents et émergents, et à partir de cette spectroscopie angulaire, de remonter aux corrélations entre les différents canaux d'injection.

Nous avons autant que possible souhaité garder à cet ouvrage un caractère de manuel accessible au plus grand nombre à partir d'un niveau DEA. Nous avons dû aussi choisir de mettre un certain nombre de problèmes de côté. Citons par exemple l'étude des « points quantiques », les relations entre transport électronique et propriétés spectrales, la localisation forte et la transition métal-isolant d'Anderson, les propriétés de cavités électroniques balistiques où la complexité ne résulte pas du désordre mais de la forme de la cavité qui confère aux électrons une dynamique chaotique, les interfaces entre métal normal et métal supraconducteur, etc. Ces différents aspects montrent la richesse de ce qu'il est convenu d'appeler maintenant la « physique quantique mésoscopique » à laquelle cet ouvrage constitue une première introduction.

Remerciements

Nous tenons à exprimer nos remerciements à tous ceux qui, à divers titres, nous ont aidés dans la réalisation de cet ouvrage, par des discussions, des critiques ou des encouragements : O. Assaf, H. Bouchiat, J. Cayssol, C. Cohen-Tannoudji, N. Dupuis, D. Estève, A. Georges, S. Guéron, B. Huard, M. Kouchnir, R. Maynard, F. Piéchon, H. Pothier, B. Reulet, B. Shapiro, D. Ullmo, B. van Tiggelen, J. Vidal, E. Wolf. Nous souhaitons exprimer tout particulièrement notre reconnaissance à C. Texier pour ses innombrables commentaires, réflexions, suggestions, corrections qui ont considérablement amélioré la qualité de cet ouvrage. Merci aussi à G. Bazalitsky qui a réalisé la plupart des figures avec beaucoup de dévouement et à Y. Dufour pour l'impression des multiples versions préliminaires. Les moments de doute ne nous ont pas été épargnés au cours de ces cinq dernières années et le soutien d'Anne-Marie et de Tirza nous a alors été très précieux.

Éric Akkermans, Gilles Montambaux,
juillet 2004.

Avertissements

• Dans l'essentiel de cet ouvrage on utilise le système d'unités internationales (MKSA), sauf dans le chapitre 13. La constante de Planck $\hbar$ est prise généralement égale à 1 en particulier dans tout le chapitre 4. Dans les chapitres où nous pensons qu'il est important de la rétablir, nous l'avons indiqué en tête de chapitre. Afin d'alléger les notations, elle n'est parfois rétablie que de façon incomplète dans une même formule, en particulier lorsque la correspondance entre échelles de fréquence et d'énergie est évidente.

• Nous avons souvent été confrontés au problème des notations, qu'il n'est pas toujours évident de garder cohérentes dans un livre qui contient plusieurs domaines habituellement traités séparément.

• Nous avons choisi de ne pas faire une bibliographie exhaustive, mais de citer des articles, soit pour leur interêt pédagogique, soit parce qu'ils présentent un aspect particulier développé dans cet ouvrage (par exemple une question traitée en exercice).

Table des matières

Avant-propos **iii**

1 Introduction : physique mésoscopique **1**
1.1 Interférence et désordre 1
1.2 L'effet Aharonov-Bohm 5
1.3 Cohérence de phase et effet du désordre 8
1.4 Cohérence moyenne et diffusion multiple 10
1.5 Cohérence de phase et auto-moyennage : fluctuations universelles 14
1.6 Corrélations spectrales 15
1.7 Probabilité classique et croisements quantiques 17
1.7.1 Croisements quantiques 19
1.8 Les objectifs 21

2 Équations d'onde dans les milieux aléatoires **35**
2.1 Équations d'ondes 35
2.1.1 Électrons dans un métal désordonné 35
2.1.2 Équation des ondes électromagnétiques – Équation de Helmholtz 36
2.1.3 D'autres équations d'ondes 38
2.2 Modèles de désordre 41
2.2.1 Le modèle gaussien 42
2.2.2 Impuretés localisées : le modèle d'Edwards 44
2.2.3 Le modèle d'Anderson 46

Compléments du chapitre 2

C2.1 Théorie des collisions élastiques et diffusion simple 49
C2.1.1 Forme asymptotique des solutions 50
C2.1.2 Section efficace et flux diffusé 51
C2.1.3 Théorème optique 53
C2.1.4 Approximation de Born 56

C2.2 Théorème de réciprocité 61
C2.3 Diffusion de la lumière 64
C2.3.1 Diffusion Rayleigh classique 64
C2.3.2 Diffusion de Mie 67
C2.3.3 Diffusion atome-photon à l'approximation dipolaire . . 69

3 Théorie de perturbation 79
3.1 Fonctions de Green 81
3.1.1 Fonction de Green de l'équation de Schrödinger 81
3.1.2 Fonction de Green de l'équation de Helmholtz 87
3.2 Développement de diffusion multiple 89
3.2.1 Équation de Dyson 89
3.2.2 Self-énergie 91
3.3 Fonction de Green et densité d'états moyennes 96

Complément du chapitre 3

C3.1 Corrélations à courte portée 98

4 Probabilité de diffusion quantique 103
4.1 Définition 104
4.2 Propagation libre 107
4.3 Approximation de Drude-Boltzmann 107
4.4 Propagation classique : approximation du diffuson 108
4.5 Approximation de diffusion 114
4.6 Propagation cohérente : le cooperon 116
4.7 Transfert radiatif 122

Compléments du chapitre 4

C4.1 Diffuson et cooperon dans l'espace réciproque 126
C4.1.1 $P_0(\boldsymbol{q}, \omega)$ 126
C4.1.2 Le diffuson 127
C4.1.3 Le cooperon 129
C4.2 Boîtes de Hikami et croisement de diffusons 133
C4.2.1 Les boîtes de Hikami 133
C4.2.2 Normalisation et coefficient de diffusion 138
C4.2.3 Croisement de deux diffusons 141
C4.3 Collisions anisotropes et libre parcours moyen de transport . . 146
C4.4 Corrélation des fonctions de Green diagonales 153
C4.5 Autres fonctions de corrélation 158
C4.5.1 Corrélations de fonctions de Green retardées 158
C4.5.2 Une identité de Ward 160
C4.5.3 Corrélations de fonctions d'ondes 161

5 Propriétés de l'équation de diffusion 163
5.1 Introduction 163
5.2 Quantités caractéristiques 164
5.2.1 Noyau de la chaleur - Probabilité de retour à l'origine 165
5.2.2 Temps de récurrence 166
5.3 Diffusion libre 168
5.4 Diffusion dans une boîte périodique 171
5.5 Diffusion dans les systèmes finis 172
5.5.1 Temps de diffusion et énergie de Thouless 172
5.5.2 Conditions aux limites pour l'équation de diffusion . . . 172
5.5.3 Volume fini et « mode zéro » 173
5.5.4 Diffusion dans un domaine anisotrope 174
5.6 Diffusion unidimensionnelle 175
5.6.1 L'anneau - conditions aux limites périodiques 176
5.6.2 Bords absorbants : fil connecté 177
5.6.3 Bords réfléchissants : fil isolé 179
5.6.4 Fil semi-infini 181
5.7 La méthode des images 181

Compléments du chapitre 5

C5.1 Validité de l'approximation de diffusion pour un milieu infini 183
C5.2 Équation de transfert radiatif 186
C5.2.1 Intensité totale 186
C5.2.2 Intensité diffusée 188
C5.2.3 Conditions aux limites 190
C5.2.4 Tranche éclairée par une source étendue 193
C5.2.5 Milieu semi-infini éclairé par un faisceau collimaté . . . 194
C5.3 Diffusion multiple dans un milieu fini 196
C5.3.1 Diffusion multiple dans un demi-espace : le problème de Milne 196
C5.3.2 Diffusion dans un milieu fini 200
C5.4 Déterminant spectral 202
C5.5 Diffusion dans un domaine de forme quelconque - Développement de Weyl 205
C5.6 Diffusion sur des graphes 208
C5.6.1 Déterminant spectral sur un graphe 208
C5.6.2 Exemples 211
C5.6.3 Thermodynamique, transport et déterminant spectral 214

6 Déphasages 215
6.1 Déphasage et diffusion multiple 215
6.1.1 Généralités 215
6.1.2 Mécanismes de déphasage : introduction 216
6.1.3 Le mode de Goldstone 219
6.2 Champ magnétique et cooperon 220

6.3 Champ magnétique uniforme 224
6.4 Probabilité de retour à l'origine pour un flux Aharonov-Bohm 227
6.4.1 L'anneau 227
6.4.2 Le cylindre 229
6.5 Couplage spin-orbite et impuretés magnétiques 231
6.5.1 Potentiel d'interaction 232
6.5.2 Temps de collision 233
6.5.3 Facteur de structure 235
6.5.4 Le diffuson 240
6.5.5 Le cooperon 241
6.5.6 La probabilité de diffusion 243
6.5.7 Le cooperon X_c 245
6.5.8 Conclusion 246
6.6 Polarisation des ondes électromagnétiques 247
6.6.1 Libre parcours moyen 249
6.6.2 Facteur de structure 249
6.6.3 Intensité classique 252
6.6.4 Rétrodiffusion cohérente 254
6.7 Déphasage associé au mouvement des diffuseurs 254
6.7.1 Expression du déphasage 255
6.7.2 Déphasage associé à un mouvement brownien des diffuseurs 258
6.8 Déphasage ou décohérence ? 260

Compléments du chapitre 6

C6.1 Effet Aharonov-Bohm dans un plan infini 262
C6.2 Représentation fonctionnelle de l'équation de diffusion 265
C6.2.1 Représentation fonctionnelle 265
C6.2.2 Lois contraintes pour le mouvement brownien et champ magnétique 266
C6.3 Le cooperon dans un champ dépendant du temps 270
C6.4 Couplage spin-orbite et impuretés magnétiques : un point de vue heuristique 275
C6.4.1 Couplage spin-orbite 275
C6.4.2 Impuretés magnétiques 278
C6.5 Collisions photons-atomes froids 281
C6.5.1 Potentiel d'interaction 281
C6.5.2 Diffuson et cooperon 282

7 Transport électronique 289
7.1 Introduction 289
7.2 Contribution incohérente à la conductivité 292
7.2.1 L'approximation de Drude-Boltzmann 292
7.2.2 Le régime de collisions multiples : le diffuson 295
7.2.3 Temps de transport et renormalisation de vertex 297

7.3 Contribution du cooperon 298
7.4 Le régime de localisation faible 300
7.4.1 Rôle de la dimensionalité 301
7.4.2 Conducteurs de taille finie 304
7.4.3 Dépendance en température 305
7.5 Correction de localisation faible en champ magnétique 306
7.5.1 Magnétorésistance négative 306
7.5.2 Couplage spin-orbite et impuretés magnétiques 310
7.6 Magnétorésistance associée à un flux Aharonov-Bohm 312
7.6.1 Anneau 312
7.6.2 Long cylindre : l'effet Sharvin-Sharvin 314
7.6.3 Remarque sur les expériences de Webb et de Sharvin-Sharvin : ϕ_0 *vs.* $\phi_0/2$ 315
7.6.4 L'effet Aharonov-Bohm dans un plan infini 316

Compléments du chapitre 7

C7.1 Formules de Kubo 318
C7.1.1 Conductivité et dissipation 318
C7.1.2 Fonction de réponse densité-densité 323
C7.2 Conductance et transmission 325
C7.2.1 Introduction - Formule de Landauer 325
C7.2.2 De Kubo à Landauer 328
C7.2.3 Transmission et conductance moyennes 330
C7.2.4 Conditions aux limites et adaptation d'impédance . . . 333
C7.2.5 Correction de localisation faible dans le formalisme de Landauer 335
C7.2.6 Formalisme de Landauer pour les ondes 336
C7.3 Conductivité dans l'espace réel 338
C7.4 Correction de localisation faible et collisions anisotropes 340

8 Rétrodiffusion cohérente de la lumière 343
8.1 Introduction 343
8.2 La géométrie de l'albédo 344
8.2.1 Définition 344
8.2.2 Albédo d'un milieu diffusant 345
8.3 Valeur moyenne de l'albédo 347
8.3.1 Albédo incohérent : contribution du diffuson 347
8.3.2 Albédo cohérent : contribution du cooperon 350
8.4 Dépendance temporelle de l'albédo et analyse de la singularité triangulaire 354
8.5 Effet de l'absorption 356
8.6 Cas des collisions anisotropes 358
8.7 Rôle de la polarisation 360
8.7.1 Coefficients de dépolarisation 360
8.7.2 Albédo cohérent d'une onde polarisée 362

8.8 Étude expérimentale 363
8.8.1 Singularité triangulaire 364
8.8.2 Réduction de la hauteur du cône 366
8.8.3 Effet de l'absorption 367
8.9 La rétrodiffusion cohérente dans d'autres situations 371
8.9.1 Rétrodiffusion cohérente et « gloire » 371
8.9.2 Rétrodiffusion cohérente et effet d'opposition en astrophysique 373
8.9.3 Rétrodiffusion cohérente par un gaz d'atomes froids . . 375
8.9.4 Rétrodiffusion cohérente en acoustique 377

9 Spectroscopie des ondes diffusées 379
9.1 Introduction 379
9.2 Corrélations dynamiques de l'intensité 381
9.3 Diffusion simple : QELS 383
9.4 Diffusion multiple : spectroscopie des ondes diffusées 383
9.5 Effet de la géométrie sur la fonction de corrélation dynamique 384
9.5.1 Réflexion par un milieu semi-infini 385
9.5.2 Comparaison de $G_1^r(T)$ et de $\alpha_c(\theta)$ 386
9.5.3 Réflexion par une tranche de largeur finie 389
9.5.4 Transmission 391

Complément du chapitre 9

C9.1 Mouvement collectif des diffuseurs 393

10 Propriétés spectrales des métaux désordonnés 397
10.1 Introduction 397
10.1.1 Répulsion de niveaux et intégrabilité 398
10.1.2 Spectre d'un métal désordonné 401
10.2 Caractérisation des corrélations spectrales 402
10.3 Séquence poissonnienne 404
10.4 Théorie des matrices aléatoires 405
10.4.1 Répulsion de niveaux et matrices 2×2 405
10.4.2 Distribution des valeurs propres de matrices $N \times N$ . . 408
10.4.3 Propriétés spectrales des matrices aléatoires 410
10.5 Corrélations spectrales en régime diffusif 414
10.5.1 Fonction de corrélation à deux points 415
10.5.2 La limite ergodique 419
10.5.3 La limite de diffusion libre 420

Complément du chapitre 10

C10.1 La transition GOE-GUE 423

11 Fluctuations universelles de conductance 425
11.1 Introduction 425
11.2 Fluctuations de conductivité 428
11.2.1 Fluctuations reliées à la densité d'états 431
11.2.2 Fluctuations reliées au coefficient de diffusion 434
11.3 Fluctuations universelles de conductance 435
11.4 Effet d'un paramètre extérieur 438
11.4.1 Dépendance en énergie 439
11.4.2 Dépendance en température 439
11.4.3 Cohérence de phase et régime mésoscopique 441
11.4.4 Dépendance en champ magnétique 444
11.4.5 Couplage spin-orbite et impuretés magnétiques 448

Compléments du chapitre 11

C11.1 Fluctuations universelles de conductance et collisions anisotropes 451
C11.2 Fluctuations de conductance dans le formalisme de Landauer 454

12 Corrélation des figures de speckle 457
12.1 Qu'est-ce qu'une figure de speckle ? 457
12.2 Comment analyser une figure de speckle ? 458
12.3 Coefficient de transmission moyen 463
12.4 Corrélations angulaires en transmission 465
12.4.1 Corrélation $C^{(1)}$ à courte portée 465
12.4.2 Corrélation $C^{(2)}$ à longue portée 469
12.4.3 Corrélation $C^{(3)}$ associée à deux croisements de diffusons 472
12.4.4 Lien avec les fluctuations universelles de conductance 475
12.5 Corrélation temporelle des figures de speckle 476
12.5.1 Corrélations temporelles $C^{(1)}(t)$ et $C^{(2)}(t)$ 477
12.5.2 Corrélation temporelle $C^{(3)}(t)$ 480
12.6 Corrélation spectrale des figures de speckle 482
12.7 Distribution des coefficients de transmission 484
12.7.1 Loi de Rayleigh 484
12.7.2 Distribution gaussienne du coefficient de transmission $\mathcal{T}_a$ 485
12.7.3 Distribution gaussienne de la conductance 487

Compléments du chapitre 12

C12.1 Corrélation spatiale de l'intensité 489
C12.1.1 Corrélations à courte portée 490
C12.1.2 Corrélations à longue portée 492

13 Interactions et diffusion **497**
13.1 Introduction 497
13.2 Potentiel de Coulomb écranté 498
13.3 Approximation de Hartree-Fock 501
13.4 Correction à la densité d'états 502
13.4.1 Interaction statique 502
13.4.2 Conductance tunnel et anomalie de densité d'états . . . 507
13.4.3 Interaction dynamiquement écrantée 510
13.4.4 Effets capacitifs 514
13.5 Correction à la conductivité 516
13.6 Temps de vie d'un état électronique 519
13.6.1 Introduction : théorie de Landau et désordre 519
13.6.2 Temps de vie à température nulle 520
13.6.3 Temps de vie à température finie 527
13.6.4 Temps de vie d'une quasi-particule au niveau de Fermi 528
13.7 Cohérence de phase 531
13.7.1 Introduction 531
13.7.2 Cohérence de phase dans un champ électrique fluctuant 532
13.7.3 Temps de cohérence de phase en dimension $d = 1$ . . . 535
13.7.4 Cohérence de phase et relaxation des quasi-particules 539
13.7.5 Temps de cohérence de phase en dimensions $d = 2$ et $d = 3$ 541
13.7.6 Mesures du temps de cohérence de phase τ_ϕ^{ee} 542

Compléments du chapitre 13

C13.1 Potentiel coulombien écranté en géométrie confinée 545
C13.2 Temps de vie en l'absence de désordre 548

14 Magnétisme orbital et courants permanents **551**
14.1 Introduction 551
14.2 Gaz d'électrons libres dans un champ uniforme 553
14.2.1 Rappel : le cas sans désordre 553
14.2.2 Aimantation moyenne 556
14.2.3 Fluctuations de l'aimantation 557
14.3 Effet des interactions 560
14.3.1 Approximation de Hartree-Fock 560
14.3.2 Renormalisation de Cooper 562
14.3.3 Température finie 563
14.4 Courant permanent dans un anneau 564
14.4.1 Anneau unidimensionnel sans désordre : périodicité et effet de parité 564
14.4.2 Courant moyen 569

14.5 Diffusion et courant permanent 571
14.5.1 Courant typique d'un anneau désordonné 572
14.5.2 Effet des interactions sur le courant moyen 575
14.5.3 Courant permanent et couplage spin-orbite 577
14.5.4 Bref panorama expérimental 579

Complément du chapitre 14

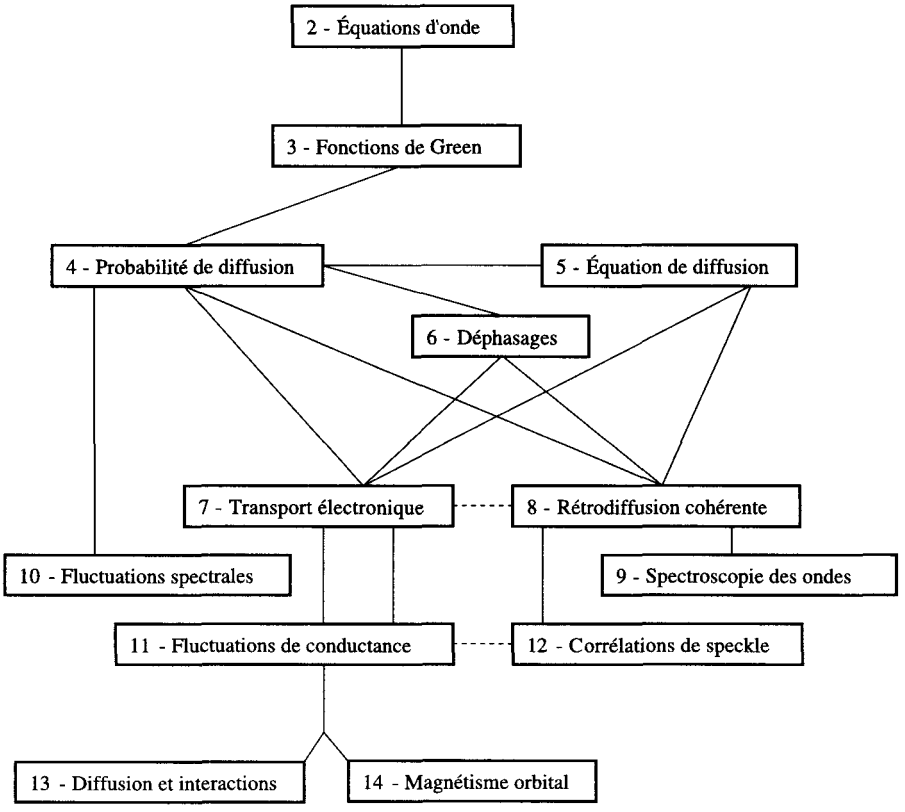
C14.1 Courant moyen dans l'ensemble canonique 581

15 Formulaire **583**
15.1 Densité d'états et conductance 583
15.2 Transformées de Fourier - Définitions 584
15.3 Probabilité $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$ 584
15.4 Divers 586
15.5 Formules de Poisson 592
15.6 Dépendances en température 593

Bibliographie **595**

Index **619**

Sujets développés. Les lignes représentent les liens logiques entre les chapitres.



Chapitre 1

Introduction : physique mésoscopique

1.1 Interférence et désordre

La propagation des ondes en milieu aléatoire est un phénomène commun à de nombreux domaines de la physique. Son étude a connu récemment un regain d'intérêt après la découverte, en optique et en mécanique quantique, d'effets cohérents inattendus dans un régime où l'on pensait que le désordre soit suffisamment fort pour éliminer *a priori* tout effet d'interférence.

Afin de comprendre l'origine de ces effets cohérents, il peut être utile de rappeler quelques généralités sur les interférences. Bien que très spectaculaires en mécanique quantique, leur traduction dans le langage de l'optique physique permet d'en avoir une intuition plus directe. Commençons donc par une discussion des effets d'interférence en optique.

Considérons la propagation d'une onde monochromatique dans le vide et sa diffraction par un obstacle géométrique, par exemple une ouverture circulaire. La figure de diffraction 1.1 fait apparaître, sur un écran placé à l'infini, une succession de cercles alternativement brillants et sombres qui résulte de l'interférence constructive ou destructive des ondes provenant de l'obstacle. D'après le principe de Huygens, il est possible de décrire l'éclairement en un point de l'écran en remplaçant l'ouverture par un ensemble de sources ponctuelles cohérentes et en étudiant la différence de longueur des chemins optiques associés à ces différentes sources. On peut alors associer à chaque anneau d'interférence un nombre entier (l'équivalent d'un nombre quantique en mécanique quantique).

Se pose alors la question de la stabilité de cette figure de diffraction. Si on éclaire l'obstacle par une source de lumière incohérente, pour laquelle la longueur des trains d'onde émis est suffisamment courte, de manière à déphaser entre elles les différentes sources virtuelles, alors la figure d'interférence disparaît et l'écran est éclairé uniformément. Par ailleurs, si on utilise une source

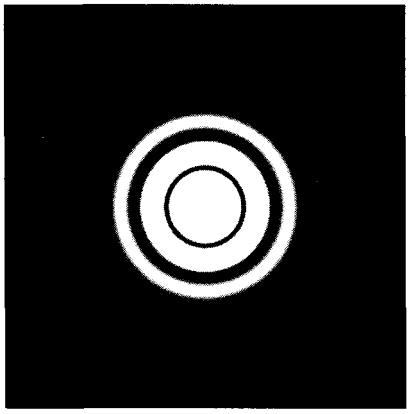


FIG. 1.1 – *Figure de diffraction à l'infini par une ouverture circulaire.*

de lumière cohérente et si on déplace dans son plan, de façon aléatoire et suffisamment rapide, l'obstacle diffractant, on constate que les franges d'interférence disparaissent à nouveau pour ne laisser qu'un éclairage uniforme sur l'écran. Dans ce cas, c'est la persistance rétinienne qui permet à l'œil de percevoir l'éclairement moyen de plusieurs figures d'interférences décalées. Cet exemple met en évidence deux situations possibles qui conduisent à une disparition de la figure d'interférence. Dans le premier cas, elle est associée à une distribution aléatoire de la longueur des trains d'onde émis par la source. Dans le second cas, elle résulte d'une *moyenne* d'ensemble sur la répartition spatiale des sources virtuelles. On conçoit donc sur cet exemple que des effets de cohérence de phase peuvent disparaître en moyenne.

Étudions maintenant la diffraction d'une source cohérente par un obstacle de forme aléatoire. Supposons par exemple que l'ouverture circulaire soit constituée d'un milieu diélectrique transparent dont l'indice fluctue spatialement sur des échelles comparables à la longueur d'onde. Il en résulte, pour l'intensité diffractée à l'infini, une figure constituée d'une répartition aléatoire de zones sombres et brillantes du type de celle représentée sur la figure 1.2, et appelées « *tavelures* » (ou *speckle* en anglais [1]). Ces tavelures associées à la diffraction par un objet aléatoire en représentent une « *empreinte digitale* » qui lui est spécifique. Mais, contrairement au cas de la diffraction par une ouverture circulaire ou par un objet suffisamment symétrique, il devient impossible d'identifier un « ordre » dans la figure d'interférence et donc de la décrire au moyen d'une suite déterminée de nombres d'onde. C'est cette impossibilité qui constitue une des caractéristiques des milieux dits « complexes ».

[1] Ces tavelures ressemblent à celles observées sur la lumière émise par un laser faiblement cohérent, mais elles sont de nature différente. Il s'agit ici de fluctuations spatiales statiques dues à l'inhomogénéité du milieu diffusant.

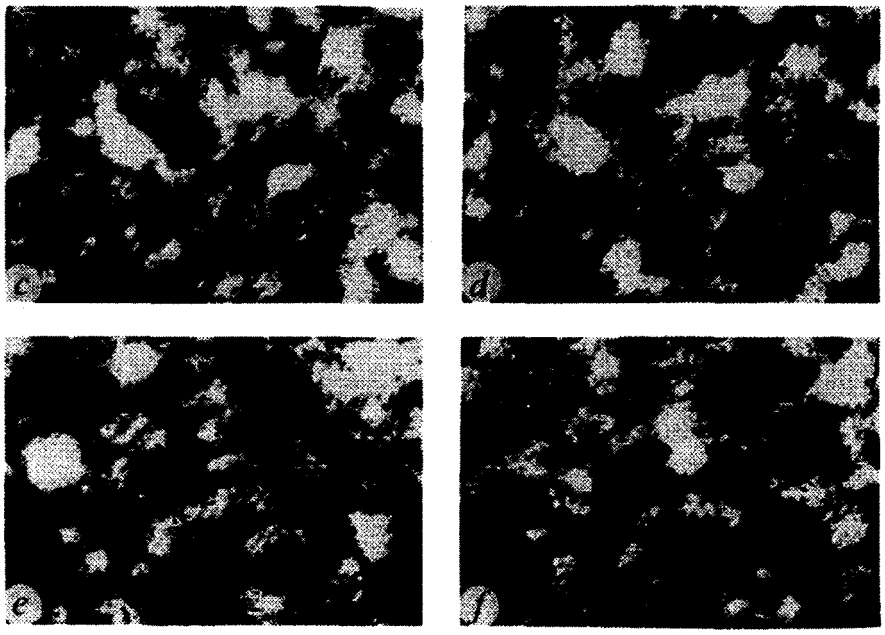


FIG. 1.2 – *Figures de tavelures (*speckle*) dues à la diffusion à travers un milieu inhomogène. Ici le milieu est optiquement épais, c'est-à-dire que le rayonnement incident subit plusieurs collisions avant de sortir de l'échantillon. Chaque image correspond à une réalisation différente du milieu aléatoire (M. Kaveh* et al.*,* Nature **326**, *778 (1987)).*

Dans cette dernière expérience, l'onde provenant de la source n'interagit qu'une seule fois avec le milieu aléatoire avant de se projeter sur l'écran à l'infini (fig. 1.3.*a*). C'est le régime dit de *diffusion simple.* Considérons maintenant l'autre limite des milieux optiquement épais (appelés aussi milieux turbides), pour laquelle l'onde subit un grand nombre de collisions avec le milieu aléatoire avant d'en sortir (fig. 1.3.*b*). On parle alors de *diffusion multiple.* L'intensité émergente en un point de l'écran est obtenue à partir de la somme des amplitudes complexes des ondes arrivant en ce point. La phase associée à chaque amplitude est proportionnelle à la longueur du chemin de diffusion multiple correspondant divisée par la longueur d'onde λ. Les longueurs de chemin sont distribuées aléatoirement et on peut donc penser *a priori* que les phases associées fluctuent et se moyennent à zéro. L'intensité totale se réduit alors à la somme des intensités associées à chacun des chemins.

On peut se représenter cette situation comme étant équivalente à une série d'obstacles du type de ceux discutés dans le cas de la diffusion simple, de telle façon que chaque élément de cette série corresponde à une réalisation différente et indépendante de la distribution du milieu aléatoire. On pourrait donc

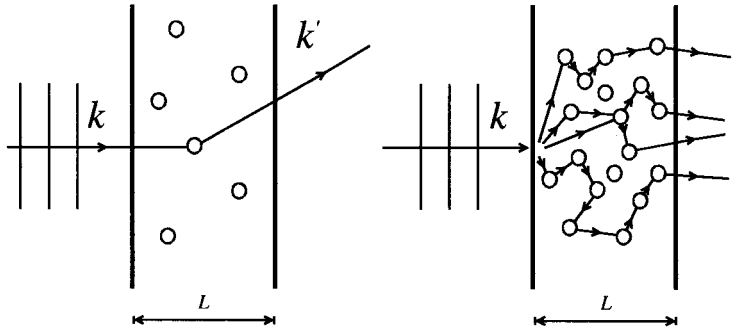


FIG. 1.3 – *a) Représentation schématique du régime de diffusion simple. b)* Idem *pour le régime de diffusion multiple.*

penser que, pour un nombre suffisamment grand de tels éléments, l'intensité émergente soit moyennée sur les différentes réalisations et que les tavelures disparaissent. Ce point de vue correspond à une description classique, c'est-à-dire pour laquelle la nature ondulatoire sous-jacente ne joue plus aucun rôle.

Les figures 1.2 et 1.4 montrent que cette conclusion est incorrecte et que les tavelures subsistent, *même en diffusion multiple.* Si, par contre, on réalise une moyenne d'ensemble, alors la figure d'interférence disparaît. C'est le cas pour des milieux turbides comme l'atmosphère ou les suspensions de diffuseurs dans un liquide (par exemple le lait) où le mouvement des diffuseurs permet, si on attend suffisamment longtemps, de réaliser une moyenne sur différentes réalisations du milieu aléatoire. L'approche classique permet donc de décrire

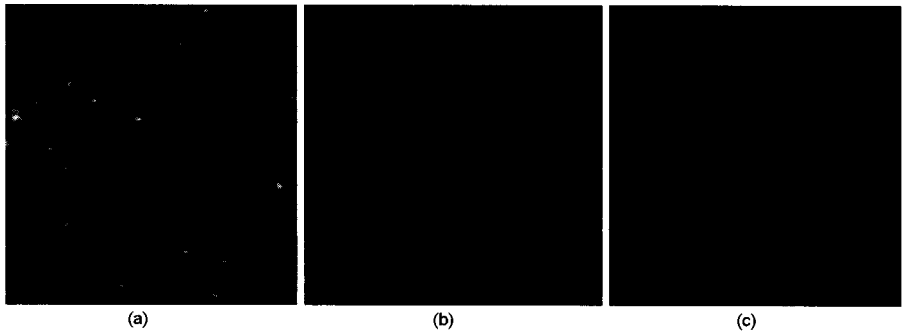


FIG. 1.4 – *Évolution vers la valeur moyenne. La première figure de tavelures (a) représente un « instantané » du milieu désordonné correspondant à une réalisation du désordre. Les deux autres figures (b et c) correspondent à une intégration sur le mouvement des diffuseurs et donc à un auto-moyennage (figure courtoisement fournie par G. Maret).*

correctement les caractéristiques moyennes d'un milieu turbide comme le coefficient de transmission ou la constante de diffusion de l'intensité moyenne. Elle a été abondamment utilisée pour la description des problèmes de transfert radiatif d'un rayonnement à travers l'atmosphère ou à travers des milieux turbulents.

Cette description peut être adaptée *bona fide* au cas de la propagation des électrons dans un métal. Dans ce cas, le champ des impuretés d'un métal est analogue au cas d'un milieu optiquement épais et une quantité équivalente à l'intensité est donnée par la conductivité électrique. En principe, il est nécessaire, pour la calculer, d'utiliser les outils de la mécanique quantique. Il est cependant admis depuis les travaux de Drude au début du XXe siècle que la conductivité moyennée sur le désordre décrit correctement les propriétés de transport et s'obtient à partir d'une description classique du gaz d'électrons. Si, en revanche, on considère un échantillon avec une réalisation spécifique du désordre, il est possible d'observer des effets d'interférence qui ne disparaissent qu'en moyenne [1].

Les succès incontestables de l'approche classique ont conduit à penser qu'il ne doit pas subsister d'effet cohérent dans un milieu aléatoire où une onde subit de la diffusion multiple. Ce point de vue a été mis en défaut de manière indiscutable depuis les années 1980 par une série d'expériences nouvelles. Afin de sonder ces effets d'interférences, la plus spectaculaire de ces expériences utilise l'effet Aharonov-Bohm sur lequel nous allons maintenant nous attarder.

1.2 L'effet Aharonov-Bohm

Le dispositif des trous d'Young est certainement l'exemple le plus simple qui mette en évidence une figure d'interférence en optique. Sa transposition au cas des électrons constitue un passage obligé pour la compréhension des effets d'interférence quantique. Dans le dispositif d'Aharonov-Bohm, un solénoïde infiniment long est placé entre les deux trous, de sorte que les électrons qui interfèrent se déplacent à l'extérieur du solénoïde, comme cela est représenté sur la figure 1.5. Le champ magnétique est nul à l'extérieur du solénoïde et classiquement sa présence n'affecte donc pas le mouvement des électrons.

Il n'en va pas de même en mécanique quantique. Dans ce cas, il faut considérer, afin de calculer l'intensité, la somme des amplitudes complexes associées aux différentes trajectoires. Pour les deux trajectoires de la figure 1.5, ces amplitudes sont de la forme $a_{1,2} = |a_{1,2}|e^{i\delta_{1,2}}$, où les phases δ_1 et δ_2 sont données par (on note $-e$ la charge de l'électron) :

$$\begin{aligned} \delta_1 &= \delta_1^{(0)} - \frac{e}{\hbar}\int_1 \boldsymbol{A}.d\boldsymbol{l} \\ \delta_2 &= \delta_2^{(0)} - \frac{e}{\hbar}\int_2 \boldsymbol{A}.d\boldsymbol{l} \quad . \end{aligned} \tag{1.1}$$

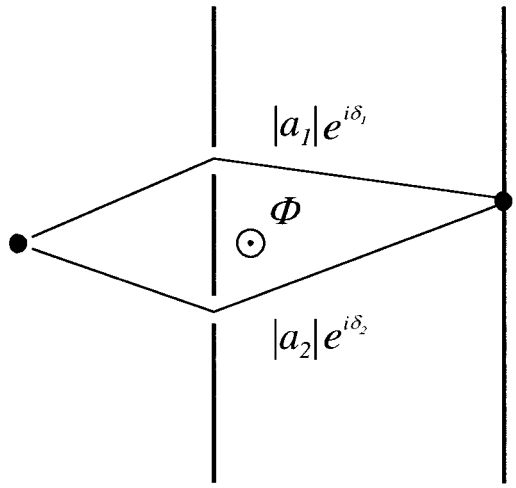


FIG. 1.5 – *Description schématique de l'effet Aharonov-Bohm. Un tube de flux ϕ est placé derrière les deux fentes.*

Les intégrales décrivent la circulation du potentiel vecteur $\boldsymbol{A}$ le long des deux trajectoires et $\delta_{1,2}^{(0)}$ sont les phases géométriques en l'absence de flux magnétique. En présence d'un flux magnétique ϕ induit par le solénoïde, l'intensité $I(\phi)$ est donnée par

$$\begin{aligned} I(\phi) &= |a_1 + a_2|^2 = |a_1|^2 + |a_2|^2 + 2|a_1 a_2| \cos(\delta_1 - \delta_2) \\ &= I_1 + I_2 + 2\sqrt{I_1 I_2} \cos(\delta_1 - \delta_2) \quad . \end{aligned} \tag{1.2}$$

La différence de phase $\Delta\delta(\phi) = \delta_1 - \delta_2$ entre les deux trajectoires est maintenant modulée par le flux magnétique ϕ

$$\Delta\delta(\phi) = \delta_1^{(0)} - \delta_2^{(0)} + \frac{e}{\hbar} \oint \boldsymbol{A}.d\boldsymbol{l} = \Delta\delta^{(0)} + 2\pi \frac{\phi}{\phi_0} \tag{1.3}$$

où $\phi_0 = h/e$ est le quantum de flux magnétique. Il est donc possible de modifier continûment l'état d'interférence en chaque point de l'écran en changeant le flux magnétique ϕ. Ceci constitue l'*effet Aharonov-Bohm* [2]. Celui-ci est directement lié à la cohérence de phase. Il constitue une sonde remarquable permettant d'étudier cette cohérence dans les systèmes électroniques [3]. C'est un avantage que n'ont pas aussi simplement les montages optiques [2].

Cet effet a été mis en évidence expérimentalement : un faiceau cohérent d'électrons est émis dans un microscope électronique et scindé en deux faisceaux avant de traverser un aimant toroïdal tel que le champ magnétique reste

[2] Il y a cependant en optique un effet analogue à l'effet Aharonov-Bohm, appelé l'effet Sagnac [4].

confiné dans le tore [5]. Le champ magnétique est donc nul sur le trajet des électrons. Il s'agit là toutefois d'une expérience effectuée dans le vide et les électrons ne subissent pas de collision avant d'interférer. Afin de mettre en évidence une éventuelle cohérence de phase dans les métaux, où les électrons subissent des collisions multiples, Richard Webb et ses collaborateurs (1983) ont mesuré la résistance d'un anneau d'or [6]. Dans ce montage schématisé sur la figure 1.6, des électrons incidents sont contraints à passer par les deux branches de l'anneau qui constituent l'équivalent des deux trous d'Young, pour être ensuite collectés dans le second brin.

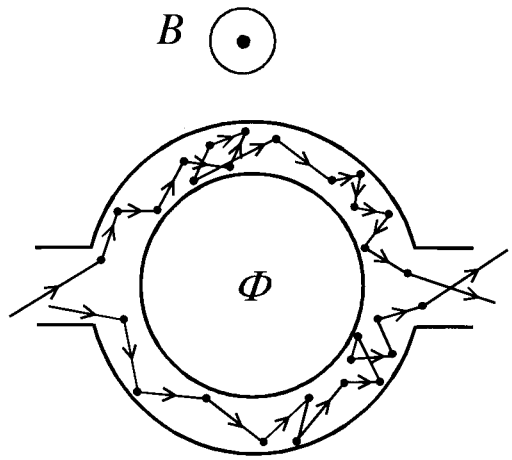


FIG. 1.6 – *Description schématique de l'expérience de Webb* et al. *sur l'effet Aharonov-Bohm dans un métal. Dans cette expérience, le champ magnétique appliqué est uniforme. ϕ est le flux à travers l'anneau.*

L'équivalent de l'intensité $I(\phi)$ est le courant électrique ou encore la conductance $G(\phi)$ mesurée pour différentes valeurs du flux magnétique ϕ. Celui-ci est obtenu par l'application d'un champ magnétique uniforme, ce qui ne correspond pas *stricto sensu* au cas de l'expérience d'Aharonov-Bohm puisque le champ magnétique n'est pas nul sur les trajectoires électroniques. Cependant, le champ appliqué est suffisamment faible pour que, d'une part, la courbure des trajectoires résultant de la force de Lorentz soit très inférieure au diamètre des fils constituant l'anneau et que, d'autre part, il n'y ait pas de déphasage entre trajectoires cohérentes à l'intérieur de l'anneau. On peut alors négliger l'effet du champ pour ne garder que celui du flux. La figure 1.7 montre que la magnétorésistance de cette boucle est en première approximation une fonction périodique du flux appliqué dont la période est donnée par le quantum de flux $\phi_0 = h/e$. En effet, la phase relative des deux trajectoires électroniques étant modulée par le flux, le courant total, donc la conductance

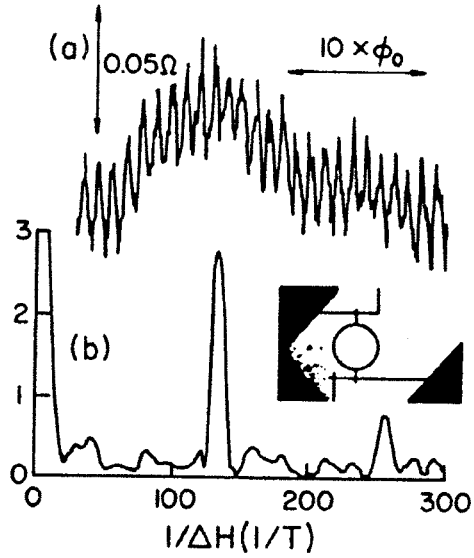


FIG. 1.7 – *a) Magnétorésistance d'un anneau d'or à $T = 0{,}01$ K. b) Spectre de Fourier de la magnétorésistance. On voit une contribution principale correspondant à la composante de Fourier à $\phi_0 = h/e$ [6].*

de l'anneau, sont des fonctions périodiques du flux [3] :

$$G(\phi) = G_0 + \delta G \cos(\Delta\delta^{(0)} + 2\pi \frac{\phi}{\phi_0}) \quad . \tag{1.4}$$

Cette modulation de la conductance en fonction du flux résulte de l'existence d'*effets cohérents* dans un milieu où le désordre est suffisamment fort pour qu'il y ait de la *diffusion multiple*. Par conséquent, l'argumentation naïve selon laquelle la cohérence de phase disparaît dans ce régime est incorrecte et doit être reconsidérée.

1.3 Cohérence de phase et effet du désordre

L'expérience de Webb décrite précédemment a été réalisée sur un anneau dont la taille est de l'ordre du micron. On sait cependant que, pour un système macroscopique, cette modulation en fonction du flux magnétique disparaît. Il existe donc une longueur caractéristique, au-delà de laquelle il n'y a plus de cohérence de phase. Cette longueur, appelée *longueur de cohérence de phase*

[3] On voit sur la figure 1.7 que la modulation n'est pas exactement périodique. Ceci est dû au fait que l'anneau n'est pas unidimensionnel et que les trajectoires de diffusion multiple au sein d'une même branche peuvent être aussi modulées par le champ magnétique qui pénètre dans l'anneau lui-même. C'est l'origine du pic à basse fréquence de la figure 1.7.*b*.

et notée L_ϕ, joue un rôle essentiel dans la description des effets cohérents dans les systèmes complexes.

Afin de mieux comprendre la nature de cette longueur, il est intéressant d'aborder brièvement certaines notions liées à la cohérence quantique [4]. Si on considère un ensemble de particules quantiques contenues dans une boîte cubique de côté L en dimension d, les états quantiques possibles sont décrits par une superposition cohérente de fonctions d'onde de telle sorte que l'état quantique du système soit un état cohérent s'étendant sur l'ensemble du volume L^d. On connaît plusieurs exemples pour lesquels la cohérence quantique s'étend jusqu'à l'échelle macroscopique : supraconductivité, suprafluidité, gaz d'électrons libres à température nulle, états cohérents du champ de photons, etc.

Pour le gaz d'électrons à température finie, cette cohérence disparaît à l'échelle macroscopique. Il est alors possible de décrire les grandeurs physiques comme par exemple le transport électrique ou thermique au moyen d'une approche essentiellement classique. La suppression de la cohérence quantique résulte de phénomènes liés à l'existence de processus incohérents et irréversibles provenant du couplage des électrons avec leur environnement. Celui-ci est constitué de degrés de liberté avec lesquels les électrons sont en interaction : excitations thermiques du réseau atomique (phonons), impuretés ayant des degrés de liberté internes, interaction avec les autres électrons, etc. Cette irréversibilité est une source de décohérence pour les électrons et sa description est un problème difficile que nous aborderons dans les chapitres 6 et 13. La longueur de cohérence de phase L_ϕ définit de manière générique la perte de cohérence de phase liée à ces processus irréversibles.

Toutes ces considérations ne sont en rien reliées à l'existence d'un désordre *statique* tel que celui décrit dans les deux sections précédentes (variation d'indice en optique, impuretés statiques telles que lacunes ou impuretés de substitution). Ce désordre *ne détruit pas la cohérence de phase* et n'introduit donc aucune irréversibilité. Par contre, les symétries éventuelles du système quantique disparaissent de telle sorte qu'il n'est plus possible de trouver de bons nombres quantiques propres à sa description. Par conséquent, chaque observable d'un milieu quantique aléatoire dépend de la distribution spécifique du potentiel de désordre. En moyenne, il est possible de caractériser le potentiel de désordre au moyen d'une longueur caractéristique : *le libre parcours moyen élastique* l_e qui représente la distance moyenne parcourue par un paquet d'ondes entre deux évènements de collision sans changement d'énergie (voir chapitres 2 et 3).

On voit ainsi que la longueur de cohérence de phase L_ϕ est fondamentalement différente du libre parcours moyen élastique l_e. À suffisamment basse

[4] La plupart des notions discutées ici utilisent le language de la mécanique quantique. Elles se transposent plus ou moins directement au cas de la propagation des ondes électromagnétiques.

température, ces deux longueurs peuvent différer par plusieurs ordres de grandeur, de telle sorte qu'un électron peut se propager dans un milieu désordonné sur des longueurs très grandes devant le libre parcours moyen élastique l_e tout en gardant sa cohérence de phase, tant que la longueur de sa trajectoire n'excède pas L_ϕ. La perte de cohérence de phase n'est donc pas reliée à l'existence d'un potentiel aléatoire aussi fort soit-il mais correspond à d'autres types de mécanismes. Il peut sembler paradoxal que cette distinction entre l'effet du désordre élastique et celui associé aux processus irréversibles de relaxation de la phase ait été mise en évidence dans le cas relativement non trivial du transport dans un métal où les électrons ont des interactions complexes avec leur environnement. Mais cette même distinction s'applique à la propagation des ondes électromagnétiques dans des milieux turbides, dans le régime de diffusion multiple cohérente, où on peut distinguer, par exemple, les effets d'une longueur d'absorption finie de ceux liés au libre parcours moyen l_e.

1.4 Cohérence moyenne et diffusion multiple

Si la cohérence de phase conduit à des effets d'interférence pour une réalisation particulière du désordre, on pourrait penser que ceux-ci disparaissent en moyenne. Ainsi, dans l'expérience de Webb décrite dans la section 1.2, les oscillations de conductance de période $\phi_0 = h/e$ correspondent à un anneau donné. Si maintenant on moyenne sur le désordre, c'est-à-dire sur $\Delta\delta^{(0)}$ dans la relation (1.4), on s'attend à ce que la modulation par le flux magnétique disparaisse et avec elle la trace des effets cohérents. Or le même type d'expérience a été réalisé en 1981 par Sharvin et Sharvin [7] sur un long cylindre métallique creux traversé par un flux Aharonov-Bohm. Pour une hauteur du cylindre supérieure à L_ϕ, celui-ci peut être décrit comme un ensemble de boucles identiques à celle de l'expérience de Webb mais incohérentes entre elles. Dans cette expérience on réalise donc une moyenne d'ensemble. De manière *a priori* surprenante, il subsiste un signal dépendant du flux mais qui correspond maintenant à une périodicité $\phi_0/2$ au lieu de ϕ_0. Comment comprendre qu'*une trace de la cohérence de phase semble subsister en moyenne* ?

Le même genre de question se pose en optique. Si on moyenne sur différentes réalisations du désordre une figure de tavelures (speckle), reste-t-il une trace de la cohérence de phase ? Là encore, de manière inattendue, on a mis en évidence pour le coefficient de réflexion d'une onde par un milieu diffusant (parfois appelé son albédo) une dépendance angulaire inexplicable par la théorie classique du transport (fig. 1.8) et qui est une signature de la cohérence de phase : c'est l'effet de *rétrodiffusion cohérente*.

Ces résultats démontrent que, *même en moyenne, il reste des effets de cohérence de phase*. Afin de préciser la nature de ces effets, considérons un milieu aléatoire optiquement épais. Il peut être modélisé par un ensemble de diffuseurs ponctuels élastiques dont les positions $\boldsymbol{r}_n$ sont distribuées aléatoirement. La validité de ces hypothèses pour une description réaliste d'un milieu

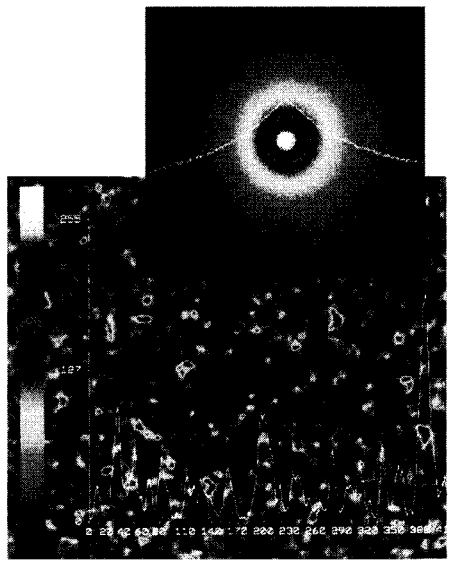


FIG. 1.8 – *Figure de* speckle *obtenue par diffusion multiple de la lumière sur un échantillon de billes de polystyrène, en fonction de l'angle d'observation. La courbe du bas représente les fluctuations de l'intensité mesurée selon une direction angulaire. La figure supérieure est obtenue en réalisant une moyenne sur la position des billes de polystyrène et la courbe donne la dépendance angulaire de l'intensité moyenne (figure courtoisement fournie par G. Maret).*

aléatoire sera discutée en détail dans les chapitres 2 et 3. Considérons maintenant une onde plane provenant d'une source cohérente située à l'extérieur du milieu et se propageant dans celui-ci en effectuant des collisions élastiques sur les diffuseurs et cherchons à déterminer la figure d'interférence qui en résulte. Pour cela, on étudie l'amplitude complexe $A(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}')$ de l'onde réémise dans la direction définie par le vecteur d'onde $\boldsymbol{k}'$ et correspondant à une onde plane incidente de vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$. En toute généralité, on peut la mettre sous la forme :

$$A(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = \sum_{\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2} f(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) e^{i(\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}_2)} \tag{1.5}$$

où $f(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ est l'amplitude complexe correspondant à la propagation entre deux évènements de diffusion situés en $\boldsymbol{r}_1$ et $\boldsymbol{r}_2$. Cette amplitude s'écrit comme une somme du type $\sum_j a_j = \sum_j |a_j| \, e^{i\delta_j}$, où chaque chemin j représente une séquence de collisions (fig. 1.9) joignant les points $\boldsymbol{r}_1$ et $\boldsymbol{r}_2$. L'intensité associée est donnée par :

$$|A(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}')|^2 = \sum_{\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2} \sum_{\boldsymbol{r}_3, \boldsymbol{r}_4} f(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) f^*(\boldsymbol{r}_3, \boldsymbol{r}_4) e^{i(\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}_2)} e^{-i(\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}_3 - \boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}_4)} \tag{1.6}$$

avec

$$f(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)f^*(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r}_4) = \sum_{j,j'} a_j(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)a^*_{j'}(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r}_4) = \sum_{j,j'} |a_j||a_{j'}|e^{i(\delta_j-\delta_{j'})} \quad . \tag{1.7}$$

Afin de calculer sa valeur moyenne sur les différentes réalisations du potentiel aléatoire, c'est-à-dire sur les positions des diffuseurs, il est utile de remarquer que la plupart des termes des relations (1.6) et (1.7) donnent une contribution nulle en moyenne, puisque la phase $\delta_j - \delta_{j'}$ qui mesure la différence de longueur entre les trajectoires de la figure 1.9 est aléatoire.

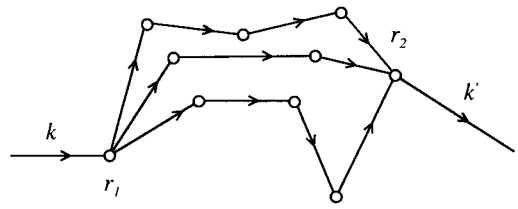


FIG. 1.9 – *Trajectoires typiques participant à l'amplitude complexe totale $f(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ d'une onde en situation de diffusion multiple. L'amplitude $f(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ est une somme de la forme $\sum_j a_j e^{i\delta_j}$.*

Par conséquent, ne vont contribuer à la moyenne de $|A(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')|^2$ que les termes pour lesquels les phases disparaissent, ce qui ne peut se produire que pour des couples de trajectoires *identiques*, c'est-à-dire parcourant exactement les mêmes séquences de collisions *soit dans le même sens, soit dans un sens opposé*. Ces trajectoires sont représentées schématiquement sur la figure 1.10 et correspondent aux séquences

$$\begin{aligned} &\boldsymbol{r}_1 \to \boldsymbol{r}_a \to \boldsymbol{r}_b \cdots \to \boldsymbol{r}_y \to \boldsymbol{r}_z \to \boldsymbol{r}_2 \\ &\boldsymbol{r}_2 \to \boldsymbol{r}_z \to \boldsymbol{r}_y \cdots \to \boldsymbol{r}_b \to \boldsymbol{r}_a \to \boldsymbol{r}_1 \quad . \end{aligned}$$

L'identité des trajectoires impose en particulier de prendre dans la relation (1.6) $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_3$ et $\boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{r}_4$ pour le premier processus (même sens) et $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_4$ et $\boldsymbol{r}_2 = \boldsymbol{r}_3$ pour le second (sens opposés). Ces deux processus sont donc caractérisés par la même intensité à condition toutefois que le système soit invariant par renversement du sens du temps. Le rôle joué par cette symétrie sera étudié en détail au chapitre 6. De plus, le second processus donne lieu, d'après la relation (1.6), à un déphasage supplémentaire de telle sorte que finalement les deux seules contributions non nulles en moyenne donnent :

$$\overline{|A(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')|^2} = \overline{\sum_{\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2} |f(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)|^2 \left[1 + e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)}\right]} \tag{1.8}$$

où $\overline{\cdots}$ dénote la valeur moyenne sur les différentes réalisations du potentiel aléatoire.

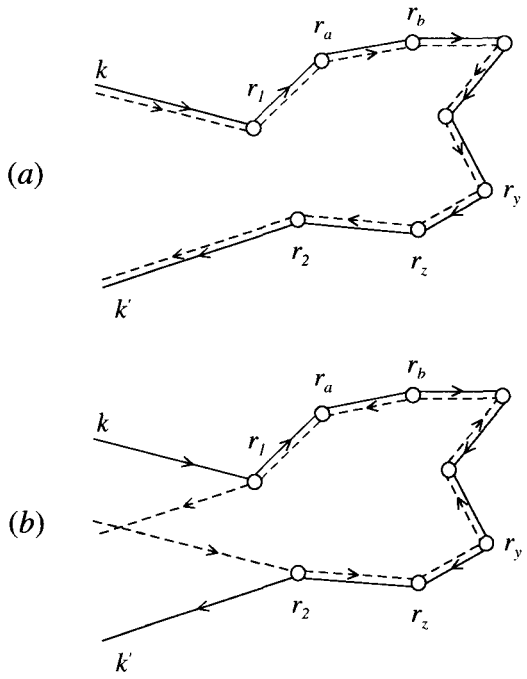


FIG. 1.10 – *Représentation schématique des deux types de séquences de collisions multiples. La première correspond à l'intensité classique. La seconde, pour laquelle les deux séquences de collisions sont parcourues dans des sens opposés, est à l'origine de l'effet de rétrodiffusion cohérente.*

Cet ouvrage présente essentiellement une étude systématique des conséquences de l'existence de ces deux processus qui subsistent en moyenne lors de la diffusion multiple d'une onde dans un milieu aléatoire. Le premier est bien connu. Il peut être parfaitement compris à partir d'une analyse classique ne prenant pas en compte l'existence d'une équation d'onde sous-jacente, puisque toutes les phases disparaissent exactement. Pour l'étude du transport dans les métaux, cette analyse classique se fait dans le cadre de l'équation de Boltzmann, tandis que pour la propagation des ondes électromagnétiques, la théorie équivalente, dite du « transfert radiatif », a été développée par Mie et Schwartzshild [8]. Toutes deux datent du début du XXe siècle.

Le second terme de la relation (1.8) contient un facteur de phase. Ce dernier dépend des points $\boldsymbol{r}_1$ et $\boldsymbol{r}_2$ et la somme sur ces points fait que la moyenne s'annule généralement sauf pour deux exceptions notables :

- $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}' \simeq 0$: dans la direction exactement opposée à la direction incidente, l'intensité est le *double* de sa valeur classique. Cette dernière n'a, en moyenne, pas de dépendance angulaire, et le second terme, qui dépend de $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'$ fait apparaître un pic dans l'albédo (c'est-à-dire la dépendance

angulaire de l'intensité moyenne réfléchie par le milieu). Ce phénomène observé en optique est appelé « *rétrodiffusion cohérente* ». Son étude fera l'objet du chapitre 8.

- Dans la somme (1.8), les termes tels que $\boldsymbol{r}_1 = \boldsymbol{r}_2$ sont particuliers. Ils correspondent aux trajectoires de diffusion multiple fermées. Cette contribution du terme d'interférence à la valeur moyenne subsiste même quand il n'est pas possible d'imposer les directions $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$. C'est le cas des métaux ou des semi-conducteurs où le terme d'interférence affecte les propriétés de transport moyennes, comme la conductivité électrique. Ceci est à l'origine du phénomène de *localisation faible*. Nous l'étudierons en détail dans le chapitre 7.

1.5 Cohérence de phase et auto-moyennage : fluctuations universelles

Les grandeurs physiques mesurables d'un système quantique désordonné dépendent de la réalisation spécifique du désordre, du moins tant que les longueurs caractéristiques de ce système sont inférieures à la longueur de cohérence de phase L_ϕ. Dans le cas contraire, c'est-à-dire pour des longueurs supérieures à L_ϕ, la cohérence de phase est perdue et le système devient classique, ce qui est le cas à l'échelle macroscopique. Les grandeurs physiques sont alors indépendantes de la réalisation spécifique du désordre. La physique des systèmes de taille inférieure à L_ϕ, appelés « *systèmes mésoscopiques* [5] », est donc particulièrement intéressante à cause des effets de cohérence [9, 10]. La physique mésoscopique précise cette distinction entre la complexité due au désordre décrite par l'échelle de longueur l_e et la décohérence décrite par L_ϕ :

- désordre (l_e) : perte des symétries et des bons nombres quantiques (complexité) ;
- perte de la cohérence de phase (L_ϕ).

Essayons maintenant de comprendre le lien qui existe entre le fait qu'un système quantique désordonné soit de taille supérieure à L_ϕ et qu'il soit auto-moyennant, c'est-à-dire que les observables physiques mesurables sur ce système soient égales à leur valeur moyenne sur plusieurs échantillons. Si la taille caractéristique L est beaucoup plus grande que L_ϕ, le système peut-être décomposé en une collection de $N = (L/L_\phi)^d \gg 1$ sous-systèmes statistiquement indépendants à l'intérieur desquels la cohérence quantique est préservée. Une observable macroscopique définie dans chaque sous-système prend donc N valeurs aléatoires. La loi des grands nombres nous assure alors que

[5] La racine grecque $\mu\epsilon\sigma o\varsigma$ signifie intermédiaire.

toute grandeur macroscopique est égale avec une probabilité un à sa valeur moyenne. Par conséquent, tout système désordonné de taille $L \gg L_\phi$ réalise pour chaque grandeur une moyenne sur les réalisations du désordre. Par contre, on observe des déviations à ce résultat pour des systèmes de taille inférieure à L_ϕ à cause de la cohérence de phase sous-jacente. L'étude de ces déviations constitue le domaine privilégié de la physique mésoscopique. Considérons ici l'exemple particulièrement important des fluctuations de la conductance électrique d'un métal faiblement désordonné (chapitre 11). Dans la limite classique auto-moyennante, et pour un échantillon cubique d'arête L, les fluctuations relatives de conductance varient comme $1/\sqrt{N}$:

$$\frac{\sqrt{\overline{\delta G^2}}}{\overline{G}} \simeq \frac{1}{\sqrt{N}} \simeq \left(\frac{L_\phi}{L}\right)^{d/2} \tag{1.9}$$

où $\delta G = G - \overline{G}$. La conductance moyenne $\overline{G}$ est la conductance classique G_{cl} donnée par la loi d'Ohm $G_{cl} = \sigma L^{d-2}$ où σ est la conductivité électrique [6]. De la relation (1.9), on déduit $\overline{\delta G^2} \propto L^{d-4}$. Pour $d \leq 3$, les fluctuations tendent bien vers zéro dans la limite des grandes tailles. On dit que le système est auto-moyennant. Par contre lorsque $L < L_\phi$, on trouve expérimentalement que

$$\sqrt{\overline{\delta G^2}} \simeq const. \times \frac{e^2}{h} \quad . \tag{1.10}$$

L'amplitude des fluctuations de conductance est indépendante de la taille L et de l'amplitude du désordre. On parle de « *fluctuations universelles de conductance* ». La variance de la conductance est le produit d'une grandeur universelle e^2/h, et d'une constante numérique qui dépend uniquement de la géométrie de l'échantillon. Cette relation implique que dans le régime mésoscopique, la conductance électrique n'est plus une quantité auto-moyennante. L'universalité apparaît sur la figure 1.11 où chaque réalisation a été obtenue pour des systèmes très différents. Une caractéristique essentielle des fluctuations mésoscopiques est leur *reproductibilité*. Pour une réalisation donnée du désordre, la dépendance des fluctuations en fonction d'un paramètre extérieur comme l'énergie de Fermi ou le champ magnétique est parfaitement reproductible. En ce sens, les fluctuations représentent, tout comme les figures de speckle en optique, une « *empreinte digitale* » de la réalisation du désordre qui permet de la caractériser de manière unique.

1.6 Corrélations spectrales

Nous avons évoqué la signature des effets cohérents sur des quantités de transport comme la conductance électrique ou l'albédo. Dans un système *isolé*

[6] La forme $G_{cl} = \sigma L^{d-2}$ est une généralisation à d dimensions de l'expression habituelle $G_{cl} = \sigma S/L$, pour un échantillon de longueur L et de section S.

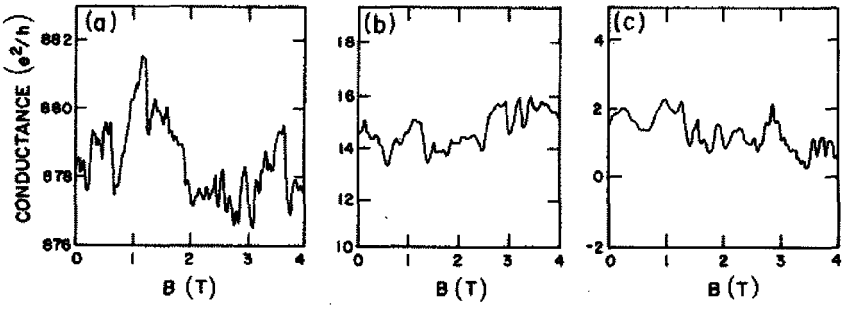


FIG. 1.11 – *Variations apériodiques de la magnétoconductance de trois systèmes différents. a) un anneau d'or de 0,8 mm de diamètre, un échantillon de Si-MOSFET, et un résultat de simulations numériques sur un modèle d'Anderson désordonné (présenté au chap. 2). La conductance varie de plusieurs ordres de grandeur d'un système à l'autre mais les fluctuations restent de l'ordre de* e^2/h *(P.A. Lee* et al., Phys. Rev. B **35**, *1039 (1987)).*

de taille finie, on peut s'interroger sur l'effet du désordre sur le comportement spatial des fonctions d'onde et sur la corrélation des énergies propres. Pour des ondes électromagnétiques il s'agira du spectre des fréquences propres. Si, par exemple, les fonctions d'onde sont très affectées par le désordre et sont exponentiellement localisées, alors les énergies (ou les fréquences) propres correspondantes peuvent être arbitrairement proches l'une de l'autre puisqu'elles décrivent des états dont le recouvrement spatial est exponentiellement petit. Ces fonctions d'onde sont décorrélées et les niveaux d'énergie le sont aussi. Si par contre les fonctions d'onde sont spatialement délocalisées sur l'ensemble du système et ne mettent en évidence aucune structure spatiale, ce qui correspond à un régime que l'on peut qualifier d'*ergodique*, alors le recouvrement spatial important des fonctions propres induit des corrélations spectrales qui se traduisent par une « répulsion » des niveaux d'énergie. Ces deux situations extrêmes sont très générales et peu sensibles aux détails microscopiques propres au désordre. On montre que *les corrélations spectrales présentent des propriétés universelles communes à des systèmes physiques très différents.* Considérons par exemple la probabilité $P(s)$ que deux niveaux d'énergie voisins soient distants de s. Les deux situations précédentes sont décrites par deux cas limites très robustes pour la fonction $P(s)$, correspondant respectivement à une distribution de *Poisson* pour des états exponentiellement localisés et à une distribution de *Wigner-Dyson* pour le cas ergodique. Ces deux distributions représentées sur la figure 10.1 décrivent une gamme très large de problèmes physiques et permettent en première approximation d'en faire une partition en deux classes correspondant d'une part aux systèmes intégrables (Poisson) et d'autre part aux systèmes non intégrables ou *chaotiques* (Wigner-Dyson). Ce dernier cas peut s'étudier systématiquement au moyen

de la « *théorie des matrices aléatoires* » dont les grandes lignes sont exposées dans le chapitre 10.

Bien entendu, un milieu complexe n'est décrit par ces comportements universels que dans des cas limites. L'approximation de diffusion permet, d'une part, de retrouver certains résultats de la théorie des matrices aléatoires et, d'autre part, d'identifier les corrections à ce régime universel. Ces corrélations spectrales sont très sensibles à la perte de cohérence de phase. Elles dépendent donc de L_ϕ et sont caractéristiques du régime mésoscopique. On peut les mettre en évidence sur le comportement de quantités thermodynamiques comme l'aimantation ou les courants permanents qui constituent la réponse orbitale des électrons à un champ magnétique appliqué. Ceci sera l'objet du chapitre 14.

1.7 Probabilité classique et croisements quantiques

La plupart des quantités physiques que nous étudierons s'expriment en fonction du produit de deux amplitudes complexes, chacune étant la somme des contributions a_i associées aux trajectoires de collisions multiples :

$$\sum_i a_i^* \sum_j a_j = \sum_{i,j} a_i^* a_j \quad . \tag{1.11}$$

C'est le cas par exemple de l'intensité lumineuse considérée dans la section 1.4. La combinaison d'amplitudes (1.11) permet de définir « *la probabilité de diffusion quantique* », dont le rôle est essentiel pour caractériser les propriétés physiques des milieux désordonnés. Cette probabilité décrit l'évolution d'un paquet d'onde entre deux points $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$ et s'écrit comme le produit de deux amplitudes complexes [7] appelées aussi propagateurs ou fonctions de Green. En notant $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ la probabilité moyenne, on a

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \propto \overline{\sum_{i,j} a_i^*(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') a_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')} \tag{1.12}$$

où $\overline{\cdots}$ désigne la moyenne sur le potentiel aléatoire. L'amplitude $a_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ décrit la propagation de $\boldsymbol{r}$ à $\boldsymbol{r}'$ et $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ apparaît donc comme la somme des contributions de paires de trajectoires, chacune étant caractérisée par une amplitude et une phase. Cette somme peut être décomposée en deux contributions, celle pour laquelle les trajectoires i et j sont identiques et celle

[7] Dans cette introduction, nous ne cherchons pas à établir des expressions exactes pour les différentes quantités physiques mais simplement à préciser leur structure en fonction des trajectoires de collisions multiples. On omet donc les variables temps ou fréquence lorsque ça n'est pas indispensable. Pour des définitions plus précises, on se reportera aux chapitres 3 et 4.

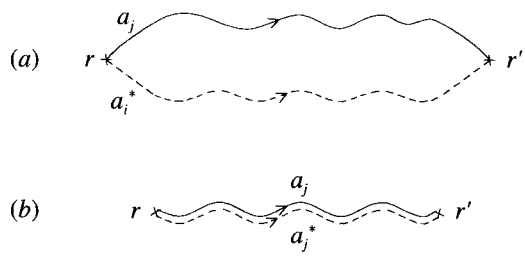


FIG. 1.12 – *En moyennant sur le désordre, la contribution des paires de trajectoires distinctes (a) disparaît pour ne laisser dans la probabilité moyenne que les termes correspondant à l'appariement de trajectoires identiques (b).*

pour laquelle $i \neq j$:

$$P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \propto \overline{\sum_j |a_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')|^2} + \overline{\sum_{i\neq j} a_i^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')a_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')} \quad . \tag{1.13}$$

Dans la première contribution les phases disparaissent. Dans la seconde, le déphasage des trajectoires appariées est grand et aléatoire. Par conséquent celle-ci s'annule en moyenne [8]. La probabilité est donc donnée par une somme d'intensités et ne contient pas de terme d'interférence (fig. 1.12) :

$$P_{cl}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \propto \overline{\sum_j |a_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')|^2} \quad . \tag{1.14}$$

On appellera ce terme classique le « *diffuson* ». Dans la limite de faible désordre, c'est-à-dire lorsque la longueur d'onde λ est petite devant le libre parcours moyen élastique l_e et pour des échelles de longueur grandes devant l_e, le diffuson est bien décrit par la solution de l'équation de diffusion

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - D\Delta\right] P_{cl}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t) = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta(t) \quad , \tag{1.15}$$

où $D = vl_e/d$ est la constante de diffusion, v la vitesse du paquet d'onde et d la dimension d'espace. Ce résultat constitue l'« *approximation de diffusion* ».

Une quantité particulièrement importante est la probabilité de retour à l'origine $P_{cl}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},t)$ ainsi que son intégrale spatiale $Z(t)$. Cette dernière s'écrit en fonction des fréquences propres notées E_n associées à l'équation de diffusion (1.15)

$$Z(t) = \int d\boldsymbol{r} P_{cl}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},t) = \sum_n e^{-E_n t} \quad . \tag{1.16}$$

[8] On montre dans la section suivante que les termes d'interférence de la relation (1.13) ne disparaissent pas complètement et sont à l'origine de la plupart des effets quantiques décrits dans cet ouvrage.

Par exemple, pour un système [9] de volume Ω, on a

$$Z(t) = \frac{\Omega}{(4\pi Dt)^{d/2}} \quad . \tag{1.17}$$

La dépendance en fonction de la dimension d'espace d joue un rôle essentiel et les propriétés physiques sont d'autant plus sensibles aux effets de la diffusion multiple que la dimension d'espace est petite, la probabilité de retour augmentant lorsque d diminue.

Pour un système fini de volume $\Omega = L^d$, les conditions aux limites peuvent jouer un rôle important. Elles reflètent la nature du couplage au monde extérieur et $Z(t)$ en dépend. Il apparaît alors un nouveau temps caractéristique

$$\tau_D = L^2/D \tag{1.18}$$

appelé *temps de Thouless.* Il représente le temps mis pour diffuser d'un bord à l'autre de l'échantillon. Si $t \ll \tau_D$, on a une diffusion libre, décrite par la relation (1.17) où l'effet des bords ne se fait pas sentir. Si par contre $t \gg \tau_D$, tout le volume mis à la disposition de la marche au hasard est exploré, on est dans le régime dit *ergodique* et $Z(t) \simeq 1$. On associe généralement à τ_D l'énergie caractéristique $E_c = \hbar/\tau_D$, appelée *énergie de Thouless.*

1.7.1 Croisements quantiques

Supposer que la seconde contribution dans (1.13) est nulle revient à négliger tout effet d'interférence. En fait, même après moyenne sur le désordre, cette contribution n'est pas rigoureusement nulle. Il reste des termes qui décrivent des appariements de trajectoires distinctes, $i \neq j$, mais suffisamment proches l'une de l'autre pour que leur déphasage reste petit. Considérons par exemple le cas de la figure 1.13.*a* où les trajectoires appariées qui constituent un diffuson suivent des séquences de collisions identiques mais se croisent pour former une boucle contenant des trajectoires allant dans des directions opposées [10]. Cette notion de croisement est essentielle car c'est elle qui est à l'origine des effets cohérents comme la localisation faible, les corrélations à longue portée de l'intensité lumineuse ou les fluctuations universelles de conductance. Il est donc important d'en avoir une bonne intuition. Les figures 1.13.*a,b* montrent qu'un tel croisement mélange quatre amplitudes complexes et les apparie différemment. Le croisement, appelé aussi *boîte de Hikami*, est donc un objet dont le rôle est de permuter les amplitudes [13]. Si l'on veut réduire le déphasage induit à des valeurs inférieures à 2π, les trajectoires doivent rester aussi proches l'une de l'autre que possible et le croisement doit donc être spatialement localisé, c'est-à-dire se faire sur une longueur de l'ordre du

[9] On néglige les effets de bords. On parle alors de diffusion libre.

[10] Il faut prendre garde à ne pas confondre un tel croisement quantique qui échange deux amplitudes avec les croisements d'une marche au hasard classique.

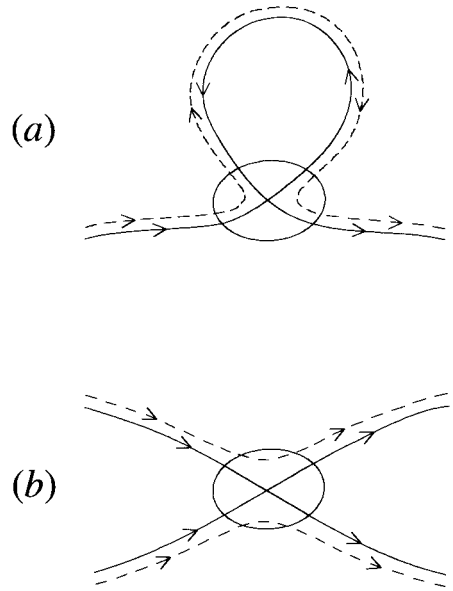


FIG. 1.13 – *a) Le croisement des trajectoires contribuant au diffuson conduit à un nouvel appariement des amplitudes. b) L'appariement de quatre amplitudes a_i fait apparaître le croisement de deux diffusons.*

libre parcours moyen élastique l_e. Nous verrons que le volume associé à un croisement en dimension d est de l'ordre de $\lambda^{d-1} l_e$. Ceci peut s'interpréter en attribuant à un diffuson – l'objet constitué de deux trajectoires appariées – se propageant pendant un temps t une longueur vt, où v est la vitesse de groupe, et une section λ^{d-1}, soit un volume $\lambda^{d-1}\, vt$.

Afin d'évaluer l'importance des effets quantiques, estimons la probabilité de croisement de deux diffusons, comme sur la figure 1.13.*b*. Cette probabilité, pour un intervalle de temps dt, est proportionnelle au rapport entre le volume d'un diffuson et le volume $\Omega = L^d$ du système, soit

$$dp_\times(t) = \frac{\lambda^{d-1} v dt}{\Omega} \simeq \frac{1}{g}\frac{dt}{\tau_D} \quad . \tag{1.19}$$

Dans cette expression, on a fait apparaître explicitement le temps de Thouless $\tau_D = L^2/D$. On a aussi introduit le nombre sans dimension g, proportionnel au rapport de deux volumes $\lambda^{d-1} v\tau_D/\Omega$. On montrera que ce nombre n'est autre que la conductance électrique classique $g = G_{cl}/(e^2/h)$, en unités du quantum de conductance e^2/h (relation 7.22).

Lorsque le milieu désordonné est couplé au monde extérieur, les ondes diffusées s'en échappent au bout d'un temps de l'ordre de τ_D, de sorte que le temps typique des trajectoires de diffusion est donné par τ_D. La probabilité de croisement pendant ce temps τ_D est donc inversement proportionnelle à la

conductance :

$$p_\times(\tau_D) = \int_0^{\tau_D} dp_\times(t) \simeq \frac{1}{g} \quad . \tag{1.20}$$

Ce nombre permet d'évaluer l'importance des corrections quantiques par rapport au comportement classique. Dans la limite de faible désordre $\lambda \ll l_e$, la conductance g est grande. Par conséquent la probabilité de croisement reste petite et les effets de cohérence de phase sont petits.

Les croisements quantiques et le déphasage qu'ils induisent viennent corriger la probabilité classique (1.14). C'est la combinaison de ces croisements, de l'interférence qu'ils décrivent et de la longue portée spatiale du diffuson qui permet de propager des effets cohérents sur l'ensemble du système, effets cohérents à la base de la physique mésoscopique. L'argument simple développé ici implique immédiatement que les corrections quantiques au transport électronique classique sont de l'ordre de $G_{cl} \times 1/g$, c'est-à-dire e^2/h. C'est pourquoi les propriétés caractéristiques du transport quantique telles que la localisation faible ou les fluctuations universelles de conductance sont d'ordre e^2/h.

Dans la limite de faible désordre, on peut montrer que les croisements sont indépendants les uns des autres. On peut alors engendrer les corrections successives à la probabilité classique en fonction du nombre de croisements, c'est-à-dire comme un développement en puissances de $1/g$.

1.8 Les objectifs

Cet ouvrage aborde les effets de la diffusion multiple cohérente d'ondes électroniques ou électromagnétiques dans des milieux désordonnés, dans la limite où la longueur d'onde [11] $\lambda = 2\pi/k$ est petite devant le libre parcours moyen élastique l_e. Ceci constitue la limite dite de « faible désordre ». Il est alors possible de construire un cadre général pour la description d'un grand nombre de phénomènes physiques qui ont été effectivement prédits, observés et expliqués, au moyen d'un petit nombre d'idées assez générales. C'est cet ensemble d'hypothèses et de résultats que nous allons maintenant exposer succinctement. Cette section constitue un résumé des propriétés physiques qui seront décrites dans l'ouvrage.

• Corrections de localisation faible à la conductivité (chap. 7) et pic de rétrodiffusion cohérente (chap. 8)

Un exemple particulièrement important où la notion de croisement quantique apparaît est celui du transport électrique dans un métal faiblement désordonné. Considérons par exemple le transport à travers un échantillon de longueur L. On peut montrer que la conductance électrique associée est proportionnelle à la probabilité de traverser l'échantillon. À la probabilité

[11] Pour les électrons, λ est la longueur d'onde au niveau de Fermi.

classique correspond la conductance classique, dite « de Drude », G_{cl}. La correction quantique à la probabilité conduit à une correction à la conductance.

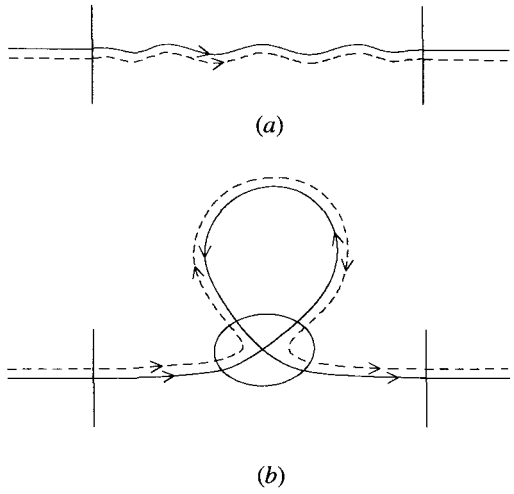


FIG. 1.14 – *Le croisement d'un diffuson avec lui-même (b) engendre une correction quantique à la conductivité classique de Drude (a).*

Cette correction associée à un seul croisement est donc d'ordre $1/g$, mais elle dépend aussi de la distribution des boucles, c'est-à-dire des trajectoires de diffusion fermées (fig. 1.14) dont le nombre est donné par l'intégrale spatiale (1.16), c'est-à-dire par la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t)$. Ainsi, la probabilité $p_o(\tau_D)$ de traverser l'échantillon avec un seul croisement quantique, c'est-à-dire une seule boucle, est de la forme

$$p_o(\tau_D) \sim \frac{1}{g} \int_0^{\tau_D} Z(t) \, \frac{dt}{\tau_D} \tag{1.21}$$

où $\tau_D = L^2/D$. On obtient ainsi la correction relative de conductance moyenne $\Delta G = G - G_{cl}$,

$$\boxed{\frac{\Delta G}{G_{cl}} \sim -p_o(\tau_D)} \tag{1.22}$$

où le signe négatif de la correction indique que la prise en compte d'un croisement quantique et de la formation d'une boucle vient diminuer la conductance moyenne. Cette correction est dite de *localisation faible*.

On remarque par ailleurs que les deux trajectoires qui constituent la boucle évoluent dans des directions *opposées*. S'il y a invariance par renversement du sens du temps, les deux amplitudes associées à ces deux trajectoires j et j^T sont identiques $a_{j^T}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}) = a_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})$ et elles interfèrent donc constructivement.

S'il existe un processus qui vient briser cette invariance, alors la correction de localisation faible disparaît. Cet appariement de trajectoires conjuguées [12] par renversement du sens du temps est appelé un *cooperon*.

Cet appariement ressemble tout à fait à celui décrit dans la section 1.4 et sur la figure 1.10.*b*, qui correspond à des amplitudes de diffusion multiple $a_j(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ et $a^*_{jT}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ conjuguées par renversement du sens du temps. L'invariance par renversement du sens du temps implique que $a_{jT}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = a_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ de sorte que le produit de ces deux amplitudes est égal au produit de deux amplitudes se propageant dans la même direction et contribue à l'intensité moyenne. Considérons un milieu désordonné semi-infini et une onde plane incidente dans la direction $\boldsymbol{k}$ et émergente le long de $\boldsymbol{k}'$. L'intensité moyenne réfléchie $I(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}')$ (appelée aussi albédo moyen) dépend, en vertu de la relation (1.8), de l'angle entre les directions $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$. Elle est de la forme

$$\boxed{I(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \propto \int d\boldsymbol{r} d\boldsymbol{r}' P_{cl}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \left[1 + e^{i(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}').(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')}\right]} \tag{1.23}$$

On identifie $\overline{|f(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')|^2}$ avec le diffuson $P_{cl}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ dont les points $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$ sont proches de l'interface de l'échantillon et du milieu extérieur. Le premier terme entre crochets est la contribution classique et indépendante de la phase, tandis que le terme d'interférence a une structure angulaire autour de la direction de rétrodiffusion $\boldsymbol{k}' \simeq -\boldsymbol{k}$. L'albédo, présente donc dans cette direction un pic, appelé *pic de rétrodiffusion cohérente*, dont l'intensité est le double de la valeur classique.

• Corrélations des figures de speckle (chap. 12)

Pour une configuration donnée du désordre, la distribution de l'intensité d'une onde lumineuse subissant de la diffusion multiple est constituée d'une répartition aléatoire de zones sombres et brillantes (fig. 1.2) appelée figure de speckle. C'est une figure d'interférence, obtenue à partir de la superposition des amplitudes complexes, qui constitue une « empreinte digitale » de la configuration de désordre. Afin de caractériser une figure de speckle, on peut mesurer la distribution angulaire de l'intensité transmise (ou réfléchie) dans la géométrie d'une tranche d'épaisseur finie L. Pour cela, on mesure l'intensité normalisée $\mathcal{T}_{ab}$ transmise selon la direction $\hat{\boldsymbol{s}}_b$ et correspondant à une onde incidente selon $\hat{\boldsymbol{s}}_a$. En moyenne, le coefficient de transmission $\overline{\mathcal{T}}_{ab}$ dépend peu des directions $\hat{\boldsymbol{s}}_a$ et $\hat{\boldsymbol{s}}_b$, et on le note $\overline{\mathcal{T}}$. La corrélation angulaire des figures

[12] Il faudra éviter la confusion entre « trajectoire conjuguée par renversement du sens du temps », décrite par l'amplitude $a_{jT}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$, et « amplitude complexe conjuguée » $a^*_j(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$. L'invariance par renversement du sens du temps se traduit par $a_{jT}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = a^*_j(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r})$.

de speckle est définie par

$$C_{aba'b'} = \frac{\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}}{\overline{\mathcal{T}}^2} \tag{1.24}$$

où $\delta\mathcal{T}_{ab} = \mathcal{T}_{ab} - \overline{\mathcal{T}}$. Les fluctuations de speckle, pour une direction d'incidence $\hat{s}_a$ donnée, sont décrites par la quantité $C_{abab} = \overline{\delta\mathcal{T}_{ab}^2}/\overline{\mathcal{T}}^2$ dont on montre qu'elle est égale à 1, c'est-à-dire

$$\overline{\mathcal{T}_{ab}^2} = 2\,\overline{\mathcal{T}}^2 \quad . \tag{1.25}$$

Ce résultat, qui constitue la loi de Rayleigh, décrit l'aspect le plus « visible » d'une figure de speckle, à savoir son aspect granulaire avec des fluctuations relatives de l'ordre de l'unité.

Contrairement à une probabilité (conductance ou intensité moyennes), une fonction de corrélation telle que (1.24) est constituée du produit de *quatre amplitudes complexes* (fig. 1.15.*a*). En moyennant sur le désordre, les seules contributions importantes sont obtenues en appariant ces amplitudes de manière à faire apparaître des diffusons ou des cooperons. En négligeant, dans un premier temps, la possibilité de croisement quantique de deux diffusons, on obtient deux possibilités représentées sur les figures 1.15.*b*,*c*. La première est le produit des deux intensités moyennes $\overline{\mathcal{T}}_{ab}$ et $\overline{\mathcal{T}}_{a'b'}$. La seconde donne la contribution principale à la fonction de corrélation (1.24). On la note $C^{(1)}_{aba'b'}$. Elle n'est non nulle que pour $\hat{s}_a - \hat{s}_{a'} = \hat{s}_b - \hat{s}_{b'}$ et elle décroît exponentiellement en fonction de $k|\hat{s}_a - \hat{s}_{a'}|/L$, c'est-à-dire sur une très petite ouverture angulaire.

Il est aussi possible d'apparier les amplitudes en intercalant un ou plusieurs croisements quantiques. Il en résulte des corrections en puissances de $1/g$ à la fonction de corrélation angulaire. La première d'entre elles, notée $C^{(2)}_{aba'b'}$, comporte *un seul croisement* et est donnée par la figure 1.15.*d*. On note que la présence du croisement impose des contraintes lors du réappariement des amplitudes et donne donc lieu à une dépendance angulaire différente. On montrera dans la section 12.4.2 que $C^{(2)}_{aba'b'}$ a une dépendance angulaire qui décroît en loi de puissance de $k|\hat{s}_a - \hat{s}_{a'}|/L$, au lieu d'une décroissance exponentielle. Elle a cependant un poids $1/g \ll 1$ par rapport au terme sans croisement.

La contribution $C^{(3)}_{aba'b'}$ comportant *deux croisements* est schématisée sur la figure 1.15.*e*. Il découle de cette structure à deux croisements que cette contribution n'a pas de dépendance angulaire, c'est-à-dire qu'elle donne un fond continu de corrélation qui s'étend sans décroissance sur l'ensemble du milieu. Ce résultat est tout à fait caractéristique de la diffusion multiple cohérente, c'est-à-dire de l'effet conjugué des croisements de phase et de leur propagation à longue portée à l'aide des diffusons. En moyennant la fonction de corrélation angulaire totale sur toutes les directions d'incidence et d'émergence des ondes, seul subsiste cette dernière contribution qui constitue l'analogue pour les ondes des fluctuations universelles de conductance.

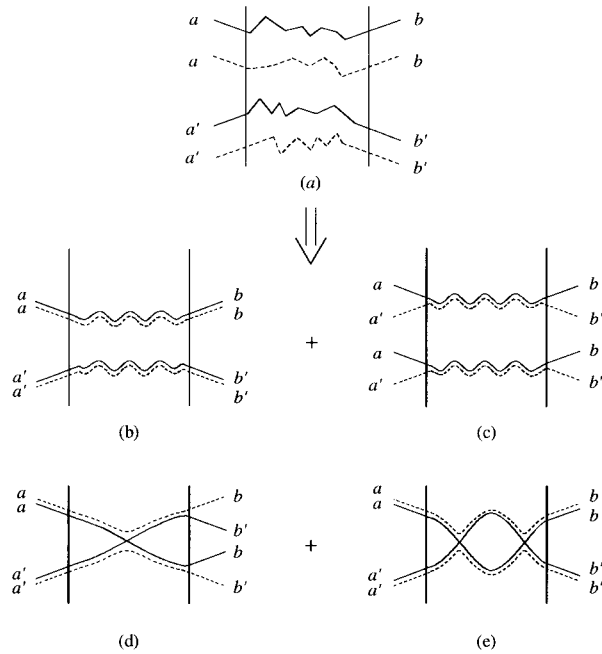


FIG. 1.15 – *(a) La fonction de corrélation angulaire d'une figure de speckle est construite à partir du produit de quatre amplitudes complexes a_j correspondant à quatre ondes planes incidentes selon $\hat{\mathbf{s}}_a$ et $\hat{\mathbf{s}}_{a'}$ et émergentes selon $\hat{\mathbf{s}}_b$ et $\hat{\mathbf{s}}_{b'}$. Les contributions principales sont obtenues en appariant les amplitudes deux à deux afin de faire apparaître des diffusons. On obtient ainsi les contributions (b) et (c). La contribution (c) qui correspond à la fonction de corrélation $C^{(1)}_{aba'b'}$ a une décroissance angulaire exponentielle. (d) Contribution contenant un croisement quantique et (e) deux croisements quantiques. Dans ce dernier cas, on note que la fonction de corrélation correspondante n'a pas de dépendance angulaire.*

• Fluctuations universelles de conductance (chap. 11)

Ces considérations obtenues pour une onde électromagnétique se transposent aisément au cas des électrons dans un métal faiblement désordonné. On est alors amené à étudier les fluctuations de la conductance électrique. Celles-ci, dans le régime mésoscopique, diffèrent considérablement du résultat classique : elles sont universelles et de l'ordre de e^2/h (voir la section 1.5). Il est possible d'interpréter ces résultats comme une conséquence de l'existence de croisements quantiques. En effet, le calcul des fluctuations $\overline{\delta G^2} = \overline{G^2} - \overline{G}^2$ met en jeu l'appariement de quatre amplitudes complexes sous forme de deux diffusons. De plus, dans le cadre du formalisme de Landauer (complément C7.2), on peut relier la conductance en unités de e^2/h au coefficient de transmission $\mathcal{T}_{ab}$ sommé sur toutes les directions a et b incidentes et émergentes. Ainsi,

tout comme pour les corrélations angulaires de speckle, on peut montrer que le terme sans croisement quantique correspond à $\overline{G}^2$. La contribution à un croisement s'annule du fait de la sommation sur les directions émergentes. Par contre, le terme à deux croisements quantiques n'a pas de structure angulaire (fig. 1.15.e) et il donne pour la variance $\overline{\delta G^2}$ une correction proportionnelle à $G_{cl}^2/g^2 = (e^2/h)^2$, c'est-à-dire universelle.

On peut remarquer que, comme pour la correction de localisation faible, la variance $\overline{\delta G^2}$ dépend aussi de la distribution des *boucles*. Ici les boucles sont formées par *deux croisements* (fig. 1.15.e). Pour une boucle de longueur vt, le choix de la position relative des deux croisements introduit un facteur supplémentaire $\lambda^{d-1}vt/\Omega \simeq t/(g\tau_D)$ dans l'intégrale (1.21). On en déduit

$$\boxed{\frac{\overline{\delta G^2}}{G_{cl}^2} \sim \frac{1}{g^2}\int_0^{\tau_D} Z(t)\frac{tdt}{\tau_D^2}} \tag{1.26}$$

Cette expression ressemble à la correction relative de localisation faible (1.21, 1.22). Mais le facteur t supplémentaire a des conséquences importantes. En effet, la dépendance $Z(t) \propto t^{-d/2}$ de la probabilité intégrée de retour à l'origine implique que la correction (1.21, 1.22) est universelle pour $d < 2$ tandis que les fluctuations de conductance le sont pour $d < 4$. En d'autres termes, la condition imposée à la taille L du système d'être inférieure à L_ϕ n'est pas déterminante pour l'observation des effets cohérents moyens. Par contre, elle le devient lorsqu'on veut étudier le comportement d'une réalisation spécifique du potentiel aléatoire, que ce soit dans l'expérience de Webb *et al.* [6] ou pour les figures de speckle [11]. Dans les métaux, la longueur de cohérence de phase est une fonction décroissante de la température. En pratique, L_ϕ est de l'ordre du micron pour des températures inférieures au Kelvin, ce qui limite sévèrement l'observation du régime mésoscopique pour les systèmes électroniques.

• Déphasages (chap. 6)

Les effets d'interférence discutés précédemment résultent de l'existence de croisements quantiques. Ils dépendent de la cohérence du système onde-diffuseur et ils peuvent être modifiés en présence de déphasages. Ceux-ci sont liés aux degrés de liberté additionnels que nous pouvons répartir en trois classes et dont nous donnons quelques exemples :

• champ extérieur : champ magnétique uniforme, flux Aharonov-Bohm ;

• degrés de liberté associés à l'onde qui diffuse : spin de l'électron et polarisation des photons ;

• degrés de liberté des diffuseurs : impuretés magnétiques, environnement des autres électrons, diffuseurs en mouvement, degrés de liberté quantiques internes (sous-niveaux Zeeman atomiques).

Reprenons tout d'abord le cas de la diffusion multiple des électrons, maintenant en présence d'un champ magnétique. Une cohérence complète suppose que les trajectoires conjuguées par renversement du sens du temps ont la même amplitude. Ça n'est plus le cas en présence d'un champ magnétique et il apparaît un déphasage entre les trajectoires conjuguées :

$$a_{jT}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = a_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')e^{i\Phi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')} \quad . \tag{1.27}$$

Dans ce cas, en utilisant (1.13) et la discussion de la page 22, la correction à la probabilité de retour liée au cooperon, que nous noterons P_c, peut s'exprimer sous la forme

$$P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}) \propto \sum_j \overline{|a_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})|^2 e^{i\Phi_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})}} \tag{1.28}$$

où $\Phi_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})$ est la différence de phase accumulée le long des trajectoires fermées. Le déphasage engendré par un champ magnétique est

$$\Phi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \frac{2e}{\hbar}\int_{\boldsymbol{r}}^{\boldsymbol{r}'} \boldsymbol{A}.d\boldsymbol{l} \tag{1.29}$$

où le facteur 2 provient du fait que les deux trajectoires appariées accumulent chacune une même phase mais de signe opposé de sorte que leur différence s'ajoute. La contribution cohérente à la probabilité de retour est donc affectée par ce facteur de phase et la correction de localisation faible (1.22) à la conductance électrique prend la forme

$$\boxed{\frac{\Delta G}{G_{cl}} \propto -\int dt Z(t)\left\langle e^{i\Phi(t)}\right\rangle} \tag{1.30}$$

où $\left\langle e^{i\Phi(t)}\right\rangle$ est la moyenne du facteur de phase associé à l'ensemble des trajectoires de longueur vt. Le champ magnétique apparaît donc comme un moyen de sonder les effets d'interférence. En particulier l'effet Aharonov-Bohm correspondant à la limite d'un solénoïde infiniment long donne lieu au spectaculaire effet Sharvin-Sharvin pour lequel il reste en moyenne une contribution à la conductance oscillant à la période $h/2e$ (section 7.6.2). Dans le cas du champ magnétique, il faut pour évaluer la contribution cohérente, chercher les solutions de l'équation de diffusion covariante qui remplace (1.15)

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - D\left(\nabla_{\boldsymbol{r}} + i\frac{2e}{\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})\right)^2\right] P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t) = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta(t) \quad . \tag{1.31}$$

Le déphasage (1.29) résultant de l'application d'un champ magnétique affecte la phase accumulée le long d'une trajectoire de diffusion multiple. Par contre, pour décrire le couplage à d'autres degrés de liberté, de l'onde ou des diffuseurs, on est amené à moyenner localement le déphasage relatif entre les

deux amplitudes complexes qui interfèrent. Ceci résulte de notre connaissance partielle de l'état quantique interne des diffuseurs. Cette moyenne sur les degrés de liberté des diffuseurs introduit une irréversibilité du déphasage que l'on décrit à l'aide d'un temps de cohérence de phase fini τ_ϕ. Nous montrerons dans le chapitre 6 qu'il est possible de généraliser l'expression de la probabilité classique (le diffuson) de manière à y inclure comme pour le cooperon, l'effet d'un déphasage lié aux degrés de liberté additionnels qui apparaît sous la forme du facteur de phase moyen décroissant en général exponentiellement avec le temps :

$$\left\langle e^{i\Phi(t)} \right\rangle \propto e^{-t/\tau_\phi} \tag{1.32}$$

où $\langle \cdots \rangle$ prend en compte la moyenne sur les autres degrés de liberté.

La détermination du temps de cohérence de phase associé à un processus de déphasage nécessite l'évaluation de la moyenne (1.32). Cette notion de déphasage s'étend à toute perturbation dont l'effet est de modifier la propriété de conjugaison de deux trajectoires de diffusion multiple. Un exemple est présenté ci-après.

• Dynamique des diffuseurs - Spectroscopie des ondes diffusées (chaps. 6 et 9)

Lorsqu'elle est bien diagnostiquée, une source de déphasage n'est pas nécessairement une nuisance mais elle peut être mise à profit afin d'étudier les propriétés du milieu diffusant. Ainsi, dans le cas de la diffusion des ondes électromagnétiques, il est possible, en mesurant la fonction de corrélation du champ électromagnétique à des temps différents, d'utiliser avantageusement la diffusion multiple cohérente afin d'en déduire des informations sur la dynamique des diffuseurs caractérisée par une échelle de temps τ_b. En effet, la vitesse des diffuseurs étant très inférieure à celle de l'onde, on peut, en envoyant des impulsions lumineuses à des temps différents 0 et T, réaliser des figures de speckle correspondant à des réalisations différentes du potentiel aléatoire. Les trajectoires appariées explorent alors des configurations différentes séparées par le temps T. Il en résulte un déphasage qui dépend du mouvement des diffuseurs pendant l'intervalle de temps T. La fonction de corrélation temporelle du champ électrique E en un point $\boldsymbol{r}$ (avec une source en $\boldsymbol{r}_0$) est de la forme

$$\langle E(\boldsymbol{r},T)E^*(\boldsymbol{r},0)\rangle \propto \left\langle \sum_j a_j(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r},T)a_j^*(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r},0) \right\rangle \tag{1.33}$$

où la moyenne est prise à la fois sur les configurations et sur le mouvement des diffuseurs. Elle s'exprime en fonction de la probabilité classique (du diffuson)

selon

$$\boxed{\langle E(\boldsymbol{r},T)E^*(\boldsymbol{r},0)\rangle \propto \int_0^\infty dt P_{cl}(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r},t)e^{-t/\tau_\phi}} \tag{1.34}$$

où le temps caractéristique τ_ϕ, qui dépend de la dynamique des diffuseurs, est relié à τ_b et à T. La technique qui consiste à mesurer ces corrélations temporelles du champ ou de l'intensité est appelée *spectroscopie des ondes diffusées*.

L'étude de la fonction de corrélation temporelle de l'intensité permet ainsi d'obtenir une information sur la dynamique des diffuseurs. Les longs chemins de diffusion multiple étant très vite décorrélés, on peut en déduire la dynamique aux temps très courts. Cette idée est largement utilisée pour l'étude des milieux turbides.

• Densité d'états (chap. 10)

Les exemples précédents décrivent le transport des ondes ou des électrons. Le cas des quantités thermodynamiques est plus délicat car celles-ci s'expriment en fonction de la densité d'états. Celle-ci est de la forme

$$\rho(\epsilon) \propto \int d\boldsymbol{r} \sum_j a_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}) \quad . \tag{1.35}$$

En moyennant sur le désordre, les phases disparaissent et il ne reste pas de trace de la cohérence de phase. Par contre, des grandeurs impliquant des produits de densités d'états ou de potentiels thermodynamiques font intervenir des *paires de trajectoires* et sont donc sensibles aux effets de cohérence de phase. Par exemple, les *fluctuations de densité d'états* sont de la forme

$$\overline{\rho(\epsilon)\rho(\epsilon')} \propto \int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \overline{\sum_{i,j} a_i(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})a_j^*(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}')} \tag{1.36}$$

qui contient les appariements de deux trajectoires fermées mais dont les points de départ sont différents. Afin de les laisser appariées, l'intégration sur un des points de départ fait apparaître la longueur $\mathcal{L}_i$ de chaque boucle de diffusion multiple. On obtient ainsi une structure assez proche de la probabilité classique (1.14) :

$$\overline{\rho(\epsilon)\rho(\epsilon')} \propto \int d\boldsymbol{r} \overline{\sum_i \mathcal{L}_i \left|a_i(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})\right|^2} \tag{1.37}$$

mais qui contient, outre $P_{cl}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},t)$, la longueur $\mathcal{L}_i$ des trajectoires, proportionnelle à vt. Plus précisément, la transformée de Fourier (par rapport à $\epsilon - \epsilon'$) de la fonction de corrélation $\overline{\rho(\epsilon)\rho(\epsilon')}$ est proportionnelle non pas à

$Z(t)$ mais à $t\,Z(t)$:

$$\boxed{\overline{\rho(\epsilon)\rho(\epsilon')} \xrightarrow{T.F.} t\,Z(t)} \tag{1.38}$$

Le nombre de niveaux $N(E)$ dans un intervalle d'énergie E est donné par l'intégrale de la densité d'états. Une quantité particulièrement utilisée pour caractériser les corrélations spectrales est la fluctuation $\Sigma^2(E) = \overline{N^2} - \overline{N}^2$ de ce nombre de niveaux, qui s'écrit

$$\Sigma^2(E) = \frac{2}{\pi^2}\int_0^\infty dt \frac{Z(t)}{t}\sin^2\left(\frac{Et}{2}\right) \quad . \tag{1.39}$$

Pour des énergies inférieures à l'énergie de Thouless E_c, c'est-à-dire pour des temps supérieurs à τ_D, on est dans le régime ergodique et $Z(t) = 1$. À partir de (1.39), on obtient

$$\Sigma^2(E) \propto \ln E \quad . \tag{1.40}$$

On retrouve ainsi le comportement de la rigidité spectrale décrit par la *théorie des matrices aléatoires*. Dans la limite inverse, lorsque $E \gg E_c$, c'est-à-dire $t \ll \tau_D$, $Z(t)$ dépend de la dimension d'espace d à travers la relation (1.17), ce qui donne pour la fluctuation le comportement non universel $\Sigma^2(E) \propto (E/E_c)^{d/2}$. On voit ainsi le rôle joué par la diffusion sur les propriétés spectrales. Il est donc en principe possible de déterminer l'énergie de Thouless et le coefficient de diffusion à partir des corrélations spectrales. On doit donc pouvoir distinguer un bon d'un mauvais conducteur simplement en considérant leurs propriétés spectrales.

• Fluctuations de grandeurs thermodynamiques – Magnétisme orbital (chap. 14)

L'aimantation orbitale d'un gaz d'électrons est donnée par la dérivée de l'énergie totale par rapport au champ magnétique :

$$\mathcal{M} \propto -\frac{\partial}{\partial B}\int_{-\epsilon_F}^{0} \epsilon\rho(\epsilon, B)d\epsilon \quad . \tag{1.41}$$

Les fluctuations d'aimantation se déduisent donc simplement des fluctuations de densité d'états. D'après cette définition de l'aimantation, la variance $\overline{\delta\mathcal{M}^2} = \overline{\mathcal{M}^2} - \overline{\mathcal{M}}^2$ est de la forme :

$$\overline{\delta\mathcal{M}^2} \propto \frac{\partial}{\partial B}\frac{\partial}{\partial B'}\int_{-\epsilon_F}^{0}\int_{-\epsilon_F}^{0} \epsilon\,\epsilon'\overline{\rho(\epsilon, B)\rho(\epsilon', B')}d\epsilon d\epsilon'|_{B'=B} \tag{1.42}$$

qui, par transformation de Fourier, conduit à

$$\boxed{\overline{\delta\mathcal{M}^2} \propto \int_0^\infty \frac{\partial^2 Z(t, B)}{\partial B^2}\frac{e^{-t/\tau_\phi}}{t^3}dt} \tag{1.43}$$

où la dépendance en champ magnétique de $Z(t, B)$ est obtenue en résolvant l'équation (1.31). Donc, contrairement à la valeur moyenne de l'aimantation qui n'est pas affectée par la cohérence de phase, la distribution d'aimantation en dépend.

• Interaction coulombienne (chap. 13)

Jusqu'à présent on a ignoré l'interaction coulombienne entre électrons. La prise en compte de cette interaction modifie de nombreuses propriétés physiques, tout particulièrement en présence de désordre, car la probabilité que deux électrons interagissent se trouve renforcée par le mouvement diffusif des électrons. Pour une densité électronique suffisamment élevée, le potentiel est fortement écranté et on peut décrire l'effet des interactions à l'approximation dite de Hartree-Fock. Il suffit alors d'ajouter au grand potentiel un terme d'interaction de la forme

$$\frac{1}{2}\int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')n(\boldsymbol{r})n(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \simeq \frac{U}{2}\int n^2(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} \tag{1.44}$$

où $U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \simeq U\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ est l'interaction écrantée et $n(\boldsymbol{r})$ la densité électronique locale reliée à la densité d'états, de sorte que l'on obtient facilement :

$$n(\boldsymbol{r})n(\boldsymbol{r}) \propto \int d\epsilon d\epsilon' \sum_{ij} a_i^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\epsilon)a_j(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\epsilon') \quad . \tag{1.45}$$

La correction à l'énergie totale est de la forme

$$\delta E_{ee} \propto U \int d\boldsymbol{r}d\epsilon_1 d\epsilon_2 P_{cl}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\epsilon_1-\epsilon_2) \quad . \tag{1.46}$$

Cette modification de l'énergie donne une contribution supplémentaire à l'aimantation moyenne qui s'écrit

$$\boxed{\overline{\mathcal{M}}_{ee} \propto -U\int_0^\infty \frac{\partial Z(t,B)}{\partial B}\frac{e^{-t/\tau_\phi}}{t^2}dt} \tag{1.47}$$

Le magnétisme orbital est une propriété très sensible à la cohérence de phase. Dans la géométrie d'un anneau traversé par un champ magnétique, ce magnétisme se traduit par l'existence d'un *courant permanent* circulant dans l'anneau.

• Anomalie de densité d'états (chap. 13)

La modification précédente de l'énergie due à l'interaction coulombienne, implique aussi par une *réduction de densité d'états* au niveau de Fermi. Formellement, la densité d'états s'exprime comme la dérivée seconde de δE_{ee} par

rapport à l'écart ϵ au niveau de Fermi, ce qui en utilisant (1.46) donne

$$\delta\rho(\epsilon) \propto U \int d\boldsymbol{r} P_{cl}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, \epsilon) \tag{1.48}$$

ou encore

$$\boxed{\delta\rho(\epsilon) \propto U \int_0^\infty Z(t) \cos \epsilon t \; dt} \tag{1.49}$$

Cette correction, appelée anomalie de densité d'états, est une signature importante de l'interaction électronique. À travers la probabilité $Z(t)$, elle dépend de la dimension d'espace et donc de la géométrie de l'échantillon.

• Temps de vie électronique (chap. 13)

Le temps de vie d'un état électronique à une particule est limité par l'interaction. En utilisant la règle d'or de Fermi, on montre qu'il est relié au carré d'un élément de matrice de l'interaction coulombienne écrantée, c'est-à-dire au produit de quatre fonctions d'onde. La moyenne sur le désordre de ce produit fait intervenir la probabilité de retour à l'origine. On obtient ainsi

$$\boxed{\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} \propto \int_0^\infty \frac{Z(t)}{t} \sin^2 \frac{\epsilon t}{2} dt} \tag{1.50}$$

où ϵ est l'écart au niveau de Fermi. On peut mesurer ce temps en étudiant comment un courant électronique injecté à l'énergie ϵ relaxe vers l'équilibre. Le temps $\tau_{ee}(\epsilon)$ tend vers l'infini lorsque l'énergie ϵ tend vers 0, c'est-à-dire pour une particule au niveau de Fermi. S'il diverge plus vite que ϵ ne tend vers 0, un état au niveau de Fermi reste bien défini et on est alors dans le cadre de la théorie de Landau des liquides de Fermi où, en bonne approximation, les états électroniques peuvent être considérés comme des états de particules interagissant faiblement. À température finie, même pour $\epsilon = 0$, le temps τ_{ee} reste fini et il contribue alors à limiter la cohérence de phase. Sa dépendance en température, notée $\tau_\phi(T)$, dépend de la dimension d'espace du fait de la nature du mouvement diffusif.

L'interaction électron-électron peut aussi être vue comme celle d'un seul électron couplé à un champ électromagnétique longitudinal fluctuant dû aux autres électrons. Le temps de cohérence de phase $\tau_\phi(T)$ peut alors s'interpréter comme résultant du déphasage affectant le cooperon et dû au champ électromagnétique dont on moyenne les fluctuations.

• Méthodologie des calculs : corrélations à longue et courte portée – Énergies caractéristiques

Pour compléter et résumer cette introduction, nous donnons un aperçu des échelles d'énergie caractéristiques des différents régimes que nous avons

discutés. Sur l'échelle supérieure de la figure 1.16, apparaît d'abord le régime ergodique correspondant aux grands temps pour lesquels l'onde diffusive explore uniformément tout le volume mis à sa disposition. Aux temps plus petits, c'est-à-dire pour des énergies plus grandes, la diffusion est libre, c'est-à-dire sans effets des bords. Nous ne considérons pas le régime des temps plus petits que le temps élastique moyen τ_e, pour lesquels le mouvement devient balistique. Sur l'échelle inférieure est indiquée la limite de validité de l'approximation du diffuson où les corrections quantiques sont petites. Ces corrections deviennent prépondérantes pour des énergies E inférieures à l'écart moyen entre niveaux Δ.

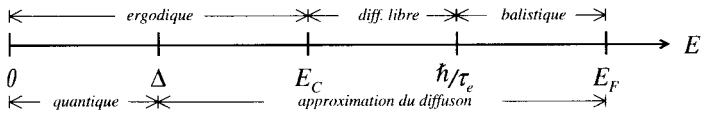


FIG. 1.16 – *Échelles d'énergie caractéristiques définissant les différents régimes étudiés en diffusion multiple cohérente.*

Le calcul des quantités physiques discutées dans les exemples précédents revient systématiquement à évaluer la moyenne d'un produit d'amplitudes associées à des trajectoires de diffusion multiple. On a indiqué comment ces produits peuvent s'exprimer au moyen d'un appariement d'amplitudes identiques ou conjuguées par renversement du sens du temps, les autres termes donnant en moyenne une contribution nulle. Ces appariements font intervenir la probabilité de diffusion, solution de l'équation de diffusion (1.15) qui constitue le diffuson. C'est une fonction à *longue portée* dont une représentation diagrammatique est donnée sur la figure 1.17. Toutes les autres quantités font apparaître une ou plusieurs de ces fonctions. Puis nous avons montré que des diffusons peuvent se croiser et que ce sont ces croisements quantiques qui sont à l'origine des effets cohérents observés en diffusion multiple. Le croisement est décrit par une fonction à courte portée qui décroît exponentiellement avec la distance sur une échelle de l'ordre de l_e, seule susceptible de préserver la cohérence de phase entre les trajectoires appariées.

On peut alors concevoir le problème de l'évaluation des différentes quantités physiques comme un « jeu de construction » consistant à obtenir une représentation diagrammatique permettant de calculer cette quantité à partir de ces constituants de base : diffusons, cooperons et croisements quantiques (boîtes de Hikami). La figure 1.17 en présente quelques exemples. Nous verrons bien sûr que ces règles de construction sont très précises. Néanmoins, notre espoir est que le lecteur qui achève la lecture de cette introduction aura acquis une compréhension des principes qui guident la construction des diverses quantités physiques.

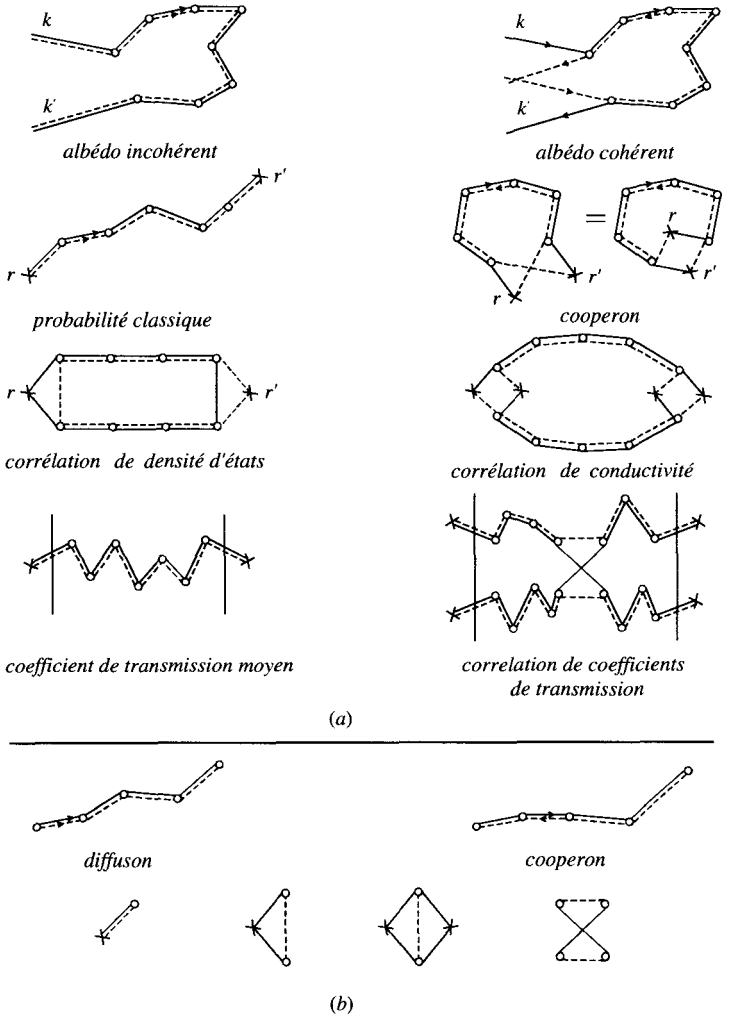


FIG. 1.17 – *a) Exemples de quantités physiques dont la structure est reliée à celle de la probabilité $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$. b) Les éléments de base intervenant dans ces quantités sont la probabilité classique de diffusion (le diffuson), la correction liée à la cohérence de phase (le cooperon) ainsi que des croisements à courte portée. Le symbole o représente une collision et le symbole × représente un point quelconque du milieu.*

Chapitre 2

Équations d'onde dans les milieux aléatoires

Les aspects généraux de la diffusion multiple cohérente présentés dans le chapitre d'introduction sont communs à une large variété d'ondes se propageant dans des milieux diffusants. D'évidence, il existe des caractéristiques et des effets physiques propres à chaque type d'onde. Dans ce chapitre, nous donnons quelques exemples d'équations d'onde et nous étudions plus en détail deux grandes familles : l'équation de Schrödinger associée à un gaz d'électrons (métaux ou semiconducteurs faiblement désordonnés) et l'équation de Helmholtz décrivant la propagation d'ondes électromagnétiques scalaires. Puis, on présente quelques modèles permettant de décrire quantitativement la nature aléatoire du milieu dans lequel se propagent ces ondes.

2.1 Équations d'ondes

2.1.1 Électrons dans un métal désordonné

On considère un gaz d'électrons sans interaction, de charge $-e$ ($e > 0$) et de masse m, soumis à l'action d'un potentiel de désordre $V(\boldsymbol{r})$. Ce modèle décrit un métal ou un semiconducteur. On suppose que les effets éventuels de structure de bande ou d'interaction entre électrons (liquide de Fermi) [14] sont pris en compte dans un terme de masse effective m différente de la masse m_0 de l'électron libre. Les états exacts de ce système sont les produits antisymétrisés des états propres de l'hamiltonien à une particule

$$\mathcal{H} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) \quad \text{avec} \quad \boldsymbol{p} = \frac{\hbar}{i}\boldsymbol{\nabla} \quad . \tag{2.1}$$

En présence d'un champ magnétique $\mathbf{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{A}$, l'opérateur impulsion $\boldsymbol{p}$ est remplacé par $\boldsymbol{p} + e\mathbf{A}$ et l'hamiltonien prend la forme :

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\boldsymbol{\nabla} + \frac{ie}{\hbar}\mathbf{A})^2 + V(\boldsymbol{r}) \quad . \tag{2.2}$$

En l'absence d'un potentiel qui en dépende explicitement, les effets de spin se ramènent simplement à un facteur de dégénérescence 2 pour chaque état. En principe $V(\boldsymbol{r})$ décrit à la fois le potentiel de confinement dans le conducteur et le potentiel de diffusion par les inhomogénéités statiques. Sauf mention explicite, on considère des électrons se propageant dans un milieu infini, donc sans potentiel de confinement.

Exercice 2.1 : Hamiltonien en présence d'un champ magnétique

En écrivant les équations de Hamilton :

$$\dot{\boldsymbol{r}} = \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \mathbf{p}} \qquad \dot{\boldsymbol{p}} = -\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial \boldsymbol{r}} \quad , \tag{2.3}$$

vérifier que, dans un champ magnétique $\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$, l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = \frac{(\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) \tag{2.4}$$

conduit à l'équation de Newton :

$$m\ddot{\boldsymbol{r}} = -e\dot{\boldsymbol{r}} \times \mathbf{B} - \boldsymbol{\nabla} V(\boldsymbol{r}) \quad . \tag{2.5}$$

2.1.2 Équation des ondes électromagnétiques – Équation de Helmholtz

Le cas des ondes électromagnétiques est particulier pour plusieurs raisons. Il a été probablement un des premiers exemples pour lequel s'est posée la question de l'effet d'un milieu aléatoire sur la propagation d'une onde. Dès le début du XXe siècle, des études très précises ont été menées sur la propagation d'ondes électromagnétiques à travers des milieux diffusants, en particulier l'atmosphère. D'un point de vue conceptuel, le problème de la propagation des ondes électromagnétiques en milieu aléatoire a beaucoup stimulé le travail des probabilistes qui y ont vu un champ d'applications nouveau des méthodes développées pour l'étude du mouvement brownien [15]. Pour l'atmosphère, la description au moyen d'un désordre statique s'applique mal. Par contre, dans beaucoup d'autres situations, il est possible de se ramener au cas d'un désordre statique décrit par un potentiel indépendant du temps. C'est le cas que nous considérons dans ce chapitre [1].

[1] Nous reviendrons sur la validité de cette hypothèse dans les chapitres 6 et 9.

On considère un milieu diélectrique hétérogène non dissipatif et non magnétique, dont la constante diélectrique réelle et positive $\epsilon(\boldsymbol{r}) = \overline{\epsilon} + \delta\epsilon(\boldsymbol{r})$ fluctue spatialement autour d'une valeur moyenne $\overline{\epsilon}$. On suppose qu'il n'y a pas de source de courant dans le milieu de telle sorte que les équations de Maxwell pour des champs oscillant à la fréquence ω s'écrivent

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{E} &= i\omega\mathbf{B} \\ \boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{H} &= -i\omega\mathbf{D} \end{aligned} \tag{2.6}$$

où les champs sont reliés par $\mathbf{D} = \epsilon\mathbf{E}$ et $\mathbf{B} = \mu_0\mathbf{H}$. On peut récrire la seconde équation de Maxwell sous la forme

$$\boldsymbol{\nabla} \times \mathbf{H} = -i\omega\overline{\epsilon}\,\mathbf{E} + \mathbf{J} \tag{2.7}$$

où on fait apparaître un terme de courant $\mathbf{J} = -i\omega\delta\epsilon(\boldsymbol{r})\mathbf{E}$ lié aux fluctuations de constante diélectrique et qui donne naissance aux ondes diffusées. Des relations précédentes, on déduit la forme de l'équation d'onde satisfaite par le champ électrique $\mathbf{E}$:

$$-\nabla^2\mathbf{E} + \boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{\nabla}.\mathbf{E}) - \frac{\omega^2}{c^2}\frac{\delta\epsilon(\boldsymbol{r})}{\epsilon_0}\mathbf{E} = \frac{\overline{\epsilon}}{\epsilon_0}\frac{\omega^2}{c^2}\mathbf{E} \quad . \tag{2.8}$$

Le terme $\boldsymbol{\nabla}.\mathbf{E}$ représente la densité de charges de polarisation. Il n'a pas d'analogue pour les systèmes électroniques. Il contribue à la polarisation du champ électrique. Nous verrons dans la section C2.3.1 qu'il est possible de découpler les effets de la polarisation et du désordre. En mettant de côté ces effets de polarisation détaillés dans les chapitres 6 et 8, on se ramène au cas d'une onde scalaire. Le champ électrique est alors décrit par une fonction complexe $\psi(\boldsymbol{r})$, solution de l'équation scalaire déduite de (2.8)

$$\boxed{-\Delta\psi(\boldsymbol{r}) - k_0^2\mu(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = k_0^2\psi(\boldsymbol{r})} \tag{2.9}$$

où $\mu(\boldsymbol{r}) = \delta\epsilon/\overline{\epsilon}$ représente la fluctuation relative de constante diélectrique et où $k_0 = \overline{n}\omega/c$. $\overline{n}$ est l'indice optique moyen $\sqrt{\overline{\epsilon}/\epsilon_0}$. Sous cette forme, l'équation d'onde (2.9) a la même structure qu'une équation de Schrödinger et ses solutions dépendent de la fonction aléatoire $\mu(\boldsymbol{r})$, responsable de la diffusion des ondes électromagnétiques et qui joue un rôle analogue au potentiel de désordre dans l'équation de Schrödinger.

Il est instructif de discuter les différences et les similarités entre l'équation de Helmholtz (2.9) et l'équation de Schrödinger (2.2). La quantité k_0^2 qui joue le rôle d'une énergie propre, est toujours positive puisque, pour un milieu non dissipatif, la constante diélectrique $\epsilon(\boldsymbol{r})$ est réelle et positive. Il n'est donc pas possible d'avoir un état lié pour la lumière dans un puits de potentiel négatif. On note aussi que le potentiel de diffusion $V(\boldsymbol{r}) = -k_0^2\mu(\boldsymbol{r})$ est proportionnel au carré de la fréquence ω. Par conséquent, contrairement aux systèmes

électroniques où on favorise l'effet de localisation en diminuant l'énergie électronique, une diminution de l'énergie de l'onde conduit au contraire à une disparition du mécanisme de diffusion. À haute fréquence ω, c'est-à-dire aux courtes longueurs d'onde λ, on atteint la limite de l'optique géométrique et par conséquent les effets d'interférence deviennent de moins en moins pertinents.

2.1.3 D'autres équations d'ondes

Les deux exemples que nous venons de décrire ne sont pas les seuls où apparaissent des effets liés à la diffusion multiple cohérente. Ceux-ci sont propres à tout phénomène ondulatoire (quantique, optique, acoustique, hydrodynamique, etc.), indépendamment de la dispersion des ondes ou de la dimensionalité d'espace, en l'absence toutefois d'effets non-linéaires. En effet, ceux-ci peuvent masquer les effets liés au désordre. De plus, les équations non-linéaires admettent souvent des solutions singulières (solitons, vortex, etc.) dont la stabilité est assurée par une contrainte topologique qu'il est très difficile de déstabiliser au moyen d'un potentiel de désordre. Le problème des effets comparés du désordre et des non-linéarités reste encore largement incompris [16].

Bien que cet ouvrage soit consacré uniquement à la description des effets de cohérence de phase dans les milieux aléatoires en électronique et en optique, nous rappelons ici d'autres phénomènes ondulatoires où ces effets sont aussi observés.

• Ondes de gravité

Considérons la surface d'un liquide incompressible dans le champ de pesanteur terrestre. À l'équilibre, cette surface est plane. Une perturbation de cet état d'équilibre se propage sous forme d'une onde. La fréquence caractéristique de cette onde dépend du champ de pesanteur d'où le nom d'*onde de gravité*. La nature de cette onde dépend aussi de la profondeur du liquide [17] et on distingue deux régimes, suivant que celle-ci est grande ou petite, par rapport à la longueur d'onde. Dans le premier cas, que nous n'étudierons pas, la propagation est indépendante des détails du fond du bassin. Par contre, dans le cas d'une faible profondeur, la structure du fond du bassin joue le rôle d'un potentiel. Celui-ci peut être périodique, auquel cas on observe des réflexions de Bragg pour le coefficient de transmission des ondes. S'il est aléatoire, il donne lieu à de la diffusion multiple cohérente.

Afin de déterminer l'équation de propagation de ces ondes, on part de l'équation d'Euler pour le champ de vitesse $\boldsymbol{v}$ d'un fluide incompressible de densité ρ dans le champ de pesanteur terrestre $\boldsymbol{g}$

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + (\boldsymbol{v}.\boldsymbol{\nabla})\boldsymbol{v} = -\frac{1}{\rho}\boldsymbol{\nabla} p + \boldsymbol{g} \tag{2.10}$$

où p est la pression dans le liquide. Pour simplifier, supposons maintenant que la propagation de l'onde est unidimensionnelle, le long d'un axe Ox parallèle

à la surface et ne dépend donc pas de la direction y. On considère des ondes longitudinales pour lesquelles les composantes de la vitesse sont telles que $v_x \gg v_z$. En projetant l'équation d'Euler (2.10) suivant les directions x et z, en négligeant les termes non linéaires et en notant $v = v_x$, on obtient les deux équations

$$\frac{\partial v}{\partial t} = -\frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial x} \tag{2.11}$$

et

$$-g = \frac{1}{\rho}\frac{\partial p}{\partial z} \quad . \tag{2.12}$$

Pour obtenir cette dernière équation, on a négligé v_z. Le fond du bassin étant de hauteur variable, on note $h_0(x)$ la hauteur de liquide à l'équilibre et $h(x,t) = h_0(x) + \eta(x,t)$ la hauteur du liquide perturbé. L'intégration de la seconde équation conduit à

$$p = p_0 + \rho g(h(x) - z) \tag{2.13}$$

où p_0 est la pression au-dessus du liquide. En reportant cette expression dans (2.11), on obtient

$$\frac{\partial v}{\partial t} + g\frac{\partial h}{\partial x} = 0 \quad . \tag{2.14}$$

À ces relations il convient d'ajouter la relation de continuité :

$$\frac{\partial h}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial x}(hv) = 0 \tag{2.15}$$

qui exprime que la variation temporelle de la hauteur en un point donné ne peut résulter que de la propagation de la perturbation le long de Ox. En négligeant le terme non linéaire proportionnel à ηv, on obtient à partir de (2.14) et (2.15) l'équation d'onde

$$\boxed{\frac{\partial^2 \eta}{\partial t^2} - g\frac{\partial}{\partial x}\left(h_0(x)\frac{\partial \eta}{\partial x}\right) = 0} \tag{2.16}$$

qui décrit les ondes de gravité à une dimension. Leur comportement est piloté par la constante g et la hauteur du liquide. Rappelons que pour un fond plat $h_0(x) = h_0$, et (2.16) se réduit alors à l'équation d'onde habituelle avec la vitesse $c = \sqrt{gh_0}$.

La structure de (2.16) est différente de celle des équations de Schrödinger ou de Helmholtz. Ici, le terme de dérivée spatiale fait intervenir le « potentiel » $h_0(x)$ qui peut s'interpréter comme un module de rigidité aléatoire dans l'équation d'onde d'un fil soumis à une tension. L'influence d'un fond aléatoire sur la propagation des ondes de gravité a été étudiée expérimentalement en détail [18]. Les effets observés s'interprètent qualitativement au moyen

des concepts que l'on va développer. Il est à noter cependant que l'équation d'onde (2.16) ne se prête pas aisément, du fait de sa structure, au calcul perturbatif de diffusion multiple. Par contre, les ondes de gravité ont, par rapport aux ondes quantiques, l'avantage de se prêter à une mesure absolue de leur amplitude et de leur phase. Ainsi, il a été possible de trouver pour les ondes de gravité l'analogue d'un flux Aharonov-Bohm, c'est-à-dire un tourbillon irrotationnel (comme une vidange de baignoire), et de mettre expérimentalement en évidence des structures de dislocation de la phase de l'onde de gravité tout à fait inaccessibles en mécanique quantique [19].

- **Ondes acoustiques**

Les ondes acoustiques dans les fluides compressibles (gaz ou liquides) résultent du mouvement vibratoire de faible amplitude. Une perturbation entraîne en tout point du fluide une succession de compressions et de dilatations supposées adiabatiques. En l'absence de gravité et en linéarisant l'équation d'Euler (2.10), on obtient [17]

$$\frac{\partial \boldsymbol{v}}{\partial t} + \frac{1}{\rho_0}\boldsymbol{\nabla} p = 0 \tag{2.17}$$

où la densité ρ du fluide peut s'écrire comme la somme d'un terme constant ρ_0 et d'un terme variable $\delta\rho(\boldsymbol{r}, t)$. À cette équation s'ajoute la relation de continuité linéarisée

$$\frac{\partial \rho}{\partial t} + \rho_0 \boldsymbol{\nabla}.\boldsymbol{v} = 0 \quad . \tag{2.18}$$

On fait enfin l'hypothèse d'une évolution adiabatique du fluide (c'est-à-dire sans échange de chaleur entre les différentes parties du fluide), ce qui permet de relier les variations de pression et de densité $\delta p = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_S \delta\rho$. En prenant la dérivée temporelle de la relation de continuité (2.18), on obtient

$$\frac{\partial^2 p}{\partial t^2} - \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_S \Delta p = 0 \tag{2.19}$$

qui est l'équation du son pour la pression. La vitesse c est donnée par $c^2 = \left(\frac{\partial p}{\partial \rho}\right)_S$. On obtient la même équation d'onde pour la vitesse ou la densité. Pour une onde monochromatique, cette équation est analogue à l'équation de Helmholtz (2.9) pour les ondes électromagnétiques scalaires ou à l'équation de Schrödinger. D'un point de vue purement théorique, il n'y a donc pas de différence entre ces ondes (acoustiques, électromagnétiques, électroniques) qui ont le même comportement en présence de désordre. Par contre, du point de vue expérimental les différences sont essentielles. Il est par exemple possible de mesurer directement la phase d'une onde sonore alors que ceci est délicat en optique et impossible en mécanique quantique. L'acoustique présente donc des avantages certains qui ont été exploités pour l'étude des effets de cohérence

et de diffusion multiple [20]. De plus, c'est un domaine où on peut trouver une grande variété de potentiels de désordre pour lesquels on peut calculer exactement la section efficace de diffusion et la modifier par plusieurs ordres de grandeur en mettant à profit les phénomènes de résonance [21].

Il est possible d'étendre les considérations précédentes à des milieux élastiques solides ou à des cristaux au lieu de fluides. La différence essentielle provient alors de la nature vectorielle des ondes et du découplage de l'onde élastique en deux ondes, l'une transverse, l'autre longitudinale, se propageant à des vitesses différentes [22, 23].

Mentionnons pour terminer quelques exemples de systèmes physiques pour lesquels la diffusion multiple peut jouer un rôle important :

- propagation du troisième son à la surface d'un film d'hélium superfluide déposé sur une surface rugueuse [24] ;
- propagation du son dans une « flûte désordonnée » [25] ;
- propagation des phonons dans les verres [26] ou des excitons dans les semiconducteurs [27] ;
- propagation des ondes sismiques [28].

2.2 Modèles de désordre

Dans les systèmes électroniques décrits par l'hamiltonien (2.2), les sources du potentiel de diffusion $V(\boldsymbol{r})$ sont multiples et mal connues. Dans un métal, il peut s'agir de dislocations, d'impuretés de substitution, de lacunes ou de joints de grains, etc. Dans les semiconducteurs, la plupart des expériences sont effectuées dans un gaz d'électrons bidimensionnel réalisé dans une couche d'inversion à l'interface de deux semiconducteurs ($GaAs/Al_xGa_{1-x}As$) ou entre un semiconducteur et un isolant ($Si - SiO_2$ dans les structures appelées Si–$MOSFET$) [29]. Le principe de ces structures est qu'à l'interface, du fait de la discontinuité des paramètres de bande, se crée un puits de potentiel dans lequel le mouvement perpendiculaire à l'interface est quantifié et où seul l'état fondamental est occupé. La dynamique des électrons est donc restreinte au plan de l'interface et elle est très bien décrite par une relation de dispersion quadratique. L'intérêt considérable de ces structures est que la densité de porteurs peut être modifiée par dopage de l'une des deux couches. Le dopage induit des centres diffuseurs coulombiens, dont l'influence sur les propriétés de transport peut être minimisée en éloignant les centres dopants de l'interface. On arrive ainsi à créer des gaz bidimensionnels d'électrons très peu diffusifs. Ceci a permis l'étude du transport balistique où la dynamique des électrons est conditionnée non plus par la diffusion sur un potentiel désordonné mais uniquement par la forme de la cavité dans laquelle les électrons sont confinés. L'étude du transport et de la thermodynamique des systèmes balistiques est

en soit un vaste sujet qui ne sera pas abordé dans cet ouvrage. On pourra consulter à ce propos les références [30]. La réalisation d'hétérojonctions très pures a été déterminante pour l'observation de l'effet Hall quantique fractionnaire [31].

Un désordre statique correspond à une situation pour laquelle les électrons sont diffusés élastiquement, c'est-à-dire sans changement d'énergie. Une telle modélisation ne décrit pas les processus de diffusion inélastiques responsables de la perte de cohérence de phase. Dans le reste de ce chapitre on ne considèrera que le problème élastique pour lequel l'hamiltonien complet du gaz d'électrons est décrit par la relation (2.2).

Malgré son apparente simplicité, il n'existe pas de solution exacte pour la diagonalisation de l'hamiltonien $\mathcal{H}$, mis à part certains cas particuliers à une dimension [32, 33]. En principe, pour une configuration donnée du désordre, c'est-à-dire pour une réalisation du potentiel $V(\boldsymbol{r})$, la diagonalisation de $\mathcal{H}$ est un problème à une particule conduisant à un ensemble complet d'états propres orthonormés $\psi_n(\boldsymbol{r})$ de valeur propre ϵ_n. Nous ne discuterons pas la possibilité d'apparition d'états liés du potentiel.

Dans le cas de l'équation de Helmholtz (2.9), les fluctuations de constante diélectrique décrites par la fonction $\mu(\boldsymbol{r})$ sont de natures variées. Le désordre peut être une variable continue comme par exemple l'indice optique dans le cas d'un rayonnement à travers l'atmosphère ou à travers des milieux turbulents. Le modèle gaussien étudié dans la section suivante est bien adapté à ce genre de situation. Par contre, d'autres situations comme la diffusion de la lumière par des suspensions colloïdales (par exemple une suspension acqueuse de billes diélectriques de tailles submicroniques) correspondent à un modèle de diffuseurs discrets ou d'impuretés localisées. Nous allons montrer dans les sections suivantes que ces modèles (continu et sur réseau) sont équivalents dans certaines limites que l'on précisera. Dans le cas où l'on peut se ramener à un modèle effectif de diffuseurs discrets, ceux-ci peuvent être caractérisés par une section efficace de diffusion qui pourra être obtenue à partir de modèles microscopiques dont le plus simple est celui de la diffusion Rayleigh. C'est certainement un avantage par rapport aux systèmes électroniques, car il est possible de contrôler des paramètres physiques comme l'importance du désordre, l'absorption, ou le couplage à d'autres degrés de liberté. Nous en verrons des exemples dans les chapitres 6 et 8.

2.2.1 Le modèle gaussien

On suppose ici que le potentiel de désordre $V(\boldsymbol{r})$ est une fonction continue et aléatoire de la position. On choisit l'origine des énergies de telle sorte que le potentiel soit nul en moyenne, $\langle V(\boldsymbol{r})\rangle = 0$, où $\langle\cdots\rangle$ désigne dans ce chapitre la moyenne sur les configurations du désordre. De manière générale, un milieu aléatoire défini par la fonction $V(\boldsymbol{r})$ est caractérisé par une distribution de

probabilité normalisée

$$P[V(\boldsymbol{r})]\,\mathcal{D}V(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\mathcal{Z}}\exp\Big[-a\int d\boldsymbol{r}F[V(\boldsymbol{r})]\Big]\,\mathcal{D}V(\boldsymbol{r}) \quad . \tag{2.20}$$

Remarque : Fonctionnelle génératrice

Afin de calculer les différentes fonctions de corrélation, on introduit une fonctionnelle génératrice

$$\Phi[g] = \left\langle \exp\Big[\int d\boldsymbol{r}g(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r})\Big]\right\rangle \tag{2.21}$$

où $\langle\cdots\rangle = \int\cdots P[V(\boldsymbol{r})]\mathcal{D}V(\boldsymbol{r})$. Le développement de $\Phi[g]$ en puissances successives de g

$$\Phi[g] = \sum_{p=0}^{\infty}\frac{1}{p!}\int d\boldsymbol{r}_1\cdots d\boldsymbol{r}_p g(\boldsymbol{r}_1)\cdots g(\boldsymbol{r}_p)\,\langle V(\boldsymbol{r}_1)\cdots V(\boldsymbol{r}_p)\rangle \tag{2.22}$$

permet de calculer les fonctions de corrélations

$$\langle V(\boldsymbol{r}_1)V(\boldsymbol{r}_2)...V(\boldsymbol{r}_n)\rangle = \left.\frac{\delta^n\Phi[g]}{\delta g(\boldsymbol{r}_1)...\delta g(\boldsymbol{r}_n)}\right|_{g=0} \quad . \tag{2.23}$$

De même, les fonctions de corrélations dites « connectées » ou encore appelées « cumulants » sont définies par :

$$\langle V(\boldsymbol{r}_1)V(\boldsymbol{r}_2)...V(\boldsymbol{r}_n)\rangle_c = \left.\frac{\delta^n\ln\Phi[g]}{\delta g(\boldsymbol{r}_1)...\delta g(\boldsymbol{r}_n)}\right|_{g=0} \tag{2.24}$$

et vérifient :

$$\ln\Phi[g] = \sum_{p=1}^{\infty}\frac{1}{p!}\int d\boldsymbol{r}_1\cdots d\boldsymbol{r}_p g(\boldsymbol{r}_1)\cdots g(\boldsymbol{r}_p)\,\langle V(\boldsymbol{r}_1)\cdots V(\boldsymbol{r}_p)\rangle_c \quad . \tag{2.25}$$

Par exemple,

$$\begin{aligned}
\langle V(\boldsymbol{r}_1)\rangle_c &= \langle V(\boldsymbol{r}_1)\rangle \\
\langle V(\boldsymbol{r}_1)V(\boldsymbol{r}_2)\rangle_c &= \langle V(\boldsymbol{r}_1)V(\boldsymbol{r}_2)\rangle - \langle V(\boldsymbol{r}_1)\langle V(\boldsymbol{r}_2)\rangle \\
\langle V(\boldsymbol{r}_1)V(\boldsymbol{r}_2)V(\boldsymbol{r}_3)\rangle_c &= \langle V(\boldsymbol{r}_1)V(\boldsymbol{r}_2)V(\boldsymbol{r}_3)\rangle - \langle V(\boldsymbol{r}_1)V(\boldsymbol{r}_2)\rangle\langle V(\boldsymbol{r}_3)\rangle \\
&\quad -\langle V(\boldsymbol{r}_1)V(\boldsymbol{r}_3)\rangle\langle V(\boldsymbol{r}_2)\rangle - \langle V(\boldsymbol{r}_2)V(\boldsymbol{r}_3)\rangle\langle V(\boldsymbol{r}_1)\rangle \\
&\quad +2\langle V(\boldsymbol{r}_1)\langle V(\boldsymbol{r}_2)\rangle\langle V(\boldsymbol{r}_3)\rangle \\
&\quad \text{etc.}
\end{aligned} \tag{2.26}$$

Un modèle particulièrement simple est obtenu en supposant que $V(\boldsymbol{r})$ est un potentiel aléatoire gaussien décrit par la loi de probabilité

$$P[V(\boldsymbol{r})]\,\mathcal{D}V(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\mathcal{Z}}\exp\Big[-\frac{1}{2}\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'V(\boldsymbol{r})\Delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}')\Big]\,\mathcal{D}V(\boldsymbol{r}) \tag{2.27}$$

et admet donc pour fonctionnelle génératrice

$$\Phi[g] = \exp\Big[\frac{1}{2}\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'g(\boldsymbol{r})B(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')g(\boldsymbol{r}')\Big] \tag{2.28}$$

où $\Delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ et $B(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ vérifient

$$\int d\boldsymbol{r}''\Delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'')B(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}'') = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \quad . \tag{2.29}$$

Pour ce modèle, seul le second cumulant est non nul. Le modèle gaussien est donc caractérisé par

$$\boxed{\begin{aligned} \langle V(\boldsymbol{r})\rangle &= 0 \\ \langle V(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r}')\rangle &= B(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \end{aligned}} \tag{2.30}$$

On supposera par ailleurs que $B(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ ne dépend que du module $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$. On note r_c la longueur caractéristique de décroissance de $B(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$. Dans cet ouvrage, on étudiera particulièrement le cas où la longueur d'onde λ du rayonnement ou des électrons diffusés est bien supérieure à r_c. On prend alors pour la fonction de corrélation à deux points la forme :

$$\boxed{\langle V(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r}')\rangle = B\ \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} \tag{2.31}$$

Un potentiel de désordre $V(\boldsymbol{r})$ ayant cette propriété est communément appelé un *bruit blanc*. Pour l'équation de Schrödinger, le paramètre B a les dimensions du carré d'une énergie multiplié par un volume. Dans le cas de l'équation de Helmholtz (2.9), pour lequel $V(\boldsymbol{r}) = -k_0^2\mu(\boldsymbol{r})$, B a les dimensions de l'inverse d'une longueur et on notera

$$k_0^4\,\langle\mu(\boldsymbol{r})\mu(\boldsymbol{r}')\rangle = B\ \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \quad . \tag{2.32}$$

2.2.2 Impuretés localisées : le modèle d'Edwards

Le modèle gaussien ne contient aucune information sur la nature microscopique du désordre. Un autre modèle, introduit par Edwards [34], consiste à décrire le potentiel $V(\boldsymbol{r})$ comme la contribution de N_i impuretés identiques, localisées en des points $\boldsymbol{r}_j$ distribués aléatoirement, et caractérisées par le potentiel $v(\boldsymbol{r})$. Ainsi, on peut écrire :

$$V(\boldsymbol{r}) = \sum_{j=1}^{N_i} v(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_j) \quad . \tag{2.33}$$

On prend la limite thermodynamique $\Omega \to \infty$, tout en gardant la densité $n_i = \frac{N_i}{\Omega}$ constante. La distance moyenne entre impuretés est ${n_i}^{-\frac{1}{d}}$ où d est la dimensionalité d'espace. On considère le cas d'un potentiel $v(\boldsymbol{r})$ central.

Afin de comparer ce modèle au modèle gaussien, on calcule la fonction génératrice associée au potentiel (2.33) avec une distribution aléatoire (poissonnienne) des impuretés de sorte que :

$$P(V)\mathcal{D}V = \prod_{j=1}^{N_i} \frac{d\boldsymbol{r}_j}{\Omega} \tag{2.34}$$

et

$$\begin{aligned}\Phi[g] &= \int \prod_{j=1}^{N_i} \frac{d\boldsymbol{r}_j}{\Omega} \exp\Big(\sum_{j=1}^{N_i} F(\boldsymbol{r}_j)\Big) \\ &= \left(\int \frac{d\boldsymbol{r}}{\Omega} \exp(F(\boldsymbol{r}))\right)^{N_i}\end{aligned} \tag{2.35}$$

où $F(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r}' g(\boldsymbol{r}') v(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$. La fonctionnelle $\Phi[g]$ se récrit sous la forme :

$$\Phi[g] = \left(1 + \frac{n_i}{N_i} \int d\boldsymbol{r} \left(e^{F(\boldsymbol{r})} - 1\right)\right)^{N_i} \tag{2.36}$$

puisque $\frac{1}{\Omega} = n_i/N_i$. Dans la limite d'un volume Ω infini et où le nombre d'impuretés N_i tend vers l'infini, à *densité n_i constante*, $\Phi[g]$ tend vers :

$$\Phi[g] = \exp\left[n_i \int d\boldsymbol{r} \left(e^{F(\boldsymbol{r})} - 1\right)\right] \quad . \tag{2.37}$$

On en déduit le développement en cumulants

$$\ln \Phi[g] = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{n_i}{p!} \int d\boldsymbol{r} F^p(\boldsymbol{r}) \quad , \tag{2.38}$$

et, en utilisant la relation (2.24), les fonctions de corrélation

$$\begin{aligned}\langle V(\boldsymbol{r}_1)\rangle &= n_i \int d\boldsymbol{r} v(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_1) \\ \langle V(\boldsymbol{r}_1)V(\boldsymbol{r}_2)...V(\boldsymbol{r}_n)\rangle_c &= n_i \int d\boldsymbol{r} v(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_1)...v(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_n) \quad .\end{aligned} \tag{2.39}$$

On retrouve le modèle gaussien en prenant la limite d'une forte densité d'impuretés ($n_i \to \infty$) faiblement diffusantes ($v(\boldsymbol{r}) \to 0$), de telle sorte que tous les cumulants d'ordre supérieur à $n = 2$ s'annulent. Il reste

$$\langle V(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r}')\rangle_c = B(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = n_i \int d\boldsymbol{r}'' v(\boldsymbol{r}'' - \boldsymbol{r}) v(\boldsymbol{r}'' - \boldsymbol{r}') \quad . \tag{2.40}$$

Par un changement de l'origine des énergies, on annule le moment d'ordre 1 et on retrouve le modèle gaussien défini par (2.31). La transformée de Fourier

$B(\boldsymbol{q})$ de la fonction de corrélation $B(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ est reliée à celle, $v(\boldsymbol{q})$, du potentiel $v(\boldsymbol{r})$ et s'écrit, d'après (2.40) :

$$\boxed{B(\boldsymbol{q}) = n_i v(\boldsymbol{q})^2} \tag{2.41}$$

On note que, pour un potentiel $v(\boldsymbol{r})$ central, la fonction de corrélation $B(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ ne dépend que de $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ et sa transformée de Fourier $B(\boldsymbol{q})$ ne dépend que de $q = |\boldsymbol{q}|$. Par ailleurs, d'après la relation (2.40), la portée r_c de la fonction de corrélation $B(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ est du même ordre de grandeur que la portée r_0 du potentiel $v(\boldsymbol{r})$. Le modèle gaussien est celui que nous utiliserons tout au long de cet ouvrage. Plus particulièrement, on considèrera souvent le cas où le potentiel d'impureté est une fonction δ, $v(\boldsymbol{r}) = v_0\delta(\boldsymbol{r})$. Dans ce cas, la fonction de corrélation $B(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ est égale à

$$B(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = B\ \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = n_i v_0^2\ \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \quad . \tag{2.42}$$

Dans le complément C2.1, on étudie quelques propriétés de la diffusion par un potentiel $v(\boldsymbol{r})$.

2.2.3 Le modèle d'Anderson

Dans le cas des métaux, les électrons, au lieu d'être libres, sont soumis à un fort potentiel V_{res} dû au réseau périodique. L'hamiltonien (2.1) devient $\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) + V_{res}(\boldsymbol{r})$. Cette limite peut être traitée à l'aide du modèle des *liaisons fortes* pour lequel les fonctions d'onde s'expriment sous la forme d'une combinaison linéaire d'orbitales atomiques

$$|\phi_n\rangle = \sum_i a_{ni}|i\rangle \tag{2.43}$$

où $|i\rangle$ est une orbitale centrée sur l'atome i, état propre de l'hamiltonien d'un atome seul. On suppose que les recouvrements entre orbitales atomiques sont suffisamment faibles ($\langle i|i'\rangle = \delta_{ii'}$), de sorte que les fonctions d'onde ϕ_n sont normalisées. L'hamiltonien est caractérisé par ses éléments de matrice dans la base $|i\rangle$. Pour un milieu désordonné, l'élément diagonal $\epsilon_i = \langle i|\mathcal{H}|i\rangle$ représente l'énergie aléatoire du site correspondant à l'atome i, tandis que les éléments de matrice $\langle i|\mathcal{H}|j\rangle = t_{ij}$ décrivent le saut du site i au site j.

Le désordre est ici décrit par l'énergie aléatoire ϵ_i sur chacun des sites. L'hamiltonien de ce modèle introduit par Anderson en 1958 [35] s'écrit,

$$\mathcal{H} = -\sum_{i,j} t_{ij}|i\rangle\langle j| + \sum_i \epsilon_i|i\rangle\langle i| \tag{2.44}$$

ou, en seconde quantification,

$$\mathcal{H} = -\sum_{i,j} t_{ij}{a_i}^\dagger a_j + \sum_i \epsilon_i {a_i}^\dagger a_i \quad . \tag{2.45}$$

On suppose que le désordre de site est distribué uniformément dans un intervalle de largeur W de telle manière que $-\frac{W}{2} \leq \epsilon_i \leq \frac{W}{2}$, où W est l'amplitude du désordre. On suppose par ailleurs que ces énergies sont décorrélées de site à site. On a donc

$$\begin{aligned} \langle \epsilon_i \rangle &= 0 \\ \langle \epsilon_i \, \epsilon_j \rangle &= \frac{W^2}{12} \delta_{ij} \end{aligned} \tag{2.46}$$

où δ_{ij} est le symbole de Kronecker. Une simplification du modèle qui n'altère pas sa généralité consiste à ne considérer que des sauts d'un site i vers les z premiers voisins $i+p$ dans un réseau cubique simple. Dans cette approximation, on prend $t_{ij} = t \; \delta_{j,i+p}$ où t est une amplitude constante. L'énergie cinétique des électrons dépend de leur densité (de l'énergie de Fermi). Elle est proportionnelle à la largeur de bande égale à $2zt$. Dans cette description, il apparaît un paramètre naturel sans dimension W/t qui décrit l'amplitude du désordre. Le cas $W = 0$ décrit un cristal parfait. L'avantage de ce modèle est qu'il se prête aisément à des calculs numériques. Il a permis de mettre en évidence l'existence d'un seuil de localisation dans les systèmes tridimensionnels, c'est-à-dire d'une valeur critique du rapport W/t au-delà de laquelle le système change qualitativement de nature. Il passe d'un comportement diffusif, pour lequel les fonctions d'onde sont spatialement étendues, à un comportement dit localisé, pour lequel ces mêmes fonctions d'onde deviennent spatialement localisées [36].

En présence d'un champ magnétique $\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$, l'hamiltonien d'Anderson devient :

$$\mathcal{H} = -\sum_{ij} t_{i,j} \; e^{i\theta_{ij}} a_i{}^\dagger a_j + \sum_i \epsilon_i a_i{}^\dagger a_i \tag{2.47}$$

où θ_{ij} est proportionnel à la circulation du potentiel vecteur $\boldsymbol{A}$ le long du lien (ij) :

$$\theta_{ij} = -\frac{e}{\hbar} \int_i^j \boldsymbol{A}.d\boldsymbol{l} \quad . \tag{2.48}$$

Remarque : Effet du champ magnétique

En présence d'un champ magnétique, l'écriture de l'hamiltonien (2.47) est loin d'être évidente. En l'absence de désordre, le vecteur d'onde est un bon nombre quantique et les solutions $|\boldsymbol{k}\rangle$ de l'équation de liaisons fortes

$$\mathcal{H}(\hbar \boldsymbol{k})|\boldsymbol{k}\rangle = \epsilon(\boldsymbol{k})|\boldsymbol{k}\rangle$$

sont des ondes de Bloch. En présence d'un champ magnétique, l'hamiltonien est remplacé par un hamiltonien effectif

$$\mathcal{H}(\hbar \boldsymbol{k} + e\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}))$$

où, par analogie avec le cas d'une particule libre, on a remplacé $\hbar \boldsymbol{k}$ par $\hbar \boldsymbol{k} + e\boldsymbol{A}$. La justification de cette opération, appelée substitution de Peierls, est difficile. Cette substitution a été discutée en particulier par Peierls, Kohn, Wannier [37, 38]. Elle est

certainement justifiée tant que le champ est suffisamment faible pour que la longueur magnétique l_B, définie par $l_B^2 = \hbar/(eB)$, reste grande devant le pas a du réseau, ce qui dans un métal reste vrai pour les champs expérimentalement accessibles.
Cette substitution, qui revient à remplacer l'opérateur de translation $e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}$ par $e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}-i\frac{e}{\hbar}\int_0^{\boldsymbol{r}}\boldsymbol{A}.d\boldsymbol{l}}$, conduit à remplacer l'hamiltonien, dans sa version « seconde quantification » par la forme invariante de jauge (2.47).

Complément C2.1 Théorie des collisions élastiques et diffusion simple

Le modèle d'Edwards permet de relier les caractéristiques du potentiel gaussien $V(\boldsymbol{r})$ à celles du potentiel $v(\boldsymbol{r})$ choisi pour décrire les impuretés individuelles. Dans ce complément, on rappelle les grandes lignes de la théorie de la diffusion d'une onde scalaire par *un seul obstacle localisé* dans l'espace et décrit par un potentiel $v(\boldsymbol{r})$. Cette théorie fait l'objet d'ouvrages spécialisés [39,40]. Outre quelques généralités on considèrera, à titre d'exemple, la diffusion des électrons par une barrière de potentiel à symétrie sphérique [40,41].

Pour des ondes scalaires, les principaux résultats sont communs à plusieurs équations d'onde. On se place ici dans le cadre de l'équation de Helmholtz.

On considère le problème de la collision d'une onde avec un potentiel $v(\boldsymbol{r})$ *localisé*, c'est-à-dire vérifiant la condition $\lim_{r\to\infty} rv(\boldsymbol{r}) = 0$. On cherche les solutions de l'équation de Helmholtz

$$\left(\Delta + k_0^2\right)\psi(\boldsymbol{r}) = v(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) \tag{2.49}$$

qui satisfont à la condition aux limites

$$\psi(\boldsymbol{r}) \propto \frac{e^{ik_0 r}}{r} \qquad r \to +\infty \tag{2.50}$$

correspondant à une onde sphérique émergente à grande distance. Les solutions de (2.49) s'expriment à partir de la fonction de Green $G_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', k_0)$ associée [2], définie par :

$$(\Delta + k_0^2)G_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', k_0) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{2.51}$$

de telle sorte que la solution générale de (2.49) peut s'écrire

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r}' G_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', k_0) v(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}') \quad . \tag{2.52}$$

À cette solution, on peut toujours ajouter une solution de l'équation homogène

$$\left(\Delta + k_0^2\right)\phi(\boldsymbol{r}) = 0 \tag{2.53}$$

qui décrit l'onde incidente que l'on choisit de prendre sous la forme d'une onde plane $\phi(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}$ avec $|\boldsymbol{k}| = k_0$. En utilisant l'expression (3.48) de la fonction de Green libre :

$$G_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', k_0) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{ik_0|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} \quad , \tag{2.54}$$

on obtient :

$$\psi(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} - \frac{1}{4\pi}\int d\boldsymbol{r}' \frac{e^{ik_0|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} v(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}') \quad . \tag{2.55}$$

[2] Pour plus de détails sur les fonctions de Green, on se reportera à la section 3.1.

C2.1.1 Forme asymptotique des solutions

Afin d'étudier la forme asymptotique ($r \to \infty$) de la solution (2.55), on écrit pour $r \gg r'$ (fig. 2.1) :

$$k_0|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| = k_0 r\sqrt{1+\left(\frac{r'}{r}\right)^2 - 2\frac{\boldsymbol{r}.\boldsymbol{r}'}{r^2}} \simeq k_0 r - \boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}' \tag{2.56}$$

où $\boldsymbol{k}' = k_0\boldsymbol{r}/r$. On obtient ainsi le développement de la fonction de Green libre (approximation de Fraunhoffer) :

$$G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',k_0) \simeq -\frac{e^{ik_0 r}}{4\pi r}e^{-i\boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}'} \tag{2.57}$$

que l'on insère dans (2.55) :

$$\psi(\boldsymbol{r}) \simeq e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} - \frac{e^{ik_0 r}}{4\pi r}\int d\boldsymbol{r}' e^{-i\boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}'} v(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}') \quad . \tag{2.58}$$

Écrite sous la forme :

$$\psi(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} + \frac{e^{ik_0 r}}{r}f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') \quad , \tag{2.59}$$

cette relation définit l'*amplitude de diffusion*

$$\boxed{f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = -\frac{1}{4\pi}\int d\boldsymbol{r}' e^{-i\boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}'} v(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')} \tag{2.60}$$

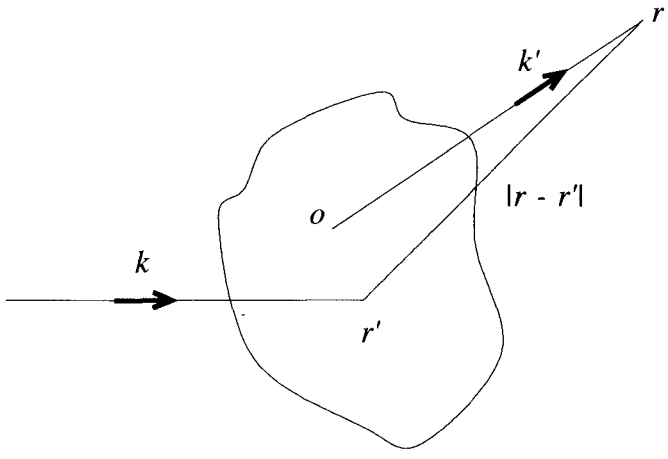


FIG. 2.1 – *Onde diffusée après une interaction avec le potentiel au point* $\boldsymbol{r}'$. *Dans l'approximation de Fraunhoffer,* $|\boldsymbol{r}'| \ll |\boldsymbol{r}|$.

qui a les dimensions d'une longueur. Le module k_0 du vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$ étant conservé dans une collision élastique, l'amplitude de diffusion ne dépend que de $k_0 = |\boldsymbol{k}| = |\boldsymbol{k}'|$ et de l'angle de diffusion θ entre les directions $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$ (fig. 2.2) soit $f(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = f(k_0, \theta)$. L'expression (2.60) de l'amplitude de diffusion a été définie pour l'équation de Helmholtz. Pour l'équation de Schrödinger avec un potentiel $v(\boldsymbol{r})$, elle s'écrit :

$$\boxed{f(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\boldsymbol{r}' e^{-i\boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}'} v(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}')} \tag{2.61}$$

Dans la limite de *basse énergie*, c'est-à-dire lorsque $k_0 r_0 \ll 1$ où r_0 est la portée du potentiel, le facteur de phase de l'équation (2.60) est égal à 1 et l'amplitude de diffusion ne dépend plus de $\boldsymbol{k}'$: *la diffusion est isotrope*. On définit alors la *longueur de diffusion* a_s par la limite

$$a_s = -\lim_{k_0 \to 0} f(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \tag{2.62}$$

soit encore

$$a_s = \frac{1}{4\pi} \int d\boldsymbol{r}' v(\boldsymbol{r}')\psi(\boldsymbol{r}') \quad . \tag{2.63}$$

Exercice 2.2 : Diffusion par un potentiel sphérique.

On considère la diffusion par le potentiel central $v(r)$ défini par

$$\begin{aligned} v(r) &= U_0 \text{ si } \quad r \leq a \\ v(r) &= 0 \quad \text{ si } \quad r > a \quad . \end{aligned} \tag{2.64}$$

Dans la limite de basse énergie, la diffusion est isotrope. Calculer la longueur de diffusion a_s, définie par (2.62). Pour cela, résoudre l'équation de Helmholtz dans la limite d'énergie nulle. On introduira la fonction $u = r\psi$ pour se ramener à la résolution d'une équation différentielle simple, avec les conditions de continuité appropriées en $r = a$. En comparant la solution obtenue avec la forme asymptotique (2.59) lorsque $k_0 \to 0$, montrer que la longueur de diffusion s'écrit :

$$a_s = a - \frac{\tanh Ka}{K} \tag{2.65}$$

où le paramètre K est égal à $\sqrt{U_0}$, pour l'équation de Helmholtz. Pour l'équation de Schrödinger, l'expression de la longueur de diffusion est identique, mais le paramètre K est égal à $\sqrt{2mU_0}/\hbar$.

C2.1.2 Section efficace et flux diffusé

À partir de la fonction $\psi(\boldsymbol{r})$, on définit le flux du courant à travers une surface S par la relation (fig. 2.2) :

$$F = \mathrm{Im} \int d\boldsymbol{S}.\psi^*(\boldsymbol{r})\boldsymbol{\nabla}\psi(\boldsymbol{r}) \quad . \tag{2.66}$$

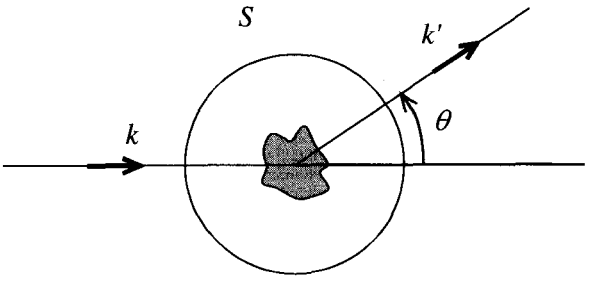


FIG. 2.2 – *Diffusion par un potentiel localisé. Le flux total $F = F_{inc} + F_{out} + F_s$ qui traverse la surface S est nul. Puisque $F_{inc} = \int \boldsymbol{k}.d\boldsymbol{S} = 0$, $F_{out} + F_s$ doit s'annuler. Ce résultat constitue le théorème optique.*

Un flux incident est envoyé sur le potentiel $v(\boldsymbol{r})$ et on mesure le flux émergent dans une direction donnée, caractérisée par l'angle θ, sous un angle solide $d\Omega$. Plus précisément on définit la *section efficace différentielle* par le rapport entre le flux émergent sous un angle solide $d\Omega$ et le flux incident par unité de surface :

$$\sigma(\theta) = \frac{dF_{out}/d\Omega}{dF_{inc}/dS} \quad . \tag{2.67}$$

Cette relation est très générale et s'applique à d'autres types d'ondes [3]. La normalisation du flux dans l'équation (2.66) contient un préfacteur qui dépend du problème physique considéré. Pour une particule quantique dont l'évolution est donnée par l'équation de Schrödinger, le flux est défini à partir de l'amplitude de probabilité [42]. La section efficace différentielle exprime alors le rapport entre le nombre de particules diffusées dans un angle solide $d\Omega$ et le flux incident de particules par unité de surface. Dans le cas d'un champ électromagnétique, on peut utiliser cette définition de la section efficace où F exprime le flux énergétique $nc\hbar\omega$ des photons, où n est la densité de photons [43]. Dans la limite classique, c'est le flux du vecteur de Poynting.

De la relation (2.59), on déduit que le flux incident par unité de surface est égal à $dF_{inc}/dS = k_0$. Le flux total de l'onde diffusée s'écrit

$$F_{out} = \mathrm{Im} \int d\boldsymbol{S}.f^*(k_0,\theta)\frac{e^{-ik_0 r}}{r}\boldsymbol{\nabla}\left[f(k_0,\theta)\frac{e^{ik_0 r}}{r}\right] \tag{2.68}$$

soit, à grande distance ($k_0 r \gg 1$),

$$F_{out} = 2\pi k_0 \int_0^\pi |f(k_0,\theta)|^2 \sin\theta d\theta \tag{2.69}$$

[3] Ainsi qu'à un flux de particules classiques.

de sorte que la section efficace différentielle de diffusion sous l'angle θ est égale au carré du module de l'amplitude de diffusion :

$$\boxed{\sigma(\theta) = |f(k_0, \theta)|^2} \tag{2.70}$$

On définit la section efficace totale

$$\sigma = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta) \sin\theta d\theta \tag{2.71}$$

qui est donc reliée, d'après (2.69), au flux total F_{out} diffusé dans toutes les directions :

$$F_{out} = k_0\ \sigma \quad . \tag{2.72}$$

Dans la limite de basse énergie, l'amplitude de diffusion n'a pas de structure angulaire et la section efficace totale s'écrit en fonction de la longueur de diffusion (2.62) :

$$\sigma = 4\pi a_s^2 \quad . \tag{2.73}$$

On définit également la section efficace de transport σ^* qui mesure le flux projeté sur la direction de l'onde incidente, soit

$$\sigma^* = 2\pi \int_0^\pi \sigma(\theta)(1 - \cos\theta) \sin\theta\, d\theta \quad . \tag{2.74}$$

Les sections efficaces σ et σ^* sont égales si la section efficace différentielle n'a pas de dépendance angulaire. La section efficace de transport σ^* joue un rôle important en diffusion multiple car elle est reliée au coefficient de diffusion (complément C4.3) et elle conditionne la plupart des propriétés physiques décrites dans cet ouvrage.

C2.1.3 Théorème optique

• Terme d'ombre

La conservation de l'énergie impose une relation importante entre section efficace et amplitude de diffusion à angle nul, relation qui constitue le théorème optique. Considérons le flux total F à travers une surface sphérique de rayon r. Compte tenu de la forme asymptotique (2.59), on peut décomposer ce flux de sorte que $F = (\boldsymbol{k}.\int d\boldsymbol{S}) + F_{out} + F_s = 0$. Le premier terme, qui correspond au flux de l'onde incidente, est nul à travers la surface sphérique. Le deuxième, donné par la relation (2.68), est le flux de l'onde diffusée. Le troisième terme F_s décrit *l'interférence entre les ondes incidente et diffusée.* À grande distance, il s'écrit :

$$F_s = \mathrm{Im} \int d\boldsymbol{S}. \left[i\boldsymbol{k} f^*(k_0, \theta) \frac{e^{i(\boldsymbol{k}.r - k_0 r)}}{r} + e^{-i\boldsymbol{k}.r} \boldsymbol{\nabla} \left(f(k_0, \theta) \frac{e^{ik_0 r}}{r} \right) \right] \tag{2.75}$$

soit

$$F_s = 2\pi k_0 \int_0^\pi \sigma_s(\theta)\sin\theta d\theta \tag{2.76}$$

avec

$$\sigma_s(\theta) = r(1+\cos\theta)\mathrm{Re}\left[f(k_0,\theta)e^{ik_0r(1-\cos\theta)}\right] \quad . \tag{2.77}$$

Cette fonction oscille très rapidement en fonction de l'angle θ. Sa contribution au terme d'interférence F_s ne provient que d'une fenêtre angulaire de largeur proportionnelle à $1/\sqrt{k_0r}$. Cette contribution dite « terme d'ombre » représente la diminution due à la diffusion du flux dans la direction du vecteur d'onde incident. Pour calculer cette contribution, on effectue une intégration par parties après avoir posé $x = \cos\theta$. Il vient

$$F_s = \mathrm{Re}\left[4i\pi f(k_0,0) - 2i\pi e^{ik_0r}\int_{-1}^{1} dx e^{-ik_0rx}\Big(f(k_0,x) + (1+x)f'(k_0,x)\Big)\right] \tag{2.78}$$

L'intégrale qui apparaît dans le second membre de cette relation tend vers zéro dans la limite $k_0r \to \infty$. Il reste donc :

$$F_s = -4\pi\mathrm{Im}f(k_0,\theta=0) \quad . \tag{2.79}$$

La conservation totale du flux impose que le terme d'interférence F_s compense exactement le flux diffusé F_{out} :

$$F_{out} + F_s = 0 \tag{2.80}$$

c'est-à-dire en utilisant les relations (2.72) et (2.79),

$$\boxed{\sigma = \frac{4\pi}{k_0}\mathrm{Im}f(k_0,\theta=0)} \tag{2.81}$$

Ce résultat constitue le *théorème optique*. C'est une conséquence de la conservation du flux lors d'un processus de diffusion élastique.

• Matrice de diffusion S et théorème optique

On présente ici une démonstration différente et plus formelle du théorème optique [4] qui s'applique aussi bien au cas de l'équation de Helmholtz qu'à celui de l'équation de Schrödinger pour laquelle on pose ici $\hbar^2/2m = 1$. Considérons d'abord l'*opérateur de diffusion ou matrice S* qui relie les fonctions d'onde incidente $|\psi_{in}\rangle$ et émergente $|\psi_{out}\rangle$:

$$|\psi_{out}\rangle = S|\psi_{in}\rangle \quad . \tag{2.82}$$

[4] Cette section utilise certains résultats du chapitre 3.

L'état incident $|\psi_{in}\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle$ est un état propre de l'hamiltonien libre $\mathcal{H}_0 = -\Delta$, d'énergie $E = k_0^2$, soit

$$\mathcal{H}_0|\psi_{in}\rangle = E|\psi_{in}\rangle \quad . \tag{2.83}$$

De même, la fonction d'onde émergente $|\psi_{out}\rangle$ est un état propre (stationnaire) de l'hamiltonien total $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + v$ avec la même énergie, soit

$$\mathcal{H}|\psi_{out}\rangle = E|\psi_{out}\rangle \quad . \tag{2.84}$$

À l'infini, les deux états $|\psi_{in}\rangle$ et $|\psi_{out}\rangle$ ne diffèrent que par l'onde diffusée, dont l'amplitude tend vers zéro. Par conséquent, les deux fonctions d'onde sont identiques à un déphasage près. En soustrayant les relations (2.83) et (2.84) et en se servant de la définition (2.82) de la matrice S, on obtient

$$vS = (E - \mathcal{H}_0)(S - \mathbb{1}) \tag{2.85}$$

qui redonne bien $S = \mathbb{1}$ lorsque $v = 0$. En utilisant la résolvante $\hat{G}_0$ associée au problème libre et définie par $(E - \mathcal{H}_0)\hat{G}_0 = \mathbb{1}$, on peut récrire une équation de Dyson [5] :

$$\boxed{S = \mathbb{1} + \hat{G}_0 v S} \tag{2.86}$$

En projetant cette équation sur un état $|\boldsymbol{k}\rangle$ incident, on retrouve la relation (2.55) sous la forme

$$|\psi_{out}\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle + \hat{G}_0 v|\psi_{out}\rangle \quad . \tag{2.87}$$

On définit maintenant *l'opérateur de collision* $T = vS$ qui vérifie l'équation dite de Lippman-Schwinger :

$$S = \mathbb{1} + \hat{G}_0 T \quad . \tag{2.88}$$

En appliquant cette égalité à l'état $|\boldsymbol{k}\rangle$, on obtient

$$|\psi_{out}\rangle = |\boldsymbol{k}\rangle + \hat{G}_0 T|\boldsymbol{k}\rangle \tag{2.89}$$

dont la projection sur $|\boldsymbol{r}\rangle$, redonne la relation (2.55). En effet, en insérant une relation de fermeture, on obtient

$$\langle \boldsymbol{r}|\psi_{out}\rangle = e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} + \int d\boldsymbol{r}' \langle \boldsymbol{r}|\hat{G}_0|\boldsymbol{r}'\rangle\langle \boldsymbol{r}'|T|\boldsymbol{k}\rangle \tag{2.90}$$

---

[5] Cette équation de Dyson permet un développement de la matrice S :

$$S = \mathbb{1} + \hat{G}_0 v + \hat{G}_0 v \hat{G}_0 v + \ldots$$

L'approximation de Born que l'on étudie plus en détail dans la section suivante, consiste à ne considérer pour la matrice S que les deux premiers termes de ce développement. Cette approximation est valable lorsque les éléments de matrice du potentiel v sont petits.

et le développement asymptotique (2.57) de $\langle \boldsymbol{r}|\hat{G}_0|\boldsymbol{r}'\rangle$ conduit à la relation (2.59) avec

$$f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = -\frac{1}{4\pi}\langle \boldsymbol{k}'|T|\boldsymbol{k}\rangle \quad . \tag{2.91}$$

Pour démontrer le théorème optique, on part de la relation de Lippman-Schwinger (2.89). En la multipliant par $T^\dagger$ et en la projetant sur l'état $|\boldsymbol{k}\rangle$ on obtient

$$\langle \boldsymbol{k}|T^\dagger|\boldsymbol{k}\rangle = -\langle \boldsymbol{k}|T^\dagger \hat{G}_0 T|\boldsymbol{k}\rangle \tag{2.92}$$

puisque $\langle \psi_{out}|v|\psi_{out}\rangle = 0$. La partie imaginaire de cette relation s'écrit, à l'aide de (3.52),

$$\mathrm{Im}\langle \boldsymbol{k}|T^\dagger|\boldsymbol{k}\rangle = \frac{\pi}{2k_0}\sum_{\boldsymbol{k}'}|\langle \boldsymbol{k}'|T|\boldsymbol{k}\rangle|^2\delta(k'-k_0) \tag{2.93}$$

soit encore

$$-\mathrm{Im}\langle \boldsymbol{k}|T|\boldsymbol{k}\rangle = \frac{k_0}{8\pi}\int_0^\pi |\langle \boldsymbol{k}'|T|\boldsymbol{k}\rangle|^2 \sin\theta d\theta \quad . \tag{2.94}$$

Finalement, des relations (2.71) et (2.91), on déduit

$$\sigma = \frac{4\pi}{k_0}\mathrm{Im}f(\theta=0) = -\frac{1}{k_0}\mathrm{Im}\langle \boldsymbol{k}|T|\boldsymbol{k}\rangle \tag{2.95}$$

qui constitue le théorème optique (2.81).

C2.1.4 Approximation de Born

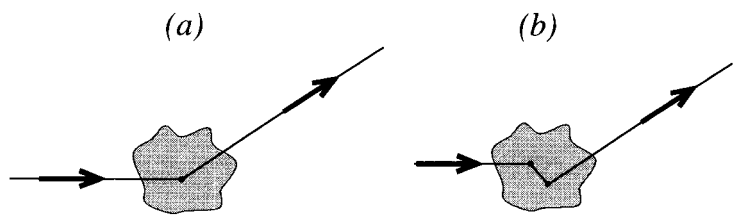


FIG. 2.3 – *a) À l'approximation de Born, l'onde n'interagit qu'une fois avec le potentiel. b) Au-delà de cette approximation, l'onde est diffusée plusieurs fois par le potentiel.*

Cette approximation, valable dans la limite d'un potentiel faible, consiste à ne garder que les deux premiers termes dans le développement de la matrice S déduit de la relation (2.86), soit $S = \mathbb{1} + \hat{G}_0 v$. Autrement dit, cela revient à supposer [6] que $T = v$. Cette approximation apparaît naturellement dans

[6] Néanmoins, pour vérifier le théorème optique à l'approximation de Born, il faut développer T à l'ordre suivant $T = v + v\hat{G}_0 v$ dans le terme de droite de la relation (2.95).

le cadre du modèle gaussien puisque celui-ci se déduit du modèle d'Edwards dans la limite d'une densité de diffuseurs infinie et d'un potentiel $v(\boldsymbol{r})$ dont l'amplitude tend vers 0.

L'amplitude de diffusion se simplifie alors considérablement puisqu'il suffit de remplacer dans (2.60) la fonction $\psi(\boldsymbol{r}')$ par l'onde plane $e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}'}$ qui décrit l'onde incidente. Ceci permet de récrire l'amplitude $f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')$ comme la transformée de Fourier du potentiel de diffusion. Ainsi,

$$f_B(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = -\frac{1}{4\pi}\int d\boldsymbol{r}' e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}').\boldsymbol{r}'} v(\boldsymbol{r}') = -\frac{1}{4\pi} v(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \tag{2.96}$$

pour l'équation de Helmholtz. La section efficace différentielle, définie par (2.70), s'écrit

$$\sigma_B(k_0,\theta) = \frac{1}{16\pi^2} v^2(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \quad . \tag{2.97}$$

Ces relations se simplifient encore dans le cas où le potentiel $v(r)$ est central, puisque l'amplitude de diffusion et donc la section efficace ne dépendent plus que du module $|\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'|$. En introduisant le vecteur $\boldsymbol{q} = \boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$ de norme $q = 2k_0\sin(\theta/2)$, où θ est l'angle entre les directions $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$, on obtient

$$f_B(k_0,\theta) = \int_0^\infty r dr \frac{\sin qr}{q} v(r) \quad . \tag{2.98}$$

Ce résultat a une application immédiate dans le cas du modèle d'Edwards considéré dans la section 2.2.2. En utilisant la relation (2.97), on peut relier la fonction de corrélation (2.41) du potentiel, à la section efficace différentielle d'un diffuseur

$$B(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') = B(k_0,\theta) = 16\pi^2 n_i \sigma_B(k_0,\theta) \tag{2.99}$$

où n_i est la densité de diffuseurs. La moyenne angulaire $\langle B(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\rangle$ s'exprime ainsi en fonction de la section efficace totale σ_B :

$$\boxed{\langle B(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\rangle = 4\pi n_i \sigma_B} \tag{2.100}$$

Pour le cas de l'équation de Schrödinger avec un potentiel décrit par le modèle d'Edwards, les expressions pour l'amplitude de diffusion et pour la fonction de corrélation du modèle gaussien s'écrivent :

$$f_B(k_0,\theta) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} v(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \tag{2.101}$$

$$\langle B(k_0,\theta)\rangle = \frac{\pi\hbar^4}{m^2} n_i \sigma_B \quad . \tag{2.102}$$

• Limite de basse énergie

Une limite particulièrement simple et très utile est celle de basse énergie ou de grande longueur d'onde, qui correspond à $\lambda \gg r_0$ où r_0 est la portée du potentiel $v(\boldsymbol{r})$. Dans ce cas, le facteur de phase dans la relation (2.96) disparaît. L'amplitude de diffusion et la section efficace différentielle n'ont plus de dépendance angulaire. La diffusion est *isotrope* :

$$f_B(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = -\frac{1}{4\pi} \int d\boldsymbol{r}' v(\boldsymbol{r}') \tag{2.103}$$

et

$$\sigma_B(k_0, \theta) = \left[\frac{1}{4\pi} \int d\boldsymbol{r}' v(\boldsymbol{r}')\right]^2 = \frac{\sigma_B}{4\pi} \quad . \tag{2.104}$$

À titre d'exemple, considérons la diffusion par une barrière de potentiel sphérique telle que $U(r) = U_0$ pour $r < a$ et $U(r) = 0$ sinon (voir exercice 2.2 pour la limite de basse énergie). À l'approximation de Born, la section efficace différentielle calculée à partir de (2.97) est donnée par

$$\sigma_B(k_0, \theta) = U_0^2 \frac{(\sin qa - qa \ \cos qa)^2}{q^6} \tag{2.105}$$

où $q = 2k_0 \sin(\theta/2)$. Sa dépendance angulaire est représentée sur la figure 2.4.

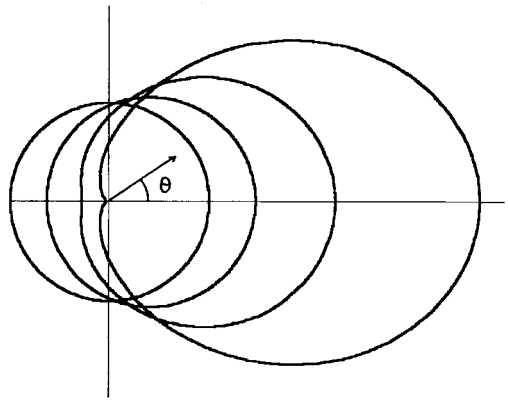


FIG. 2.4 – *Section efficace $\sigma(\theta)/\sigma$ à l'approximation de Born, pour un potentiel sphérique de rayon a et pour les valeurs du paramètre $k_0 a = 0{,}1, 1, 1{,}5, 2$. Lorsque $k_0 a$ augmente, la diffusion devient de plus en plus anisotrope.*

Dans la limite $k_0 a \to 0$, la diffusion devient isotrope et la section efficace ne dépend plus du vecteur d'onde. Elle s'écrit :

$$\sigma_B(k_0, \theta) = \frac{U_0^2 \Omega^2}{16\pi^2} \quad \text{pour} \quad k_0 a \to 0 \tag{2.106}$$

	Exact	Approx. Born $Ka \ll 1$	Pot. fort $Ka \gg 1$	Pot. δ
Toute énergie		$K^2 \dfrac{\sin qa - qa\cos qa}{q^3}$		0
Basse énergie Diff. isotrope $k_0 a \ll 1$	$a_s = a - \dfrac{\tanh Ka}{Ka}$	$a_s = \dfrac{K^2 a^3}{3}$	$a_s = a$	$a_s = 0$

FIG. 2.5 – *Ce tableau récapitule les résultats discutés dans ce complément pour l'amplitude de diffusion $-f(k_0, \theta)$ dans le cas d'un potentiel sphérique de hauteur U_0 et de rayon a. Dans la limite de basse énergie, cette quantité ne dépend pas de l'angle θ. Elle est appelée longueur de diffusion et notée a_s. Le paramètre K est tel que $K^2 = U_0$ pour l'équation de Helmholtz et $K^2 = 2mU_0/\hbar^2$ pour l'équation de Schrödinger. On a défini $q = 2k_0 \sin\theta/2$. Dans le modèle d'Edwards, $v_0 \propto K^2 a^3 \to 0$.*

où $\Omega = 4\pi a^3/3$ est le volume du diffuseur. Cette limite de basse énergie pour le cas des électrons dans un métal ($k_F r_0 \ll 1$) ou pour la diffusion de la lumière ($\lambda \gg r_0$) impose une condition sur la nature des diffuseurs [7]. Cette limite de diffusion isotrope est très souvent utilisée afin de simplifier les calculs. Cependant, il est important de noter qu'elle est très restrictive et que les situations physiques rencontrées correspondent le plus souvent à un potentiel de portée finie et donc à une diffusion anisotrope.

• Le potentiel δ

Pour décrire la limite de basse énergie où la portée du potentiel est petite devant la longueur d'onde, on remplace souvent le potentiel de diffusion $v(\boldsymbol{r})$ par un potentiel « delta » $v_0\delta(\boldsymbol{r})$, obtenu en faisant tendre U_0 vers l'infini et a vers 0, en gardant constant le produit $v_0 = \int v(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} = 4\pi a^3 U_0/3$. La section efficace à l'approximation de Born devient

$$\sigma_B = \frac{v_0^2}{4\pi} \quad . \tag{2.107}$$

Il convient toutefois d'être prudent dans l'utilisation d'une telle limite. En effet, en faisant tendre U_0 vers l'infini, on sort du domaine de validité de l'approximation de Born. En fait le résultat de l'exercice 2.2 montre que la section efficace est nulle ! (tout au moins dans la limite de basse énergie, mais il est possible de montrer que cela est vrai pour toute énergie).

[7] Dans ces deux cas la longueur r_0 est à préciser et dépend de la physique du processus de collision. Pour le potentiel sphérique, $r_0 = a$.

Il faut donc bien comprendre la signification du modèle d'Edwards (section 2.2.2) appliqué au cas d'impuretés δ :

$$V(r) = \sum_i v_0 \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i) \quad . \tag{2.108}$$

On pourrait en effet se demander si le choix de ce potentiel a un sens puisqu'il n'y a pas de diffusion par un potentiel δ. En fait, on ne considère dans cet ouvrage que le cas du potentiel gaussien, c'est-à-dire la limite du potentiel (2.108) lorsque $v_0 \propto K^2 a^3 \to 0$, et pour lequel la section efficace à l'approximation de Born est aussi nulle. Le modèle gaussien correspond donc à une densité infinie de diffuseurs de section efficace nulle. Le modèle (2.108) est bien justifié dans la limite où $v_0 \to 0$.

Remarque

Si le potentiel δ a une section efficace nulle, il existe une autre façon de définir correctement un potentiel de portée nulle. C'est le pseudo-potentiel défini par [44] :

$$v(\boldsymbol{r})\psi(\boldsymbol{r}) = v_0 \delta(\boldsymbol{r}) \frac{\partial}{\partial r} r\psi(\boldsymbol{r}) \quad . \tag{2.109}$$

Il est aisé de montrer que cette expression correspond à un potentiel de portée nulle et de section efficace totale donnée par (2.107). On ne considèrera pas ce potentiel dans cet ouvrage.

Complément C2.2 Théorème de réciprocité

Afin de traduire le renversement du sens du temps en mécanique quantique, on applique l'opérateur anti-linéaire qui transforme un état en son complexe conjugué. En particulier, pour une onde plane, on a la transformation $|\boldsymbol{k}\rangle \rightarrow |-\boldsymbol{k}\rangle$. Lorsqu'elle existe, l'invariance par renversement du sens du temps se traduit par la relation suivante sur l'amplitude de diffusion f par un obstacle localisé telle qu'elle a été définie dans le complément C2.1 :

$$f(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = f(-\boldsymbol{k}', -\boldsymbol{k}) \quad . \tag{2.110}$$

Cette relation constitue le *théorème de réciprocité* [45]. Elle exprime que l'amplitude de diffusion reste inchangée lorsqu'on intervertit les états initiaux et finaux [8] ainsi que les directions de propagation. La relation précédente se généralise au cas où d'autres degrés de liberté sont présents. Ainsi, si nous prenons l'exemple d'une onde électromagnétique de polarisation $\hat{\varepsilon}$, l'invariance dans le renversement du sens du temps se traduit par [46] :

$$f(\boldsymbol{k}, \hat{\varepsilon}; \boldsymbol{k}', \hat{\varepsilon}') = f(-\boldsymbol{k}', \hat{\varepsilon}'^*; -\boldsymbol{k}, \hat{\varepsilon}^*) \tag{2.111}$$

où $\hat{\varepsilon}^*$ est le complexe conjugué de $\hat{\varepsilon}$. Pour un électron de spin σ, l'inversion du sens du temps retourne le spin et le théorème de réciprocité devient [45]

$$f(\boldsymbol{k}, \sigma; \boldsymbol{k}', \sigma') = (-1)^{\sigma-\sigma'} f(-\boldsymbol{k}', -\sigma'; -\boldsymbol{k}, -\sigma) \quad . \tag{2.112}$$

Ces relations se généralisent au cas où les diffuseurs ont des degrés de libertés internes. Par exemple, dans le cas de la diffusion de photons sur des atomes, il faut prendre en compte le fait que les nombres quantiques magnétiques m de chaque niveau atomique sont des variables dynamiques (fig. 2.6). Le théorème de réciprocité s'écrit alors [45]

$$\begin{aligned} &f(\boldsymbol{k}, \hat{\varepsilon}, \{m\}; \boldsymbol{k}', \hat{\varepsilon}', \{m'\}) = \\ &\qquad (-1)^{\sum_\alpha (m'_\alpha - m_\alpha)} f(-\boldsymbol{k}', \hat{\varepsilon}'^*, \{-m'\}; -\boldsymbol{k}, \hat{\varepsilon}^*, \{-m\}) \quad . \end{aligned} \tag{2.113}$$

Dans une opération de renversement du sens du temps, il faut donc non seulement changer la direction des vecteurs d'onde et les vecteurs polarisation mais aussi le signe des nombres quantiques magnétiques. Les deux premières opérations peuvent aisément être contrôlées expérimentalement, par contre la troisième à savoir $\{m'\} = \{-m\}$ n'est généralement pas réalisée dans un gaz atomique, brisant ainsi la condition de réciprocité [47].

---

[8] Pour « final », le *Petit Robert* admet sans remarque particulière le pluriel en « als » ou en « aux ». Grevisse (*Le bon usage*) précise : « Hanse (*Nouveau dictionnaire des difficultés du français moderne*) ne donnait en 1983 que le pluriel finals. Depuis 1983, il laisse le choix entre finals et finaux. Ce dernier se répand de plus en plus, notamment chez les grammairiens ».

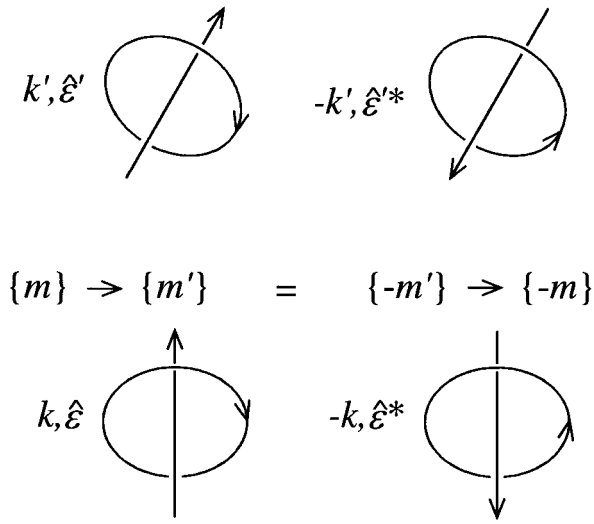


FIG. 2.6 – *Description du théorème de réciprocité pour la diffusion de photons* $(\boldsymbol{k}, \hat{\varepsilon})$ *par des atomes, en présence d'une dégérescence Zeeman des niveaux atomiques.*

On rencontre une situation analogue dans les métaux lors de la diffusion des électrons par des impuretés magnétiques. Celles-ci portent un moment magnétique fixé qui n'est pas retourné lors du renversement du sens du temps.

Dans cet ouvrage on étudiera généralement des séquences de collisions multiples sur des impuretés successives. On peut alors considérer *que ces impuretés constituent un gros objet diffuseur* pour lequel l'ordre de la séquence de collisions sur les impuretés joue le rôle d'un degré de liberté supplémentaire. Ainsi, pour une séquence de n collisions, le théorème de réciprocité (2.110) devient, en l'absence d'autres degrés de liberté,

$$f(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}', \{1 \to n\}) = f(-\boldsymbol{k}', -\boldsymbol{k}, \{n \to 1\}) \quad . \tag{2.114}$$

Il est plutôt d'usage de noter T l'amplitude de diffusion associée à une séquence de diffusion multiple, avec l'indice *dir* pour la séquence directe $\{1 \to n\}$ et l'indice *rev* pour la séquence obtenue par renversement du temps $\{n \to 1\}$. Ainsi la relation (2.114) devient :

$$T_{dir}(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{k}') = T_{rev}(-\boldsymbol{k}'; -\boldsymbol{k}) \quad . \tag{2.115}$$

On constate alors que les processus direct et renversé ne sont égaux, $T_{dir}(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{k}') = T_{rev}(\boldsymbol{k}; \boldsymbol{k}')$, que dans la direction de rétrodiffusion, c'est-à-dire lorsque $\boldsymbol{k}' = -\boldsymbol{k}$:

$$T_{dir}(\boldsymbol{k}; -\boldsymbol{k}) = T_{rev}(\boldsymbol{k}; -\boldsymbol{k}) \quad . \tag{2.116}$$

Notons finalement qu'en présence d'absorption les notions de réciprocité et d'invariance dans le renversement du sens du temps ne sont pas identiques [48]. Dans ce cas, il n'y a pas invariance dans le renversement du sens du temps mais la réciprocité reste préservée et s'exprime simplement par l'affirmation : « si vous me voyez alors je vous vois aussi », qui reste vraie même à travers un brouillard absorbant.

Complément C2.3 Diffusion de la lumière

Un avantage de la diffusion de la lumière par rapport à la diffusion des électrons dans les métaux est qu'il est souvent possible de caractériser les diffuseurs et de connaître le potentiel de diffusion. On peut ainsi prévoir à partir des propriétés de la diffusion simple certaines des caractéristiques de la diffusion multiple comme par exemple le coefficient de diffusion.

On s'intéresse en particulier à la diffusion de la lumière sur des particules diélectriques. C'est un problème compliqué dont on ne connait une solution exacte que pour une sphère homogène, pour un rayon et un indice de réfraction arbitraires. Cette solution a été proposée par G. Mie en 1908 pour l'étude des propriétés de diffusion de la lumière par des suspensions acqueuses de billes d'or. Une limite extrêmement utile de ce problème est celle de la diffusion Rayleigh pour laquelle la taille du diffuseur est très petite par rapport à la longueur d'onde. Cette limite correspond à l'approximation de Born et nous l'étudions dans la section suivante. La théorie de Mie est très formelle mais son importance fait qu'elle est traitée en détail dans de nombreux ouvrages. Nous n'en donnons qu'un aperçu dans la section C2.3.2 en renvoyant le lecteur aux références [49]. Enfin, lorsque la longueur d'onde devient très inférieure à la taille du diffuseur, on tend vers la limite de l'optique géométrique pour laquelle la section efficace de diffusion est constante et de l'ordre de la section efficace géométrique πa^2, où a est le rayon du diffuseur.

Un autre exemple tout aussi important est celui de la diffusion de la lumière par un dipôle. À l'approximation de Born, on retrouve la diffusion Rayleigh. La diffusion Rayleigh peut aussi être résonnante, ce qui a pour effet de considérablement augmenter la section efficace.

C2.3.1 Diffusion Rayleigh classique

On considère la diffusion par un milieu diélectrique localisé de volume Ω et de constante diélectrique ϵ, placé dans le vide. La constante diélectrique $\epsilon(\boldsymbol{r})$ est de la forme $\epsilon(\boldsymbol{r}) = \epsilon_0 + \delta\epsilon(\boldsymbol{r})$. La diffusion Rayleigh est obtenue dans la limite où la longueur d'onde est grande devant la taille du diffuseur ($k_0 a \ll 1$), ce qui correspond à la limite de basse énergie dans le tableau 2.5. Le potentiel $U_0 = k_0^2 \delta\epsilon/\epsilon_0$ induit par le diffuseur correspond donc à un petit paramètre $Ka = k_0 a\sqrt{\delta\epsilon/\epsilon_0}$ (voir le tableau 2.5). La diffusion Rayleigh peut donc être décrite dans le cadre de l'approximation de Born.

Des équations de Maxwell (2.6), on déduit la forme de l'équation d'onde satisfaite par le champ $\boldsymbol{D}$ [50]

$$\boldsymbol{\Delta D} + k_0^2 \boldsymbol{D} = -\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{P} \quad . \tag{2.117}$$

La polarisation $\boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{D}(\boldsymbol{r}) - \epsilon_0 \boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}) = \delta\epsilon(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r})$ agit donc comme un terme de source pour le champ $\boldsymbol{D}$. La solution de l'équation d'onde (2.117) s'écrit, comme pour (2.52), à l'aide de la fonction de Green libre

$G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ (2.54) :

$$\boldsymbol{D}(\boldsymbol{r}) = -\int d^3\boldsymbol{r}' G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\boldsymbol{\nabla}' \times \boldsymbol{\nabla}' \times \boldsymbol{P}(\boldsymbol{r}') \quad . \tag{2.118}$$

La résolution de cette équation intégrale est difficile puisque la polarisation $\boldsymbol{P}$ dépend elle-même de $\boldsymbol{D}$. Mais, à partir de cette équation, on peut supposer, dans la limite où $\delta\epsilon$ est petit, que le vecteur polarisation $\boldsymbol{P}$ est proportionnel au champ incident. Cette approximation, due à Rayleigh, est précisément celle de Born (section C2.1.4). On note $\boldsymbol{D} = \boldsymbol{D}_i + \boldsymbol{D}_s$ et $\boldsymbol{E} = \boldsymbol{E}_i + \boldsymbol{E}_s$, où $\boldsymbol{D}_i$ et $\boldsymbol{E}_i$ sont les champs incidents et $\boldsymbol{D}_s$ et $\boldsymbol{E}_s$ sont les champs diffusés. À l'extérieur du milieu diélectrique, on a $\boldsymbol{D}_i = \epsilon_0\boldsymbol{E}_i$ et $\boldsymbol{D}_s = \epsilon_0\boldsymbol{E}_s$. L'approximation de Born consiste à prendre $\boldsymbol{P} = \delta\epsilon(\boldsymbol{r})\boldsymbol{E}_i$ à l'intérieur du milieu diélectrique, de sorte qu'à partir de la relation (2.118), on obtient le champ électrique diffusé :

$$\epsilon_0\boldsymbol{E}_s = -\int_\Omega d^3\boldsymbol{r}' G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \times [\delta\epsilon(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}_i(\boldsymbol{r}')] \quad . \tag{2.119}$$

Le champ électrique incident est une onde plane de la forme $\boldsymbol{E}_i(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{E}_i e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}$. À grande distance du diélectrique, la fonction de Green prend la forme (2.57) (approximation de Fraunhoffer) :

$$G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \simeq -\frac{1}{4\pi r} e^{ik_0 r - i\boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}'} \tag{2.120}$$

et le champ électrique diffusé s'écrit

$$\epsilon_0\boldsymbol{E}_s(\boldsymbol{r}) = \frac{e^{ik_0 r}}{4\pi r}\int_\Omega d^3\boldsymbol{r}'\, e^{-i\boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}'}\, \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{\nabla} \times [\delta\epsilon(\boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}_i e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}'}] \quad . \tag{2.121}$$

Une double intégration par partie conduit à

$$\epsilon_0\boldsymbol{E}_s(\boldsymbol{r}) = -\frac{e^{ik_0 r}}{4\pi r}\int_\Omega d^3\boldsymbol{r}'\delta\epsilon(\boldsymbol{r}')\, e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}').\boldsymbol{r}'}\boldsymbol{k}' \times (\boldsymbol{k}' \times \boldsymbol{E}_i) \quad . \tag{2.122}$$

Le champ diffusé dépend de la direction de polarisation du champ électrique incident $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i = \boldsymbol{E}_i/E_i$. L'amplitude de diffusion *vectorielle* $f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i)$ définie à partir de (2.59) est donnée par $\boldsymbol{E}_s(\boldsymbol{r}) = E_i\frac{e^{ik_0 r}}{r}f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i)$, ce qui, à partir de (2.122), mène à

$$f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i) = -\frac{1}{4\pi}\int_\Omega d^3\boldsymbol{r}'\frac{\delta\epsilon(\boldsymbol{r}')}{\epsilon_0}\, e^{i(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}').\boldsymbol{r}'}\boldsymbol{k}' \times (\boldsymbol{k}' \times \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i) \quad . \tag{2.123}$$

On suppose le milieu homogène, c'est-à-dire que $\delta\epsilon(\boldsymbol{r}) = \delta\epsilon = \epsilon - \epsilon_0$ est constant. Par ailleurs, on suppose que la longueur d'onde du rayonnement est grande devant la taille de l'objet diélectrique, de sorte que l'exponentielle est égale à 1. On obtient ainsi

$$f(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i) = -\frac{\alpha_0}{4\pi}\,\boldsymbol{k}' \times (\boldsymbol{k}' \times \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i) \tag{2.124}$$

où $\alpha_0 = \Omega\delta\epsilon/\epsilon_0$ est la *polarisabilité*. On définit l'angle χ entre la direction d'observation $\boldsymbol{k}'$ et la polarisation du champ incident $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$. On a donc

$$|\boldsymbol{k}' \times (\boldsymbol{k}' \times \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i)| = k_0^2 |\sin\chi| \tag{2.125}$$

et pour la section efficace différentielle on a l'expression :

$$\boxed{\sigma(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}', \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i) = |f(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}', \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i)|^2 = \frac{k_0^4 \alpha_0^2}{16\pi^2} \sin^2\chi} \tag{2.126}$$

qui constitue la formule de Rayleigh. Mis à part l'effet de polarisation, on retrouve le résultat (2.106) de la diffusion d'une onde scalaire par un potentiel sphérique. La dépendance en k_0^4 est bien connue pour être à l'origine du « bleu du ciel ». Dans la limite des grandes longueurs d'onde $\lambda \gg a$ considérée ici, la diffusion est isotrope : la section efficace ne dépend pas de la direction du rayonnement incident, mais seulement de sa polarisation.

Ce calcul peut se généraliser au cas où l'onde incidente est polarisée circulairement ou n'est pas polarisée (lumière naturelle). On obtient alors pour la section efficace différentielle une relation identique à (2.126) en remplacant $\sin^2\chi$ par $\frac{1}{2}(1 + \cos^2\theta)$ où θ est l'angle entre la direction d'incidence $\boldsymbol{k}$ et la direction d'observation $\boldsymbol{k}'$ (voir aussi la relation 2.150).

On n'a pas tenu compte du fait que dans le diélectrique, le champ interne n'est pas égal au champ extérieur. Pour le cas d'une sphère homogène, ceci conduit à remplacer $\boldsymbol{P} = (\epsilon - \epsilon_0)\boldsymbol{E}_i$ par la formule de Clausius-Mosotti [51]

$$\boldsymbol{P} = 3\epsilon_0 \left(\frac{\epsilon - \epsilon_0}{\epsilon + 2\epsilon_0}\right) \boldsymbol{E}_i \tag{2.127}$$

si bien que

$$\sigma(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}', \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i) = k_0^4 a^6 \left(\frac{\epsilon - \epsilon_0}{\epsilon + 2\epsilon_0}\right)^2 \sin^2\chi \tag{2.128}$$

où a est le rayon de la sphère. En intégrant sur toutes les directions émergentes, on obtient la section efficace totale σ. Il est d'usage de définir le facteur d'efficacité Q_r comme le rapport de cette section efficace totale et de la section efficace géométrique définie par πa^2. On obtient ainsi

$$Q_r(x) = \frac{8}{3} x^4 \left(\frac{\epsilon - \epsilon_0}{\epsilon + 2\epsilon_0}\right)^2 \tag{2.129}$$

où le paramètre de taille $x = k_0 a$ est petit. Le facteur d'efficacité est donc petit devant la section efficace géométrique ce qui traduit le fait que la diffusion Rayleigh est peu efficace.

Exercice 2.3 : Diffusion de Rayleigh-Gans

Si la différence de constante diélectrique $\delta\epsilon$ est petite, on peut se trouver dans la situation où la taille de la sphère diélectrique n'est plus négligeable devant la longueur d'onde $k_0 a \simeq 1$ mais où $Ka = k_0 a\sqrt{\delta\epsilon/\epsilon_0} \ll 1$. On n'est donc plus dans la limite de basse énergie qui correspondait à la diffusion Rayleigh, mais on reste dans l'approximation de Born. C'est le régime appelé diffusion de Rayleigh-Gans.
Dans ce cas, en intégrant dans (2.123) l'exponentielle sur le volume de la sphère, on trouve que l'amplitude de diffusion est multipliée par le facteur $s(q)$ (voir aussi la relation 2.105)

$$s(q) = \frac{3}{2}\frac{\sin qa - qa\cos qa}{q^3 a^3} \tag{2.130}$$

où $q = |\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'| = 2k_0 \sin\theta/2$ et où θ est l'angle entre les directions incidente et émergente. On constate que la section efficace devient de plus en plus anisotrope quand la longueur d'onde diminue et devient de l'ordre de la taille de l'objet diffuseur (fig. 2.4). L'amplitude de diffusion a la forme

$$f(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}', \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i) = -\frac{\alpha_0}{4\pi} s(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')\, \boldsymbol{k}' \times (\boldsymbol{k}' \times \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i) \tag{2.131}$$

avec $s(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}') = s(|\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}'|) = s(q)$. Physiquement, cette approximation est valable pour un volume fini, tant que l'onde plane incidente ne subit pas une trop grande distorsion de son amplitude et de sa phase à l'intérieur du diffuseur.

C2.3.2 Diffusion de Mie

Le problème général ($k_0 a$ et $\delta\epsilon$ quelconques) de la diffusion d'une onde électromagnétique plane par un volume diélectrique fini est très complexe. En fait il y a très peu de solutions exactes connues et parmi celles-ci la solution de Mie pour un volume sphérique homogène est la plus importante [49]. Le problème consiste à résoudre les différentes équations d'onde pour les champs incident, diffusé et interne à la sphère et à les raccorder au moyen des conditions de continuité respectives des champs électriques et magnétiques à la surface de la sphère. Le facteur d'efficacité obtenu en divisant la section efficace totale par la section géométrique πa^2, est donné par

$$Q_{Mie}(x, m) = \frac{2}{x^2}\sum_{n=1}^{\infty}(2n+1)\left(|a_n|^2 + |b_n|^2\right) \tag{2.132}$$

où $m = \sqrt{\epsilon/\epsilon_0}$ est le rapport des indices de réfraction à l'intérieur et à l'extérieur de la sphère et où les amplitudes a_n et b_n sont données par

$$a_n = \frac{m\psi_n(mx)\psi_n'(x) - \psi_n(x)\psi_n'(mx)}{m\psi_n(mx)\xi_n'(x) - \xi_n(x)\psi_n'(mx)} \tag{2.133}$$

et

$$b_n = \frac{\psi_n(mx)\psi_n'(x) - m\psi_n(x)\psi_n'(mx)}{\psi_n(mx)\xi_n'(x) - m\xi_n(x)\xi_n'(mx)} \tag{2.134}$$

avec $\psi_n(r) = rj_n(r)$ et $\xi_n(r) = rh_n^{(1)}(r)$, $j_n(r)$ et $h_n^{(1)}$ étant respectivement des fonctions de Bessel et de Hankel sphériques de première espèce [52]. On vérifie que le facteur d'efficacité s'annule pour $m = 1$ ce qui correspond à l'absence de diffuseur. On a représenté sur la figure 2.7 le facteur d'efficacité en fonction du paramètre de taille x pour une valeur donnée de m. On voit ainsi apparaître trois régimes distincts. Pour les petites valeurs de x, $Q_{\text{Mie}} \propto x^4$, on retrouve la diffusion Rayleigh. Pour $x \simeq 1$, c'est-à-dire lorsque la longueur d'onde est de l'ordre de la taille du diffuseur, il apparaît une succession de résonances correspondant à l'annulation des dénominateurs dans les expressions des amplitudes a_n et b_n. Pour ces valeurs, la diffusion est très efficace et la section efficace très supérieure à la section géométrique et bien entendu au régime Rayleigh. À la résonance, le temps passé par l'onde dans le diffuseur est grand et la vitesse de groupe de l'onde s'en trouve d'autant plus réduite. Ce résultat a des conséquences importantes dans le régime de diffusion multiple [53]. Enfin, pour les grandes valeurs de x, c'est-à-dire pour des longueurs d'onde très inférieures à la taille du diffuseur, la section efficace totale tend vers 2 fois la section géométrique donnée par l'optique géométrique. Ce facteur 2 est connu sous le nom de paradoxe d'extinction et il correspond aux effets de diffraction liés à l'existence du bord de la sphère qui ne sont pas pris en compte par l'optique géométrique dans la section efficace géométrique qui représente simplement un terme d'ombre. Contrairement à la diffusion Rayleigh, dans le régime de Mie, la section efficace n'a pas de dépendance simple en fonction de la fréquence. Ceci explique en particulier le fait qu'un ciel nuageux ou en présence de poussières (pollution, sable, etc.) apparaisse gris.

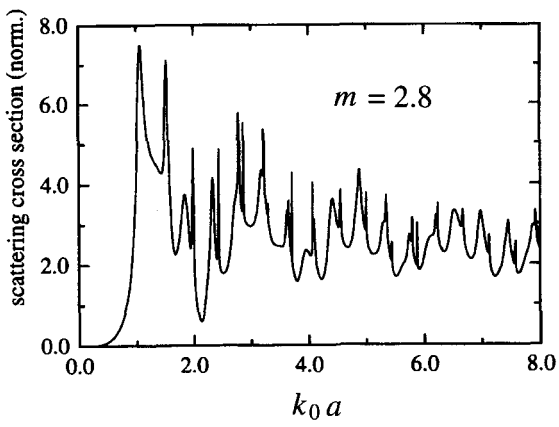


FIG. 2.7 – *Facteur d'efficacité Q_{Mie} défini comme le rapport de la section efficace totale à la section géométrique πa^2 en fonction du paramètre de taille $x = k_0 a$ pour une valeur de l'indice relatif $m = 2{,}8$. On retrouve le régime de Rayleigh à basse fréquence, puis les résonances de Mie et finalement la diffusion géométrique aux grandes valeurs de x (D.S. Wiersma, thèse de doctorat, Amsterdam (1995)).*

Notons enfin que le régime de Mie ne peut pas être décrit à l'aide du modèle gaussien pour lequel les diffuseurs ont une section efficace qui tend vers zéro.

C2.3.3 Diffusion atome-photon à l'approximation dipolaire

On a considéré la diffusion d'une onde électromagnétique par un objet classique. Nous étudions maintenant le cas où le diffuseur est un atome. L'existence de niveaux dégénérés dans le spectre de l'atome conduit à des expressions différentes de la section efficace différentielle qui, d'une part, acquiert une structure tensorielle et qui, d'autre part, peut, à résonance, devenir très grande. Les degrés de liberté internes additionnels provenant de la dégénérescence des niveaux atomiques donnent lieu à une modification des interférences en diffusion multiple et à un temps de cohérence de phase fini (complément C6.5).

Afin d'étudier l'interaction d'un faisceau laser monochromatique de fréquence ω avec un gaz d'atomes, on se ramène au problème de la diffusion d'un photon de vecteur d'onde $\boldsymbol{k}_i$, de longueur d'onde $\lambda = 2\pi/k = 2\pi c/\omega$ et de polarisation $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$ avec un atome que l'on supposera au repos [9]. Dans le domaine du visible, la longueur d'onde λ est beaucoup plus grande que la taille de l'atome (typiquement dans un rapport de quelques 10^2). On peut donc supposer que le champ est constant sur l'atome et décrire l'interaction photon-atome à l'approximation dipolaire. Celle-ci prend la forme simple $-\boldsymbol{d}.\boldsymbol{E}$ où $\boldsymbol{d}$ est l'opérateur moment dipolaire de l'atome et $\boldsymbol{E}$ le champ électrique du rayonnement [54, 55]. Les atomes constituent donc une excellente réalisation de l'approximation des diffuseurs ponctuels. Ceux sont aussi des diffuseurs fortement résonnants. À la résonance, c'est-à-dire lorsque la fréquence ω du laser est ajustée à une fréquence de résonance ω_0 de l'atome, leur section efficace est très grande et de l'ordre de $\lambda^2 \simeq \lambda_0^2$ avec $\lambda_0 = 2\pi/\omega_0$ [10]. De plus, la résonance étant très étroite (de l'ordre de quelques MHz pour une fréquence de résonance de l'ordre de 10^{14} Hz), on peut raisonablement négliger les contributions des niveaux atomiques autres que ceux correspondant à la transition résonnante. On peut donc modéliser l'atome comme un système à deux niveaux distants de $\hbar\omega_0$ ayant chacun un moment angulaire fixé. Finalement, un dernier avantage des atomes pour l'étude de la diffusion multiple est qu'ils sont tous identiques (même fréquence ω_0, même largeur de la résonance) et ils constituent donc un échantillon parfaitement monodisperse.

Le niveau fondamental et le niveau excité de l'atome sont caractérisés respectivement par leur moment angulaire J et J_e. En l'absence de perturbation, ces niveaux sont dégénérés et leur nombre quantique magnétique est tel que

[9] Un gaz d'atomes froids pour lequel on peut négliger l'effet Doppler associé à la vitesse des atomes correspond bien au régime que l'on souhaite étudier.

[10] Rappelons que la section efficace Rayleigh (2.126) est proportionelle à λ^{-4}.

$|m| \leq J$ et $|m_e| \leq J_e$. L'interaction dipolaire induit des transitions entre les états propres de l'hamiltonien non couplé $H_{at} + H_{ray}$ décrivant l'atome et le rayonnement. On distingue deux types de transition suivant que la diffusion d'un photon se fait sans changement d'état interne (diffusion Rayleigh) ou avec un changement d'état interne permis par les règles de selection, c'est-à-dire vers un nombre quantique magnétique différent (diffusion Raman). Il est à noter cependant que dans les deux cas on a toujours à faire à une diffusion élastique. Les états élémentaires possibles du système couplé atome-photon sont de la forme $|Jm, 0\rangle$ (état sans photon) ou $|Jm, \boldsymbol{k}\hat{\varepsilon}\rangle$ (état à un photon d'impulsion $\boldsymbol{k}$ et de polarisation $\hat{\varepsilon}$) [11].

La diffusion d'un photon par un atome est décrite au moyen de l'opérateur de collision $\mathcal{T}$ défini à partir de (2.88). En tronquant au second ordre le développement de perturbation, on obtient $\mathcal{T} = V + V\hat{G}_0 V$ où $V = -\boldsymbol{d}.\boldsymbol{E}$. Le processus de diffusion correspond à l'absorption par l'atome d'un photon incident $(\boldsymbol{k}_i, \hat{\varepsilon}_i)$ et à l'émission d'un photon $(\boldsymbol{k}', \hat{\varepsilon}')$ dans un mode vide du champ [12]. Il est donc donné par le terme d'ordre 2 en V. L'amplitude $\mathcal{T}_{fi}$ associée s'exprime à partir des élements de matrice de V obtenus par un développement en modes dans une boîte de volume Ω :

- Absorption d'un photon $(\boldsymbol{k}_i, \hat{\varepsilon}_i)$

$$\langle J_e m_e, 0|\boldsymbol{d}.\boldsymbol{E}|Jm_i, \boldsymbol{k}_i\hat{\varepsilon}_i\rangle = -i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0\Omega}}e^{i\boldsymbol{k}_i.\boldsymbol{r}}\langle J_e m_e|\boldsymbol{d}.\hat{\varepsilon}_i|Jm_i\rangle \quad . \tag{2.135}$$

- Propagateur libre $\hat{G}_0$ de l'atome

$$\frac{1}{\hbar(\omega - \omega_0)} \quad . \tag{2.136}$$

- Émission d'un photon $(\boldsymbol{k}', \hat{\varepsilon}')$

$$\langle Jm_f, \boldsymbol{k}'\hat{\varepsilon}'|\boldsymbol{d}.\boldsymbol{E}|J_e m_e, 0\rangle = i\sqrt{\frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0\Omega}}e^{-i\boldsymbol{k}'.\boldsymbol{r}}\langle Jm_f|\boldsymbol{d}.\hat{\varepsilon}'^*|J_e m_e\rangle \quad . \tag{2.137}$$

À l'aide de ces éléments de matrice, on construit dans un premier temps un processus de collision élastique non résonnant où l'atome est excité par un photon $|\boldsymbol{k}_i\hat{\varepsilon}_i\rangle$ du laser depuis l'état fondamental $|Jm_i\rangle$ vers un état excité $|J_e m_e\rangle$ et retourne dans l'état $|Jm_f\rangle$. À l'ordre le plus bas, on obtient pour l'élément de matrice de l'opérateur de collision $\mathcal{T}$ pour le processus de diffusion

[11] La polarisation est un vecteur unitaire situé dans le plan perpendiculaire au vecteur $\boldsymbol{k}$. Elle peut être linéaire ou circulaire. On la décrit par le vecteur complexe $\hat{\varepsilon}$.

[12] On considère ici le problème à un seul photon dans le mode laser. Notre description n'est valable que dans la limite d'un petit nombre de photons incidents où l'on peut négliger les effets de saturation de l'intensité réémise ainsi que de pompage optique.

$|\Psi_i\rangle = |Jm_i, \boldsymbol{k}_i\hat{\varepsilon}_i\rangle \to |\Psi_f\rangle = |Jm_f, \boldsymbol{k}'\hat{\varepsilon}'\rangle$, l'expression [55] :

$$\mathcal{T}_{fi} = \frac{\hbar\omega}{2\epsilon_0\Omega}\sum_{m_e}\left[\frac{\langle Jm_f|\boldsymbol{d}.\hat{\varepsilon}'^*|J_em_e\rangle\ \langle J_em_e|\boldsymbol{d}.\hat{\varepsilon}_i|Jm_i\rangle}{\hbar\omega-\hbar\omega_0}\right.$$
$$\left.+\ \frac{\langle Jm_i|\boldsymbol{d}.\hat{\varepsilon}_i|J_em_e\rangle\ \langle J_em_e|\boldsymbol{d}.\hat{\varepsilon}'^*|Jm_f\rangle}{-\hbar\omega-\hbar\omega_0}\right]\ . \tag{2.138}$$

- **La diffusion Rayleigh non résonnante**

Lorsque l'état fondamental n'est pas dégénéré (par exemple si $J = 0$), on retrouve, dans la limite des basses fréquences $\omega \ll \omega_0$, la section efficace (2.126) de la diffusion Rayleigh par un dipôle classique. Pour cela, on introduit le tenseur de polarisabilité statique

$$\alpha_{ij} = \frac{1}{\epsilon_0}\sum_{m_e}\frac{\langle Jm|d_i|Jm_e\rangle\ \langle Jm_e|d_j|Jm\rangle + \langle Jm|d_j|Jm_e\rangle\ \langle Jm_e|d_i|Jm\rangle}{\hbar\omega_0} \tag{2.139}$$

où d_i est la composante du moment dipolaire selon la direction i. On suppose le tenseur isotrope c'est-à-dire tel que $\alpha_{ij} = \alpha_0\delta_{ij}$. On peut alors récrire (2.138) sous la forme

$$\mathcal{T}_{fi} = -\frac{\hbar\omega}{2\Omega}\ \alpha_0\ \hat{\varepsilon}_i.\hat{\varepsilon}'^*\ . \tag{2.140}$$

La probabilité de transition par unité de temps et d'angle solide est donnée par la règle d'or de Fermi,

$$W = \frac{2\pi}{\hbar}|\mathcal{T}_{fi}|^2\rho = \frac{2\pi}{\hbar}\left(\frac{\hbar\omega\alpha_0}{2\Omega}\right)^2\ |\hat{\varepsilon}_i.\hat{\varepsilon}'^*|^2\ \frac{\Omega}{8\pi^3}\frac{\omega^2}{\hbar c^3} \tag{2.141}$$

où

$$\rho = \frac{\Omega}{8\pi^3}\frac{\omega^2}{\hbar c^3} \tag{2.142}$$

est la densité d'états des photons dans un volume Ω et par unité d'angle solide.

La section efficace différentielle $\sigma(\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}', \hat{\varepsilon}_i)$ pour une polarisation finale $\hat{\varepsilon}'$ quelconque est obtenue en divisant W par le flux de photons c/Ω et en sommant sur les polarisations finales $\hat{\varepsilon}'$, soit

$$\sigma(\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}', \hat{\varepsilon}_i) = \frac{\alpha_0^2k^4}{16\pi^2}\sum_{\hat{\varepsilon}'\perp\boldsymbol{k}'}|\hat{\varepsilon}_i.\hat{\varepsilon}'^*|^2 \tag{2.143}$$

où $k = 2\pi/\lambda$. À l'aide de la relation

$$\sum_{\hat{\varepsilon}\perp\hat{\boldsymbol{k}}}|\hat{\varepsilon}.\boldsymbol{X}|^2 = \boldsymbol{X}.\boldsymbol{X}^* - (\hat{\boldsymbol{k}}.\boldsymbol{X})(\hat{\boldsymbol{k}}.\boldsymbol{X}^*) \tag{2.144}$$

valable pour toute grandeur vectorielle $\boldsymbol{X}$ à valeurs complexes, on déduit que

$$\sigma(\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}', \hat{\varepsilon}_i) = \frac{\alpha_0^2k^4}{16\pi^2}\left(1 - \left|\hat{\varepsilon}_i.\hat{\boldsymbol{k}}'\right|^2\right) \tag{2.145}$$

où $\hat{\boldsymbol{k}}' = \boldsymbol{k}'/k$. La section efficace totale σ définie par (2.71) s'écrit

$$\sigma = \frac{\alpha_0^2 k^4}{6\pi} \tag{2.146}$$

de sorte qu'on peut récrire la section efficace différentielle (2.143) sous la forme

$$\boxed{\sigma(\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}', \hat{\varepsilon}_i) = \frac{3\sigma}{8\pi}\left(1 - \left|\hat{\varepsilon}_i.\hat{\boldsymbol{k}}'\right|^2\right)} \tag{2.147}$$

On en déduit le diagramme de rayonnement d'une onde polarisée en diffusion Rayleigh :

- Pour une polarisation incidente $\hat{\varepsilon}_i$ linéaire, on a

$$\sigma(\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}', \hat{\varepsilon}_i) = \frac{3\sigma}{8\pi}\sin^2\chi \tag{2.148}$$

  où χ est l'angle entre $\hat{\varepsilon}_i$ et le vecteur d'onde $\boldsymbol{k}'$ du photon diffusé. On retrouve ainsi l'expression de la section efficace de diffusion (2.126).

- Pour onde polarisée circulairement, on note les deux polarisations

$$\hat{\varepsilon}_{\pm 1} = \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\boldsymbol{e}}_x \pm i\hat{\boldsymbol{e}}_y) \tag{2.149}$$

  dans la base cartésienne directe $(\hat{\boldsymbol{e}}_x, \hat{\boldsymbol{e}}_y, \hat{\boldsymbol{e}}_z)$ avec $\hat{\boldsymbol{e}}_z = \hat{\boldsymbol{k}}_i$ pour l'onde incidente. De plus, on définit l'*hélicité* h du photon comme la projection de son moment angulaire sur l'axe de propagation. Ainsi l'onde polarisée $\hat{\varepsilon}_{+1}$ a une hélicité positive et l'onde polarisée $\hat{\varepsilon}_{-1}$ a une hélicité négative. Dans une réflexion par un miroir, la polarisation reste inchangée mais le vecteur d'onde change de signe $\hat{\boldsymbol{k}}_i \to -\hat{\boldsymbol{k}}_i$. L'hélicité est donc renversée.

  En notant θ l'angle entre $\boldsymbol{k}_i$ et $\boldsymbol{k}'$, on a $\left|\hat{\varepsilon}_i.\hat{\boldsymbol{k}}'\right|^2 = \frac{1}{2}\sin^2\theta$ et on déduit de (2.147), l'expression de la section efficace différentielle :

$$\sigma(\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}', \hat{\varepsilon}_i) = \frac{3\sigma}{16\pi}(1 + \cos^2\theta) \tag{2.150}$$

  On note que cette section efficace ne dépend pas de la polarisation circulaire incidente. On en déduit immédiatement que, pour une lumière incidente non polarisée, la section efficace différentielle est aussi donnée par (2.150).

L'expression (2.147) correspond à une somme sur les polarisations finales. On peut aussi analyser une lumière initialement polarisée, dans un canal donné de polarisation finale. Ainsi la lumière polarisée linéairement peut être analysée dans les canaux de polarisation parallèle ($l \parallel l$) ou perpendiculaire ($l \perp l$).

De même, la lumière polarisée circulairement peut être analysée dans les canaux d'hélicité conservée ($h \parallel h$) ou d'hélicité renversée ($h \perp h$). Il est alors utile de garder l'expression de la section efficace en fonction des polarisations entrante et sortante :

$$\boxed{\sigma(\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}', \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}') = \frac{3\sigma}{8\pi}|\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*|^2} \tag{2.151}$$

avec les contraintes $\boldsymbol{k}_i \perp \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$ et $\boldsymbol{k}' \perp \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'$. Enfin, on note que la section efficace différentielle dépend des polarisations entrante et sortante mais pas des directions incidente $\boldsymbol{k}_i$ et émergente $\boldsymbol{k}'$. Cela s'exprime par le fait que la section efficace de transport (2.74) est égale à la section efficace totale : $\sigma^* = \sigma$. En ce sens, la diffusion Rayleigh est isotrope. Cette conclusion reste vraie pour la diffusion résonnante par des atomes ayant des niveaux d'énergie dégénérés.

Exercice 2.4 : Montrer que pour la diffusion Rayleigh non résonnante, la section efficace différentielle (2.151) dans la direction de rétrodiffusion $\boldsymbol{k}' = -\boldsymbol{k}_i$ est non nulle dans les canaux ($l \parallel l$) et ($h \perp h$) et qu'elle s'annule dans les canaux ($l \perp l$) et ($h \parallel h$).

Pour une polarisation linéaire, le produit scalaire $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*$ est nul dans le canal ($l \perp l$).

Pour une polarisation circulaire, le canal d'hélicité conservée ($h \parallel h$) correspond à une polarisation émergente $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}' = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^*$. En effet, l'hélicité est définie par rapport à la direction de propagation et donc le canal ($h \parallel h$) correspond à un sens de rotation opposé à celui de $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$. De la relation (2.149) on déduit que $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^* = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i = 0$. D'après la relation (2.141), la probabilité de transition est nulle.

Par contre dans le canal d'hélicité renversée ($h \perp h$), on a, en rétrodiffusion, $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}' = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$ et donc $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^* = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^* = 1$.

Exercice 2.5 : Montrer que, pour une onde incidente $\boldsymbol{k}_i$ non polarisée, la lumière diffusée dans la direction $\boldsymbol{k}' \perp \boldsymbol{k}_i$ est polarisée linéairement.

Pour cela, on somme la relation (2.151) sur les polarisations incidentes et on utilise (2.144) pour montrer que l'intensité émise dépend de la polarisation émergente comme $1 - |\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'.\hat{\boldsymbol{k}}_i|^2$. L'intensité est donc nulle si $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}' \parallel \hat{\boldsymbol{k}}_i$, c'est-à-dire si $\boldsymbol{k}' \perp \boldsymbol{k}_i$. Une lumière initialement dépolarisée donne lieu, dans les directions perpendiculaires à la direction d'incidence, à un faisceau complètement polarisé. Ce résultat s'applique à la diffusion de la lumière solaire par l'atmosphère. Il permet aux navigateurs de repérer la direction du soleil même si celui-ci est caché par des nuages. Il est cependant nécessaire d'avoir un coin de ciel bleu afin d'éviter la diffusion de Mie pour laquelle ces conclusions sont incorrectes. Il semblerait que ce fait ait été connu des vikings. C'est la conclusion à laquelle sont arrivés les archéologues après avoir trouvé dans des tombes des morceaux de cordiérite qui est un cristal polariseur naturel.

• La diffusion résonnante

On considère maintenant le cas de la diffusion résonnante d'un photon par un atome et on cherche à determiner l'élément de matrice $\mathcal{T}_{fi}$ de l'opérateur de collision. Une première difficulté provient de ce qu'à la résonance, $\omega = \omega_0$,

l'amplitude (2.138) diverge. En fait, cette divergence est levée car le niveau excité J_e a une durée de vie finie liée à son interaction avec les fluctuations du champ électromagnétique. Un atome dans l'état excité J_e peut donc se désexciter par émission spontanée vers le fondamental J. En resommant toutes les amplitudes de transition correspondant à l'émission et à la réabsorption d'un photon par l'atome dans son état excité du fait de son interaction avec les fluctuations du vide [55], on fait apparaître la largeur Γ du niveau excité qui mesure le taux d'émission spontanée [13]. L'amplitude de diffusion correspondante se déduit de (2.138) et se met sous la forme

$$\mathcal{T}_{fi} = \frac{\omega}{2\epsilon_0\Omega}\frac{1}{\delta + i\Gamma/2}\sum_{m_e}\langle Jm_f|\boldsymbol{d}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^{*}|J_e m_e\rangle\langle J_e m_e|\boldsymbol{d}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i|Jm_i\rangle \tag{2.152}$$

où on a défini $\delta = \omega - \omega_0$. Cette amplitude fait intervenir des éléments de matrice de l'opérateur $\boldsymbol{d}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$. Afin de les évaluer, on se place dans la base définie à partir d'une base cartésienne $(\hat{\boldsymbol{e}}_x, \hat{\boldsymbol{e}}_y, \hat{\boldsymbol{e}}_z)$ par

$$\begin{aligned}\hat{\boldsymbol{e}}_0 &= \hat{\boldsymbol{e}}_z \\ \hat{\boldsymbol{e}}_{\pm 1} &= \mp\frac{1}{\sqrt{2}}(\hat{\boldsymbol{e}}_x \pm i\hat{\boldsymbol{e}}_y)\end{aligned} \tag{2.153}$$

et dans laquelle un vecteur se décompose sous la forme $\boldsymbol{a} = \sum_{q=0,\pm 1}(-1)^q a_q \hat{\boldsymbol{e}}_{-q}$ de sorte que :

$$\boldsymbol{d}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} = \sum_q (-1)^q d_q \varepsilon_{-q} = d_0\varepsilon_0 - d_{+1}\varepsilon_{-1} - d_{-1}\varepsilon_{+1} \quad . \tag{2.154}$$

Puisque seuls les d_q sont des opérateurs, ce sont leurs éléments de matrices qui interviennent dans l'amplitude $\mathcal{T}_{fi}$. Or, en vertu du théorème de Wigner-Eckart, un élément de matrice quelconque d'une composante $T_q^{(k)}$ d'un opérateur tensoriel $T^{(k)}$ d'ordre k évalué pour des états propres du moment angulaire est donné par [56, 57]

$$\langle J_e m_e|T_q^{(k)}|Jm\rangle = \frac{\langle J_e||T^{(k)}||J\rangle}{\sqrt{2J_e+1}}\langle Jkmq|J_e m_e\rangle \tag{2.155}$$

où $\langle J_e||T^{(k)}||J\rangle$ est un coefficient indépendant de m, m_e et q, c'est-à-dire des dépendances angulaires, et qui ne dépend que de J, J_e et de l'amplitude de l'opérateur tensoriel $T^{(k)}$ [14]. Le second terme $\langle Jkmq|J_e m_e\rangle$ est un coefficient de Clebsch-Gordan ou coefficient $3j$. D'une manière générale, ces coefficients sont ceux qui, dans le problème de l'addition de deux moments angulaires, $\boldsymbol{J} = \boldsymbol{j}_1 + \boldsymbol{j}_2$, permettent d'exprimer les vecteurs $|JM\rangle$ en fonction des états

[13] L'interaction avec les fluctuations du vide donne lieu aussi à un déplacement de l'énergie de l'état excité (déplacement de Lamb) que nous incluons dans la définition de ω_0.

[14] Le terme $\sqrt{2J_e+1}$ est purement conventionnel.

$|j_1 j_2 m_1 m_2\rangle$, soit $\langle j_1 j_2 m_1 m_2 | JM\rangle$. Les coefficients de Clebsch-Gordan qui apparaissent dans (2.155) sont réels et ne sont non nuls que pour $m_e - m = q$ et $|J_e - J| \leq k \leq J_e + J$, établissant ainsi les règles de sélection de la transition correspondante. Dans le cas d'une transition dipolaire, l'opérateur $\boldsymbol{d}$ est un vecteur ($k = 1$) et les règles de sélection permettent de définir la nature de la transition, Rayleigh ou Raman, en fonction de la polarisation ε_{-q} du photon. On note $d = \langle J_e \| \boldsymbol{d} \| J\rangle / \sqrt{2J_e + 1}$ et on définit ainsi l'opérateur sans dimension $\tilde{\boldsymbol{d}} = \boldsymbol{d}/d$. Par ailleurs, on peut montrer [47, 55] que la largeur Γ du niveau excité est reliée à d par

$$\hbar\Gamma = \frac{d^2\omega_0^3}{3\pi\epsilon_0 c^3} \quad . \tag{2.156}$$

En utilisant cette relation et le fait que la transition est fermée, c'est-à-dire $\sum_{m_e} |J_e m_e\rangle\langle J_e m_e| = 1$, on peut récrire l'amplitude (2.152) sous la forme

$$\mathcal{T}_{fi} = \frac{3\pi\hbar c^3}{\Omega\omega^2} \frac{\Gamma/2}{\delta + i\Gamma/2} \langle J m_f | (\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*)(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i) | J m_i\rangle \quad . \tag{2.157}$$

Le taux de transition obtenu en ne sélectionnant pas l'état Zeeman final m_f est donné par la règle d'or de Fermi

$$\frac{2\pi}{\hbar} \sum_{\hat{\boldsymbol{k}}, m_f} |\mathcal{T}_{fi}|^2 \quad . \tag{2.158}$$

Pour avoir la section efficace différentielle, il faut diviser par le flux incident de photons c/Ω et, en utilisant (2.141) et (2.152), on obtient

$$\frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{k}}} = \frac{\Omega}{c}\frac{2\pi}{\hbar}\rho(\omega)\left(\frac{3\pi\hbar c^3}{\Omega\omega^2}\right)^2 \frac{\Gamma^2/4}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \langle J m_i | (\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^*)(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}')(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*)(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i) | J m_i\rangle \cdot \tag{2.159}$$

L'expression (2.142) de la densité d'états des photons par unité d'angle solide permet finalement d'écrire

$$\boxed{\frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{k}}} = \frac{9}{16\pi^2}\lambda^2 \frac{\Gamma^2/4}{\delta^2 + \Gamma^2/4} \langle J m_i | (\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^*)(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}')(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*)(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i) | J m_i\rangle} \tag{2.160}$$

La section efficace totale σ est obtenue en intégrant la section efficace différentielle sur l'angle solide. En moyennant sur la polarisation des photons diffusés, on a

$$\sigma = \int d\Omega_{\boldsymbol{k}} \sum_{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \perp \hat{\boldsymbol{k}}} \frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{k}}} \quad . \tag{2.161}$$

L'intégrale et la somme ne portent que sur $(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}')(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*)$ et donnent, en utilisant (2.144),

$$\int d\Omega_{\boldsymbol{k}} \sum_{\hat{\boldsymbol{\varepsilon}} \perp \boldsymbol{k}} (\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}})(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}^*) = \int d\Omega_{\boldsymbol{k}} \left(\tilde{\boldsymbol{d}}.\tilde{\boldsymbol{d}} - (\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{k}})(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{k}})\right) = \frac{8\pi}{3}\tilde{\boldsymbol{d}}.\tilde{\boldsymbol{d}} \quad . \tag{2.162}$$

L'opérateur $\tilde{\boldsymbol{d}}.\tilde{\boldsymbol{d}} = \tilde{d}_0\tilde{d}_0 - \tilde{d}_{+1}\tilde{d}_{-1} - \tilde{d}_{-1}\tilde{d}_{+1}$ est égal à l'identité. Pour s'en convaincre, considérons son action sur un état $|J_e m_e\rangle$ [15],

$$\begin{aligned}\tilde{\boldsymbol{d}}.\tilde{\boldsymbol{d}}|J_e m_e\rangle = \Big[&\langle J_e m_e|J1m_e0\rangle^2 + \langle J_e m_e|J1(m_e-1)+1\rangle^2 \\ &+ \langle J_e m_e|J1(m_e+1)-1\rangle^2\Big]|J_e m_e\rangle = |J_e m_e\rangle \qquad (2.163)\end{aligned}$$

du fait de la normalisation de l'état $|J_e m_e\rangle$. On obtient donc [16]

$$\boxed{\sigma = \frac{3}{2\pi}\lambda^2 \frac{\Gamma^2/4}{\delta^2+\Gamma^2/4}\langle Jm_i|(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^*)(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i)|Jm_i\rangle} \qquad (2.164)$$

De manière équivalente on pourrait obtenir ce résultat à partir du théorème optique (2.81). Pour cela, il faut remarquer que l'amplitude $\mathcal{T}_{fi}$ obtenue à partir de la règle d'or de Fermi, est proportionnelle à l'amplitude de diffusion $f(\boldsymbol{k}_i m_i, \boldsymbol{k}' m_f)$. Le coefficient de proportionnalité se déduit de l'expression (2.159) pour la section efficace différentielle et il est donné par $\sqrt{(\Omega/c)(2\pi/\hbar)\rho(\omega)} = \Omega\omega/2\pi\hbar c^2$. Ainsi, moyennant la définition

$$f(\boldsymbol{k}_i m_i, \boldsymbol{k}' m_f) = -\frac{\Omega\omega}{2\pi\hbar c^2}\mathcal{T}_{fi} \qquad (2.165)$$

on obtient la section efficace totale (2.164) à l'aide du théorème optique (2.81).

Afin d'achever le calcul de la section efficace, on moyenne sur la distribution statistique des états Zeeman internes $|Jm_i\rangle$ que nous supposons équiprobables, c'est-à-dire décrits par une matrice densité scalaire. En notant $\langle\cdots\rangle_{int}$ cette moyenne, on a

$$\begin{aligned}\langle(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^*)(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i)\rangle_{int} &= \frac{1}{2J+1}\sum_{m_i,m_e}\langle Jm_i|\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^*|J_e m_e\rangle\langle J_e m_e|\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i|Jm_i\rangle \\ &= \frac{1}{2J+1}\sum_{m_i,m_e}|\langle Jm_i|\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i|J_e m_e\rangle|^2 = \frac{1}{3}\frac{2J_e+1}{2J+1} \qquad (2.166)\end{aligned}$$

où, pour écrire la dernière égalité, on a utilisé l'identité [57]

$$\sum_{mm_e}|\langle Jm|f_q^{(k)}|J_e m_e\rangle|^2 = \frac{1}{2k+1}|\langle J||f^{(k)}||J_e\rangle|^2 \quad . \qquad (2.167)$$

[15] Cet opérateur ne peut pas agir sur les états $|Jm\rangle$ puisqu'il est intercalé entre les opérateurs $\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$ qui font passer l'atome du fondamental dans son état excité.

[16] Avant de prendre la moyenne sur la distribution des états internes, il y a une direction privilégiée donnée par le dipole atomique. La section efficace totale dépend alors de la projection de la polarisation incidente $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$ le long de cette direction.

Pour un opérateur vectoriel ($k = 1$) et compte tenu de la définition de $\tilde{\boldsymbol{d}}$, on a $\langle J_e || \tilde{\boldsymbol{d}} || J \rangle = \sqrt{2J_e + 1}$. On en déduit finalement pour la section efficace totale moyenne :

$$\boxed{\langle \sigma \rangle = A_{JJ_e} \frac{3\lambda^2}{2\pi} \frac{\Gamma^2/4}{\delta^2 + \Gamma^2/4}} \tag{2.168}$$

où $A_{JJ_e} = \frac{1}{3}\frac{2J_e+1}{2J+1}$. On voit sur cette expression que *la section efficace totale ne dépend pas de la structure interne des niveaux atomiques*, c'est-à-dire de leur dégénerescence (mis à part le facteur constant A_{JJ_e}). Les quantités physiques qui s'en déduisent, comme l'indice optique ou le libre parcours moyen élastique, ne dépendent pas non plus de la structure interne des niveaux atomiques.

Par contre, la section efficace différentielle (2.160) a une structure plus riche. En moyennant (2.160) sur la distribution statistique des états Zeeman $|Jm_i\rangle$, on obtient, en utilisant (2.168) :

$$\left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{k}}} \right\rangle_{int} = \frac{3\langle \sigma \rangle}{8\pi A_{JJ_e}} \langle (\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^*)(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}')(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*)(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i) \rangle_{int} \tag{2.169}$$

qui est un tenseur d'ordre 4 qui dépend clairement de la structure interne des niveaux atomiques. Afin de calculer la moyenne $\langle (\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^*)(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}')(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*)(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i) \rangle_{int}$ à l'aide d'une matrice densité scalaire, on doit d'abord décomposer ce tenseur en composantes irréductibles [47, 58, 59]. Notons simplement ici le résultat en essayant de le justifier. La trace doit être invariante par rotation et ne doit donc dépendre que des produits scalaires entre les vecteurs polarisation $(\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}', \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^*, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*)$. Plus précisément, on peut écrire la section efficace différentielle sous la forme

$$\left\langle \frac{d\sigma}{d\Omega_{\boldsymbol{k}}} \right\rangle_{int} = \frac{3\langle \sigma \rangle}{8\pi A_{JJ_e}} \left(w_1 |\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i|^2 + w_2 |\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i|^2 + w_3 \right) \quad . \tag{2.170}$$

La nature du photon diffusé dépend non seulement de l'état de polarisation du photon incident, mais aussi de l'état Zeeman interne de l'atome. Nous reviendrons plus en détail dans le complément C6.5 sur ce rôle de la structure interne sur les effets d'interférence en diffusion multiple.

Notons finalement que l'on retrouve la section efficace différentielle de Rayleigh (2.151) en considérant un fondamental non dégénéré, soit $J = 0, J_e = 1$, auquel cas on a $(w_1, w_2, w_3) = (1, 0, 0)$.

Chapitre 3

Théorie de perturbation

Dans ce chapitre on prend $\hbar = 1$ et on désigne la moyenne sur le désordre par $\overline{\cdots}$.

Dans ce chapitre et le suivant, on se propose de résoudre les équations d'onde (Schrödinger ou Helmholtz) en présence du potentiel de désordre gaussien introduit au chapitre 2. Pour cela, on présente une méthode permettant de décrire l'évolution temporelle d'un paquet d'ondes dans le milieu aléatoire. Cette méthode utilise le formalisme des fonctions de Green [60–63] dont l'intérêt ici est de permettre l'écriture d'un développement itératif en puissances du potentiel, appelé développement de diffusion multiple. Dans la limite de faible désordre, que l'on précisera, ce développement s'exprime sous la forme d'une suite de *processus indépendants*, dits *évènements de collision*, séparés par un temps caractéristique τ_e appelé temps de collision élastique moyen. On lui associe une longueur caractéristique, le *libre parcours moyen*, défini par $l_e = v\tau_e$ où v est la vitesse de groupe de l'onde [1]. Afin d'évaluer le temps de collision τ_e dans le cas de l'équation de Schrödinger, on utilise une représentation d'ondes planes qui correspond aux états propres $|\boldsymbol{k}\rangle$ de l'hamiltonien libre. On interprète alors τ_e comme le temps de vie moyen des états $|\boldsymbol{k}\rangle$. Pour l'estimer en présence du potentiel V à l'ordre le plus bas en perturbation, on peut utiliser la règle d'or de Fermi. Ainsi le temps de vie $\tau_{\boldsymbol{k}}$ d'un état $|\boldsymbol{k}\rangle$ est donné par

$$\frac{1}{\tau_{\boldsymbol{k}}} = 2\pi \sum_{\boldsymbol{k}'} |\langle \boldsymbol{k}|V|\boldsymbol{k}'\rangle|^2 \delta(\epsilon_{\boldsymbol{k}} - \epsilon_{\boldsymbol{k}'}) \quad . \tag{3.1}$$

En prenant pour V le potentiel gaussien défini par (2.30) et, en moyennant sur le désordre, on obtient $\Omega\overline{|\langle \boldsymbol{k}|V|\boldsymbol{k}'\rangle|^2} = B(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')$ où $B(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')$ est la

[1] Pour des électrons dégénérés dont on étudiera le comportement au niveau de Fermi, v est la vitesse de Fermi v_F. Pour des ondes, v est la vitesse de groupe que l'on notera c.

transformée de Fourier de la fonction de corrélation $\overline{V(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r}')}$. On en déduit le temps de vie moyen τ_e d'un état d'énergie ϵ [2] :

$$\boxed{\frac{1}{\tau_e} = 2\pi\rho_0\gamma_e} \tag{3.2}$$

où ρ_0 est la densité d'états par unité de volume à l'énergie considérée et où le paramètre γ_e qui caractérise le désordre est égal à

$$\boxed{\gamma_e = \langle B(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\rangle} \tag{3.3}$$

$\langle\cdots\rangle$ désigne la moyenne angulaire de $B(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$ avec la contrainte $\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \epsilon_{\boldsymbol{k}'}$. Pour le bruit blanc défini par (2.31), on a $\gamma_e = B$. En général, on ne connait pas les détails microscopiques du désordre qui est décrit par le paramètre phénoménologique γ_e. Toutefois, dans le cadre du modèle d'Edwards pour une densité n_i de diffuseurs de section efficace σ, la relation (2.102) permet de récrire le libre parcours moyen élastique l_e en fonction de la section efficace des diffuseurs [3] :

$$\frac{1}{l_e} = n_i\sigma \quad , \tag{3.4}$$

relation qui est aussi valable pour le cas de l'équation de Helmholtz (2.9) [4]. Dans certains cas, la section efficace peut se calculer au moyen d'un modèle microscopique. Par exemple, pour décrire la diffusion multiple de la lumière par des suspensions, on prend pour σ la section efficace de Rayleigh étudiée dans le complément C2.3. Le modèle gaussien apparaît donc comme un modèle *effectif* qui dépend du paramètre γ_e lequel peut être relié à des paramètres physiques qu'il est éventuellement possible de contrôler expérimentalement. On montrera dans le complément C4.3 que lorsque le potentiel a une portée finie, il apparaît un autre temps caractéristique appelé *temps de transport* et noté τ^*.

---

[2]On montre d'abord que

$$\frac{1}{\tau_e} = \frac{2\pi}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}'} B(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\delta(\epsilon_k - \epsilon_{k'})$$

et on obtient la relation (3.2) en passant au continuum.

[3]On utilise pour cela l'expression (3.40) de la densité d'états ρ_0.

[4]Pour l'équation de Helmholtz, on montre plus loin (3.77) que $1/l_e = \gamma_e/(4\pi)$. On obtient alors la relation (3.4) en utilisant (2.100).

Exercice 3.1 : En utilisant la règle d'or de Fermi, montrer que le temps de vie élastique τ_e pour le modèle d'Anderson (section 2.2.3) avec une distribution de potentiel rectangulaire se met sous la forme $\frac{1}{\tau_e} \propto W^2/t$.

3.1 Fonctions de Green

La règle d'or de Fermi ne permet de décrire l'évolution temporelle du système que pour des temps inférieurs à τ_e. Afin d'obtenir l'évolution temporelle du système au-delà de τ_e, on introduit le formalisme des fonctions de Green et de l'opérateur résolvante. On ne cherchera pas ici à décrire ce formalisme dans toute sa généralité, mais on retiendra un certain nombre de notions indispensables [60,61]. On considérera séparément le cas de l'équation de Schrödinger, qui est du premier ordre en temps, et celui de l'équation de Helmholtz qui est du second ordre.

3.1.1 Fonction de Green de l'équation de Schrödinger

On considère l'équation de Schrödinger associée à l'hamiltonien (2.1) :

$$i\frac{\partial \psi}{\partial t} = \mathcal{H}\psi = (\mathcal{H}_0 + V)\psi \tag{3.5}$$

où $\mathcal{H}_0 = -\frac{1}{2m}\Delta$ et V est le potentiel de désordre. On décrit ici des électrons libres supposés sans spin. L'évolution temporelle d'un état $|\psi(t)\rangle$ initialement en $|\psi_0(t=0)\rangle$ est décrite au moyen de l'opérateur unitaire d'évolution $U(t)$:

$$|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi_0(0)\rangle = e^{-i\mathcal{H}t}|\psi_0(0)\rangle \quad . \tag{3.6}$$

En représentation spatiale,

$$\psi_f(\boldsymbol{r},t) = \langle \boldsymbol{r}|\psi_f(t)\rangle = \int d\boldsymbol{r}_i \langle \boldsymbol{r}|e^{-i\mathcal{H}t}|\boldsymbol{r}_i\rangle \psi_0(\boldsymbol{r}_i,0) \quad . \tag{3.7}$$

Avec la convention de la figure 3.1, on définit la fonction de Green par [5] :

$$G(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r},t) = \langle \boldsymbol{r}|e^{-i\mathcal{H}t}|\boldsymbol{r}_i\rangle = \sum_n \phi_n^*(\boldsymbol{r}_i)\phi_n(\boldsymbol{r})e^{-i\epsilon_n t} \tag{3.8}$$

où ϵ_n et ϕ_n sont respectivement les énergies propres et les états propres normés de $\mathcal{H}$. Ainsi définie, la fonction $G(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r},t)$ décrit l'évolution d'un état $|\boldsymbol{r}_i\rangle$ au

[5] Ainsi définie, $G^R(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r})$ se lit de gauche à droite (fig. 3.1). Cette convention n'est pas la plus habituelle. C'est cependant celle que nous adopterons dans tout cet ouvrage. Elle est mieux adaptée à la description des expériences de diffusion ou de transport, où la source est en général représentée à gauche et le détecteur à droite.

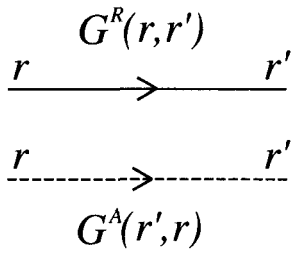


FIG. 3.1 – *Convention choisie dans cet ouvrage pour la représentation des fonctions de Green. On a* $G^A(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}) = G^R(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')^*$.

temps $t = 0$ vers l'état $|\boldsymbol{r}\rangle$ à un temps t dont le signe n'est pas précisé. Si on veut décrire l'évolution d'un état créé au temps $t = 0$ vers les temps positifs ou négatifs, on est amené à définir les opérateurs

$$\begin{aligned} \hat{G}^R(t) &= -i\theta(t)e^{-i\mathcal{H}t} \\ \hat{G}^A(t) &= i\theta(-t)e^{-i\mathcal{H}t} \end{aligned} \tag{3.9}$$

dont les représentations spatiales correspondent aux fonctions de Green retardée G^R et avancée G^A

$$\begin{aligned} G^R(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r},t) &= -i\theta(t)\ \langle\boldsymbol{r}|e^{-i\mathcal{H}t}|\boldsymbol{r}_i\rangle = -i\theta(t)\ \sum_n \phi_n^*(\boldsymbol{r}_i)\phi_n(\boldsymbol{r})e^{-i\epsilon_n t} \\ G^A(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r},t) &= i\theta(-t)\ \langle\boldsymbol{r}|e^{-i\mathcal{H}t}|\boldsymbol{r}_i\rangle = i\theta(-t)\ \sum_n \phi_n^*(\boldsymbol{r}_i)\phi_n(\boldsymbol{r})e^{-i\epsilon_n t}\ . \end{aligned} \tag{3.10}$$

Les transformées de Fourier

$$G^{R,A}(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r},\epsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\epsilon t} G^{R,A}(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r},t) \tag{3.11}$$

s'écrivent :

$$\boxed{G^{R,A}(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r},\epsilon) = \sum_n \frac{\phi_n^*(\boldsymbol{r}_i)\phi_n(\boldsymbol{r})}{\epsilon - \epsilon_n \pm i0}} \tag{3.12}$$

La convergence des intégrales (3.11) aux temps longs nécessite l'introduction d'une partie imaginaire à l'énergie $\epsilon \pm i0$, le signe $\pm$ correspondant respectivement aux parties retardée et avancée. La relation (3.12) permet d'introduire formellement les opérateurs

$$\hat{G}^{R,A}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \mathcal{H} \pm i0}\ , \tag{3.13}$$

transformés de Fourier de $\hat{G}^{R,A}(t)$. On définit de même les opérateurs de Green libres associés à l'hamiltonien $\mathcal{H}_0$

$$\hat{G}_0^{R,A}(\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \mathcal{H}_0 \pm i0}\ . \tag{3.14}$$

L'équation de Schrödinger (3.5) s'exprime alors sous la forme d'une relation entre les opérateurs $\hat{G}$ et $\hat{G}_0$. En multipliant par $\hat{G}_0$ la relation (3.13) récrite sous la forme

$$(\epsilon - \mathcal{H})\hat{G} = \mathbb{1} \tag{3.15}$$

et en utilisant la relation (3.14) sous la forme $(\epsilon - \mathcal{H}_0)\hat{G}_0 = 1$, on obtient

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 V \hat{G} \tag{3.16}$$

qui se prête au développement itératif que l'on considèrera dans la section 3.2.

• Quelques propriétés des fonctions de Green

On a introduit la fonction de Green à partir de l'opérateur d'évolution. Celle-ci mesure aussi la réponse impulsionnelle associée à l'équation de Schrödinger (3.5). En effet, en représentation spatiale la relation (3.13) s'écrit

$$(\epsilon - \mathcal{H} \pm i0)\, G^{R,A}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \epsilon) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i) \tag{3.17}$$

et la relation (3.16) entre les opérateurs $\hat{G}$ et $\hat{G}_0$ devient

$$G(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \epsilon) = G_0(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \epsilon) + \int G(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}', \epsilon) V(\boldsymbol{r}') G_0(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}, \epsilon) d\boldsymbol{r}' \quad . \tag{3.18}$$

Par ailleurs, la fonction de Green vérifie les propriétés :

$$G^A(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_i, \epsilon) = G^R(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \epsilon)^* \tag{3.19}$$

et

$$G^A(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_i, -t) = G^R(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, t)^* \tag{3.20}$$

où * dénote le complexe conjugué. On définit aussi la partie imaginaire de $\hat{G}^R$ par

$$\mathrm{Im}\hat{G}^R = \frac{\hat{G}^R - \hat{G}^A}{2i} \quad . \tag{3.21}$$

Remarque importante

On notera

$$\mathrm{Im}G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \langle \boldsymbol{r}' | \mathrm{Im}\hat{G}^R | \boldsymbol{r} \rangle = \frac{G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') - G^A(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')}{2i} \tag{3.22}$$

et non pas

$$\mathrm{Im}G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \frac{G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') - G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')^*}{2i} = \frac{G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') - G^A(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r})}{2i} \quad . \tag{3.23}$$

• Fonction de Green et densité d'états

La fonction de Green contient toutes les informations sur les solutions de l'équation de Schrödinger. En particulier, elle est reliée à la densité d'états $\nu(\epsilon)$ définie par

$$\nu(\epsilon) = \sum_n \delta(\epsilon - \epsilon_n) \quad . \tag{3.24}$$

On utilisera aussi la densité d'états par unité de volume notée $\rho(\epsilon) = \nu(\epsilon)/\Omega$. On définit aussi :

- la densité d'états locale au point $\boldsymbol{r}$:

$$\rho_\epsilon(\boldsymbol{r}) = \rho(\boldsymbol{r}, \epsilon) = \sum_n |\phi_n(\boldsymbol{r})|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_n) \tag{3.25}$$

- la densité d'états non locale :

$$\rho_\epsilon(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \rho(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \epsilon) = \sum_n \phi_n^*(\boldsymbol{r}) \phi_n(\boldsymbol{r}') \delta(\epsilon - \epsilon_n) \tag{3.26}$$

À partir de l'équation (3.12), la relation :

$$\frac{1}{x + i0} = pp\frac{1}{x} - i\pi\delta(x) \tag{3.27}$$

permet d'écrire

$$\begin{aligned} \rho_\epsilon(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') &= -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \epsilon) = -\frac{1}{\pi}\langle \boldsymbol{r}'|\mathrm{Im}\hat{G}^R|\boldsymbol{r}\rangle \\ &= \frac{i}{2\pi}\left[G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \epsilon) - G^A(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \epsilon)\right] \end{aligned} \tag{3.28}$$

ainsi que

$$\rho_\epsilon(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{\pi}\mathrm{Im}G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, \epsilon) \tag{3.29}$$

et d'obtenir la densité d'états par unité de volume sous la forme :

$$\boxed{\rho(\epsilon) = \frac{\nu(\epsilon)}{\Omega} = -\frac{1}{\pi\Omega}\mathrm{Im}\int d\boldsymbol{r} G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, \epsilon)} \tag{3.30}$$

Ainsi $\rho_\epsilon(\boldsymbol{r}) = \rho_\epsilon(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})$ et $\rho(\epsilon)$ est la moyenne spatiale de $\rho_\epsilon(\boldsymbol{r})$.

Par ailleurs, on considère la fonction de Green en *représentation impulsion*

$$G^{R,A}(\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}, \epsilon) = \langle \boldsymbol{k}|\hat{G}^{R,A}(\epsilon)|\boldsymbol{k}_i\rangle \quad . \tag{3.31}$$

L'invariance par translation, lorsqu'elle existe, implique que $G(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \epsilon) = G(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i, \epsilon)$. Dans ce cas, $G^{R,A}(\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}, \epsilon) = G^{R,A}(\boldsymbol{k}, \epsilon)\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}_i}$, avec

$$G^{R,A}(\boldsymbol{k}, \epsilon) = \int G^{R,A}(\boldsymbol{r}, \epsilon) e^{-i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} d\boldsymbol{r}$$

et la densité d'états par unité de volume s'écrit :

$$\rho(\epsilon) = -\frac{1}{\pi\Omega} \sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{Im} G^R(\boldsymbol{k}, \epsilon) \quad . \tag{3.32}$$

On voit que cette expression est analogue à (3.30). La densité d'états ne dépend pas de la représentation considérée. On peut écrire plus généralement

$$\boxed{\nu = -\frac{1}{\pi} \mathrm{Im} \mathrm{Tr} \hat{G}^R} \tag{3.33}$$

- **Fonction de Green libre**

En l'absence de désordre, l'hamiltonien $\mathcal{H}_0$ est diagonal dans la base des ondes planes et la fonction de Green s'écrit :

$$G_0^{R,A}(\boldsymbol{k}, \epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \epsilon(\boldsymbol{k}) \pm i0} \tag{3.34}$$

où $\epsilon(\boldsymbol{k}) = k^2/2m$. La fonction de Green en représentation spatiale est la transformée de Fourier de (3.34). À trois dimensions et pour un milieu infini, on a :

$$G_0^{R,A}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \epsilon) = \frac{2m}{(2\pi)^3} \int d\boldsymbol{k}' e^{i\boldsymbol{k}'.(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)} \frac{1}{k^2 - k'^2 \pm i0} \quad . \tag{3.35}$$

L'intégrale angulaire donne, en posant $R = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i|$,

$$G_0^{R,A}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \epsilon) = \frac{2m}{(2\pi)^2} \int_0^\infty k'^2 dk' \frac{1}{ik'R} \frac{e^{ik'R} - e^{-ik'R}}{k^2 - k'^2 \pm i0} \quad . \tag{3.36}$$

L'intégrale sur k' se récrit

$$G_0^{R,A}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \epsilon) = -\frac{m}{2i\pi^2 R} \int_{-\infty}^{\infty} dk' \frac{k' e^{ik'R}}{(k' - k \mp i0)(k' + k \pm i0)} \tag{3.37}$$

et se calcule par la méthode des résidus pour donner finalement

$$G_0^{R,A}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \epsilon) = -\frac{m}{2\pi} \frac{e^{\pm ikR}}{R} \tag{3.38}$$

avec $k = \sqrt{2m\epsilon}$. On peut aussi établir directement cette expression en notant que la fonction de Green libre est solution de l'équation différentielle

$$\left(\epsilon + \frac{1}{2m}\Delta_{\boldsymbol{r}} \pm i0\right) G_0^{R,A}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \epsilon) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i) \quad . \tag{3.39}$$

On vérifie bien que, à trois dimensions, la densité d'états (sans spin) donnée par la relation (3.30) est égale à

$$\boxed{\rho_0(\epsilon) = \frac{mk}{2\pi^2}} \tag{3.40}$$

de sorte que la fonction de Green est de la forme

$$\boxed{G_0^{R,A}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \epsilon) = -\pi\rho_0 \frac{e^{\pm ikR}}{kR}} \tag{3.41}$$

Exercice 3.2 : Pour une relation de dispersion $\epsilon(\boldsymbol{k}) = \epsilon(|\boldsymbol{k}|)$, vérifier que la fonction de Green $G_0^{R,A}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \epsilon)$ ne dépend que de $R = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i|$ et qu'en dimension $d = 3$, elle s'écrit sous la forme (3.41).

Exercice 3.3 : Montrer qu'en dimension $d = 1$, la fonction de Green s'écrit :

$$G_0^{R,A}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \epsilon) = \mp i\frac{m}{k}e^{\pm ikR} = \mp i\pi\rho_0 e^{\pm ikR} \tag{3.42}$$

où $k = |\boldsymbol{k}|$.

Exercice 3.4 : Montrer qu'en dimension $d = 2$, la fonction de Green s'écrit :

$$G_0^{R,A}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \epsilon) = -i\frac{m}{2}H_0^{(1)}(\pm kR) \tag{3.43}$$

où $k = |\boldsymbol{k}|$ et $H_0^{(1)}(\pm x) = \pm J_0(x) + iY_0(x)$. Les fonctions $J_0(x)$, $Y_0(x)$ et $H_0^{(1)}(x)$ sont respectivement des fonctions de Bessel, de Neumann et de Hankel (appelées encore fonctions de Bessel de première, deuxième et troisième espèce) [64]. Retrouver la densité d'états à deux dimensions.

Exercice 3.5 : Montrer que, en dimension d quelconque, la densité d'états $\rho_0(\epsilon)$ pour une dispersion quadratique $\epsilon = k^2/2m$ est

$$\rho_0(\epsilon) = \frac{dA_d}{(2\pi)^d} mk^{d-2} \tag{3.44}$$

où $A_d = \frac{2}{d}\frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2)}$ est le volume de la sphère unité. En particulier

$$\rho_0^{1d}(\epsilon) = \frac{m}{\pi k} \qquad \rho_0^{2d}(\epsilon) = \frac{m}{2\pi} \quad . \tag{3.45}$$

3.1.2 Fonction de Green de l'équation de Helmholtz

La forme de la fonction de Green dépend de l'équation différentielle à laquelle elle est associée. Comme on l'a fait dans (3.17) pour l'équation de Schrödinger, on définit la fonction de Green $G(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, k_0)$ associée à l'équation de Helmholtz (2.9) par

$$\left[\Delta_{\boldsymbol{r}} + k_0^2(1+\mu(\boldsymbol{r}))\right] G(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, k_0) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i) \quad . \tag{3.46}$$

La fonction de Green libre $G_0(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, k_0)$ est donc solution de l'équation différentielle

$$\left(\Delta_{\boldsymbol{r}} + k_0^2\right) G_0(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, k_0) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i) \tag{3.47}$$

et elle s'obtient de manière similaire à (3.38) :

$$\boxed{G_0^{R,A}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, k_0) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik_0 R}}{R}} \tag{3.48}$$

à trois dimensions, et par

$$G_0^{R,A}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, k_0) = \mp\frac{i}{2k_0}e^{\pm ik_0 R} \tag{3.49}$$

à une dimension. Notons finalement que sa transformée de Fourier est égale à

$$G_0^{R,A}(\boldsymbol{k}, k_0) = \frac{1}{k_0^2 - k^2 \pm i0} \quad . \tag{3.50}$$

Comme pour (3.30), on peut relier la densité de modes propres de l'équation de Helmholtz à la fonction de Green. La relation de dispersion étant linéaire, $\omega = kc$, la densité de modes est donnée par

$$\nu(\omega) = \sum_{\boldsymbol{k}} \delta(\omega - k_0 c) = \frac{1}{c}\sum_{\boldsymbol{k}} \delta(k - k_0) \tag{3.51}$$

où $k = |\boldsymbol{k}|$. Par ailleurs, la partie imaginaire de la fonction de Green (3.50) est égale à

$$\mathrm{Im}G_0^R(\boldsymbol{k}, k_0) = -\frac{\pi}{2k_0}\left[\delta(k + k_0) + \delta(k - k_0)\right] \tag{3.52}$$

de sorte que

$$\rho_0(\omega) = -\frac{2k_0}{\pi c\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \mathrm{Im}G_0^R(\boldsymbol{k}, k_0) \quad . \tag{3.53}$$

En présence de désordre,

$$\rho(\omega) = -\frac{2k_0}{\pi c\Omega}\int d\boldsymbol{r}\mathrm{Im}G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, k_0) \tag{3.54}$$

ou encore

$$\boxed{\nu = -\frac{2k_0}{\pi c}\mathrm{Im}\mathrm{Tr}\hat{G}^R} \tag{3.55}$$

qu'il est intéressant de comparer à la relation (3.33) pour l'équation de Schrödinger. Le facteur multiplicatif supplémentaire provient du fait que l'équation de Schrödinger est du premier ordre en temps alors que l'équation de Helmholtz est du second ordre.

Exercice 3.6 : Montrer que, pour l'équation de Helmholtz libre, la densité de modes à trois dimensions s'écrit

$$\rho_0(\omega) = \frac{\omega^2}{2\pi^2 c^3} \quad . \tag{3.56}$$

Le formalisme des fonctions de Green donne un cadre technique approprié à l'étude systématique des solutions de l'équation de Schrödinger. Il devient naturel et même indispensable pour l'étude de la propagation des ondes électromagnétiques (solutions dites radiatives) à partir d'une distribution de sources $j(\boldsymbol{r})$. Cette distribution peut-être une source ponctuelle décrite par une fonction δ, ce qui correspond à l'équation (3.46). Si l'onde est émise à partir d'une distribution $j(\boldsymbol{r})$ de sources du champ électrique (qui décrit par exemple la forme du faisceau laser incident), l'amplitude du champ électrique $\psi(\boldsymbol{r})$ n'est plus solution de (2.9) mais de

$$\boxed{\Delta\psi(\boldsymbol{r}) + k_0^2(1+\mu(\boldsymbol{r}))\psi(\boldsymbol{r}) = j(\boldsymbol{r})} \tag{3.57}$$

Il est possible de récrire cette équation différentielle comme une équation intégrale

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r}_i\, j(\boldsymbol{r}_i) G(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, k_0) \tag{3.58}$$

où la fonction de Green $G(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, k_0)$ est solution de l'équation différentielle (3.46). En utilisant la fonction de Green libre $G_0(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, k_0)$ solution de (3.47), on obtient une autre équation intégrale analogue à (3.18)

$$G(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, k_0) = G_0(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, k_0) - k_0^2 \int d\boldsymbol{r}' G(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}', k_0)\mu(\boldsymbol{r}')G_0(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}, k_0) \tag{3.59}$$

de telle sorte que les solutions de (3.57) s'écrivent sous une forme permettant de séparer la contribution de la source de celle du désordre

$$\psi(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r}_i j(\boldsymbol{r}_i) G_0(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, k_0) - k_0^2 \int d\boldsymbol{r}' \psi(\boldsymbol{r}')\mu(\boldsymbol{r}')G_0(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}, k_0) \tag{3.60}$$

cette relation généralise (3.59) au cas d'une distribution de sources quelconque.

3.2 Développement de diffusion multiple

3.2.1 Équation de Dyson

On cherche maintenant à établir un développement perturbatif à partir de la relation (3.16) entre $\hat{G}$ et $\hat{G}_0$. Formellement, ce développement s'écrit [62,63]

$$\hat{G} = \hat{G}_0 + \hat{G}_0 V \hat{G}_0 + \hat{G}_0 V \hat{G}_0 V \hat{G}_0 + \dots \tag{3.61}$$

En représentation spatiale, il devient [6] :

$$\begin{aligned} G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') &+ \int d\boldsymbol{r}_1 G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1) V(\boldsymbol{r}_1) G_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}') \\ &+ \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1) V(\boldsymbol{r}_1) G_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) V(\boldsymbol{r}_2) G_0(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}') \\ &+ \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 d\boldsymbol{r}_3 G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1) V(\boldsymbol{r}_1) G_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) \\ &\qquad \times V(\boldsymbol{r}_2) G_0(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3) V(\boldsymbol{r}_3) G_0(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r}') \\ &+ \dots \end{aligned} \tag{3.62}$$

Ce développement peut se visualiser à l'aide des diagrammes de la figure 3.2. Lorsqu'on moyenne sur le potentiel aléatoire en utilisant la forme particulière (2.30) du potentiel gaussien, le développement de la fonction de Green moyenne $\overline{G}$ se simplifie considérablement. Le terme linéaire en V ainsi que tous les termes impairs disparaissent, tandis que le terme quadratique fait apparaître la fonction de corrélation $B(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$. Il reste

$$\begin{aligned} \overline{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') &= G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \\ &+ \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 B(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1) G_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1) G_0(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}') + \dots \end{aligned} \tag{3.63}$$

Ce développement est représenté sur la figure 3.3, où les appariements de lignes d'impuretés représentent les différents produits $\overline{V(\boldsymbol{r}_i)V(\boldsymbol{r}_j)}$ [7]. En moyennant sur le désordre, on récupère l'invariance par translation et la fonction de Green ne dépend alors que de la différence des positions, $\overline{G}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \overline{G}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$. En transformée de Fourier, le développement (3.63) s'écrit sous la forme :

$$\overline{G}(\boldsymbol{k}) = G_0(\boldsymbol{k}) + \frac{1}{\Omega} \sum_{\boldsymbol{q}} B(\boldsymbol{q}) G_0(\boldsymbol{k}) G_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) G_0(\boldsymbol{k}) + \dots \tag{3.64}$$

[6] Pour alléger les notations et lorsqu'aucune confusion n'est possible, on omet l'énergie ϵ (ou la fréquence) à laquelle sont calculées les fonctions de Green.

[7] Dorénavant la moyenne sur le potentiel aléatoire sera dénotée par $\overline{\cdots}$ au lieu de $\langle \cdots \rangle$ comme dans le chapitre 2.

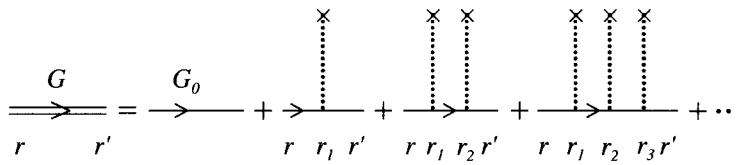


FIG. 3.2 – *Développement diagrammatique de la fonction de Green avant la moyenne sur le désordre.*

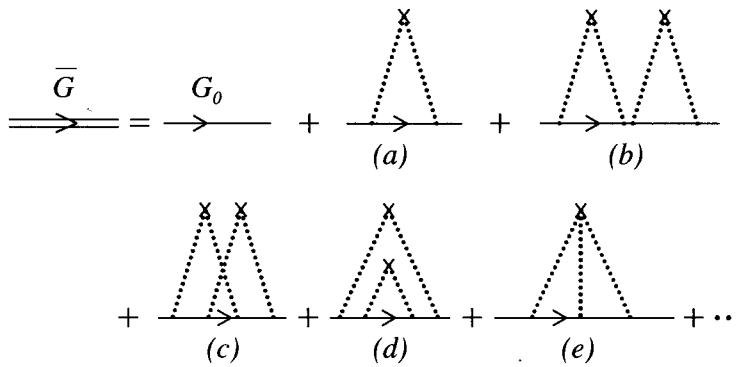


FIG. 3.3 – *Développement diagrammatique de la fonction de Green moyenne.*

En moyennant, on engendre tous les diagrammes correspondant à tous les appariements possibles des lignes d'interaction avec les impuretés qui apparaissent sur la figure 3.2. Ces diagrammes (fig. 3.3) sont de deux types. Les uns sont dits séparables ou réductibles, c'est-à-dire que l'on peut les séparer en deux diagrammes sans avoir à couper de ligne d'impureté. Tous les autres, par opposition, sont non-séparables ou irréductibles. Les diagrammes réductibles peuvent être factorisés en un produit de diagrammes irréductibles. Ceci est possible dans le cas du potentiel gaussien car les intégrales sur les vecteurs d'onde intermédiaires sont indépendantes. Par exemple le diagramme (*b*) de la figure 3.3 s'écrit

$$\begin{aligned}&\frac{1}{\Omega^2}\sum_{\boldsymbol{q}}\sum_{\boldsymbol{q}'} G_0(\boldsymbol{k})B(\boldsymbol{q})G_0(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})G_0(\boldsymbol{k})B(\boldsymbol{q}')G_0(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}')G_0(\boldsymbol{k})\\ &= G_0(\boldsymbol{k})\Big[\sum_{\boldsymbol{q}}\frac{B(\boldsymbol{q})}{\Omega}G_0(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q})G_0(\boldsymbol{k})\Big]^2 \quad . \end{aligned} \tag{3.65}$$

La somme des contributions de tous les diagrammes se ramène au calcul de la série géométrique

$$\overline{G}(\boldsymbol{k}) = G_0(\boldsymbol{k}) + G_0(\boldsymbol{k})\sum_{n=1}^{\infty}[\Sigma(\boldsymbol{k},\epsilon)G_0(\boldsymbol{k})]^n \tag{3.66}$$

solution de l'équation dite de Dyson

$$\overline{G}(\boldsymbol{k}) = G_0(\boldsymbol{k}) + G_0(\boldsymbol{k})\Sigma(\boldsymbol{k},\epsilon)\overline{G}(\boldsymbol{k}) \quad . \tag{3.67}$$

La fonction $\Sigma(\boldsymbol{k},\epsilon)$, appelée *self-énergie* est, par construction, la somme d'une infinité de diagrammes irréductibles (fig. 3.4).

Pour l'équation de Schrödinger, la fonction de Green libre $G_0(\boldsymbol{k},\epsilon)$ est donnée par (3.34). L'équation de Dyson correspondante (3.67) s'écrit sous la forme

$$\overline{G}^{R,A}(\boldsymbol{k},\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \epsilon(\boldsymbol{k}) - \Sigma^{R,A}(\boldsymbol{k},\epsilon)} \quad . \tag{3.68}$$

Pour l'équation de Helmholtz, la fonction de Green libre $G_0(\boldsymbol{k},k_0)$ est donnée par (3.50) et la fonction de Green moyenne s'écrit donc

$$\overline{G}^{R,A}(\boldsymbol{k},k_0) = \frac{1}{k_0^2 - k^2 - \Sigma^{R,A}(\boldsymbol{k},k_0)} \tag{3.69}$$

où k_0 est relié à la pulsation $\omega = ck_0$ de l'onde. La self-énergie $\Sigma(\boldsymbol{k},k_0)$ a, dans ce cas, les dimensions de l'inverse d'une surface.

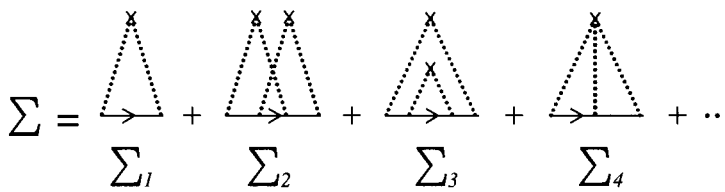


FIG. 3.4 – *Représentation diagrammatique de la self-énergie comme une somme de diagrammes irréductibles.*

3.2.2 Self-énergie

Le calcul de la self-énergie est en principe un problème difficile puisque celle-ci contient une infinité de termes. Le premier , $\Sigma_1^{R,A}(\boldsymbol{k},\epsilon)$, s'écrit (fig. 3.4)

$$\Sigma_1^{R,A}(\boldsymbol{k},\epsilon) = \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}'} B(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')G_0^{R,A}(\boldsymbol{k}') \quad . \tag{3.70}$$

La partie réelle de la self-énergie correspond à un déplacement sans conséquence de l'origine des énergies (ou des fréquences pour l'équation de Helmholtz) dont on ne tiendra pas compte. Dans le cas de l'équation de Schrödinger, la relation (3.33) qui relie la fonction de Green et la densité d'états conduit à

$$\mathrm{Im}\Sigma_1^R(\boldsymbol{k},\epsilon) = -\frac{\pi}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}'} B(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\delta(\epsilon - \epsilon(\boldsymbol{k}')) \quad . \tag{3.71}$$

En notant $\boldsymbol{k} = k\hat{s}$ où $\hat{s}$ est un vecteur unitaire, et en séparant les sommations radiale et angulaire, on obtient :

$$\mathrm{Im}\Sigma_1^R(\boldsymbol{k},\epsilon) = -\pi\rho_0(\epsilon)\langle B(k_0,\hat{s}-\hat{s}')\rangle_{\hat{s}'} \tag{3.72}$$

où on a introduit la moyenne angulaire $\langle\cdots\rangle$ de B. La self-énergie définit un temps caractéristique τ_e dit *temps de collision élastique moyen* tel que

$$\boxed{\frac{1}{2\tau_e} = -\mathrm{Im}\Sigma_1^R(\boldsymbol{k},\epsilon) = \pi\rho_0(\epsilon)\gamma_e} \qquad \textbf{Schrödinger} \tag{3.73}$$

où on note

$$\gamma_e = \langle B(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\rangle \quad . \tag{3.74}$$

Ce temps, déjà obtenu par la règle d'or de Fermi (3.2), est le temps de vie moyen d'un état propre de vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$ et d'énergie ϵ. Dans le modèle gaussien, il est indépendant du vecteur d'onde. L'existence d'une partie imaginaire finie pour la self-énergie implique que la densité d'états proportionnelle à la partie imaginaire de la fonction de Green (relation 3.30) est constituée d'une série de lorentziennes chacune d'elles décrivant un état d'énergie élargi d'une quantité proportionnelle à $1/2\tau_e$.

Remarque : Autres mécanismes de diffusion

On n'a considéré ici que la contribution des collisions élastiques sur le potentiel aléatoire dû aux impuretés statiques. La prise en compte du couplage spin-orbite conduit à un élargissement supplémentaire $1/2\tau_{so}$, et le couplage à des impuretés magnétiques conduit à un élargissement $1/2\tau_m$. Les temps de collision spin-orbite et de retournement d'une impureté magnétique τ_{so} et τ_m sont définis dans la section 6.5.2. En tenant compte de ces mécanismes de collision, la self-énergie devient

$$-\mathrm{Im}\Sigma_1^R = \frac{1}{2\tau_e} + \frac{1}{2\tau_{so}} + \frac{1}{2\tau_m} = \frac{1}{2\tau_{tot}} \quad , \tag{3.75}$$

ce qui définit le temps de collision total τ_{tot} en présence de ces nouveaux mécanismes (p. 234). Tout autre mécanisme de collision peut ainsi être pris en compte par une contribution supplémentaire à la self-énergie. Ces contributions sont additives dans la mesure où les degrés de libertés sont découplés les uns des autres (règle de Matthiessen).

Le couplage à des degrés de liberté dynamiques peut aussi être incorporé de façon phénoménologique à la fonction de Green à une particule, en justifiant d'un élargissement dû au couplage à ces degrés de liberté que sont les phonons, d'une part et les autres électrons d'autre part. L'interaction électron-phonon n'est pas décrite dans cet ouvrage (on pourra consulter [65]). L'interaction coulombienne entre électrons (chap. 13) donne aussi lieu à l'apparition d'un nouveau temps caractéristique τ_{ee}.

De même, dans le cas de l'équation de Helmholtz, on déduit des relations (3.70) et (3.50) que

$$\mathrm{Im}\Sigma_1^R(\boldsymbol{k},k_0) = -\frac{\gamma_e k_0}{4\pi} \quad . \tag{3.76}$$

On définit dans ce cas le *libre parcours moyen élastique* l_e par

$$\boxed{\frac{1}{l_e} = -\frac{1}{k_0}\mathrm{Im}\Sigma_1^R(\boldsymbol{k}, k_0) = \frac{\gamma_e}{4\pi}} \qquad \textbf{Helmholtz} \tag{3.77}$$

pour $d = 3$. À toute dimension, en utilisant les relations (3.70) et (3.55), on obtient

$$\frac{1}{l_e} = \frac{\pi c \rho_0}{2k_0^2}\gamma_e \tag{3.78}$$

où ρ_0 est la densité de modes propres par unité de volume.

Le tableau 3.5 résume les expressions du temps de collision ou du libre parcours moyen élastique pour les problèmes de Schrödinger et de Helmholtz.

Schrödinger	**Helmholtz**
$\frac{1}{2\tau_e} = -\mathrm{Im}\Sigma^R$	$\frac{1}{l_e} = -\frac{1}{k_0}\mathrm{Im}\Sigma^R$
$\mathrm{Im}\Sigma^R = -\pi\gamma_e\rho_0$	$\mathrm{Im}\Sigma^R = -\frac{\gamma_e k_0}{4\pi}$
$\gamma_e = \frac{1}{2\pi\rho_0\tau_e}$	$\gamma_e = \frac{4\pi}{l_e}$

$$\boxed{\mathrm{Im}\Sigma^R = \gamma_e \mathrm{Im}G^R}$$

FIG. 3.5 – *Expressions du temps de collision τ_e et du libre parcours moyen élastique l_e pour les équations de Schrödinger et de Helmholtz.*

Dans les exercices qui suivent on considère (sauf mention explicite) un bruit blanc.

Exercice 3.7 : Montrer qu'en représentation spatiale, la self-énergie Σ_1^R s'écrit

$$\Sigma_1^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \epsilon) = \gamma_e G_0^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \epsilon)\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \tag{3.79}$$

ce qui implique immédiatement (3.73).

Exercice 3.8 : Calculer, pour l'équation de Schrödinger, le terme suivant Σ_2^R du développement de la self-énergie à $d = 3$ (fig. 3.4).

Ce terme est donné par

$$\Sigma_2^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \epsilon) = \gamma_e^2 \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 G_0^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1)\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_2)G_0^R(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}')G_0^R(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}') \tag{3.80}$$

soit

$$\Sigma_2^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \epsilon) = \gamma_e^2 \left[G_0^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \epsilon)\right]^3.$$

En utilisant l'expression (3.41) de la fonction de Green libre à $d = 3$, il vient

$$\Sigma_2^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \epsilon) = -\frac{\pi}{4}\frac{\rho_0}{\tau_e^2}\frac{e^{3ik_0R}}{k_0^3R^3} \tag{3.81}$$

où $R = |\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ et où k_0 est le vecteur d'onde associé à l'énergie ϵ. La partie imaginaire $\mathrm{Im}\Sigma_2^R(k,\epsilon)$ de la transformée de Fourier de $\Sigma_2^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \epsilon)$ est donnée par l'intégrale

$$\mathrm{Im}\Sigma_2^R(k,\epsilon) = -\pi^2\frac{\rho_0}{\tau_e^2}\frac{1}{kk_0^3}\int_0^\infty dR\frac{\sin kR \sin 3k_0R}{R^2} = -\frac{\pi^2}{2}\frac{\rho_0}{\tau_e^2k_0^3}\min\left(1, \frac{3k_0}{k}\right) \quad .$$

À $d = 3$, la densité d'états est donnée par $\rho_0 = \frac{mk_0}{2\pi^2}$ avec $\epsilon = \frac{k_0^2}{2m}$. On peut donc écrire

$$\mathrm{Im}\Sigma_2^R(k,\epsilon) = -\frac{1}{2\tau_e}\frac{\pi}{2k_0l_e}\min\left(1, \frac{3k_0}{k}\right) \tag{3.82}$$

où l_e est le libre parcours moyen élastique défini par $l_e = v\tau_e$ et v la vitesse de groupe $v = \frac{d\epsilon}{dk}$ associée à l'équation de Schrödinger. Cette correction, d'ordre $1/k_0l_e$ est donc négligeable à $d = 3$.

Exercice 3.9 : Généraliser le résultat précédent à une dimension d quelconque et vérifier que la correction $\mathrm{Im}\Sigma_2^R(k,\epsilon)$ à la self-énergie fait intervenir une intégrale de la forme :

$$\mathrm{Im}\Sigma_2^R(k,\epsilon) \propto \int_0^\infty \frac{dR}{R^{d-1}} \quad . \tag{3.83}$$

La correction est finie en dimension $d = 3$. Par contre elle diverge à $d = 1$ et elle est marginale (logarithmique) à $d = 2$. On en conclut que pour $d \geq 2$, tous les termes d'ordre supérieur dans la self-énergie sont négligeables devant $\Sigma_1(\boldsymbol{k}, \epsilon)$ dans la limite $k_0l_e \gg 1$. Par contre, cela n'est plus vrai à $d = 1$. Dans ce cas, il existe une méthode systématique pour resommer les diagrammes [66].

Exercice 3.10 : Montrer que $\mathrm{Im}\Sigma_3^R$ représenté sur la figure 3.4 est une correction d'ordre $1/k_0l_e$ à la self-énergie.

Il est instructif de représenter schématiquement (fig. 3.6) dans l'espace réel les séquences de collisions correspondant respectivement à Σ_1 et Σ_2 (fig. 3.4). On voit ainsi que Σ_1 décrit une succession d'évènements de collisions indépendants tandis que les termes suivants de la self-énergie font apparaître des termes d'interférence entre collisions successives. La limite $k_0l_e \gg 1$ correspond au régime pour lequel on peut négliger ces effets d'interférence (voir exercice 3.8). Cette approximation revient à supposer qu'après chaque collision on peut reconstruire asymptotiquement une onde libre. C'est la *limite de faible désordre* que nous considèrerons dans tout l'ouvrage.

$$\boxed{\textit{limite de faible désordre} : k_0l_e \gg 1} \tag{3.84}$$

On note que pour le modèle d'Edwards (section 2.2.2),

$$\langle B(\boldsymbol{q})\rangle = 4\pi n_i\sigma \tag{3.85}$$

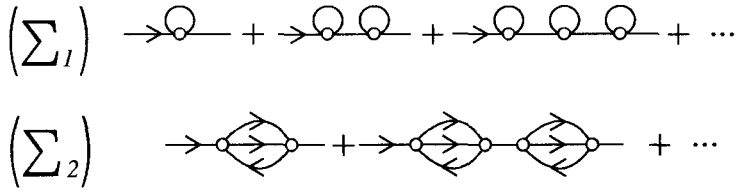


FIG. 3.6 – *Chaque terme Σ_i qui contribue à la self-énergie (fig. 3.4) est l'élément de base dont l'itération permet de construire, à une approximation donnée, les séquences de collisions multiples. Les deux contributions représentées correspondent aux itérations engendrées respectivement par Σ_1 et Σ_2.*

où σ est la section efficace d'une impureté. On voit ainsi que la contribution Σ_1, qui correspond à des collisions indépendantes, est proportionnelle à la densité n_i d'impuretés puisque, à partir de (3.76), on obtient

$$\boxed{\frac{1}{l_e} = n_i \sigma} \tag{3.86}$$

Il est donc possible de relier le libre parcours moyen l_e à des quantités physiques en utilisant dans la relation (3.86) l'expression de la section efficace obtenue par la théorie des collisions simples. Par exemple, dans le cas de la diffusion de la lumière par des suspensions denses de diffuseurs, on utilise la relation (3.86) en prenant pour σ la section efficace calculée pour un diffuseur unique (compléments C2.1 et C2.3). De la dépendance de σ en fonction de la longueur d'onde λ, on déduit le comportement de $l_e(\lambda)$.

Remarque

On utilisera régulièrement le terme « impureté » ou « centre diffuseur » pour décrire les évènements de collisions. La distance moyenne entre deux collisions successives sur ces « impuretés » est le libre parcours moyen l_e et non pas $n_i^{-1/d}$ qui d'ailleurs est nulle pour le modèle gaussien.

Exercice 3.11 : Montrer que, dans le modèle d'Edwards, le diagramme correspondant à Σ_4^R (fig. 3.4) est égal à

$$n_i v_0^3 \int d\boldsymbol{r}_1 G_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1) G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1) G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1) G_0(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}')$$

et qu'il s'annule dans la limite d'un potentiel gaussien pour lequel $v_0 \to 0$ avec $n_i v_0^2$ constant.

3.3 Fonction de Green et densité d'états moyennes

En se limitant au premier ordre pour la self-énergie, on peut écrire la fonction de Green électronique moyenne à partir des relations (3.68) et (3.73) :

$$\overline{G}^{R,A}(\boldsymbol{k},\epsilon) = \frac{1}{\epsilon - \epsilon(\boldsymbol{k}) \pm \frac{i}{2\tau_e}} \quad . \tag{3.87}$$

$\overline{G}^{R,A}(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r},\epsilon)$ est la transformée de Fourier de (3.87). Pour une relation de dispersion quadratique $\epsilon(\boldsymbol{k}) = k^2/2m$, elle s'écrit

$$\overline{G}^{R,A}(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r},\epsilon) = \frac{2m}{(2\pi)^3}\int d\boldsymbol{k}' e^{i\boldsymbol{k}'.(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i)}\frac{1}{k_e^2 - k'^2}$$

où on a défini $k_e^2 = k^2 \pm i\frac{m}{\tau_e}$. En procédant de façon analogue au calcul de la fonction de Green libre (3.38), et en considérant la limite $kl_e \gg 1$ de telle sorte que $k_e = k(1 \pm \frac{i}{kl_e})^{\frac{1}{2}} \simeq k \pm \frac{i}{2l_e}$, on a

$$\begin{aligned}\overline{G}^{R,A}(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r},\epsilon) &= -\frac{m}{2\pi R}e^{\pm ikR}e^{-R/2l_e} \\ &= -\pi\rho_0\frac{e^{\pm ikR}}{kR}e^{-R/2l_e} \quad ,\end{aligned} \tag{3.88}$$

ou encore

$$\boxed{\overline{G}^{R,A}(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r},\epsilon) = G_0^{R,A}(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r},\epsilon)\ \ e^{-|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_i|/2l_e}} \tag{3.89}$$

De même, à partir de l'expression de la fonction de Green moyenne dans le cas des ondes

$$\overline{G}^{R,A}(\boldsymbol{k},k_0) = \frac{1}{k_0^2 - k^2 \pm i\frac{k_0}{l_e}} \tag{3.90}$$

on obtient

$$\overline{G}^{R,A}(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r},k_0) = -\frac{1}{4\pi}\frac{e^{\pm ik_0R}}{R}\ \ e^{-R/2l_e} \tag{3.91}$$

où $R = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i|$. Ces deux dernières expressions de la fonction de Green moyenne ont été obtenues dans l'hypothèse d'un milieu infini et invariant par translation. En fait, il suffit que la taille caractéristique L du milieu soit très supérieure à l_e pour que l'on puisse utiliser les expressions précédentes.

À partir de l'expression (3.87) de la fonction de Green moyenne, on déduit la densité d'états moyenne :

$$\overline{\rho}(\epsilon) = \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}}\frac{1/2\pi\tau_e}{(\epsilon-\epsilon_{\boldsymbol{k}})^2 + (1/2\tau_e)^2} = \frac{1}{2\pi\tau_e}\int_0^\infty \frac{\rho_0(\eta)}{(\eta-\epsilon)^2 + (1/2\tau_e)^2}d\eta \quad . \tag{3.92}$$

Par exemple, dans le cas $d = 2$ pour lequel la densité d'états $\rho_0(\epsilon) = \rho_0$ est constante, on obtient

$$\overline{\rho}(\epsilon) = \rho_0(\frac{1}{2} + \frac{1}{\pi}\arctan 2\epsilon\tau_e) \underset{\epsilon\tau_e\to\infty}{\longrightarrow} \rho_0\left(1 - \frac{1}{2\pi\epsilon\tau_e}\right) \quad . \tag{3.93}$$

On constate ainsi que la densité d'états moyenne est très peu affectée par le désordre et que la correction est d'ordre $1/kl_e$ à deux dimensions, et d'ordre $1/(kl_e)^2$ à trois dimensions (voir exercice 3.12). On prendra donc dans la suite $\overline{\rho}(\epsilon) = \rho_0(\epsilon)$.

Exercice 3.12 : Densité d'états électronique moyenne à trois dimensions

À trois dimensions, la densité d'états ρ_0 varie comme $\epsilon^{1/2}$. Montrer que la densité d'états moyenne s'écrit :

$$\overline{\rho}(\epsilon) = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2}(\epsilon^2 + \frac{1}{4\tau_e^2})^{1/4}\cos(\frac{1}{2}\arctan\frac{1}{2\epsilon\tau_e}) \underset{\epsilon\tau_e\to\infty}{\longrightarrow} \rho_0(\epsilon)(1 + \frac{1}{32\epsilon^2\tau_e^2}) \tag{3.94}$$

où $\rho_0(\epsilon)$ est donnée par la relation (3.44).

Exercice 3.13 : Montrer que la dépendance temporelle de la fonction de Green $\overline{G}^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$ définie par la transformée de Fourier de (3.91) s'écrit :

$$\overline{G}^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) = -\frac{c}{4\pi R}\,\delta(R - ct)e^{-t/2\tau_e} \tag{3.95}$$

avec $R = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|$.

Complément C3.1 Corrélations à courte portée

La compréhension des mécanismes physiques liées à la diffusion multiple nécessite la description de la propagation d'un point origine vers une impureté, puis de la séquence de collisions d'impureté en impureté. Il est donc nécessaire d'avoir une description précise des « terminaisons » des séquences de collisions. Ce sont des fonctions à courte portée spatiale qui font intervenir des combinaisons de fonctions de Green moyennes. Le but de ce complément est de passer en revue et de calculer ces différentes combinaisons de fonctions de Green. On définit tout d'abord la fonction à courte portée

$$g(\boldsymbol{R}) = \begin{cases} -\dfrac{1}{\pi\rho_0}\mathrm{Im}\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') & \textbf{Schrödinger} \\ \\ -\dfrac{4\pi}{k_0}\mathrm{Im}\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') & \textbf{Helmholtz} \end{cases} \tag{3.96}$$

avec $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'$. L'utilisation des expressions (3.89, 3.41, 3.43 et 3.42) de la fonction de Green moyenne $\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$, mène aux expressions

$$\boxed{\begin{array}{ll} g(\boldsymbol{R}) = \dfrac{\sin k_0 R}{k_0 R}\, e^{-R/2l_e} & d=3 \\ \\ g(\boldsymbol{R}) = J_0(k_0 R)\, e^{-R/2l_e} & d=2 \\ \\ g(\boldsymbol{R}) = \cos k_0 R\, e^{-R/2l_e} & d=1 \end{array}} \tag{3.97}$$

avec $k_0 = \sqrt{2m\epsilon}$ et $R = |\boldsymbol{R}|$. Par ailleurs, à l'aide de (3.28), on note que, pour l'équation de Schrödinger, la fonction $g(\boldsymbol{R})$ est reliée à la densité non locale moyenne :

$$\overline{\rho}_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \rho_0 g(\boldsymbol{R}) \quad . \tag{3.98}$$

Dans ce cas, on vérifie que, dans la limite $k_0 l_e \gg 1$ et à toute dimension, on a

$$\boxed{\int g^2(\boldsymbol{R})d\boldsymbol{R} = \frac{\tau_e}{\pi\rho_0}} \tag{3.99}$$

pour des électrons.

Exercice 3.14 : Calculer l'intégrale $I = \int g^2(\boldsymbol{R})d\boldsymbol{R}$ et vérifier que, dans la limite $k_0 l_e \gg 1$,

$$I = \frac{2\pi l_e}{k_0^2} \quad \text{à } d = 3 \ , \qquad I = \frac{2l_e}{k_0} \quad \text{à } d = 2 \ , \qquad I = l_e \quad \text{à } d = 1 \quad . \tag{3.100}$$

Ces relations sont valables aussi bien pour l'équation de Schrödinger que pour celle de Helmholtz.

Montrer que, dans la limite $ql_e \to \infty$, la fonction $a(\boldsymbol{q})$, transformée de Fourier de $g^2(\boldsymbol{R})$, s'écrit, pour $q < 2k_0$:

$$a(\boldsymbol{q}) = \frac{\pi^2}{k_0^2 q} \quad \text{à } d = 3 \ , \qquad a(\boldsymbol{q}) = \frac{4}{q}\frac{1}{\sqrt{4k_0^2 - q^2}} \quad \text{à } d = 2 \tag{3.101}$$

et qu'elle est nulle pour $q > 2k_0$.

La fonction $g(\boldsymbol{R})$ intervient dans de nombreuses combinaisons de fonctions de Green moyennes. Par exemple, l'intégrale $f^{1,1}(\boldsymbol{R})$ définie par

$$f^{1,1}(\boldsymbol{R}) = \gamma_e \int \overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1)\overline{G}_\epsilon^A(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}_1 \tag{3.102}$$

avec $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'$, se récrit

$$f^{1,1}(\boldsymbol{R}) = \frac{\gamma_e}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{k})\overline{G}_\epsilon^A(\boldsymbol{k})e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{R}} = \frac{\gamma_e}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \frac{e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{R}}}{(\epsilon - \epsilon_{\boldsymbol{k}})^2 + 1/4\tau_e^2} \tag{3.103}$$

et fait ainsi apparaître $\mathrm{Im}\overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$. On obtient finalement [8]

$$f^{1,1}(\boldsymbol{R}) = g(\boldsymbol{R}) \quad . \tag{3.104}$$

Plus généralement, on peut introduire la fonction $f^{m,n}(\boldsymbol{R})$ définie par

$$f^{m,n}(\boldsymbol{R}) = \gamma_e \int \prod_{i=1}^{m} d\boldsymbol{r}_i \prod_{j=1}^{n} d\boldsymbol{r}'_j \overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1)\cdots\overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_{m-1}, \boldsymbol{r}_m) \times \overline{G}_\epsilon^A(\boldsymbol{r}_m, \boldsymbol{r}'_1)\cdots\overline{G}_\epsilon^A(\boldsymbol{r}'_n, \boldsymbol{r}') \tag{3.105}$$

avec un produit de m fonctions de Green retardées et de n fonctions de Green avancées. Sa valeur en $\boldsymbol{R} = 0$, notée $f^{m,n} = f^{m,n}(0)$, est donnée par l'expression

$$f^{m,n} = \frac{\gamma_e}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \left[\overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{k})\right]^m \left[\overline{G}_\epsilon^A(\boldsymbol{k})\right]^n \quad . \tag{3.106}$$

---

[8] Le résultat (3.103) se déduit de la relation

$$\overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{k})\overline{G}_\epsilon^A(\boldsymbol{k}) = -2\tau_e \mathrm{Im}\overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{k}) \quad .$$

Une intégration par la méthode des résidus conduit à [67, 68] :

$$\boxed{f^{m,n} = i^{n-m} \frac{(n+m-2)!}{(n-1)!(m-1)!} \tau_e^{n+m-2}} \tag{3.107}$$

Un calcul similaire de $f^{m,n}$ pour les ondes à trois dimensions donne

$$f^{m,n} = i^{n-m} \frac{(n+m-2)!}{(n-1)!(m-1)!} \left(\frac{l_e}{2k_0}\right)^{n+m-2} \quad . \tag{3.108}$$

Le tableau 3.7 et la figure 3.8 donnent les expressions de quelques diagrammes ainsi que les valeurs de quelques $f^{m,n}$.

Exercice 3.15 : Calculer le dernier diagramme de la figure 3.8.

On rappelle que la ligne d'impureté correspond à la quantité $\gamma_e \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$. On montre ainsi que ce diagramme est le produit de γ_e et de deux diagrammes indépendants et identiques, égaux à $f^{1,2}(0)/\gamma_e$.

Exercice 3.16 : Montrer que, dans la limite $k_0 l_e \gg 1$,

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\boldsymbol{k}} \overline{G}^R(\boldsymbol{k}) \overline{G}^R(\boldsymbol{k}) \simeq \frac{\rho_0}{\epsilon} \quad , \tag{3.109}$$

résultat à comparer à

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\boldsymbol{k}} \overline{G}^R(\boldsymbol{k}) \overline{G}^A(\boldsymbol{k}) = 2\pi \rho_0 \tau_e \quad . \tag{3.110}$$

Il est donc négligeable, d'ordre $1/k_0 l_e$. On obtient le même résultat pour la somme d'un produit de deux fonctions de Green avancées.

$m \backslash n$	1	2	3	4
1	1	$i\tau_e$	$-\tau_e^2$	$-i\tau_e^3$
2	$-i\tau_e$	$2\tau_e^2$	$3i\tau_e^3$	$-4\tau_e^4$
3	$-\tau_e^2$	$-3i\tau_e^3$	$6\tau_e^4$	$10i\tau_e^5$
4	$i\tau_e^3$	$-4\tau_e^4$	$-10i\tau_e^5$	$20\tau_e^6$

FIG. 3.7 – *Quelques valeurs de $f^{m,n}$. Pour les ondes à $d = 3$, il faut remplacer τ_e par $l_e/(2k_0)$.*

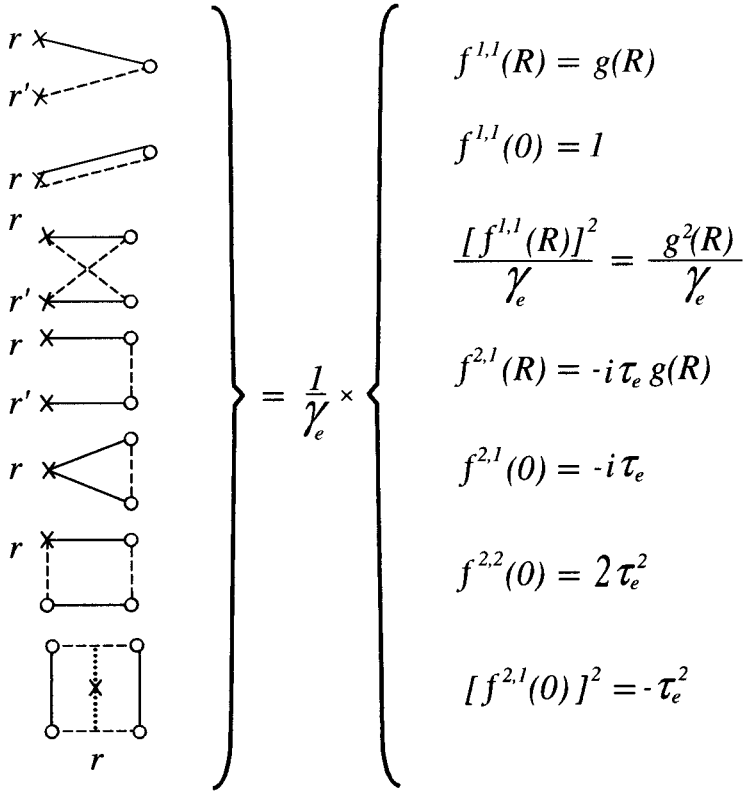


FIG. 3.8 – *Différents produits de fonctions de Green. La fonction $f^{m,n}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ ne dépend pas de l'ordre de la séquence des fonctions de Green retardées (traits pleins) et avancées (tirets). Les cercles ouverts indiquent des points dont les positions ont été intégrées. Pour les ondes à $d = 3$, il faut remplacer τ_e par $l_e/(2k_0)$ et γ_e par $4\pi/l_e$.*

Chapitre 4

Probabilité de diffusion quantique

Ce chapitre contient une description des concepts et outils essentiels qui seront utilisés de manière récurrente tout au long de cet ouvrage. On prend ici $\hbar = 1$.

La fonction de Green moyenne permet de décrire l'évolution d'une onde plane dans un milieu désordonné mais elle ne contient pas d'information sur l'évolution d'un paquet d'onde. Pour des milieux optiquement épais ou des métaux, la plupart des propriétés physiques ne s'expriment pas à partir de la fonction de Green moyenne mais plutôt à partir de la probabilité $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$ pour une particule de se déplacer d'un point $\boldsymbol{r}$ à un point $\boldsymbol{r}'$, ou éventuellement de revenir à son point de départ.

Dans ce chapitre, à partir de l'équation de Schrödinger (ou de l'équation de Helmholtz), on établit une expression générale pour la probabilité quantique de propager une particule (c'est-à-dire un paquet d'ondes) d'un point à un autre. Lorqu'on moyenne cette probabilité sur le potentiel aléatoire, on montre que, dans la limite de faible désordre $kl_e \gg 1$, elle se décompose comme la somme de trois contributions principales :

- La probabilité d'aller d'un point à un autre sans collision.

- La probabilité d'aller d'un point à un autre par un processus *classique* de diffusion multiple sur les impuretés.

- La probabilité d'aller d'un point à un autre par un processus *cohérent* de diffusion multiple sur les impuretés.

On montre que les deux dernières contributions, appelées respectivement *diffuson* et *cooperon*, obéissent, dans certaines limites, à une équation de diffusion.

4.1 Définition

À partir de l'équation de Schrödinger, on cherche à déterminer la probabilité de trouver une particule d'énergie ϵ_0 au point $\boldsymbol{r}_2$ à l'instant t, si elle a été placée initialement en $\boldsymbol{r}_1$ à $t = 0$. Pour cela, on considère l'évolution temporelle d'un état initial noté $|\psi_{\boldsymbol{r}_1}\rangle$ et représenté par un paquet d'ondes centré en $\boldsymbol{r}_1$ et d'énergie moyenne ϵ_0. Ce paquet d'ondes se décompose sur les fonctions propres orthonormées $|\phi_n\rangle$ de l'hamiltonien (2.1). On considère un paquet d'ondes gaussien dont la largeur en énergie est notée σ_ϵ :

$$|\psi_{\boldsymbol{r}_1}\rangle = A\sum_n \langle\phi_n|\boldsymbol{r}_1\rangle e^{-(\epsilon_n-\epsilon_0)^2/4\sigma_\epsilon^2}|\phi_n\rangle \tag{4.1}$$

de sorte que

$$\psi_{\boldsymbol{r}_1}(\boldsymbol{r}) = \langle\boldsymbol{r}|\psi_{\boldsymbol{r}_1}\rangle = A\sum_n \langle\boldsymbol{r}|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\boldsymbol{r}_1\rangle e^{-(\epsilon_n-\epsilon_0)^2/4\sigma_\epsilon^2} \quad . \tag{4.2}$$

Le coefficient de normalisation A est tel que $A^2 = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\rho_0\sigma_\epsilon}$ où ρ_0 est la densité d'états moyenne.

Normalisation

La condition $\int |\psi_{\boldsymbol{r}_1}(\boldsymbol{r})|^2 d\boldsymbol{r} = 1$ de normalisation de la fonction d'onde s'écrit :

$$A^2\sum_{n,n'}\int \phi_n(\boldsymbol{r})\phi_n^*(\boldsymbol{r}_1)\phi_{n'}^*(\boldsymbol{r})\phi_{n'}(\boldsymbol{r}_1)e^{-(\epsilon_n-\epsilon_0)^2/4\sigma_\epsilon^2}e^{-(\epsilon_{n'}-\epsilon_0)^2/4\sigma_\epsilon^2}d\boldsymbol{r} = 1 \quad .$$

L'intégration sur $\boldsymbol{r}$ puis l'utilisation de la relation (3.28) conduisent à

$$A^2\sum_n |\phi_n(\boldsymbol{r}_1)|^2 e^{-(\epsilon_n-\epsilon_0)^2/2\sigma_\epsilon^2} = A^2\int \rho(\boldsymbol{r}_1,\epsilon)e^{-(\epsilon-\epsilon_0)^2/2\sigma_\epsilon^2}d\epsilon = 1 \quad .$$

On choisit de normaliser la fonction d'onde en moyenne sur le désordre. On remplace donc la densité d'états locale $\rho(\boldsymbol{r}_1,\epsilon)$ par sa valeur moyenne sur le désordre $\overline{\rho}(\boldsymbol{r}_1,\epsilon) = \rho_0(\epsilon)$ et pour une densité d'états ρ_0 constante, on déduit la valeur de A.

L'évolution de ce paquet d'ondes de $\boldsymbol{r}_1$ en $\boldsymbol{r}_2$ est décrite par l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution $e^{-i\mathcal{H}t}$:

$$\begin{aligned}
\langle\boldsymbol{r}_2|^{-i\mathcal{H}t}|\psi_{\boldsymbol{r}_1}\rangle\theta(t) &= \theta(t)\sum_n \langle\boldsymbol{r}_2|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\psi_{\boldsymbol{r}_1}\rangle e^{-i\epsilon_n t} \\
&= A\theta(t)\sum_n \langle\boldsymbol{r}_2|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\boldsymbol{r}_1\rangle e^{-\frac{(\epsilon_n-\epsilon_0)^2}{4\sigma_\epsilon^2}}e^{-i\epsilon_n t} \\
&= iA\int\frac{d\epsilon}{2\pi}\sum_n \frac{\langle\boldsymbol{r}_2|\phi_n\rangle\langle\phi_n|\boldsymbol{r}_1\rangle}{\epsilon-\epsilon_n+i0}e^{-\frac{(\epsilon-\epsilon_0)^2}{4\sigma_\epsilon^2}}e^{-i\epsilon t} \\
&= iA\int\frac{d\epsilon}{2\pi}G^R(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\epsilon)e^{-\frac{(\epsilon-\epsilon_0)^2}{4\sigma_\epsilon^2}}e^{-i\epsilon t} \quad ,
\end{aligned} \tag{4.3}$$

où on a utilisé les relations (4.2) et (3.12). À l'instant t, on définit la probabilité conditionnelle, moyennée sur le désordre, d'être dans l'état $|\boldsymbol{r}_2\rangle$ par

$$\begin{aligned} P(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,t) &= \overline{|\langle \boldsymbol{r}_2|^{-i\mathcal{H}t}|\psi_{\boldsymbol{r}_1}\rangle\theta(t)|^2} \\ &= A^2\int \frac{d\epsilon}{2\pi}\frac{d\omega}{2\pi}\overline{G^R(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\epsilon+\frac{\omega}{2})G^A(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1,\epsilon-\frac{\omega}{2})} \\ &\quad\times e^{-\frac{(\epsilon+\omega/2-\epsilon_0)^2}{4\sigma_\epsilon^2}-\frac{(\epsilon-\omega/2-\epsilon_0)^2}{4\sigma_\epsilon^2}}e^{-i\omega t} \quad . \end{aligned} \tag{4.4}$$

On suppose maintenant que le produit $\overline{G^R(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\epsilon+\frac{\omega}{2})G^A(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1,\epsilon-\frac{\omega}{2})}$ dépend peu de l'énergie ϵ, ce qui est le cas si la densité d'états autour de l'énergie ϵ_0 varie peu. Ce produit peut donc être sorti de l'intégrale. Enfin on suppose que la fréquence ω est petite devant la largeur σ_ϵ du paquet d'ondes. Dans ce cas,

$$A^2\int d\epsilon\, e^{-\frac{(\epsilon+\omega/2-\epsilon_0)^2}{4\sigma_\epsilon^2}-\frac{(\epsilon-\omega/2-\epsilon_0)^2}{4\sigma_\epsilon^2}} \simeq A^2\int d\epsilon\, e^{-\frac{(\epsilon-\epsilon_0)^2}{2\sigma_\epsilon^2}} = A^2\sqrt{2\pi}\sigma_\epsilon = \frac{1}{\rho_0} \quad . \tag{4.5}$$

On obtient ainsi :

$$P(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega P(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\omega)e^{-i\omega t} \tag{4.6}$$

avec

$$P(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\omega) = \frac{1}{2\pi\rho_0}\overline{G^R(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\epsilon_0+\frac{\omega}{2})G^A(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1,\epsilon_0-\frac{\omega}{2})} \quad . \tag{4.7}$$

La probabilité ainsi définie [1] décrit l'évolution d'une particule *d'énergie donnée* ϵ_0 vue comme un paquet d'ondes de largeur σ_ϵ. Cette description n'a de sens que pour des échelles de temps supérieures à l'extension $1/\sigma_\epsilon$, donc pour des fréquences $\omega \ll \sigma_\epsilon$.

Il est important de noter que l'expression (4.7) de la probabilité n'est valable que pour des systèmes dont la densité d'états n'a pas de variation importante. Si la formule (4.4) est générale, les considérations qui suivent ne s'appliquent que si le produit $\overline{G^RG^A}$ varie peu avec l'énergie. Par exemple, ça n'est pas le cas dans un quasi-cristal, où la densité d'états varie fortement sur toutes les échelles d'énergie. Dans un système désordonné, la densité d'états peut aussi avoir des variations mais la moyenne sur le désordre les supprime. On considèrera des situations où la densité d'états $\rho_0(\epsilon)$ peut être supposée constante sur l'intervalle de fréquence (ou d'énergie) ω considéré. La valeur moyenne du produit des deux fonctions de Green est alors indépendante de

[1] Des expressions équivalentes de la probabilité ont été proposées. On pourra, par exemple consulter la référence [69].

ϵ_0 et la probabilité se récrit sous la forme [2] :

$$\boxed{P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = \frac{1}{2\pi\rho_0}\overline{G^R_{\epsilon_0}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')G^A_{\epsilon_0-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})}} \tag{4.9}$$

La transformée de Fourier $P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)$ de la *probabilité de diffusion quantique* décrit donc la probabilité moyenne qu'une particule d'énergie ϵ_0 évolue d'un point $\boldsymbol{r}$ vers un point $\boldsymbol{r}'$ pendant un temps t [3]. Le but de ce chapitre est d'étudier $P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)$, c'est-à-dire de développer une méthode systématique pour le calcul de la valeur moyenne du produit de deux fonctions de Green G^RG^A.

La probabilité moyenne est normalisée à l'unité (voir exercice 4.1). Donc pour tout temps t, on a

$$\int P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)d\boldsymbol{r}' = 1 \tag{4.10}$$

ou

$$\int P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)d\boldsymbol{r}' = \frac{i}{\omega} \quad . \tag{4.11}$$

Pour un système invariant par translation, $P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ ne dépend que de $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$ et sa transformée de Fourier $P(\boldsymbol{q},\omega)$ peut s'écrire :

$$P(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{2\pi\rho_0\Omega}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\overline{G^R_{\epsilon_0}(\boldsymbol{k}_+,\boldsymbol{k}'_+)G^A_{\epsilon_0-\omega}(\boldsymbol{k}'_-,\boldsymbol{k}_-)} \tag{4.12}$$

avec $\boldsymbol{k}_\pm = \boldsymbol{k} \pm \frac{\boldsymbol{q}}{2}$.

Exercice 4.1 : Vérifier la normalisation de P.

Montrer que la probabilité $P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ définie par la relation (4.9) est normalisée, c'est-à-dire qu'elle obéit à (4.11). Pour cela, on remplace les fonctions de Green dans (4.9) par leur expression et on obtient :

$$\int P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)d\boldsymbol{r}' = \frac{1}{2\pi\rho_0}\int d\boldsymbol{r}'\overline{\sum_{n,m}\frac{\phi^*_n(\boldsymbol{r}')\phi_n(\boldsymbol{r})\phi_m(\boldsymbol{r}')\phi^*_m(\boldsymbol{r})}{(\epsilon_0-\epsilon_n+i0)(\epsilon_0-\epsilon_m-\omega-i0)}} \quad . \tag{4.13}$$

Les fonctions d'onde sont orthonormées $\int d\boldsymbol{r}'\phi^*_n(\boldsymbol{r}')\phi_m(\boldsymbol{r}') = \delta_{n,m}$, on obtient ainsi :

$$\int P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)d\boldsymbol{r}' = \frac{1}{2\pi\rho_0}\int\frac{\overline{\rho}(\boldsymbol{r},\epsilon)}{(\epsilon_0-\epsilon+i0)(\epsilon_0-\epsilon-\omega-i0)}d\epsilon$$

où $\overline{\rho}(\boldsymbol{r},\epsilon) = \rho_0$. L'intégrale restante conduit à la normalisation (4.11).

---

[2] Dans la suite, on utilisera indifféremment les notations

$$G_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\epsilon) \quad . \tag{4.8}$$

[3] Cette convention pour les arguments de $P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ correspond au choix que nous avons précisé dans le chapitre 3 (fig. 3.1).

4.2 Propagation libre

Il est instructif de commencer par étudier la probabilité de diffusion quantique pour un système *sans désordre*. En utilisant l'expression de la fonction de Green (3.41) et la définition (4.9), cette probabilité s'écrit, en dimension $d = 3$:

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = \frac{\pi}{2}\rho_0 \frac{e^{i\omega R/v}}{k^2 R^2} = \frac{e^{i\omega R/v}}{4\pi R^2 v} \tag{4.14}$$

où $R = |\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}|$. On a utilisé l'expression générale de la densité d'états à trois dimensions (3.40) et on a développé $k(\epsilon_0) - k(\epsilon_0 - \omega) \simeq \omega \frac{\partial k}{\partial \epsilon} = \frac{\omega}{v}$. La dépendance temporelle de la probabilité s'obtient par transformation de Fourier de l'équation (4.14) :

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) = \frac{\delta(R - vt)}{4\pi R^2} \quad . \tag{4.15}$$

Cette probabilité décrit le mouvement *balistique* de la particule à la vitesse v. Pour une énergie fixée, le module v de la vitesse étant fixé, la particule a parcouru une distance $R = vt$ en l'absence de collision. Cette distance étant parcourue dans une direction quelconque, la probabilité décroît comme $1/R^2$. Plus généralement, à d dimensions, elle décroît comme $1/R^{d-1}$.

4.3 Approximation de Drude-Boltzmann

En présence de désordre, il faut, pour calculer la probabilité (4.9), évaluer la moyenne du produit de deux fonctions de Green. L'approximation de Drude-Boltzmann [4] consiste à remplacer cette moyenne par le produit de deux valeurs moyennes, c'est-à-dire à remplacer $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$ par

$$\boxed{P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = \frac{1}{2\pi\rho_0} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r})} \tag{4.16}$$

Dans cette expression, le désordre intervient dans les fonctions de Green moyennes qui décrivent le temps de vie d'un état propre d'impulsion donnée. Ainsi $P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$ est la probabilité pour qu'une particule située en $\boldsymbol{r}$ atteigne le point $\boldsymbol{r}'$ *sans avoir subi de collision*. En utilisant l'expression de la fonction de Green moyenne (3.88), cette probabilité s'écrit, en dimension $d = 3$

$$P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = \frac{e^{i\omega R/v - R/l_e}}{4\pi R^2 v} \tag{4.17}$$

[4] Nous avons choisi cette dénomination qui est celle couramment utilisée pour le calcul de la conductivité classique à cette approximation (voir aussi le chap. 7).

ou encore

$$P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) = \frac{\delta(R - vt)e^{-t/\tau_e}}{4\pi R^2} \tag{4.18}$$

avec $R = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|$. La probabilité qu'une particule ne subisse pas de collision décroît donc exponentiellement avec la distance. Ainsi, la probabilité totale qu'une particule n'ait pas eu de collision avant le temps t décroît exponentiellement avec le temps :

$$\int P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) d\boldsymbol{r}' = \theta(t)\, e^{-t/\tau_e} \tag{4.19}$$

et sa transformée de Fourier s'écrit :

$$\boxed{\int P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) d\boldsymbol{r}' = \frac{\tau_e}{1 - i\omega\tau_e}} \tag{4.20}$$

On montrera dans la section 7.2.1 que cette probabilité integrée est proportionnelle à la conductivité électrique dans l'approximation de Drude.

4.4 Propagation classique : approximation du diffuson

L'équation (4.19) montre que la probabilité P_0 n'est pas normalisée (comparer avec 4.10). En remplaçant la moyenne de $G^R G^A$ dans la probabilité quantique (4.9) par le produit des moyennes, on a omis certains processus. Il existe effectivement une autre contribution à la probabilité qui décrit la *diffusion multiple* sur le potentiel de désordre. Dans ce qui suit, on montre que, dans la limite de faible désordre discutée au chapitre 3, cette nouvelle contribution obéit, sous certaines conditions, à une équation de diffusion classique et permet d'obtenir, à nouveau, une probabilité normalisée.

Afin d'évaluer la probabilité $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$ donnée par (4.9), il faut considérer la moyenne sur le désordre du produit $G^R G^A$ des fonctions de Green correspondant à toutes les séquences possibles de collisions multiples du type de celles représentées schématiquement sur la figure 4.1. La fonction de Green $G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \epsilon)$ décrit l'amplitude complexe d'un paquet d'ondes se propageant de $\boldsymbol{r}$ en $\boldsymbol{r}'$ à l'énergie $\epsilon(\boldsymbol{k})$. On peut la représenter qualitativement par l'expression [5]

$$G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \epsilon) = \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\boldsymbol{r}_1, \cdots, \boldsymbol{r}_N} |A(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \mathcal{C}_N)| \exp(ik\mathcal{L}_N) \tag{4.21}$$

[5]Dans le chapitre 3, nous avons noté k_0 le vecteur de l'onde diffusée. Dorénavant, nous le notons k.

où $A(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \mathcal{C}_N)$ est l'amplitude complexe associée à une séquence de N collisions $\mathcal{C}_N = (\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, ..., \boldsymbol{r}_N)$ et où la phase accumulée $k\mathcal{L}_N$ mesure la longueur $\mathcal{L}_N$ de la trajectoire en unité de la longueur d'onde λ. Le produit $G^R G^A$ correspondant est représenté schématiquement sur la figure 4.1. Le déphasage associé au produit de deux trajectoires $\mathcal{C}_N$ et $\mathcal{C}_{N'}$ est proportionnel à la différence des longueurs $\mathcal{L}_N - \mathcal{L}_{N'}$.

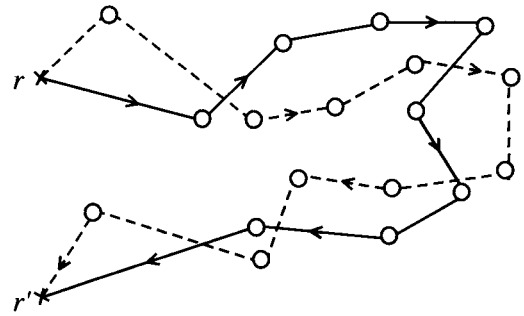


FIG. 4.1 – *Trajectoires typiques décrites par les fonctions de Green G^R (traits pleins) et G^A (tirets). Ces deux trajectoires sont orientées avec la convention de la figure 3.1 et représentent la propagation de $\boldsymbol{r}$ à $\boldsymbol{r}'$.*

Une première conséquence de la moyenne sur le potentiel aléatoire, décrite à l'aide du modèle gaussien (2.30), consiste à ne retenir dans $\overline{G^R G^A}$ que les couples de trajectoires pour lesquelles l'ensemble des centres diffuseurs est identique. Cela résulte de la courte portée du potentiel gaussien. On obtient ainsi des configurations du type de celle représentée sur la figure 4.2. Une seconde conséquence de la moyenne consiste à remplacer les fonctions de Green par leur valeur moyenne. La distance entre deux collisions successives est alors de l'ordre du libre parcours moyen élastique l_e. Dans le régime de faible désordre (section 3.2), les collisions sont indépendantes et $l_e \gg \lambda$.

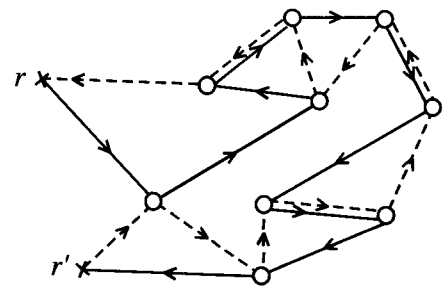


FIG. 4.2 – *Du fait de la courte portée du potentiel, seules les trajectoires passant par les mêmes centres diffuseurs contribuent à la moyenne $\overline{G^R G^A}$. Ici, le déphasage entre les deux trajectoires est très supérieur à 2π.*

Par conséquent, la différence de longueur entre trajectoires, dont la séquence des collisions ne serait pas identique, c'est-à-dire *passant par toutes les impuretés et dans le même ordre*, serait au moins de l'ordre de l_e, c'est-à-dire très supérieure à la longueur d'onde λ. Le déphasage résultant est très grand et ces contributions sont par conséquent négligeables. On ne retiendra donc que les contributions du type de celle représentée sur la figure 4.3.

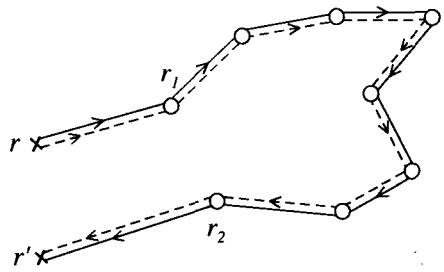


FIG. 4.3 – *Les trajectoires ayant des séquences de collisions identiques contribuent à la moyenne* $\overline{G^R G^A}$.

À cette approximation, dite *approximation du diffuson*, l'expression de la probabilité moyenne que nous noterons $P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$, s'obtient comme le produit de trois termes distincts. Le premier décrit la propagation depuis un point $\boldsymbol{r}$ quelconque du milieu (qui ne correspond pas nécessairement à un évènement de collision) au point de la première collision en $\boldsymbol{r}_1$. Il est donné par

$$\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1)\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}) \quad . \tag{4.22}$$

Le deuxième terme prend en compte toutes les séquences de collisions possibles entre les diffuseurs $\boldsymbol{r}_1$ et $\boldsymbol{r}_2$. Il est caractérisé par une fonction notée $\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$, que l'on appellera *facteur de structure*. Finalement, le troisième terme décrit la propagation depuis le point $\boldsymbol{r}_2$ de la dernière collision au point final $\boldsymbol{r}'$. On en déduit pour $P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$ l'expression :

$$P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = \frac{1}{2\pi\rho_0} \int \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1)\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r})\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}')\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}_2)$$
$$\times \Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \tag{4.23}$$

où l'intégrale sur les points $\boldsymbol{r}_1$ et $\boldsymbol{r}_2$ revient à sommer sur tous les processus de diffusion possibles. L'équation (4.23) est illustrée par la figure 4.4.

Afin d'évaluer le facteur de structure Γ_ω, on utilise l'hypothèse de séquences de collisions indépendantes du modèle de bruit blanc défini par (2.31), c'est-à-dire $B(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) = \gamma_e \delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$ avec $\gamma_e = \frac{1}{2\pi\rho_0\tau_e}$. On construit toutes les séquences possibles contribuant à Γ_ω en itérant à l'infini une séquence de

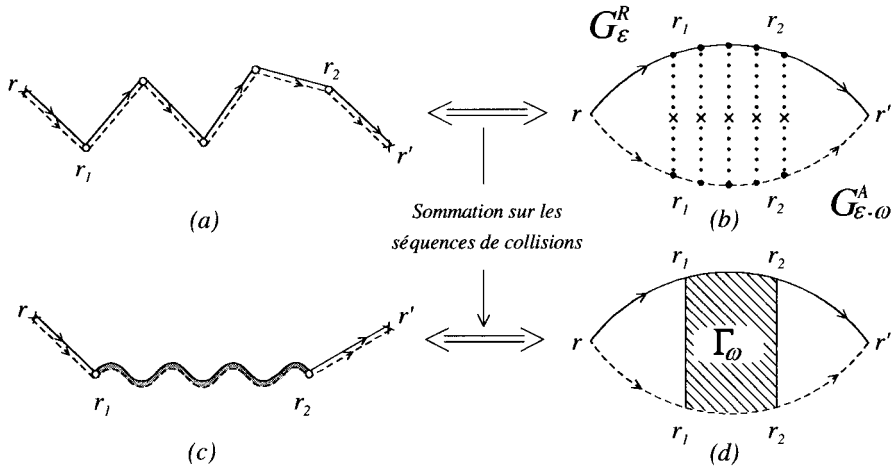


FIG. 4.4 – *Différentes représentations de la probabilité $P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$. Les figures (a) et (b) représentent des trajectoires de diffusion multiple avec cinq collisions. Les figures (c) et (d) représentent la probabilité $P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$ obtenue en itérant à l'infini une suite de séquences de collisions. Le facteur de structure Γ_ω représente la somme des processus de diffusion multiple qui relient les centres diffuseurs $\boldsymbol{r}_1$ et $\boldsymbol{r}_2$. Les figures (c) et (d) montrent que la probabilité P_d a la structure d'un produit $|G^R|^2\Gamma_\omega|G^R|^2$. Les conventions adoptées pour représenter les fonctions de Green G^R et G^A sont celles de la figure 3.1.*

processus élémentaires de collision d'amplitude γ_e. On en déduit l'équation intégrale [6]

$$\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \gamma_e \delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) + \gamma_e \int \Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}'')\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}_2)\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}'')d\boldsymbol{r}'' \tag{4.24}$$

représentée diagrammatiquement sur la figure 4.5. Les expressions (4.23) et (4.24) font apparaître le produit $\overline{G}^R\overline{G}^A$ proportionnel à la probabilité P_0 donnée par (4.16) de telle sorte que (4.23) se récrit :

$$\boxed{P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = 2\pi\rho_0 \int P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1, \omega)\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)P_0(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}', \omega)d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2} \tag{4.25}$$

Ce résultat met en évidence une structure très simple : la probabilité d'aller de $\boldsymbol{r}$ en $\boldsymbol{r}'$ dépend de la probabilité d'atteindre sans collision la première impureté

[6] Une équation intégrale de cette forme porte le nom d'équation de Bethe-Salpeter. De façon générale, le facteur de structure est une fonction de quatre arguments. C'est le cas si la fonction de corrélation $\overline{V(\boldsymbol{r}_1)V(\boldsymbol{r}_2)} = B(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$ n'est pas une fonction δ (complément C4.3). Voir aussi la remarque p. 239.

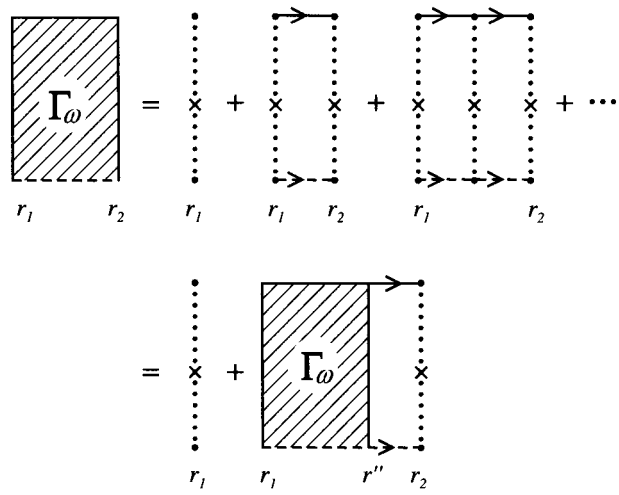


FIG. 4.5 – *Représentation diagrammatique de l'équation d'itération donnant le facteur de structure $\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$. Cette quantité est appelée diffuson ou diagramme en échelle.*

située en $\boldsymbol{r}_1$, puis du processus de collisions successives indépendantes et enfin de la probabilité d'atteindre le point final $\boldsymbol{r}'$ sans autre collision. Dans la littérature, on nomme *diffuson* cette contribution P_d à la probabilité quantique.

Le processus de diffusion multiple est décrit, quant à lui, par l'équation intégrale :

$$\boxed{\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \gamma_e \delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) + \frac{1}{\tau_e} \int \Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}'') P_0(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}_2, \omega) d\boldsymbol{r}''} \tag{4.26}$$

où $\gamma_e = \frac{1}{2\pi\rho_0\tau_e}$.

Remarque

La structure de la probabilité P_d résulte de la sommation d'une infinité de séquences de collisions. Ces séquences s'interprêtent comme une succession d'évènements indépendants séparés par des propagations balistiques classiques. Définissons la probabilité $w(R)d^3R$ pour que deux collisions successives soient distantes de $R = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|$:

$$w(R) = \frac{\int P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) dt}{\int P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) dt d\boldsymbol{r}'} = \frac{e^{-R/l_e}}{4\pi R^2 l_e} = \frac{1}{\tau_e} P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega = 0) \quad . \tag{4.27}$$

On peut alors récrire explicitement la probabilité P_d déduite de (4.29) sous la forme d'une somme infinie de séquences de collisions indépendantes [69] :

$$\begin{aligned} P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) &= \tau_e \sum_{n=1}^{\infty} \int d\boldsymbol{r}_1 \cdots d\boldsymbol{r}_n \delta\left(t - \frac{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_1| + \cdots + |\boldsymbol{r}_n - \boldsymbol{r}'|}{v}\right) \\ &\quad \times w(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1) \cdots w(\boldsymbol{r}_n, \boldsymbol{r}') \quad . \end{aligned} \tag{4.28}$$

La probabilité P_d ne contient aucune information sur la phase et s'exprime uniquement à partir de quantités classiques.

• Équation intégrale pour la probabilité totale $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$

À partir de l'équation intégrale (4.26) pour $\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ et de la relation (4.25) entre $P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$ et $\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$, on obtient pour la probabilité totale $P = P_0 + P_d$ l'équation intégrale

$$\boxed{P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) + \frac{1}{\tau_e} \int P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'', \omega) P_0(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}', \omega) d\boldsymbol{r}''} \tag{4.29}$$

• Diffuson et théorème de réciprocité

Nous avons vu dans le complément C2.2 que, du fait du théorème de réciprocité, les amplitudes de diffusion multiple associées à une séquence donnée de collisions et à la même séquence mais renversée dans le sens du temps sont égales (relation 2.115). Voyons maintenant comment mettre en œuvre ce principe à l'approximation du diffuson. Pour cela considérons la figure 4.5 et retournons *les deux* amplitudes associées aux séquences de collisions multiples. On engendre alors le diffuson correspondant à la propagation entre les points $\boldsymbol{r}_2$ et $\boldsymbol{r}_1$ et, en vertu du théorème de réciprocité, cette contribution est identique à celle décrivant la propagation entre $\boldsymbol{r}_1$ et $\boldsymbol{r}_2$.

Il existe cependant une autre possibilité offerte par le théorème de réciprocité. En effet, puisque ce dernier concerne l'amplitude associée à une séquence de collisions multiples, on peut, dans le processus de la figure 4.5, ne retourner *qu'une seule* des deux amplitudes et obtenir une contribution équivalente. On engendre ainsi une contribution qu'il est impossible de décrire au moyen d'un diffuson puisque les deux amplitudes ont maintenant des sens de propagation opposés. On aboutit ainsi à la conclusion que l'approximation du diffuson ne prend pas en compte tous les processus autorisés par le théorème de réciprocité [70]. Cette constatation sera l'objet de la section 4.6.

• Le diffuson pour des collisions anisotropes

Les expressions que nous venons d'établir pour P_d et pour Γ_ω ont une structure itérative assez simple [7]. C'est une conséquence du fait que le potentiel de bruit blanc décrivant un processus élémentaire de collision est une fonction δ. Si le potentiel a une portée finie comparable à la longueur d'onde, alors les collisions sont anisotropes et sont décrites par la fonction de corrélation $B(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$ (relation 2.30). Dans ce cas, il faut généraliser l'équation (4.24) pour le facteur de structure qui apparaît maintenant comme une fonction à quatre points $\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \boldsymbol{r}_4)$ au lieu de deux. On peut encore établir une expression pour Γ_ω et pour la probabilité P. Ceci fait l'objet des compléments C4.3 et C5.2.

[7] Cette propriété apparaît encore plus clairement en transformée de Fourier (voir complément C4.3).

Exercice 4.2 : Montrer l'équivalence entre les équations (4.28) et (4.29).

Exercice 4.3 : Montrer que la probabilité de retour à l'origine après une seule collision est égale à [71] :

$$P_1(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},t) = \frac{1}{2\pi l_e}(vt)^{1-d}e^{-t/\tau_e} \quad .$$

4.5 Approximation de diffusion

Pour certaines géométries, il est possible de résoudre exactement les équations (4.25) et (4.26) et d'en déduire la probabilité P_d. Pour un milieu infini, celle-ci est obtenue dans le complément C5.1. Ici, nous donnons une forme approchée de P_d valable aux temps longs $t \gg \tau_e$ ($\omega\tau_e \ll 1$), c'est-à-dire après un grand nombre de collisions [8]. Dans cette limite, appelée *régime diffusif* ou hydrodynamique [9], les variations spatiales de $\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ sont faibles à l'échelle de l_e et l'équation intégrale (4.26) se simplifie. On peut développer $\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}'')$ autour de $\boldsymbol{r}'' = \boldsymbol{r}_2$:

$$\begin{aligned}\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}'') = \Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) + (\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}_2).\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}_2}\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\\ + \frac{1}{2}[(\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}_2).\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}_2}]^2\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) + \cdots \qquad (4.30)\end{aligned}$$

L'intégrale du terme linéaire en gradient ainsi que les termes croisés dans la contribution quadratique s'annulent par symétrie, de telle sorte que l'équation intégrale (4.26) devient :

$$\begin{aligned}\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = \gamma_e\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) + \Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\int\frac{P_0(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}_2,\omega)}{\tau_e}d\boldsymbol{r}''\\ + \frac{1}{2d}\Delta_{\boldsymbol{r}_2}\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\int\frac{P_0(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}_2,\omega)}{\tau_e}(\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}_2)^2d\boldsymbol{r}'' + \cdots \qquad (4.31)\end{aligned}$$

Les deux intégrales se calculent aisément :

$$\int P_0(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}_2,\omega)d\boldsymbol{r}'' = \frac{\tau_e}{1-i\omega\tau_e} \simeq \tau_e(1+i\omega\tau_e) \qquad (4.32)$$

$$\int P_0(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}_2,\omega)(\boldsymbol{r}''-\boldsymbol{r}_2)^2d\boldsymbol{r}'' = 2\frac{l_e^2\tau_e}{(1-i\omega\tau_e)^2} \simeq 2l_e^2\tau_e \quad . \qquad (4.33)$$

[8] Dans le complément C5.1, on montre que le régime diffusif est très rapidement atteint, pour des distances de l'ordre de l_e.

[9] On parle aussi d'*approximation de diffusion*, qui est plus restrictive que l'*approximation du diffuson* décrite dans la section 4.4.

Le développement (4.31) peut alors se mettre sous la forme d'une équation de diffusion pour $\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$:

$$(-i\omega - D\Delta_{\boldsymbol{r}_2})\,\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{\gamma_e}{\tau_e}\delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) \tag{4.34}$$

où la constante de diffusion D est définie par :

$$\boxed{D = \frac{v l_e}{d} = \frac{v^2 \tau_e}{d}} \tag{4.35}$$

d est la dimension d'espace et v est la vitesse de groupe. Dans la limite diffusive de variation spatiale lente, Γ_ω varie plus lentement que P_0. Dans l'équation (4.25), on peut donc extraire Γ_ω de l'intégrale et la probabilité P_d devient simplement proportionnelle au facteur de structure :

$$P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = 2\pi\rho_0\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \int P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1, \omega) P_0(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}', \omega) d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \quad . \tag{4.36}$$

En utilisant (4.32), on obtient :

$$\boxed{P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = \frac{\tau_e}{\gamma_e}\,\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = 2\pi\rho_0\tau_e^2\,\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')} \tag{4.37}$$

de sorte que $P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$ obéit également à une équation de diffusion [10] :

$$\boxed{(-i\omega - D\Delta_{\boldsymbol{r}'})\,P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')} \tag{4.38}$$

On peut vérifier maintenant que la probabilité totale $P_0 + P_d$ est correctement normalisée [11].

Remarque

Ainsi que le rappelle la figure 4.6, le facteur de structure décrit le processus de collisions successives et ses arguments correspondent à des évènements de collisions. Par contre, la fonction P_d décrit la propagation entre deux points *quelconques* $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$.

[10] En pratique, du fait de leur proportionnalité, on utilisera indifféremment l'appellation *diffuson* pour Γ_ω et P_d.

[11] Cette vérification est assez simple dans l'espace réciproque. Elle est présentée dans le complément C4.1.

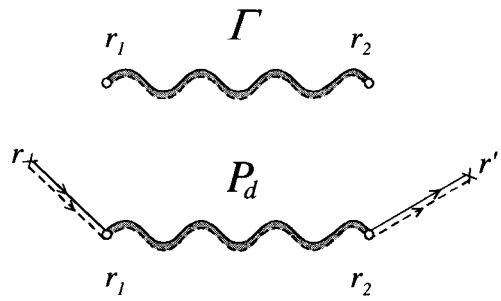


FIG. 4.6 – *Le facteur de structure relie des évènements de collision. La probabilité relie des points $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$ quelconques.*

Remarque

Le chapitre 5 est consacré à l'étude des solutions de l'équation de diffusion pour certaines géométries. Une solution particulièrement utile de (4.38) est celle correspondant à un milieu infini tridimensionnel. À fréquence nulle, elle s'écrit :

$$P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega = 0) = \frac{1}{4\pi D R} \tag{4.39}$$

où $R = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|$. De même, on utilisera la solution de Fourier de (4.38) qui s'écrit

$$\boxed{P_d(\boldsymbol{q}, \omega) = \frac{1}{-i\omega + Dq^2}} \tag{4.40}$$

et qui sera étudiée dans la section C4.1.2.

En résumé, on a montré que, dans la limite $kl_e \gg 1$ de faible désordre, la probabilité quantique s'exprime comme une quantité classique. C'est une conséquence de l'approximation de collisions indépendantes qui moyenne à zéro tous les effets d'interférence. Par ailleurs, l'équation (4.38) a été établie pour le cas d'un milieu invariant par translation, mais sa validité, tout comme pour la fonction de Green moyenne, s'étend au cas d'un système fini de taille caractéristique L, pourvu que $l_e \ll L$.

4.6 Propagation cohérente : le cooperon

La probabilité $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) = P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) + P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$ calculée dans la section précédente est normalisée. On pourrait donc penser avoir décrit tous les processus de collision qui contribuent à la probabilité quantique moyenne. Dans la limite $kl_e \gg 1$, celle-ci se trouverait alors être égale à la probabilité classique de diffusion. Pourtant, il n'est pas certain que, même dans cette limite de faible désordre, tous les processus possibles de collisions aient été pris en compte, même si la somme de leur contributions doit effectivement s'annuler. En effet, nous avons vu (p. 113) que le théorème de réciprocité autorise le retournement d'une des deux amplitudes du diffuson.

Revenons sur la structure de P_d. Elle peut s'exprimer comme une suite d'évènements de collisions indépendants, séparés par une propagation décrite par la probabilité $P_0(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_{i+1})$, produit de deux fonctions de Green conjuguées correspondant à deux trajectoires identiques (fig. 4.7.*a*). Par conséquent, toutes les phases disparaissent dans la moyenne $\overline{G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')G^A(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r})}$ et P_d est une quantité classique.

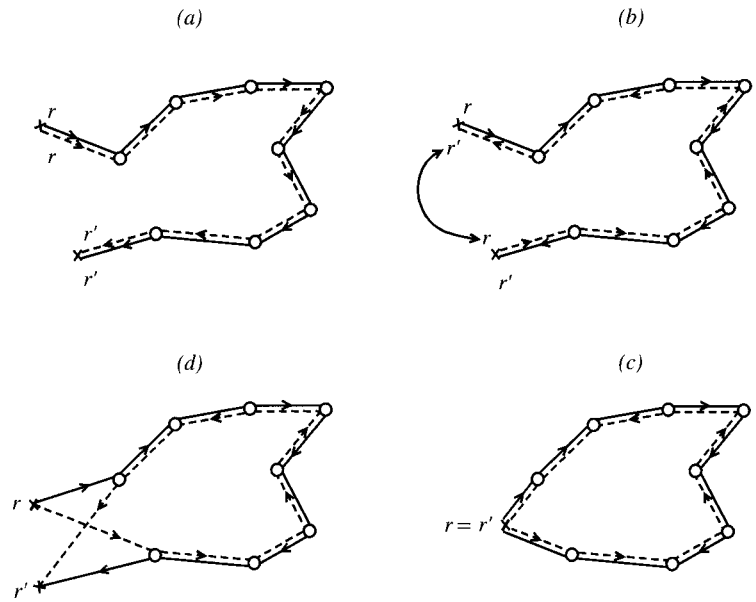


FIG. 4.7 – *a) Contribution classique à la probabilité. b) En inversant une des deux trajectoires, les points* $\boldsymbol{r}$ *et* $\boldsymbol{r}'$ *sont échangés. c) Les phases ne peuvent disparaître que si les points* $\boldsymbol{r}$ *et* $\boldsymbol{r}'$ *coincident. d) Si* $\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{r}'$*, il existe un déphasage entre les deux trajectoires.*

Or, il existe au moins une autre contribution qui n'a pas été prise en compte et qui est à l'origine de phénomènes physiques importants. Pour la mettre en évidence, considérons le produit de deux fonctions de Green décrivant deux trajectoires identiques mais *parcourues dans des sens exactement opposés* comme celles représentées sur la figure 4.7.*b*. Les facteurs de phase $k\mathcal{L}_N$ associés à chacune de ces deux trajectoires (voir la relation 4.21) sont identiques *à condition que le système soit invariant par renversement du sens du temps*. Dans ce cas, la fonction de Green possède la propriété :

$$G^{R,A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) = G^{R,A}(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}, t) \quad . \tag{4.41}$$

Un tel processus pour lequel les deux trajectoires sont parcourues dans des sens opposés est permis par le théorème de réciprocité et il doit donc aussi contribuer à la probabilité. Comme on le voit sur les figures 4.7.*b.c*, ceci n'est

rigoureusement possible que si $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}'$. Par contre, pour $\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{r}'$, les deux trajectoires sont déphasées (fig. 4.7.d). Dans quelle mesure peuvent elles encore contribuer à la probabilité ?

Afin d'évaluer la contribution de ce nouveau type de processus, on considère l'ensemble des diagrammes pour lesquels les deux trajectoires correspondent à des séquences de collisions dans un ordre inverse. La figure 4.8 montre plusieurs représentations équivalentes d'une séquence de cinq collisions, permettant de faire apparaître une structure itérative semblable à celle de P_d, dont elle ne diffère que par l'inversion des arguments.

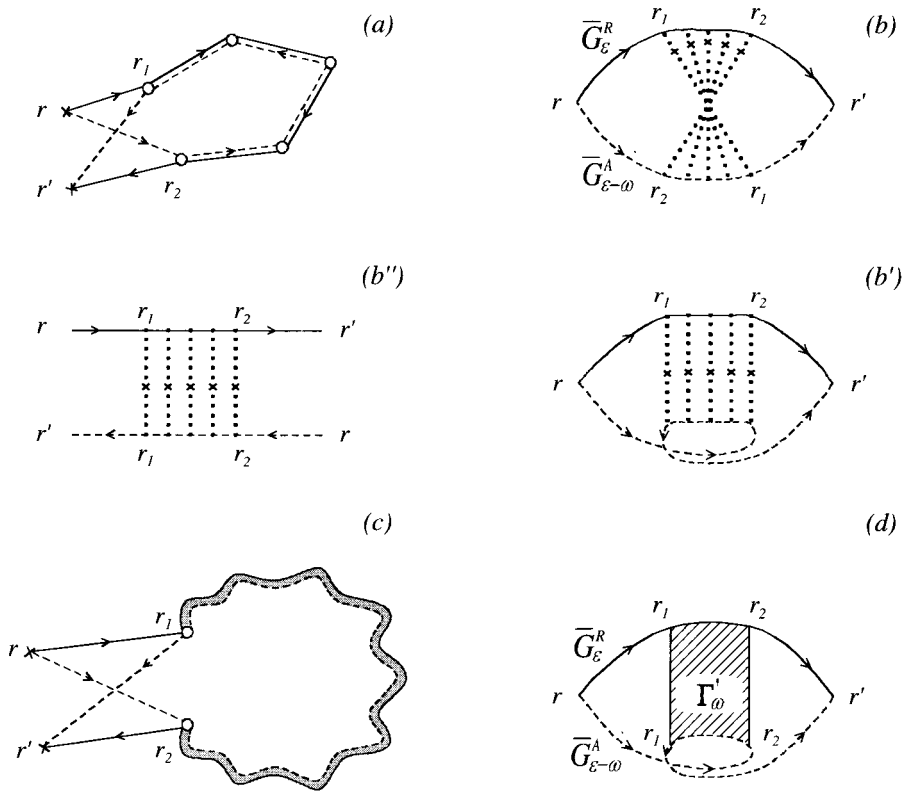


FIG. 4.8 – *a, b, b', b'') Diverses représentations équivalentes d'un processus à 5 collisions contribuant à X_c. Dans la littérature, on rencontre souvent la représentation (b), appelée cooperon ou diagramme croisé. En retournant une des deux trajectoires ($b' \to b''$), on voit que le cooperon a une structure « en échelle » très semblable à celle du diffuson. c,d) Représentations de X_c. Ces deux figures sont à comparer avec les figures 4.4.c,d et montrent pourquoi le cooperon est une fonction à courte portée.*

La probabilité associée à ce nouveau processus, que nous noterons X_c, est appelée *cooperon* [12]. Elle est donnée par la figure 4.8.*d*

$$X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = \frac{1}{2\pi\rho_0}\int \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}')\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_1)\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}) \times \Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \quad . \tag{4.42}$$

Cette contribution à la probabilité a une structure proche de celle de P_d donnée par la relation (4.23), avec *a priori* un nouveau facteur de structure $\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$. Celui-ci est maintenant solution de l'équation intégrale [13] illustrée par la figure 4.9 :

$$\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = \gamma_e\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) + \gamma_e\int \Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}'')\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}_2)\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}'' \tag{4.43}$$

qu'il est utile de comparer à l'équation intégrale (4.24) pour $\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$.

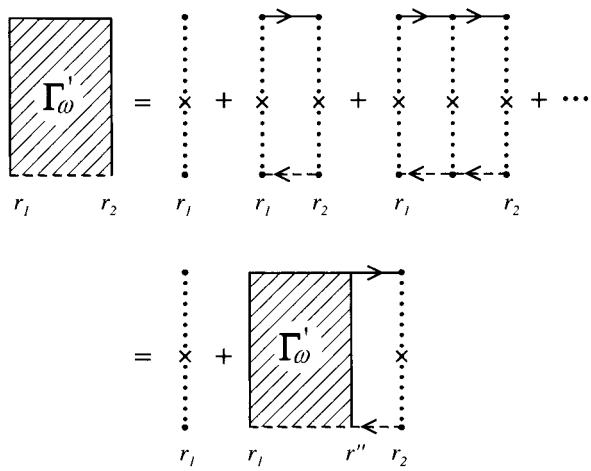


FIG. 4.9 – *Représentation diagrammatique de la structure itérative donnant le facteur de structure* Γ'_ω.

Comme le produit $\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_2)\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_2)$ est égal au produit $\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_2)\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r})$, le facteur de structure $\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ est identique à

[12] La structure des diagrammes (4.8,4.9) qui contribuent à la probabilité X_c ressemble à celle des diagrammes en échelle qui interviennent dans le calcul de la fonction de réponse supraconductrice (électron-électron) étudiée par L.N. Cooper : ils contiennent deux propagateurs reliés par l'interaction attractive BCS. C'est en raison de cette similitude que cette contribution à la probabilité est appelée *cooperon*.

[13] En utilisant les conventions de la figure 3.1.

$\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ calculé précédemment (4.26) pour le diffuson P_d [14]. C'est une conséquence du théorème de réciprocité. Ainsi, par renversement du sens du temps de leur ligne inférieure, les diagrammes des figures 4.5 et 4.9 sont identiques. Par contre le produit des quatre fonctions de Green de l'équation (4.42) ne se réduit plus au produit de deux fonctions P_0 et le déphasage qui en résulte diminue la probabilité $X_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$ dès que $\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{r}'$. En supposant, comme dans la section 4.5, que les variations spatiales sont lentes, l'équation (4.42) devient (en négligeant la dépendance en fréquence ω des fonctions de Green moyennes) :

$$X_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = \frac{\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})}{2\pi\rho_0\gamma_e^2} \left[\gamma_e \int \overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1)\overline{G}_\epsilon^A(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}_1) d\boldsymbol{r}_1\right]^2 \quad . \tag{4.44}$$

Lorsque $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}'$, le terme entre crochets est $f^{1,1}(0)$ donné par la table 3.8 et est égal à 1. Puisque $\Gamma'_\omega = \Gamma_\omega$, on obtient

$$X_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, \omega) = P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, \omega) \quad . \tag{4.45}$$

La probabilité de retour à l'origine est donc doublée par rapport à son expression classique $P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, \omega)$.

Lorsque $\boldsymbol{r} \neq \boldsymbol{r}'$, le terme entre crochets est la fonction $f^{1,1}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$ à courte portée dont on montre (3.104) qu'elle est égale à $g(\boldsymbol{R})$ définie par (3.96). On en déduit :

$$X_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = \frac{\tau_e}{\gamma_e} g^2(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}) \quad . \tag{4.46}$$

À trois dimensions et dans la limite $kl_e \gg 1$, la probabilité $X_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$ est égale à [15]

$$\boxed{X_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = X_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, \omega)\frac{\sin^2 kR}{k^2R^2}e^{-R/l_e}} \tag{4.47}$$

Cette contribution est donc négligeable pour des distances $R = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|$ supérieures au libre parcours moyen l_e. En résumé, les deux contributions du diffuson et du cooperon sont représentées sur la figure 4.10.

Il semblerait que, à cause de cette nouvelle contribution, la probabilité totale ne soit plus normalisée. On montre dans la section C4.2.2 qu'il existe d'autres corrections qui restaurent cette normalisation.

---

[14] En toute rigueur, le premier terme de l'équation intégrale (4.43) devrait contenir *deux* impuretés, puisque le terme à une impureté est déjà pris en compte par le diffuson (voir figs. 4.5 et 4.9). Ce terme, qui est égal à $\gamma_e\delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$ n'existe pas à longue distance. On a choisi de l'insérer dans le facteur de structure Γ'_ω afin que celui-ci coincide avec Γ_ω lorsque le système est invariant par renversement du sens du temps. Voir aussi la note 19, p. 130.

[15] Voir la note 5, p. 108.

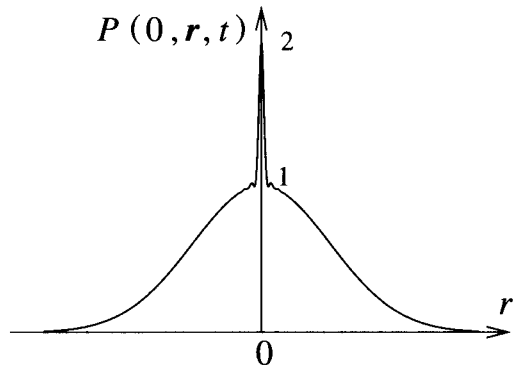


FIG. 4.10 – *Probabilité totale $P(0,\boldsymbol{r},t) = P_d + X_c$ en fonction de la position $\boldsymbol{r}$ le long d'une direction de l'espace. La probabilité est doublée à l'origine, dans un petit volume $\lambda^{d-1}l_e$. Le volume relatif du pic est $\lambda^{d-1}l_e/(Dt)^{d/2}$. Il est maximum pour $t \simeq \tau_e$ et d'ordre $1/(kl_e)^{d-1}$.*

Remarque importante :

Le cooperon n'est pas solution d'une équation de diffusion.

La fonction $X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ est piquée autour de $\boldsymbol{r}' \simeq \boldsymbol{r}$. Elle n'est donc pas solution d'une équation de diffusion. Par contre Γ'_ω, tout comme Γ_ω, est solution d'une équation de diffusion. On définit une probabilité $P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ par

$$P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = \frac{\tau_e}{\gamma_e}\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \tag{4.48}$$

qui est l'analogue de P_d et qui est solution d'une équation de diffusion. Elle est reliée à $X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ par

$$\boxed{X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)g^2(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} \tag{4.49}$$

Par commodité, on utilisera la même appellation *cooperon* pour X_c, P_c et Γ'.

La probabilité intégrée associée au cooperon est obtenue à partir de la relation (4.47) et elle est donnée par (voir exercice 3.14) :

$$\int X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)d\boldsymbol{r}' = X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)\frac{2\pi l_e}{k^2} \quad . \tag{4.50}$$

Plus généralement, cette probabilité intégrée est donnée à toute dimension par :

$$\int X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)d\boldsymbol{r}' = X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)\int_0^\infty g^2(\boldsymbol{R})d\boldsymbol{R} \tag{4.51}$$

c'est-à-dire, en vertu de (3.99)

$$\boxed{\int X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)d\boldsymbol{r}' = X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)\frac{\tau_e}{\pi\rho_0}} \tag{4.52}$$

Le volume $\int_0^\infty g^2(\boldsymbol{R})d\boldsymbol{R} = \tau_e/(\pi\rho_0)$ est proportionnel à $\lambda^{d-1}l_e$. Ce volume s'interprète de la manière suivante. Le cooperon X_c peut être vu comme résultant du croisement quantique d'un diffuson avec lui-même (voir les sections 1.7.1 et C4.2.3). Le volume spatial de la région d'intersection est celui d'un tube de longueur l_e et de section λ^{d-1}. Il exprime le déphasage fini qui résulte du croisement. Il peut s'obtenir en décrivant le diffuson comme un objet de section efficace finie λ^{d-1} (fig. 4.11). Une bonne approximation de $X_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$ est obtenue en remplaçant (4.47) par

$$X_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = \frac{\tau_e}{\pi\rho_0} P_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, \omega)\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') \quad . \tag{4.53}$$

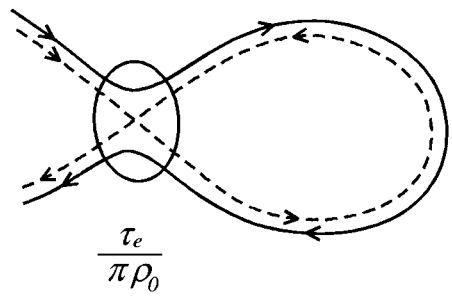


FIG. 4.11 – *Croisement quantique d'un diffuson avec lui-même. Le volume associé à la région d'intersection est* $\tau_e/(\pi\rho_0) \propto \lambda^{d-1}l_e$.

4.7 Transfert radiatif

On s'est intéressé jusque-là à la probabilité $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$ définie dans le cadre de l'équation de Schrödinger. On peut définir de la même manière la probabilité associée à l'équation de Helmholtz. Elle est alors reliée à l'intensité en un point donné du rayonnement électromagnétique considéré comme une onde scalaire. L'approximation du diffuson dans ce contexte est abondamment utilisée [16] et elle est connue sous le nom de *transfert radiatif* [72].

Considérons par exemple le cas d'une source ponctuelle située en un point origine $\boldsymbol{r}_0$. Le champ électrique ψ_ϵ émis par cette source correspond à la fonction de Green $G_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r})$ de l'équation de Helmholtz (2.9). La moyenne sur le désordre de $\psi_\epsilon(\boldsymbol{r})$ est donnée par $\overline{\psi}_\epsilon(\boldsymbol{r}) = \overline{G}_\epsilon(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r})$ et elle se calcule au moyen des méthodes du chapitre 3. L'intensité du champ rayonné en un

[16] Voir le complément C5.2 où l'équation de transfert radiatif est discutée en détail.

point $\boldsymbol{r}$ est [17] :

$$\begin{aligned} I(\boldsymbol{r}) &= \frac{4\pi}{c}|\psi_\epsilon(\boldsymbol{r})|^2 \\ &= \frac{4\pi}{c}G_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r})G_\epsilon^A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_0) \quad . \end{aligned} \tag{4.54}$$

L'intensité moyenne

$$\overline{I}(\boldsymbol{r}) = \frac{4\pi}{c}\overline{G_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r})G_\epsilon^A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_0)} \tag{4.55}$$

a la même structure que la probabilité P introduite en (4.9) mais qu'il nous faut adapter au cas de l'équation de Helmholtz, soit

$$\boxed{P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \frac{4\pi}{c}\overline{G_\epsilon^R(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')G_\epsilon^A(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})}} \tag{4.56}$$

où les deux fonctions de Green sont prises à la même fréquence. Plus généralement, on peut considérer la fonction de corrélation de deux champs $\psi_\epsilon(\boldsymbol{r})$ et $\psi^*_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}')$ à deux énergies différentes :

$$\overline{\psi_\epsilon(\boldsymbol{r})\psi^*_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}')} = \overline{G_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r})G^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_0)} \quad . \tag{4.57}$$

Cette fonction de corrélation n'est pas directement reliée à la probabilité $P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$, car elle fait intervenir trois points au lieu de deux.

En négligeant les corrélations entre fonctions d'onde, comme on l'a fait dans la section 4.3, on obtient l'équivalent de la contribution de Drude-Boltzmann (4.17), c'est-à-dire l'intensité du rayonnement qui n'aurait pas subi de collision jusqu'à une distance R de la source :

$$I_0(R) = \frac{1}{4\pi R^2 c}e^{-R/l_e} \quad . \tag{4.58}$$

L'intensité rayonnée à des distances plus grandes que l_e résulte de processus de diffusion multiple. On peut donc chercher pour la fonction de corrélation $\overline{\psi_\epsilon(\boldsymbol{r})\psi^*_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}')}$ et pour l'intensité $\overline{I}(\boldsymbol{r})$ les contributions classique et cohérente de phase, c'est-à-dire celles du diffuson et du cooperon. La contribution du diffuson est obtenue à partir de la figure 4.12 et s'écrit de manière analogue à (4.23)

$$\begin{aligned} \overline{\psi_\epsilon(\boldsymbol{r})\psi^*_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}')} &= \overline{\psi}_\epsilon(\boldsymbol{r})\overline{\psi}^*_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}') + \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \overline{\psi}_\epsilon(\boldsymbol{r}_1)\overline{\psi}^*_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}_1) \\ &\quad \times \Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r})\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_2) \end{aligned} \tag{4.59}$$

[17] Dans cette relation, la normalisation a été choisie afin que l'intensité obéisse à une équation de Laplace avec une source dont l'amplitude est égale à l'unité (relation 4.66). Voir aussi la note 3, p. 345.

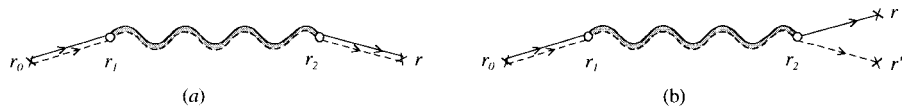


FIG. 4.12 – *a) Représentation de l'intensité moyenne $\overline{I}(\boldsymbol{r}) = P(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r})$, solution de l'équation (4.60). b) Représentation de la fonction de corrélation des champs.*

qui, pour $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}'$, donne l'intensité moyenne rayonnée $\overline{I}(\boldsymbol{r})$

$$\begin{aligned}\overline{I}(\boldsymbol{r}) &= I_0(\boldsymbol{r}) + I_d(\boldsymbol{r}) \\ &= I_0(\boldsymbol{r}) + \frac{4\pi}{c}\int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 |\overline{\psi}_\epsilon(\boldsymbol{r}_1)|^2 \Gamma(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) |\overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r})|^2 \qquad (4.60)\end{aligned}$$

où $I_0(\boldsymbol{r})$ est la contribution (4.58) de Drude-Boltzmann et $I_d(\boldsymbol{r})$ celle du diffuson [18]. La relation pour I_d est équivalente à l'équation (4.25) écrite pour le cas de l'équation de Schrödinger. Le facteur de structure Γ obéit à l'équation (4.24). De même, la contribution du cooperon est immédiate et s'obtient à partir de la figure 4.13, ce qui donne pour l'intensité moyenne rayonnée $I_c(\boldsymbol{r})$ correspondante, une relation analogue à (4.42) :

$$I_c(\boldsymbol{r}) = \frac{4\pi}{c}\int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \overline{\psi}_\epsilon(\boldsymbol{r}_1)\overline{\psi}_\epsilon^*(\boldsymbol{r}_2)\Gamma'(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)\overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r})\overline{G}_\epsilon^A(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_1) \qquad (4.61)$$

où Γ' est donné par une relation équivalente à (4.43).

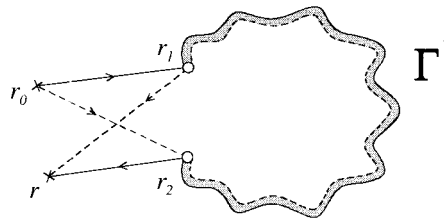


FIG. 4.13 – *Contribution du cooperon à l'intensité.*

Remarque

Les équations précédentes correspondent au cas d'une source localisée spatialement, c'est-à-dire représentée par une fonction δ. Les relations (4.60) et (4.61) peuvent se généraliser au cas d'une source quelconque décrite par une fonction $j(\boldsymbol{r})$. Dans ce cas, comme on l'a vu en (3.58), $\overline{\psi}_\epsilon(\boldsymbol{r})$ n'est plus simplement une fonction de Green, mais elle est donnée par

$$\overline{\psi}_\epsilon(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r}' j(\boldsymbol{r}')\overline{G}_\epsilon(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}) \quad . \qquad (4.62)$$

[18] Dorénavant, on adopte la notation $\Gamma_{\omega=0} = \Gamma$.

Dans la limite diffusive, la relation (4.60) après intégration, s'écrit :

$$\boxed{I_d(\boldsymbol{r}) = P_d(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}) = \frac{l_e^2}{4\pi c}\Gamma(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r})} \tag{4.63}$$

qui est l'équivalent de la relation (4.37). Par ailleurs, dans cette limite, la relation (4.24) conduit à l'équation de diffusion pour Γ, équivalent de (4.34)

$$-D\Delta_{\boldsymbol{r}}\Gamma(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}) = \frac{\gamma_e}{\tau_e}\delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) \quad , \tag{4.64}$$

où la constante de diffusion D est donnée par

$$D = \frac{cl_e}{d} \quad . \tag{4.65}$$

À l'aide de (4.63), et puisque $\gamma_e = 4\pi/l_e$, on obtient également une équation de diffusion pour l'intensité :

$$-D\Delta I_d(\boldsymbol{r}) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0) \tag{4.66}$$

dont la solution pour l'espace libre à $d = 3$ est

$$\boxed{I_d(R) = \frac{1}{4\pi DR}} \tag{4.67}$$

avec $R = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_0|$.

Complément C4.1 Diffuson et cooperon dans l'espace réciproque

En principe, le diffuson et le cooperon sont respectivement les solutions des équations (4.25) et (4.42). Ces solutions sont plus faciles à obtenir en transformée de Fourier car, dans l'espace réciproque, leur structure est celle d'une série géométrique. Le but de ce complément est de mettre en évidence cette structure.

C4.1.1 $P_0(\boldsymbol{q},\omega)$

On introduit d'abord la quantité $P_0(\boldsymbol{q},\omega)$, transformée de Fourier de $P_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$. De la relation (4.16), on déduit :

$$P_0(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{2\pi\rho_0\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) \quad . \tag{4.68}$$

On définit aussi

$$\tilde{P}_0(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{2\pi\rho_0}\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k}+\frac{\boldsymbol{q}}{2})\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{k}-\frac{\boldsymbol{q}}{2}) \tag{4.69}$$

de sorte que

$$P_0(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \tilde{P}_0(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\omega) \quad . \tag{4.70}$$

Calculons explicitement cette somme :

$$P_0(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{2\pi\rho_0\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \frac{1}{\epsilon-\epsilon(\boldsymbol{k})+\frac{i}{2\tau_e}}\;\frac{1}{\epsilon-\omega-\epsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})-\frac{i}{2\tau_e}} \quad . \tag{4.71}$$

Dans la limite diffusive où $ql_e \ll 1$, on a $q \ll k$. On peut donc linéariser la relation de dispersion $\epsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) \simeq \epsilon(k) - \boldsymbol{v}.\boldsymbol{q}$ avec $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{k}/m$. En introduisant la densité d'états $\rho_0(\epsilon)$, qui est supposée ne pas avoir d'accident autour de ϵ, on obtient :

$$P_0(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{2\pi\rho_0}\int \frac{1}{\epsilon-\eta+\frac{i}{2\tau_e}}\;\frac{1}{\epsilon-\omega-\eta+\boldsymbol{v}.\boldsymbol{q}-\frac{i}{2\tau_e}}\;\rho_0\;d\eta d\varpi \tag{4.72}$$

$$= \tau_e\int \frac{d\varpi}{1-i\omega\tau_e+i\boldsymbol{v}.\boldsymbol{q}\tau_e} \quad , \tag{4.73}$$

où $\varpi = (\boldsymbol{k},\boldsymbol{q})$ est l'angle solide normalisé déterminé par les deux vecteurs $\boldsymbol{q}$ et $\boldsymbol{k}$. Dans la limite diffusive $ql_e \ll 1$ et $\omega\tau_e \ll 1$, on développe le dénominateur et, en utilisant les relations $\int d\varpi \boldsymbol{v}.\boldsymbol{q} = 0$ et $\int d\varpi(\boldsymbol{v}.\boldsymbol{q})^2 = \frac{v^2q^2}{d}$ où v est la

vitesse quadratique moyenne et d est la dimension d'espace, on obtient :

$$\boxed{P_0(\boldsymbol{q},\omega) = \tau_e(1 + i\omega\tau_e - Dq^2\tau_e + \cdots)} \tag{4.74}$$

où le coefficient de diffusion est égal à $D = \frac{v^2}{d}\tau_e = \frac{vl_e}{d}$.

Enfin, on définit la quantité

$$P_0(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{\Omega}\sum_k \tilde{P}_0(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\omega) \tag{4.75}$$

où la somme est effectuée sur le module de $\boldsymbol{k}$ et pas sur sa direction et où $\hat{\boldsymbol{s}} = \boldsymbol{k}/k$. On déduit de la relation (4.73) que cette fonction peut se mettre sous la forme :

$$P_0(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{q},\omega) = \tau_e f_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{q}) \tag{4.76}$$

où $f_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{q})$ est égale à :

$$f_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{q}) = \frac{1}{1 - i\omega\tau_e + i\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{q}l_e} \quad . \tag{4.77}$$

Exercice 4.4 : Montrer que, à trois dimensions,

$$P_0(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{qv}\arctan\frac{ql_e}{1 - i\omega\tau_e} \tag{4.78}$$

où $q = |\boldsymbol{q}|$. Montrer que, à deux dimensions,

$$P_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = \frac{e^{i\omega R/v - R/l_e}}{2\pi Rv} \tag{4.79}$$

ou

$$P_0(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{\tau_e}{\sqrt{(1 - i\omega\tau_e)^2 + q^2 l_e^2}} \quad . \tag{4.80}$$

Vérifier le développement (4.74).

C4.1.2 Le diffuson

L'équation intégrale (4.24) pour Γ_ω est difficile à résoudre dans l'espace réel et on n'a pu le faire que dans la limite de variations lentes. Dans l'espace réciproque, cette équation intégrale s'exprime comme la somme d'une série géométrique, ce qui conduit à une expression simple de la probabilité P_d valable au-delà de l'approximation de diffusion. Dans un milieu invariant par translation, la transformée de Fourier $\Gamma_\omega(\boldsymbol{q})$ de $\Gamma_\omega(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$, solution de l'équation intégrale (4.24), est donnée par

$$\Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) = \gamma_e + \frac{\gamma_e}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})\Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) \quad . \tag{4.81}$$

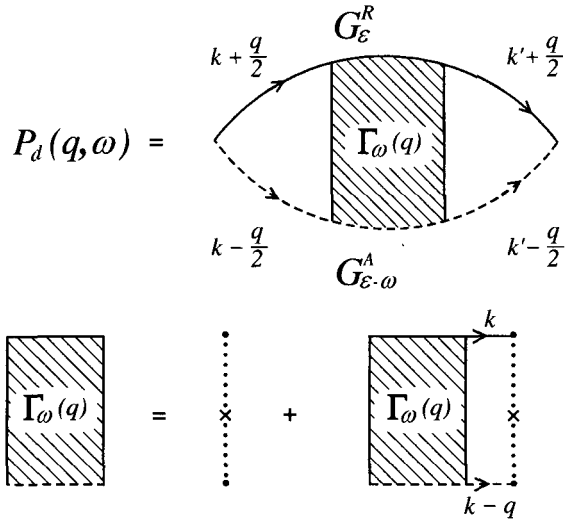


FIG. 4.14 – *Représentation diagrammatique de la probabilité $P_d(\boldsymbol{q},\omega)$ et du facteur de structure $\Gamma_\omega(\boldsymbol{q})$. On retrouve, bien entendu, une structure tout à fait analogue à celle obtenue dans l'espace réel sur les figures 4.4 et 4.5.*

Cette équation a la structure représentée sur la figure 4.14. Sous cette forme, $\Gamma_\omega(\boldsymbol{q})$ se factorise et s'écrit

$$\Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_e}{1 - P_0(\boldsymbol{q},\omega)/\tau_e} \tag{4.82}$$

où $P_0(\boldsymbol{q},\omega)$ est donné par (4.68). Par ailleurs, l'équation (4.25) devient :

$$P_d(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{2\pi\rho_0}{\Omega^2} \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \tilde{P}_0(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\omega)\tilde{P}_0(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{q},\omega)\ \Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) \tag{4.83}$$

où $\tilde{P}_0(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\omega)$ est défini par (4.69). Dans cette équation le facteur de structure ne dépend ni de $\boldsymbol{k}$, ni de $\boldsymbol{k}'$. Les sommes se factorisent donc et font apparaître la probabilité $P_0(\boldsymbol{q},\omega)$. On obtient alors :

$$\boxed{P_d(\boldsymbol{q},\omega) = 2\pi\rho_0 P_0(\boldsymbol{q},\omega)^2\ \Gamma_\omega(\boldsymbol{q})} \tag{4.84}$$

ce qui mène à

$$\boxed{P_d(\boldsymbol{q},\omega) = P_0(\boldsymbol{q},\omega)\frac{P_0(\boldsymbol{q},\omega)/\tau_e}{1 - P_0(\boldsymbol{q},\omega)/\tau_e}} \tag{4.85}$$

où $P_0(\boldsymbol{q},\omega)$ a été calculé explicitement à deux et trois dimensions (voir exercice 4.4). La probabilité $P = P_0 + P_d$ est donnée par

$$P(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{P_0(\boldsymbol{q},\omega)}{1 - P_0(\boldsymbol{q},\omega)/\tau_e} \tag{4.86}$$

transformée de Fourier de (4.29). Pour un système invariant par translation, l'expression (4.85) est valable *au-delà de l'approximation de diffusion* puisqu'on n'a fait aucune hypothèse sur les variations temporelle et spatiale de P_d. On étudiera cette solution ainsi que la validité de l'approximation de diffusion dans le complément C5.1.

Remarque : Normalisation de la probabilité P

Compte tenu de ce que $P_0(\boldsymbol{q}=0,\omega) = \tau_e/(1 - i\omega\tau_e)$, on vérifie que la probabilité $P = P_0 + P_d$ est telle que :

$$P(\boldsymbol{q}=0,\omega) = \frac{i}{\omega} \tag{4.87}$$

qui est la condition de normalisation (4.11). La normalisation de la probabilité exprime une loi de conservation : celle du nombre de particules (ou de l'énergie pour les ondes). Cette loi de conservation s'exprime aussi par la divergence de $P_d(\boldsymbol{q},\omega=0)$ pour $q=0$. Ce mode de diffusion est connu dans la littérature sous le nom de mode de Goldstone.

À partir de (4.82) et (4.85), on obtient dans la limite diffusive et en utilisant l'expression (4.74) pour $P_0(\boldsymbol{q},\omega)$, les expressions suivantes pour le facteur de structure $\Gamma_\omega(\boldsymbol{q})$:

$$\Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_e}{\tau_e}\frac{1}{-i\omega + Dq^2} \tag{4.88}$$

et pour la probabilité $P_d(\boldsymbol{q},\omega)$:

$$\boxed{P_d(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{-i\omega + Dq^2}} \tag{4.89}$$

dont les transformées de Fourier sont bien solutions des équations de diffusion (4.34) et (4.38). Notons par ailleurs que, dans la limite diffusive $P(\boldsymbol{q},\omega) \simeq P_d(\boldsymbol{q},\omega)$ de sorte que la probabilité totale est aussi solution de l'équation de diffusion (4.38).

C4.1.3 Le cooperon

On vient de voir que le diffuson $P_d(\boldsymbol{q},\omega)$ a une structure itérative simple. On peut se demander ce qu'il en est pour le cooperon $X_c(\boldsymbol{q},\omega)$. La transformation de Fourier de l'équation intégrale (4.42) donne :

$$X_c(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{2\pi\rho_0}{\Omega^2}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} \tilde{P}_0(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\omega)\tilde{P}_0(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{q},\omega)\Gamma'_\omega(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}') \tag{4.90}$$

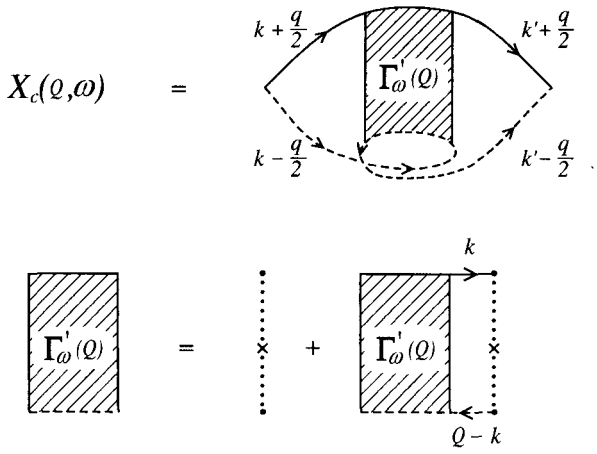


FIG. 4.15 – *Représentation diagrammatique du cooperon $X_c(\boldsymbol{q},\omega)$ et du facteur de structure $\Gamma'_\omega(\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')$ dans l'espace réciproque. On retrouve pour ces diagrammes une structure analogue à celle des figures 4.8 et 4.9.*

où $\tilde{P}_0(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\omega)$ est donné par (4.69). La comparaison de cette relation et de (4.83) pour le diffuson est instructive. Ces deux quantités ont des structures très voisines. Pour le diffuson, le vecteur d'onde qui apparaît dans le facteur de structure est la *différence* des vecteurs d'onde $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$, tandis que pour le cooperon, c'est leur *somme* qui apparaît.

Le facteur de structure $\Gamma'_\omega(\boldsymbol{Q}=\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')$ obéit à une équation intégrale schématisée par la figure 4.15 et similaire à celle du facteur de structure $\Gamma_\omega(\boldsymbol{q})$. La transformée de Fourier de (4.26) donne

$$\Gamma'_\omega(\boldsymbol{Q}) = \gamma_e + \frac{\gamma_e}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{k})\Gamma'_\omega(\boldsymbol{Q}) \tag{4.91}$$

avec $\overline{G}(\boldsymbol{Q}-\boldsymbol{k}) = \overline{G}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{Q})$. Le facteur de structure Γ'_ω du cooperon est donc identique à celui (4.81) du diffuson [19]

$$\Gamma'_\omega(\boldsymbol{Q}) = \frac{\gamma_e}{1-P_0(\boldsymbol{Q},\omega)/\tau_e} \tag{4.93}$$

et dans la limite diffusive,

$$\Gamma'_\omega(\boldsymbol{Q}) = \frac{\gamma_e}{\tau_e}\frac{1}{-i\omega+DQ^2} \quad . \tag{4.94}$$

[19]En toute rigueur, puisque le premier terme de Γ'_ω contient deux impuretés, Γ'_ω est égal à

$$\Gamma'_\omega(\boldsymbol{Q}) = \frac{\gamma_e P_0(\boldsymbol{Q},\omega)/\tau_e}{1-P_0(\boldsymbol{Q},\omega)/\tau_e} \quad . \tag{4.92}$$

Les expressions (4.92) et (4.93) sont identiques dans la limite diffusive. Voir aussi la note 14, p. 120.

Comme pour le diffuson, le calcul de $X_c(\boldsymbol{q},\omega)$ est simple dans la limite diffusive où on néglige la dépendance en $\boldsymbol{q}$, $\boldsymbol{Q}$ et ω des fonctions de Green moyennes. En utilisant (4.90) et $\boldsymbol{k} \simeq -\boldsymbol{k}'$, on obtient :

$$X_c(\boldsymbol{q},\omega) \simeq \frac{1}{2\pi\rho_0\Omega^2}\sum_{\boldsymbol{k}} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{k})\sum_{\boldsymbol{Q}}\Gamma'_\omega(\boldsymbol{Q}) \quad . \tag{4.95}$$

La somme sur $\boldsymbol{k}$ est égale à $4\pi\rho_0\tau_e^3$ (voir la table 3.8 et la relation 3.106). En utilisant (4.94), on obtient

$$\boxed{X_c(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{\tau_e}{\pi\rho_0\Omega}\sum_{\boldsymbol{Q}}\frac{1}{-i\omega + DQ^2}} \tag{4.96}$$

La comparaison de (4.96) avec la probabilité $P_d(\boldsymbol{q},\omega)$ donnée par (4.89) appelle deux remarques :

- À l'approximation de diffusion $X_c(\boldsymbol{q},\omega)$ ne dépend pas de $\boldsymbol{q}$. Ceci traduit le fait que le cooperon est localisé dans l'espace réel. La relation (4.96) apparaît alors comme la transformée de Fourier de (4.53).

- Dans l'expression (4.83) pour le diffuson, tous les vecteurs $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$ contribuent. Autrement dit, un paquet d'onde injecté dans une direction $\boldsymbol{k}$ peut sortir, après diffusion, dans n'importe quelle direction $\boldsymbol{k}'$.

  Par contre, dans l'expression (4.90), la fonction $\Gamma'_\omega(\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}')$ est piquée autour de $\boldsymbol{Q} \simeq 0$, et seuls contribuent au cooperon les vecteurs $\boldsymbol{k}'$ voisins de $-\boldsymbol{k}$. On peut donc associer à la fonction Γ'_ω une largeur angulaire $\Delta\theta \simeq Q/k$ de l'ordre de $1/kl_e$. Dans la limite de faible désordre, cette contribution est petite, elle est néanmoins directement mesurable par des expériences d'optique évoquées dans la section 1.4 du chapitre d'introduction et qui seront étudiées en détail au chapitre 8.

Remarque importante : $X_c(\boldsymbol{q},\omega)$ et $P_c(\boldsymbol{Q},\omega)$

Le cooperon $X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ est une fonction piquée autour de $\boldsymbol{r}' \simeq \boldsymbol{r}$. Cela se traduit par le fait que $X_c(\boldsymbol{q},\omega)$ est à peu près indépendant de $\boldsymbol{q}$ et n'est pas solution d'une équation de diffusion. Par contre, la transformée de Fourier $P_c(\boldsymbol{Q},\omega)$ de $P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ définie par la relation (4.48) est proportionnelle au facteur de structure $\Gamma'_\omega(\boldsymbol{Q})$:

$$P_c(\boldsymbol{Q},\omega) = 2\pi\rho_0\tau_e^2\,\Gamma'_\omega(\boldsymbol{Q}) \tag{4.97}$$

et elle est solution d'une équation de diffusion. Par ailleurs $X_c(\boldsymbol{q},\omega)$ est donnée par

$$X_c(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{Q}} a(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{Q})P_c(\boldsymbol{Q},\omega) \tag{4.98}$$

où $a(\boldsymbol{q})$ est la transformée de Fourier de $g^2(\boldsymbol{r})$. Remplacer $g^2(\boldsymbol{r})$ par une fonction δ dans (4.53) revient à supposer que $a(\boldsymbol{q})$ est constant et à retrouver (4.96). Comme nous l'avons déjà remarqué précédemment, il semble que du fait de la contribution du cooperon, la probabilité totale ne soit plus normalisée. Ce point est abordé dans la section C4.2.2.

Remarque : Les diagrammes croisés de Langer et Neal

Le facteur de structure $\Gamma'_\omega(\boldsymbol{Q})$ obtenu en sommant la série représentée sur la figure 4.15, dépend de l'impulsion $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}'$. L'importance des diagrammes croisés pour l'étude des propriétés des milieux aléatoires a été discutée pour la première fois par Langer et Neal [73]. La motivation de leur travail procédait de la remarque que, contrairement aux propriétés d'équilibre, les propriétés de transport des gaz classiques n'ont pas de développement simple et analytique en fonction de la densité n du gaz. Ils ont voulu voir si ce résultat bien connu (par exemple dans les gaz de Lorentz [74, 75]) apparaissait aussi dans le cas quantique. Pour cela, ils ont considéré la résistivité d'un gaz d'électrons libres dégénéré. Ils ont remarqué qu'il existait une classe de diagrammes, les diagrammes croisés, qui produisait à un ordre donné $s \geq 3$ du développement, des termes de la forme $n_i^s \ln n_i$ où n_i est la densité de centres diffuseurs. Ces contributions non analytiques sont tout à fait analogues à celles obtenues dans le cas classique.
Langer et Neal n'ont considéré que les contributions des diagrammes croisés à un ordre donné sans envisager de les resommer. Ils ont montré que chaque terme de la série géométrique dont la somme est (4.93), donne après sommation sur $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$, une contribution nonanalytique en $\gamma_e^3 \ln \gamma_e$. Il est donc préférable de sommer d'abord la série représentée par la figure 4.15 des diagrammes croisés et ensuite de faire la somme sur $\boldsymbol{Q} = \boldsymbol{k} + \boldsymbol{k}'$ afin de trouver la contribution du cooperon à la probabilité ainsi qu'à la conductivité électrique comme nous le verrons en détail dans la section 7.3. Ce calcul, maintenant standard, du cooperon a été ultérieurement utilisé pour discuter le comportement anormale de la diffusivité dans les gaz de Lorentz quantiques [75].

Complément C4.2 Boîtes de Hikami et croisement de diffusons

C4.2.1 Les boîtes de Hikami

La notion de croisement quantique de diffusons ou de cooperons est essentielle pour comprendre les effets d'interférence dans les systèmes diffusifs. Ces croisements sont décrits par des combinaisons particulières de fonctions de Green moyennes, combinaisons connues dans la littérature sous le nom de *boîtes de Hikami* [76, 77] [20]. On considère ici la boîte de Hikami, notée H, construite à partir de quatre fonctions de Green moyennes alternativement avancées et retardées (fig. 4.16). H est une fonction réelle de quatre arguments, $H(\{\boldsymbol{r}_i\}) = H(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \boldsymbol{r}_4)$. Elle est constituée de la somme de trois diagrammes,

$$H(\{\boldsymbol{r}_i\}) = H^{(A)}(\{\boldsymbol{r}_i\}) + H^{(B)}(\{\boldsymbol{r}_i\}) + H^{(C)}(\{\boldsymbol{r}_i\}) \tag{4.99}$$

dont nous allons montrer qu'il forment une combinaison particulière. Notons d'abord la symétrie

$$H^{(C)}(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \boldsymbol{r}_4) = H^{(B)}(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \boldsymbol{r}_4, \boldsymbol{r}_1) \quad . \tag{4.100}$$

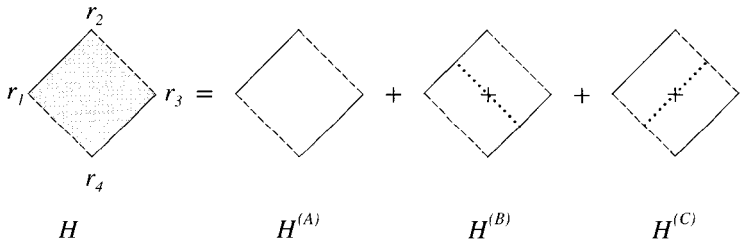


FIG. 4.16 – *Boîte de Hikami $H(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \boldsymbol{r}_4)$. Pour obtenir la fonction $H(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$, on intègre sur deux points opposés.*

En intégrant sur deux des variables $\boldsymbol{r}_i$ (opposées sur la figure 4.16), on définit la fonction

$$H(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') = \int d\boldsymbol{r}_2 d\boldsymbol{r}_4 H(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}_4) \tag{4.101}$$

et en intégrant sur une troisième variable, on obtient

$$H = \int d\boldsymbol{r}_2 d\boldsymbol{r}_3 d\boldsymbol{r}_4 H(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3, \boldsymbol{r}_4) \quad . \tag{4.102}$$

[20] C'est la dénomination couramment utilisée, mais elles ont aussi été introduites dans la référence [76].

Du fait de l'invariance par translation, la première intégrale ne dépend que de $\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$ et la seconde est une constante. En particulier [21], de la table 3.8, on déduit les constantes :

$$H^{(A)} = \frac{1}{\gamma_e} f^{2,2}(0) = \begin{cases} 4\pi\rho_0\tau_e^3 & \textbf{Schrödinger} \\ \dfrac{l_e^3}{8\pi k^2} & \textbf{Helmholtz} \end{cases} \tag{4.103}$$

et

$$H^{(B)} = H^{(C)} = \frac{1}{\gamma_e}\left[f^{1,2}(0)\right]^2 = \begin{cases} -2\pi\rho_0\tau_e^3 & \textbf{Schrödinger} \\ -\dfrac{l_e^3}{16\pi k^2} & \textbf{Helmholtz} \end{cases} \tag{4.104}$$

On vérifie aussi la propriété suivante

$$H = \int H(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r} = H^{(A)} + H^{(B)} + H^{(C)} = 0 \quad . \tag{4.105}$$

Cette propriété est remarquable. On montre dans prochaine la section qu'elle traduit la normalisation de la probabilité, c'est-à-dire la conservation du nombre de particules.

La dépendance spatiale de $H^{(A)}(\boldsymbol{R})$ est donnée par

$$H^{(A)}(\boldsymbol{R}) = \frac{1}{\gamma_e^2}|f^{1,1}(\boldsymbol{R})|^2 = \frac{1}{\gamma_e^2}g^2(\boldsymbol{R}) \quad . \tag{4.106}$$

Les fonctions $H^{(B)}(\boldsymbol{R})$ et $H^{(C)}(\boldsymbol{R})$ sont plus complexes et sont calculées dans l'exercice 4.5.

Exercice 4.5 : Montrer que la transformée de Fourier $H(\boldsymbol{q})$ de $H(\boldsymbol{r})$ vérifie

$$H(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{\Omega}H(-\boldsymbol{q},0,\boldsymbol{q},0) \quad , \tag{4.107}$$

où $H(\{\boldsymbol{q}_i\})$ et la transformée de Fourier de $H(\{\boldsymbol{r}_i\})$. En dimension $d=3$, montrer les relations :

$$\begin{aligned} H^{(A)}(\boldsymbol{q}) &= \frac{1}{\gamma_e^2}a(\boldsymbol{q}) \\ H^{(B)}(\boldsymbol{q}) = H^{(C)}(\boldsymbol{q}) &= -\frac{1}{4\gamma_e^3\tau_e^2}a(\boldsymbol{q})^2 \end{aligned} \tag{4.108}$$

où la fonction $a(\boldsymbol{q})$ est la transformée de Fourier de $g^2(\boldsymbol{r})$ donnée par (3.97). Elle ne dépend que de $q=|\boldsymbol{q}|$ et elle est égale à

$$a(q) = \frac{\pi}{k^2 q}\left[\arctan(2k-q)l_e + 2\arctan ql_e - \arctan(2k+q)l_e\right] \quad . \tag{4.109}$$

---

[21] Les expressions écrites pour les ondes le sont en trois dimensions. Elles sont aussi utilisables pour les électrons. Par contre, les expressions écrites pour les électrons et qui font intervenir la densité d'états ρ_0 sont valables en toute dimension. Par ailleurs, voir la note 5, p. 108.

• Montrer que, pour $q \to 0$,

$$a(q) = 2\gamma_e\tau_e^2\left(1 - \frac{q^2 l_e^2}{3}\right) = \frac{2\pi l_e}{k^2}\left(1 - \frac{q^2 l_e^2}{3}\right) \quad . \tag{4.110}$$

• Montrer que la fonction $H(\boldsymbol{q})$ est donnée par

$$H(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{\gamma_e^2}\left[a(q) - \frac{1}{2\gamma_e\tau_e^2}a(q)^2\right] \simeq \frac{1}{\gamma_e^2}[a(0) - a(q)] \tag{4.111}$$

et que lorsque $q \to 0$, elle admet le développement

$$H(\boldsymbol{q}) = \frac{l_e^5}{24\pi k^2}q^2 + O(q^4) \tag{4.112}$$

de sorte que

$$\frac{H(\boldsymbol{q})}{H^{(A)}(\boldsymbol{q})} \simeq \frac{1}{3}q^2 l_e^2 = Dq^2\tau_e \quad . \tag{4.113}$$

• Montrer que, lorsque $R \to \infty$, on a

$$\begin{aligned} H^{(A)}(\boldsymbol{R}) &\propto \frac{1}{R^2}e^{-R/l_e} \\ H^{(B)}(\boldsymbol{R}) = H^{(C)}(\boldsymbol{R}) &\propto -\frac{1}{Rl_e}e^{-R/l_e} \end{aligned} \tag{4.114}$$

et que si $R \ll l_e$

$$H^{(B)}(\boldsymbol{R}) \simeq -\frac{1}{\gamma_e^2}\frac{\pi}{16k^2 l_e}\frac{\mathrm{Si}(2kR)}{R} \tag{4.115}$$

où Si est la fonction sinus intégral.

• En déduire que

$$H(\boldsymbol{R} = 0) \simeq \frac{1}{\gamma_e^2}\left(1 - \frac{\pi}{4kl_e}\right) \quad . \tag{4.116}$$

Exercice 4.6 : Vérifier que le diagramme de la figure 4.17 est d'ordre $1/kl_e$ par rapport à ceux de la figure 4.16.

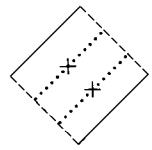


FIG. 4.17 – *Boîte de Hikami d'ordre supérieur.*

À cause des deux fonctions de Green $\overline{G}^A(\boldsymbol{k}'')$ supplémentaires, ce diagramme est égal à :

$$H^{(B')} = H^{(B)} \times \frac{1}{2\pi\rho_0\tau_e}\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}''}\overline{G}_\epsilon^A(\boldsymbol{k}'')\overline{G}_\epsilon^A(\boldsymbol{k}'') \simeq H^{(B)}/kl_e \tag{4.117}$$

car la somme porte sur le produit de deux fonctions de Green avancées (voir l'exercice 3.15).
En déduire une règle systématique pour la valeur d'un tel diagramme en fonction du nombre n de lignes d'impuretés pour $n \geq 2$.

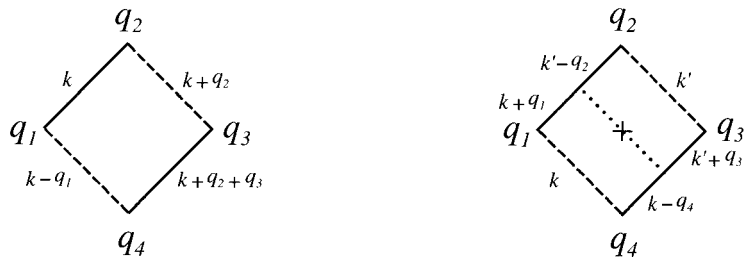


FIG. 4.18 – *Paramétrisation des fonctions de Green choisie pour le calcul de $H^{(A)}(\{\boldsymbol{q}_i\})$ et de $H^{(B)}(\{\boldsymbol{q}_i\})$.*

Le calcul complet de $H(\{\boldsymbol{r}_i\})$ est difficile. On considère ici sa transformée de Fourier $H(\{\boldsymbol{q}_i\})$ dans la limite $\boldsymbol{q}_i \to 0$. La contribution $H^{(A)}$ du diagramme 4.16, détaillée sur la figure 4.18, est donnée par

$$H^{(A)}(\{\boldsymbol{q}_i\}) = \delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0} \sum_{\boldsymbol{k}} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}_2)\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}_2+\boldsymbol{q}_3)\overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}_1) \quad (4.118)$$

où $\delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0}$ est le symbole de Kronecker. Les deux autres diagrammes contiennent une ligne d'impureté supplémentaire et sont donnés par (fig. 4.18) :

$$\begin{aligned} H^{(B)}(\{\boldsymbol{q}_i\}) &= \gamma_e\, \delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0} \sum_{\boldsymbol{k}} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}_4)\overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}_1) \\ &\quad \times \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}'} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}_2)\overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{k}')\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}_3) \qquad (4.119) \\ H^{(C)}(\{\boldsymbol{q}_i\}) &= \gamma_e\, \delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0} \sum_{\boldsymbol{k}} \overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}_1)\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}_2) \\ &\quad \times \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}'} \overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{k}'-\boldsymbol{q}_3)\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k}')\overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{k}'+\boldsymbol{q}_4) \quad . \qquad (4.120) \end{aligned}$$

Si tous les vecteurs d'onde $\boldsymbol{q}_i$ sont nuls, H est nul et on retrouve (4.105). On effectue alors un développement à petit $\boldsymbol{q}_i$, ce qui correspond au régime diffusif (section 4.5). Compte tenu des relations (3.68) et (3.69), chaque fonction de Green se développe de la façon suivante. Pour les électrons [22],

$$\overline{G}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) = \overline{G}(\boldsymbol{k}) + \boldsymbol{v}.\boldsymbol{q}\ \overline{G}(\boldsymbol{k})^2 + (\boldsymbol{v}.\boldsymbol{q})^2\ \overline{G}(\boldsymbol{k})^3 \qquad (4.121)$$

avec $\boldsymbol{v} = \boldsymbol{k}/m$. En insérant ce développement dans l'expression (4.119), les termes linéaires en $\boldsymbol{q}$ disparaissent par symétrie après sommation sur $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$.

[22] Dans les développements (4.121) et (4.128), il existe aussi un terme d'ordre $q^2\overline{G}(\boldsymbol{k})^2$ qui donne une contribution à H beaucoup plus faible, d'ordre $1/kl_e$.

Il reste

$$H^{(B)}(\{\boldsymbol{q}_i\}) = \frac{\Omega\delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0}}{\gamma_e}\Big[f^{2,1} + \frac{v^2}{3}(q_1^2 + q_4^2 - \boldsymbol{q}_1.\boldsymbol{q}_4)f^{4,1}\Big] \times\Big[f^{2,1} + \frac{v^2}{3}(q_2^2 + q_3^2 - \boldsymbol{q}_2.\boldsymbol{q}_3)f^{4,1}\Big] \tag{4.122}$$

où $v = \sqrt{2\epsilon/m}$ est la vitesse associée à l'énergie ϵ. Les coefficients $f^{m,n}$ sont donnés par les relations (3.107, 3.108) et le tableau (3.7). En ne gardant que les termes d'ordre q^2, on obtient

$$H^{(B)}(\{\boldsymbol{q}_i\}) = \frac{\tau_e^2}{\gamma_e}\Big[-1+\frac{l_e^2}{3}(q_1^2+q_2^2+q_3^2+q_4^2-\boldsymbol{q}_1.\boldsymbol{q}_4-\boldsymbol{q}_2.\boldsymbol{q}_3)\Big]\Omega\delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0} \ . \tag{4.123}$$

De même, le diagramme $H^{(C)}$ est égal à

$$H^{(C)}(\{\boldsymbol{q}_i\}) = \frac{\tau_e^2}{\gamma_e}\Big[-1+\frac{l_e^2}{3}(q_1^2+q_2^2+q_3^2+q_4^2-\boldsymbol{q}_1.\boldsymbol{q}_2-\boldsymbol{q}_3.\boldsymbol{q}_4)\Big]\Omega\delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0} \ . \tag{4.124}$$

Enfin, pour $H^{(A)}$, l'expression (4.118) conduit à

$$H^{(A)}(\{\boldsymbol{q}_i\}) = 2\frac{\tau_e^2}{\gamma_e}\Big[1-\frac{l_e^2}{3}(q_1^2+q_2^2+q_3^2+q_4^2+\boldsymbol{q}_1.\boldsymbol{q}_3+\boldsymbol{q}_2.\boldsymbol{q}_4)\Big]\Omega\delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0} \ . \tag{4.125}$$

En sommant ces trois contributions, les termes constants disparaissent. En utilisant la contrainte $\sum_i \boldsymbol{q}_i = 0$ et la relation

$$\Big(\sum_i \boldsymbol{q}_i\Big)^2 = \sum_i q_i^2 + 2\sum_{i<j} \boldsymbol{q}_i.\boldsymbol{q}_j = 0 \quad , \tag{4.126}$$

on obtient pour la somme $H(\{\boldsymbol{q}_i\})$ de ces trois contributions le développement

$$\boxed{H(\{\boldsymbol{q}_i\}) = \Omega h_4\delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0}\Big[\sum_i q_i^2 + \boldsymbol{q}_1.\boldsymbol{q}_2 + \boldsymbol{q}_2.\boldsymbol{q}_3 + \boldsymbol{q}_3.\boldsymbol{q}_4 + \boldsymbol{q}_4.\boldsymbol{q}_1\Big]} \tag{4.127}$$

où $h_4 = l_e^2\tau_e^2/(3\gamma_e) = 2\pi\rho_0 D\tau_e^4$. On peut faire le même calcul pour les ondes [23] et on obtient la même expression (4.127) avec

$$\boxed{h_4 = 2\pi\rho_0 D\tau_e^4 \quad \text{pour les électrons,} \quad \text{et} \quad h_4 = \frac{l_e^5}{48\pi k^2} \quad \text{pour les ondes} \ .} \tag{4.129}$$

[23] Pour des ondes, le développement des fonctions de Green s'écrit

$$\overline{G}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) = \overline{G}(\boldsymbol{k}) + 2\boldsymbol{k}.\boldsymbol{q}\,\overline{G}(\boldsymbol{k})^2 + 4(\boldsymbol{k}.\boldsymbol{q})^2\,\overline{G}(\boldsymbol{k})^3 \quad . \tag{4.128}$$

On peut obtenir d'autres expressions équivalentes à (4.127) en utilisant la contrainte $\sum_i \boldsymbol{q}_i = 0$ et la relation (4.126).

Exercice 4.7 : Boîtes de Hikami d'ordre plus élevé

La condition $\sum \boldsymbol{q}_i = 0$ et la relation (4.126) permettent d'écrire l'expression des boîtes de Hikami sous des formes équivalentes. Montrer en particulier que

$$H(\boldsymbol{q}_i) = \Omega h_4 \delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0}\Big[-\boldsymbol{q}_1\cdot\boldsymbol{q}_3 - \boldsymbol{q}_2\cdot\boldsymbol{q}_4 + \frac{1}{2}\sum q_i^2\Big] \quad . \tag{4.130}$$

Identifier les diagrammes qui interviennent dans le calcul d'une boîte de Hikami *hexagonale* (notée H_6) et, en s'aidant des références [77, 78], montrer que

$$H_6(\boldsymbol{q}_i) = -4\pi\rho_0 D\tau_e^6\, \Omega\delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0}\Big[\sum q_i^2 + \boldsymbol{q}_1\cdot\boldsymbol{q}_2 + \boldsymbol{q}_2\cdot\boldsymbol{q}_3 + \boldsymbol{q}_3\cdot\boldsymbol{q}_4 + \boldsymbol{q}_4\cdot\boldsymbol{q}_5 + \boldsymbol{q}_5\cdot\boldsymbol{q}_6 + \boldsymbol{q}_6\cdot\boldsymbol{q}_1\Big] \quad . \tag{4.131}$$

C4.2.2 Normalisation et coefficient de diffusion

La contribution du cooperon à la probabilité quantique modifie-t-elle la normalisation de cette probabilité ? Le doublement de la probabilité dans un volume $\tau_e/(\pi\rho_0)$ autour de $\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r}$ semble bien violer la normalisation. L'écart est petit et de l'ordre de $1/(kl_e)^{d-1}$ (voir fig. 4.10).

On montre ici qu'il existe d'autres corrections qui préservent la normalisation de la probabilité. En effet, le diagramme représentant le cooperon $X_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$ a la forme illustrée sur la figure 4.8, ou celle topologiquement équivalente de la figure 4.19.*a* en transformée de Fourier. Or, nous avons vu dans la section C4.2.1 et sur la figure 4.16 que ce diagramme est le premier d'un ensemble de trois diagrammes donnant des contributions du même ordre. Pour assurer la normalisation de la probabilité, il faut donc considérer la contribution *de ces trois diagrammes* (fig. 4.19.*b*). Le premier, calculé dans la section 4.6, donne

$$X_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = \frac{1}{2\pi\rho_0} H^{(A)}(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\Gamma'(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) \tag{4.132}$$

où $H^{(A)}(\boldsymbol{R}) = g^2(\boldsymbol{R})/\gamma_e^2$. Les deux autres diagrammes font intervenir les quantités *négatives* (exercice 4.5 et relation 4.115) :

$$H^{(B)}(\boldsymbol{R}) = H^{(C)}(\boldsymbol{R}) \propto -\frac{1}{\gamma_e^2}\frac{1}{kl_e}\frac{\mathrm{Si}(2kR)}{kR}e^{-R/l_e} \tag{4.133}$$

où Si est la fonction sinus intégral. Les contributions de ces deux diagrammes sont négligeables lorsque $R \to 0$ et *la probabilité de retour à l'origine est bien*

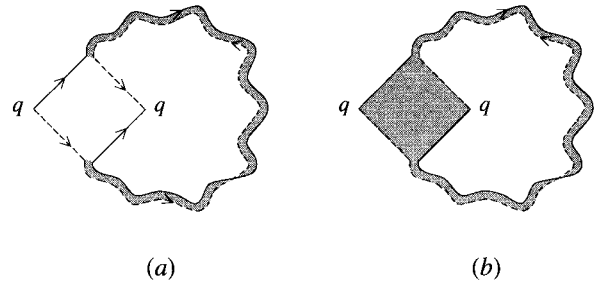


FIG. 4.19 – *Contribution du cooperon à la probabilité. a) Diagramme pour la contribution $X_c(\boldsymbol{q},\omega)$. b) L'habillage de la boîte de Hikami avec des lignes d'impuretés (fig. 4.16) donne des contributions du même ordre qui doivent être prises en compte. Ceci conduit remplacer $X_c(\boldsymbol{q},\omega)$ par $I_c(\boldsymbol{q},\omega) = Dq^2\tau_e X_c(\boldsymbol{q},\omega)$.*

doublée. Par contre, la relation (4.105) implique que l'intégrale de la somme des trois contributions se compense exactement, c'est-à-dire

$$H(\boldsymbol{q}=0) = \int H(\boldsymbol{R})d\boldsymbol{R} = 0 \quad . \tag{4.134}$$

Ainsi, le cooperon X_c, qui a pour effet fondamental d'augmenter la probabilité de retour à l'origine, ne viole pas la condition de normalisation de la probabilité totale qui est assurée par une petite réduction de celle-ci loin de l'origine (mais à des distances de l'ordre de l_e).

On voit donc que c'est l'« habillage » de la boîte de Hikami qui permet de restaurer la normalisation de la probabilité (c'est-à-dire la conservation du nombre de particules). Ceci apparaît clairement si on écrit la probabilité dans l'espace réciproque où la normalisation de la probabilité se traduit par la condition (4.11) :

$$P(\boldsymbol{q}=0,\omega) = \frac{i}{\omega} \quad . \tag{4.135}$$

Le diagramme de la figure 4.19.*a* est égal à (4.96). C'est bien celui qui permet de doubler la probabilité de retour à l'origine. Mais cette contribution étant constante à petit $\boldsymbol{q}$, la probabilité n'est plus conservée. Par contre, en habillant la boîte de Hikami, on remplace ce diagramme par celui de la figure 4.19.*b* qui est égal à :

$$I_c(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{D\tau_e^2 q^2}{\pi\rho_0\Omega}\sum_{\boldsymbol{Q}} \frac{1}{-i\omega + DQ^2} = Dq^2\tau_e X_c(\boldsymbol{q},\omega) \quad , \tag{4.136}$$

résultat obtenu en utilisant la relation (4.113). On voit ainsi qu'habiller une boîte de Hikami revient à la multiplier par $D\tau_e q^2$. Cette contribution tend vers 0 lorsque $q \to 0$ et la probabilité est bien normalisée.

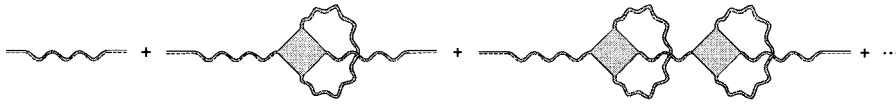


FIG. 4.20 – *Contributions à la probabilité totale $P(\boldsymbol{q},\omega)$. Le premier terme, avec un seul diffuson est $P_d(\boldsymbol{q},\omega)$. La série de perturbation décrite par cette figure conduit à une expression $P'_d(\boldsymbol{q},\omega)$ de la probabilité où le coefficient de diffusion est modifié et est donné par (4.140).*

On peut maintenant se demander s'il ne faut pas ajouter d'autres contributions venant corriger la probabilité classique P_d, constituées d'insertions de boîtes de Hikami (et donc de cooperons). Ainsi, la série constituée des diagrammes de la figure 4.20 fait apparaître des termes de plus en plus divergents puisqu'ils contiennent des puissances successives du diffuson. Cette série s'écrit

$$P'_d(\boldsymbol{q},\omega) = P_d(\boldsymbol{q},\omega) + P_d^2(\boldsymbol{q},\omega)\frac{I_c(\boldsymbol{q},\omega)}{\tau_e^2} + P_d^3(\boldsymbol{q},\omega)\left[\frac{I_c(\boldsymbol{q},\omega)}{\tau_e^2}\right]^2 + \cdots \quad (4.137)$$

Après sommation, on obtient :

$$P'_d(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{P_d(\boldsymbol{q},\omega)}{1 - \frac{P_d(\boldsymbol{q},\omega)I_c(\boldsymbol{q},\omega)}{\tau_e^2}} \quad . \quad (4.138)$$

On constate tout d'abord que l'égalité $I_c(\boldsymbol{q}=0,\omega) = 0$ implique la normalisation de $P'_d(\boldsymbol{q},\omega)$. Par ailleurs, dans la limite des petits vecteurs d'onde, cette probabilité renormalisée garde bien un pôle de diffusion

$$P'_d(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{-i\omega + D'q^2} \quad (4.139)$$

mais dont le coefficient de diffusion est modifié selon :

$$D' = D\left[1 - \frac{X_c(\boldsymbol{q},\omega)}{\tau_e}\right] = D\left[1 - \frac{\Delta}{\pi}\sum_{\boldsymbol{Q}}\frac{1}{-i\omega + DQ^2}\right] \quad . \quad (4.140)$$

Ainsi la prise en compte du cooperon à tous les ordres de perturbation conduit à une réduction du coefficient de diffusion. Ce phénomène appelé *localisation faible* conduit à une réduction de la conductivité (voir la section 7.4).

La renormalisation (4.140) du coefficient de diffusion correspond au régime de faible désordre $kl_e \gg 1$. On n'a retenu dans le développement perturbatif qu'une seule classe de diagrammes et il n'y a pas de raison *a priori* de s'en tenir là. Par exemple, les cooperons de la figure 4.20 pourraient eux-mêmes être habillés par des diffusons. Ainsi Vollhardt et Wölfe [79] ont été amenés à écrire une équation d'auto-cohérence pour le coefficient de diffusion $D(\omega)$ renormalisé

$$D(\omega) = D - \frac{\Delta}{\pi}\sum_{\boldsymbol{Q}}\frac{D(\omega)}{-i\omega + D(\omega)Q^2} \quad . \quad (4.141)$$

La résolution de cette équation permet de décrire le passage vers le régime localisé pour lequel $kl_e \simeq 1$.

C4.2.3 Croisement de deux diffusons

Le diffuson est une contribution classique à la probabilité, c'est-à-dire qu'il ne dépend pas des phases des amplitudes complexes conjuguées qui le constituent. Dans le régime diffusif, il est solution d'une équation de diffusion.

Il apparaît cependant des effets quantiques ou ondulatoires liés à ces amplitudes complexes, lors du croisement de deux diffusons (ou du croisement d'un diffuson avec lui-même). Comme le montre la figure 4.21, ce croisement est décrit par une boîte de Hikami. Cette notion de croisement de diffusons est particulièrement importante. En effet, le diffuson étant une quantité classique, les effets d'interférence ne peuvent donc provenir que de l'existence de ces « croisements quantiques » faisant intervenir les boîtes de Hikami [24]. Ce sont les propriétés combinées des diffusons (ou des cooperons) et des croisements qui sont à l'origine des effets cohérents comme la localisation faible, les fonctions de corrélations de l'intensité lumineuse ou les fluctuations de conductance. Il est donc important d'en avoir une bonne intuition. La figure 4.21 montre qu'un croisement mélange les quatre amplitudes complexes des deux diffusons incidents et les apparie différemment. Les deux diffusons émergents sont ainsi chacun constitués de deux amplitudes provenant respectivement de chacun des diffusons incidents. Le diffuson étant à longue portée, on peut ainsi propager à longue distance des effets cohérents. Une boîte de Hikami apparaît donc comme un objet dont la fonction est de permuter les amplitudes.

On peut d'ores et déjà évaluer qualitativement la probabilité d'un tel croisement. Nous avons vu dans la section 4.6 que le volume associé au croisement de deux trajectoires diffusives est $\lambda^{d-1} l_e$ (fig. 4.11). On peut interpréter ce résultat en considérant qu'un diffuson se propageant pendant un temps t est un objet effectif de longueur $\mathcal{L} = vt$ et de section λ^{d-1}. On peut donc lui associer un volume fini $v\lambda^{d-1}t$. La probabilité de croisement de deux diffusons au bout d'un temps t, dans un système de volume $\Omega = L^d$, est donc proportionnelle au rapport entre le volume d'un diffuson et le volume Ω. Ainsi la probabilité que deux diffusons se croisent une fois ou qu'un diffuson se croise avec lui-même est proportionnelle à [25]

$$p(t) = \frac{\lambda^{d-1} vt}{\Omega} \propto \frac{t}{\rho_0 \hbar \Omega} \quad . \tag{4.142}$$

[24] Il faut prendre garde à ne pas confondre ces croisements « quantiques » avec les croisements d'une marche au hasard classique.

[25] On rappelle que la densité d'états en dimension d est proportionnelle à

$$\rho_0 \propto \frac{1}{\hbar v \lambda^{d-1}} \quad .$$

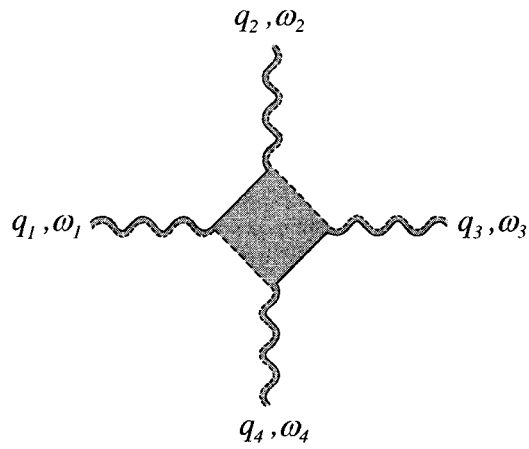


FIG. 4.21 – *Le croisement de deux diffusons apparaît comme un ensemble de quatre diffusons connectés par une boîte de Hikami.*

• Considérons d'abord un système ouvert, par exemple un conducteur relié à des reservoirs ou, en optique, un milieu diffusant sans bord réfléchissant. Le temps pour traverser l'échantillon est, dans le régime diffusif, égal à $\tau_D = L^2/D$ (voir la section 5.5.1). La probabilité d'avoir un croisement de diffusons pendant le temps τ_D est donc donnée par

$$p(\tau_D) = \frac{\tau_D}{\rho_0 \hbar \Omega} = \frac{L^2}{\rho_0 \hbar D \Omega} \simeq \frac{1}{g} \quad . \tag{4.143}$$

Cette probabilité est proportionnelle à l'inverse du nombre sans dimension g. Celui-ci joue un rôle important dans la description des effets cohérents. Pour le cas des électrons dans les métaux, il correspond à la conductance moyenne sans dimension $g = G/(e^2/h)$, où G est donnée par $G = se^2 D \rho_0 L^{d-2}$ (voir chap. 7).

Dans la limite de faible désordre $kl_e \gg 1$, g est grand et les effets de cohérence sont donc faibles. Le rapport $1/g$ est un petit paramètre en fonction duquel on va étudier, en perturbation, les effets cohérents. Ceci permet de classer formellement l'importance de ces effets en fonction du nombre de croisements quantiques.

• Considérons maintenant un système isolé. La probabilité $p(t)$ augmente linéairement et n'est plus limitée par le temps τ_D. L'échelle d'énergie $\Delta = 1/(\rho_0 \Omega)$ représente, pour un système de taille finie, l'écart moyen entre niveaux d'énergie des solutions de l'équation d'onde [26]. On peut donc écrire

$$p(t) = \frac{t}{\rho_0 \hbar \Omega} = \frac{\Delta t}{\hbar} \tag{4.144}$$

[26] Et non pas des solutions de l'équation de diffusion.

et faire apparaître le temps caractéristique défini par $\tau_H = h/\Delta$ au bout duquel cette probabilité de croisement est d'ordre 1. Au-delà de ce temps, appelé *temps de Heisenberg*, il apparaît donc des corrections quantiques à la probabilité. Un milieu diffusant isolé ne peut donc être décrit de manière classique, c'est-à-dire à l'aide du diffuson, que pour des temps inférieurs au temps de Heisenberg [71]. De même les propriétés spectrales d'un système isolé ne peuvent pas être décrites de façon classique pour des énergies plus petites que Δ (chap. 10).

Description quantitative du croisement de deux diffusons

Le croisement de deux diffusons est décrit par la boîte de Hikami calculée dans la section C4.2.1. On considère le cas représenté sur la figure 4.21 où quatre diffusons sont reliés par une boîte [27], les diffusons pouvant éventuellement être pris à des fréquences ω_i finies. En transformée de Fourier, chaque diffuson est, dans le régime diffusif, solution de l'équation de diffusion (4.89) :

$$(-i\omega_i + Dq_i^2)P(\boldsymbol{q}_i, \omega_i) = 1 \quad . \tag{4.145}$$

La boîte de Hikami représentée sur la figure 4.22 relie quatre diffusons caractérisés par les paramètres $\boldsymbol{q}_i$ et ω_i, avec les conditions $\sum_i \boldsymbol{q}_i = 0$ et $\omega_1 + \omega_3 = \omega_2 + \omega_4$.

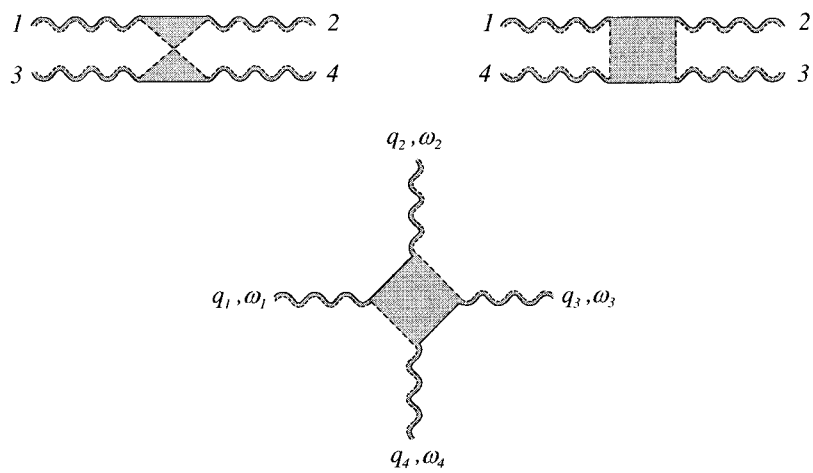


FIG. 4.22 – *Trois représentations équivalentes d'une boîte de Hikami décrivant le croisement de deux diffusons, c'est-à-dire le changement d'appariement de quatre amplitudes complexes.*

[27] Ce calcul se généralise immédiatement à des cooperons.

Le calcul de cette boîte est identique à celui effectué à fréquence nulle dans la section C4.2.1 en notant toutefois que les fonctions de Green moyennes (3.87) dépendent maintenant de la fréquence. Ainsi, pour des électrons, les fonctions de Green

$$\overline{G}^{R,A}_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{k}) = \frac{1}{\epsilon - \omega - \epsilon(\boldsymbol{k}) \pm \frac{i}{2\tau_e}} \tag{4.146}$$

admettent le développement :

$$\overline{G}_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{q}) = \overline{G}(\boldsymbol{k}) + (\boldsymbol{v}.\boldsymbol{q}+\omega)\ \overline{G}(\boldsymbol{k})^2 + (\boldsymbol{v}.\boldsymbol{q})^2\ \overline{G}(\boldsymbol{k})^3 + \cdots \tag{4.147}$$

En insérant ce développement dans les expressions (4.118–4.120) de $H^{(A)}$, $H^{(B)}$ et $H^{(C)}$, en tenant compte des fréquences ω_i portées par les différentes fonctions de Green, et en suivant les étapes qui ont conduit à (4.127), on obtient :

$$H(\{\boldsymbol{q}_i\}) = \\ \Omega h_4\ \delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0}\Big[\sum_i \Big(q_i^2 - i\frac{\omega_i}{2D}\Big) + \boldsymbol{q}_1.\boldsymbol{q}_2 + \boldsymbol{q}_2.\boldsymbol{q}_3 + \boldsymbol{q}_3.\boldsymbol{q}_4 + \boldsymbol{q}_4.\boldsymbol{q}_1\Big] \tag{4.148}$$

où la constante h_4 est donnée par (4.129). Puisque $\sum_i \boldsymbol{q}_i = 0$, on peut encore écrire :

$$\boxed{H(\{\boldsymbol{q}_i\}) = \Omega h_4\ \delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0}\Big[\frac{1}{2}\sum_i \Big(q_i^2 - i\frac{\omega_i}{D}\Big) - \boldsymbol{q}_1.\boldsymbol{q}_3 - \boldsymbol{q}_2.\boldsymbol{q}_4\Big]} \tag{4.149}$$

Compte tenu des équations de diffusion (4.145), le premier terme appliqué à un diffuson donne une constante, c'est-à-dire dans l'espace réel une fonction δ qui est nulle loin des sources [28]. La boîte de Hikami reliant quatre diffusons se réduit donc à la forme :

$$\boxed{H(\{\boldsymbol{q}_i\}) = \Omega h_4\ \delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0}\Big[-\boldsymbol{q}_1.\boldsymbol{q}_3 - \boldsymbol{q}_2.\boldsymbol{q}_4\Big]} \tag{4.150}$$

En pratique, on utilisera plutôt la représentation spatiale. Chaque vecteur d'onde est donc un opérateur de dérivation $\boldsymbol{q}_i \to -i\boldsymbol{\nabla}_i$. Afin de minimiser

[28] Cette fonction δ peut conduire à des divergences qui sont discutées dans les références [78, 80, 81]. Par exemple, lorsque la boîte de Hikami connecte un diffuson ou un cooperon faisant une boucle, certains termes de (4.149) produisent des divergences. La procédure proposée en [80] évite l'apparition de ces divergences et conduit au résultat (4.151, 4.152), adapté au cas où les gradients opèrent en des points placés loin des sources, c'est-à-dire sur des diffusons qui ont leur source à l'extérieur du milieu diffusif. Ceux-ci sont appelés diffusons externes [78].

le calcul de ces dérivées, il est commode d'utiliser pour la boîte de Hikami une forme moins symétrique mais où n'apparaissent que deux vecteurs d'onde c'est-à-dire deux gradients. En utilisant la contrainte $\sum_i \boldsymbol{q}_i = 0$ et la relation (4.126), on obtient la forme

$$H(\{\boldsymbol{q}_i\}) = -2h_4\ \delta_{\sum \boldsymbol{q}_i,0}\ \boldsymbol{q}_1.\boldsymbol{q}_3 \tag{4.151}$$

ou, en transformée de Fourier,

$$\boxed{H(\{\boldsymbol{r}_i\}) = 2h_4 \int d\boldsymbol{r} \prod_{i=1}^{4} \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_i) \boldsymbol{\nabla}_1.\boldsymbol{\nabla}_3} \tag{4.152}$$

Complément C4.3 Collisions anisotropes et libre parcours moyen de transport

La probabilité de diffusion quantique a été obtenue en supposant que le potentiel était un bruit blanc gaussien, c'est-à-dire sans corrélation spatiale et tel que $\langle V(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r}')\rangle = B\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$. Ceci implique, dans le cadre du modèle d'Edwards (section 2.2.2), que les collisions sont isotropes. L'équivalence entre les deux points de vue est obtenue en considérant des diffuseurs δ, dans la limite où l'amplitude v_0 du potentiel tend vers 0 avec $n_i v_0^2$ constant. On a alors $B = n_i v_0^2$.

On veut généraliser ces résultats au cas d'un potentiel gaussien mais dont la fonction de corrélation a maintenant une portée finie $\langle V(\boldsymbol{r})V(\boldsymbol{r}')\rangle = B(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$. Pour le modèle d'Edwards, cela correspond à un potentiel d'impureté $v(\boldsymbol{r})$ de portée finie. Si celle-ci est de l'ordre de la longueur d'onde $\lambda_0 = 2\pi/k$, la diffusion devient anisotrope (voir fig. 2.4). La section efficace de diffusion par une impureté calculée à l'approximation de Born, dépend alors de l'angle θ entre les directions incidente et émergente (2.101) et s'écrit, pour le cas de l'équation de Schrödinger et en rétablissant $\hbar$:

$$\sigma(k,\theta) = \frac{m^2}{\pi\hbar^4} v^2(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \quad . \tag{4.153}$$

La transformée de Fourier de la fonction de corrélation du potentiel V dépend aussi de $\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}'$:

$$B(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') = n_i v^2(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \quad . \tag{4.154}$$

Nous avons établi au chapitre 3 une relation entre le temps de collision élastique et la moyenne angulaire de $B(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$:

$$\frac{1}{\tau_e} = 2\pi\rho_0\langle B(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')\rangle \tag{4.155}$$

ainsi que $\frac{1}{l_e} = n_i\sigma$, de telle sorte que la fonction de Green moyenne ne dépend que de la moyenne angulaire du potentiel de diffusion à une impureté.

Qu'advient-il de la probabilité lorsque la diffusion sur les impuretés devient anisotrope ? Le calcul du facteur de structure Γ_ω nécessite de prendre en compte le fait que dans la séquence des collisions successives, chaque collision doit être caractérisée par les directions incidente et émergente. Comme le montre qualitativement la figure 4.23, on s'attend à une modification du processus de diffusion. On va montrer ici qu'il apparaît un second temps caractéristique, appelé *temps de transport* et noté τ^*, qui décrit le comportement de Γ_ω et de P_d en diffusion multiple. *Par opposition à τ_e qui est le temps séparant deux collisions élastiques, le temps τ^* est celui pour lequel la mémoire de la direction incidente est perdue.*

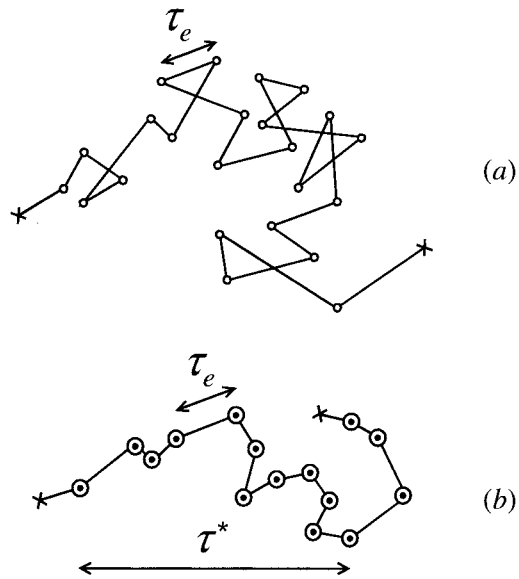


FIG. 4.23 – *Représentation schématique d'un processus de diffusion multiple sur des impuretés, lorsque les collisions sont soit isotropes (a), soit anisotropes (b). Pour des collisions isotropes, les temps τ_e et τ^* sont égaux. Pour des collisions anisotropes, il faut plusieurs collisions pour perdre la mémoire de la direction incidente : le temps τ^* est plus grand que τ_e. Pour des suspensions colloïdales, leur rapport peut-être de l'ordre de 10^2.*

Afin de décrire les collisions anisotropes, deux présentations sont possibles qui reprennent l'équivalence mentionnée précedemment entre potentiel de portée finie et collisions anisotropes. Elles correspondent respectivement à la description de Γ_ω dans l'espace réel et dans l'espace réciproque. Dans le cas où la portée $B(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ du potentiel est une fonction δ, le facteur de structure ne dépend que du point initial et du point final de la séquence (fig. 4.24.a). Par contre, dès lors que $B(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ a une portée finie et comparable à la longueur d'onde, le facteur de structure dépend de quatre arguments $\Gamma(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1';\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_2')$ (fig. 4.24.b) et satisfait une équation intégrale de la forme (fig. 4.24.c)

$$\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1';\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_2') = \delta(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)\delta(\boldsymbol{r}_2'-\boldsymbol{r}_1')B(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_1') + \int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1';\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_2')\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r})B(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_2') \quad . \tag{4.156}$$

Lorsque $B(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') = B\delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$, on retrouve bien l'équation (4.24). L'invariance par translation implique que Γ_ω ne dépend que de trois arguments $\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1'-\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2'-\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)$.

Une description équivalente de Γ_ω dans l'espace réciproque s'obtient en prenant la transformée de Fourier de l'équation (4.156). Cette description est

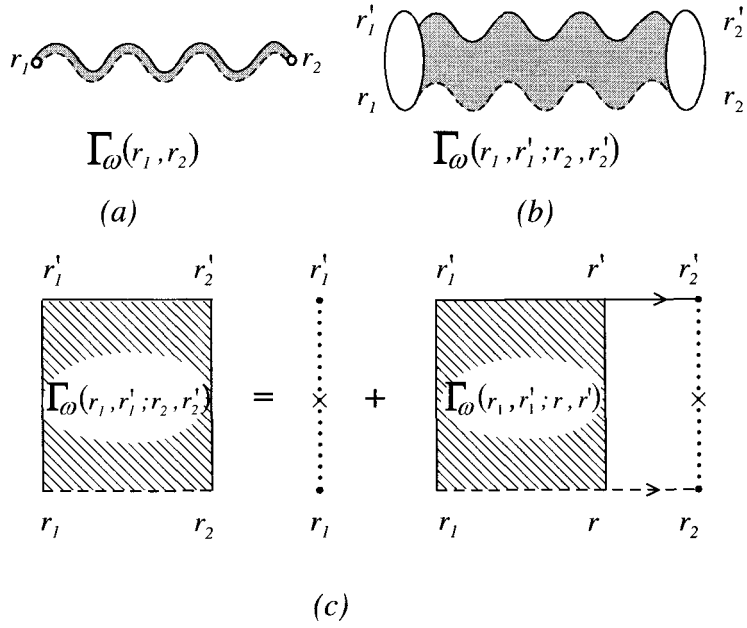


FIG. 4.24 – *a) Lorsque la diffusion est isotrope, le facteur de structure ne dépend que de deux arguments* $\boldsymbol{r}_1$ *et* $\boldsymbol{r}_2$. *b) Lorsque la fonction de corrélation du potentiel a une portée finie, le facteur de structure dépend de quatre arguments. c) Représentation de l'équation intégrale pour le facteur de structure* $\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1'; \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_2')$.

intéressante pour deux raisons. Tout d'abord l'utilisation de (4.154) permet de faire apparaître la fonction $v^2(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')$ qui contient l'information sur l'anisotropie des collisions. De plus, la transformée de Fourier $\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})$ prend en compte de manière explicite la dépendance en fonction des vecteurs d'onde incident $\hat{\boldsymbol{s}} = \boldsymbol{k}/k$ et émergent $\hat{\boldsymbol{s}}' = \boldsymbol{k}'/k$. Le vecteur d'onde $\boldsymbol{q}$ associé à $(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$ décrit, comme dans le cas isotrope, la propagation à longue portée. La relation (4.81) se généralise alors sous la forme

$$\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) = B(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}') + \frac{1}{\Omega} \sum_{\boldsymbol{k}''} \Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}'', \boldsymbol{q}) \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k}'') \overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{k}'' - \boldsymbol{q}) B(\hat{\boldsymbol{s}}'' - \hat{\boldsymbol{s}}') \tag{4.157}$$

représentée diagrammatiquement sur la figure 4.25. Le facteur de structure $\Gamma_\omega(\boldsymbol{q})$ est la moyenne angulaire de $\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})$:

$$\boxed{\Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) = \langle \Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) \rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}'}} \tag{4.158}$$

Pour des collisions isotropes, $B(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}')$ est constant et le facteur de structure ne dépend que de $\boldsymbol{q}$. La difficulté nouvelle dans (4.157) est que Γ_ω ne se factorise

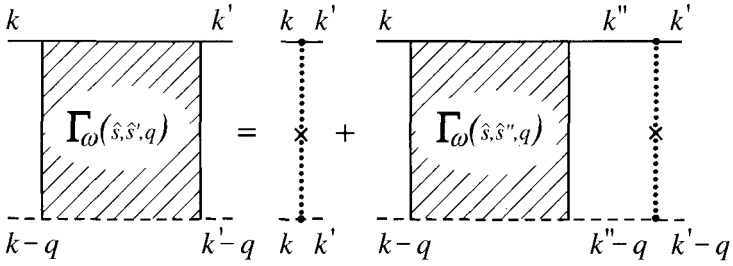


FIG. 4.25 – *Représentation de l'équation intégrale pour* $\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})$, *avec* $\hat{\boldsymbol{s}} = \hat{\boldsymbol{k}}/k$ *et* $\hat{\boldsymbol{s}}' = \hat{\boldsymbol{k}}'/k$.

plus. On perd donc la structure itérative simple (4.81) du cas isotrope et on ne peut plus résoudre exactement cette équation. On peut rechercher sa solution dans le régime diffusif, c'est-à-dire lorsque q tend vers 0. En effet, le mode de diffusion en $1/Dq^2$ (voir la relation 4.88) est un mode de Goldstone qui traduit la conservation de la probabilité. Il doit donc subsister pour des collisions élastiques anisotropes. Par contre, nous allons voir que la constante de diffusion D est affectée par l'anisotropie des collisions.

On introduit les notations suivantes

$$\begin{aligned} \gamma_e &= \langle B(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}')\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'} = \langle B(\theta)\rangle \\ \gamma_1 &= \langle \hat{\boldsymbol{s}}.\hat{\boldsymbol{s}}' B(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}')\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'} = \langle B(\theta)\cos\theta\rangle \end{aligned} \tag{4.159}$$

où θ est l'angle $(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}')$. On vérifie que

$$\langle \hat{\boldsymbol{s}}' B(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}')\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'} = \gamma_1 \hat{\boldsymbol{s}} \quad . \tag{4.160}$$

Dans l'équation intégrale (4.157), on développe d'abord le produit des fonctions de Green, en séparant les dépendances radiale $k = |\boldsymbol{k}|$ et angulaire $\hat{\boldsymbol{s}} = \boldsymbol{k}/k$ de $\boldsymbol{k}$. En n'effectuant que la somme sur k il vient [29]

$$\frac{1}{\Omega}\sum_k \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) = 2\pi\rho_0\tau_e f_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{q}) \tag{4.161}$$

où la fonction $f_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{q})$ définie par (4.77) admet, pour $\boldsymbol{q} \to 0$ et $\omega\tau_e \to 0$, le développement

$$f_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{q}) = 1 + i\omega\tau_e - q^2 l_e^2 (\hat{\boldsymbol{u}}.\hat{\boldsymbol{s}})^2 - iql_e(\hat{\boldsymbol{u}}.\hat{\boldsymbol{s}}) \tag{4.162}$$

[29] En moyennant cette somme sur la direction $\hat{\boldsymbol{s}}$, on retrouve le résultat (4.74) :

$$P_0(\boldsymbol{q}, \omega) = \frac{1}{2\pi\rho_0\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) = \tau_e\langle f_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{q})\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}} = \tau_e\left(1 + i\omega\tau_e - Dq^2\tau_e\right) \quad .$$

avec $\hat{\boldsymbol{u}} = \boldsymbol{q}/q$. L'équation intégrale (4.157) devient

$$\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) = B(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}') + \frac{1}{\gamma_e}\Big\langle \Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}'', \boldsymbol{q}) f_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}'', \boldsymbol{q}) B(\hat{\boldsymbol{s}}'' - \hat{\boldsymbol{s}}')\Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}''} \quad . \tag{4.163}$$

Dans un premier temps, on cherche à déterminer $\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) = \langle \Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}}$ solution de l'équation intégrale

$$\boxed{\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) = \gamma_e + \frac{1}{\gamma_e}\Big\langle \Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}'', \boldsymbol{q}) f_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}'', \boldsymbol{q}) B(\hat{\boldsymbol{s}}'' - \hat{\boldsymbol{s}}')\Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}''}} \tag{4.164}$$

L'approximation de diffusion consiste à ne garder pour $\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})$ que les deux premières harmoniques ($l = 0$ et $l = 1$) d'un développement en harmoniques sphériques :

$$\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) = \Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) + d\ \hat{\boldsymbol{s}}'.\boldsymbol{j}_\omega(\boldsymbol{q}) \tag{4.165}$$

où d est la dimension d'espace et où $\boldsymbol{j}_\omega(\boldsymbol{q})$ est la densité de courant associée à $\Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) = \langle \Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'}$:

$$\boldsymbol{j}_\omega(\boldsymbol{q}) = \langle \hat{\boldsymbol{s}}'\, \Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'} \quad . \tag{4.166}$$

En insérant (4.165) dans la relation (4.164) et en séparant les harmoniques $l = 0$ et $l = 1$, on obtient deux équations pour les inconnues Γ_ω et $\boldsymbol{j}_\omega$ [30] :

$$\begin{aligned} \Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) &= \gamma_e + \Gamma_\omega(\boldsymbol{q})\left(1 + i\omega\tau_e - \frac{q^2 l_e^2}{d}\right) - i l_e \boldsymbol{q}.\boldsymbol{j}_\omega \\ \boldsymbol{j}_\omega(\boldsymbol{q}) &= \frac{\gamma_1}{\gamma_e}\left[\boldsymbol{j}_\omega(\boldsymbol{q}) - i\frac{\boldsymbol{q} l_e}{d}\Gamma_\omega(\boldsymbol{q})\right] \end{aligned} \tag{4.167}$$

dont la solution est :

$$\Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_e}{-i\omega\tau_e + \frac{q^2 l_e^2/d}{1-\gamma_1/\gamma_e}} \quad . \tag{4.168}$$

Cette expression fait apparaître une nouvelle échelle de temps τ^* définie par

$$\frac{1}{\tau^*} = 2\pi\rho_0(\gamma_e - \gamma_1) \tag{4.169}$$

[30] Il suffit d'une part de moyenner l'expression (4.164) sur $\hat{\boldsymbol{s}}'$, d'autre part de la multiplier par $\hat{\boldsymbol{s}}'$ puis de la moyenner sur $\hat{\boldsymbol{s}}'$. On rappelle que

$$\langle(\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{A})\ (\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{B})\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}} = \frac{\boldsymbol{A}.\boldsymbol{B}}{d} \qquad \langle\hat{\boldsymbol{s}}\ (\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{A})\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}} = \frac{\boldsymbol{A}}{d} \quad .$$

c'est-à-dire

$$\boxed{\frac{1}{\tau^*} = 2\pi\rho_0\Big\langle B(\theta)(1-\cos\theta)\Big\rangle} \tag{4.170}$$

et appelée *temps de transport*. On en déduit la forme caractéristique d'une loi de diffusion

$$\boxed{\Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_e}{\tau_e}\frac{1}{-i\omega + D^* q^2}} \tag{4.171}$$

où

$$D^* = \frac{1}{d}v^2\tau^* = \frac{vl^*}{d} \tag{4.172}$$

est le coefficient de diffusion et où on définit le libre parcours moyen de transport par

$$l^* = v\tau^* \quad . \tag{4.173}$$

De même que le libre parcours moyen élastique est relié à la section efficace σ des diffuseurs (relation 3.86), le libre parcours moyen de transport est relié à la section efficace de transport σ^* définie par la relation

$$\frac{1}{l^*} = n_i\sigma^* \quad . \tag{4.174}$$

À partir de (4.167), on obtient la *loi de Fick*, reliant $\Gamma_\omega(\boldsymbol{q})$ et son courant associé :

$$\boldsymbol{j}_\omega(\boldsymbol{q}) = -i\boldsymbol{q}\frac{l^*}{d}\Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) \quad . \tag{4.175}$$

Afin d'obtenir le comportement de $P_d(\boldsymbol{q},\omega)$ dans le régime diffusif, on généralise la relation (4.83) qui, du fait des dépendances angulaires, s'écrit

$$P_d(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{2\pi\rho_0}{\Omega^2}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\tilde{P}_0(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\omega)\tilde{P}_0(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{q},\omega)\;\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}',\boldsymbol{q}) \quad . \tag{4.176}$$

En effectuant l'intégration sur les amplitudes k et k' qui se factorisent, on obtient

$$P_d(\boldsymbol{q},\omega) = 2\pi\rho_0\tau_e^2\langle\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}';\boldsymbol{q})\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}'} = \frac{\tau_e}{\gamma_e}\Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) \quad . \tag{4.177}$$

La relation de proportionnalité (4.84) entre $P_d(\boldsymbol{q},\omega)$ et $\Gamma_\omega(\boldsymbol{q})$ reste donc inchangée et on obtient finalement à partir de (4.171)

$$\boxed{P_d(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{-i\omega + D^* q^2}} \tag{4.178}$$

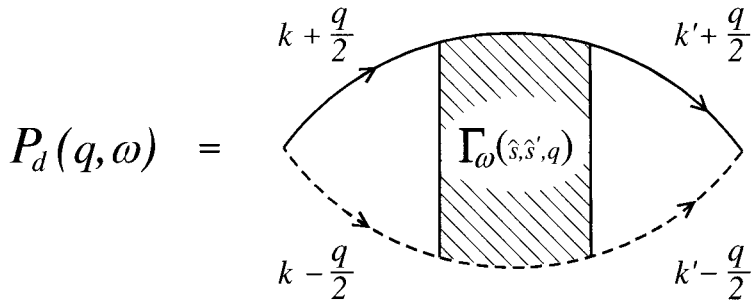


FIG. 4.26 – *Représentation diagrammatique de la probabilité $P_d(\boldsymbol{q},\omega)$ pour la diffusion anisotrope, avec $\hat{\boldsymbol{s}} = \hat{\boldsymbol{k}}/k$ et $\hat{\boldsymbol{s}}' = \hat{\boldsymbol{k}}'/k$. Elle généralise la représentation 4.14 pour la diffusion isotrope.*

Pour un potentiel de portée finie ou, de façon équivalente, pour des diffuseurs anisotropes, le diffuson P_d est caractérisé par un coefficient de diffusion qui dépend du temps de transport τ^*. Par contre, il est à noter que la contribution de Drude-Boltzmann $P_0(\boldsymbol{q},\omega)$, qui décrit la probabilité qu'une particule ne subisse pas de collision, ne dépend que du seul temps de collision élastique τ_e.

La terminologie *temps de transport* pour τ^* ne doit pas prêter à confusion. Ce temps intervient naturellement dans les propriétés de transport comme la conductivité électrique (sections 7.2.2 et 7.2.3). Mais nous venons de voir qu'il intervient aussi dans la probabilité de diffusion quantique, c'est-à-dire dans la propagation d'un paquet d'onde. De fait, le temps τ^* intervient également dans les propriétés thermodynamiques et spectrales.

Exercice 4.8 : Calculer les libres parcours moyens l_e et l^*, pour le modèle d'Edwards avec des impuretés décrites par un potentiel sphérique d'amplitude U_0 et de portée a. Utiliser pour cela l'expression pour $\sigma(\theta)$ de la section C2.1.4 :

$$\frac{l^*}{l_e} = \frac{\sigma}{\sigma^*} = \frac{\int_0^\pi \sigma(\theta)\sin\theta d\theta}{\int_0^\pi \sigma(\theta)(1-\cos\theta)\sin\theta d\theta} \quad . \tag{4.179}$$

Montrer les expressions asymptotiques :

$$\begin{aligned} \frac{l^*}{l_e} &\to 1 + \frac{2}{15}(ka)^2 && \text{si} \quad ka \ll 1 \\ &\to (ka)^2/\ln[4e^{\gamma-1}ka] && \text{si} \quad ka \gg 1 \end{aligned} \tag{4.180}$$

où $\gamma = 0{,}577\cdots$ est la constante d'Euler.

Complément C4.4 Corrélation des fonctions de Green diagonales

La probabilité de diffusion quantique $P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ est donnée par le produit de deux fonctions de Green non diagonales $\overline{G^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')G^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})}$. Cette quantité joue un rôle prépondérant dans un grand nombre de phénomènes physiques, mais ce n'est toutefois pas la seule grandeur importante. On peut aussi, du moins formellement à ce stade, construire d'autres fonctions de corrélation des fonctions de Green qui ne sont pas *a priori* reliées à P. La fonction de corrélation des champs (4.57) en est un premier exemple. Une autre fonction de corrélation importante définie par

$$K(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = \overline{G^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})G^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}')} - \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}') \tag{4.181}$$

fait intervenir le produit de deux fonctions de Green *diagonales* prises en des points $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$ *différents*. On se servira de cette fonction lors de l'étude des corrélations de densité d'états au chapitre 10. Comme la probabilité de retour à l'origine $P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)$, ce corrélateur décrit le produit de deux trajectoires *fermées*, mais dont les points de départ sont *distincts*. La figure 4.27 montre la structure de ces deux quantités. Le corrélateur $K(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ contient deux contributions représentées sur les figures 4.27.*c* et 4.27.*d* et notées $K^{(1)}$ et $K^{(2)}$.

La première contribution contient un diffuson et s'écrit :

$$\begin{aligned} K^{(1)}_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = \int & \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r})\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}')\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_2) \\ & \times\ \Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \quad . \end{aligned} \tag{4.182}$$

Dans l'approximation de diffusion (section 4.5), elle devient :

$$\begin{aligned} K^{(1)}_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) &= \Gamma_\omega(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})\left[\int \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)\overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}_1\right]^2 \\ &= \Gamma_\omega(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})\frac{1}{\gamma_e^2}g^2(\boldsymbol{R}) \quad , \end{aligned} \tag{4.183}$$

puisque l'intégrale est la fonction $f^{1,1}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')/\gamma_e$ définie en (3.102), égale à la fonction à courte portée $g(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ donnée par la relation (3.96). Finalement, en utilisant (4.37), on a :

$$\boxed{K^{(1)}_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = 2\pi\rho_0 g^2(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)} \tag{4.184}$$

On obtient ainsi ce résultat important qui s'avèrera très utile, qu'une fonction de corrélation diagonale, *a priori* indépendante de la probabilité P_d, peut en

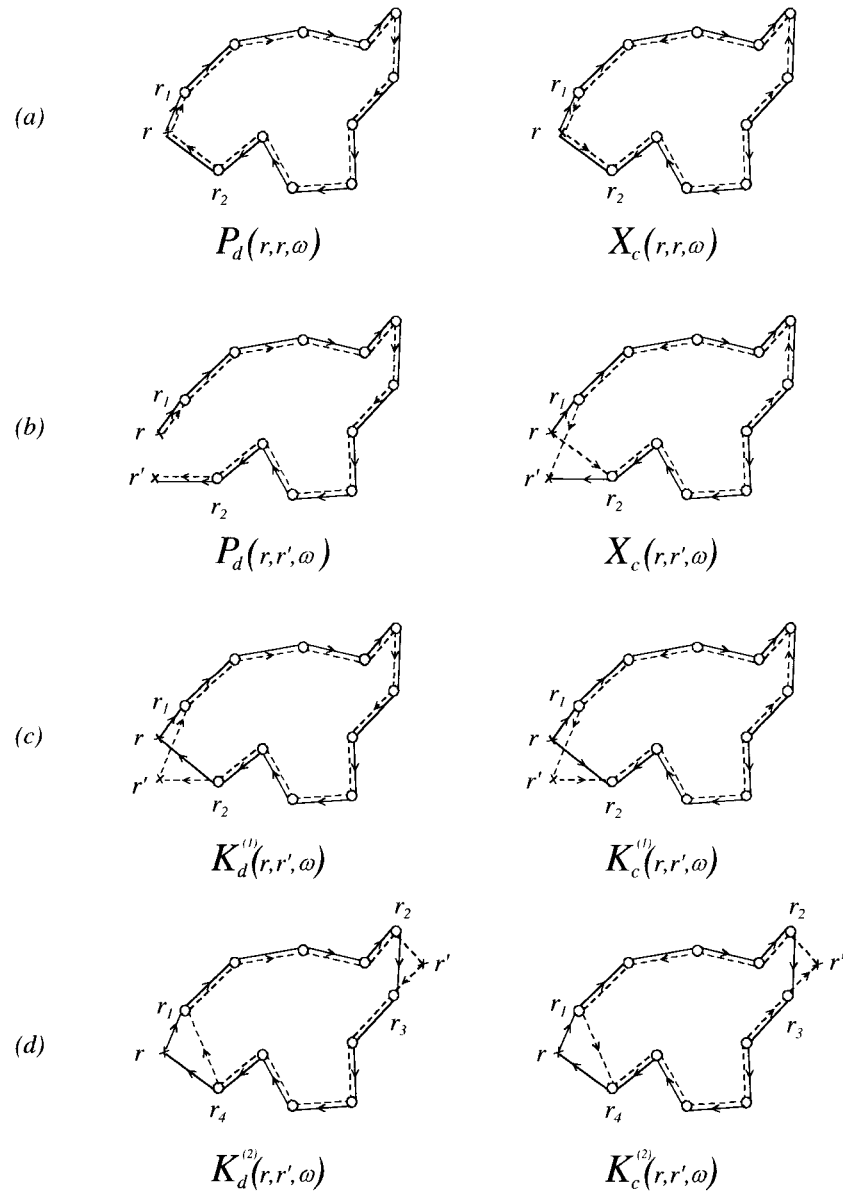


FIG. 4.27 – *Représentations schématiques de différentes trajectoires correspondant aux fonctions de corrélations* $P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)$, $P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$, $K^{(1)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ *et* $K^{(2)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$. *À gauche contribution des diffusons, et à droite contribution des cooperons.*

fait lui être reliée. De même, la figure 4.27.*c* montre qu'il existe une seconde contribution due au cooperon, donnée par

$$\boxed{K_c^{(1)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = 2\pi\rho_0 X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)} \tag{4.185}$$

où $X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = g^2(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)$ est une fonction à courte portée (4.49). Les deux contributions $K_d^{(1)}$ et $K_c^{(1)}$ sont donc à courte portée et disparaissent dès que $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| > l_e$.

La figure 4.27.*d* fait apparaître une seconde contribution $K^{(2)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ qui reste importante même lorsque $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|$ devient plus grand que l_e. Elle contient le produit de deux facteurs de structure Γ_ω et de six fonctions de Green qui varient exponentiellement sur la longueur l_e, ce qui impose donc que les points $\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_4$, d'une part, et les points $\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3$, d'autre part, soient au plus distants de l_e. Cette remarque faite, l'écriture de la fonction de corrélation est longue mais évidente. Elle contient deux termes. Le premier décrit des trajectoires de diffusion parcourues dans le même sens (fig. 4.27.*d*)

$$\begin{aligned} K_d^{(2)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = & \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 d\boldsymbol{r}_3 d\boldsymbol{r}_4 \Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r}_4) \\ & \times \overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)\overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3)\overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_4,\boldsymbol{r}) \\ & \times \overline{G}_{\epsilon-\omega}^A(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_2)\overline{G}_{\epsilon-\omega}^A(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_4)\overline{G}_{\epsilon-\omega}^A(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r}') \quad . \end{aligned} \tag{4.186}$$

Le second terme décrit des trajectoires de diffusion parcourues dans des sens opposés (figs. 4.27.*d*)

$$\begin{aligned} K_c^{(2)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = & \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 d\boldsymbol{r}_3 d\boldsymbol{r}_4 \Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r}_4) \\ & \times \overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)\overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3)\overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_4,\boldsymbol{r}) \\ & \times \overline{G}_{\epsilon-\omega}^A(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_3)\overline{G}_{\epsilon-\omega}^A(\boldsymbol{r}_4,\boldsymbol{r}_1)\overline{G}_{\epsilon-\omega}^A(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}') \quad . \end{aligned} \tag{4.187}$$

Dans l'approximation de diffusion, c'est-à-dire pour des distances supérieures à l_e, l'intégrale donnant $K_d^{(2)}$ se découple pour donner :

$$\begin{aligned} K_d^{(2)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = & \Gamma_\omega(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}) \\ & \times \int \overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)\overline{G}_{\epsilon-\omega}^A(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_4)\overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_4,\boldsymbol{r}) d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_4 \\ & \times \int \overline{G}_{\epsilon-\omega}^A(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_2)\overline{G}_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_3)\overline{G}_{\epsilon-\omega}^A(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r}') d\boldsymbol{r}_2 d\boldsymbol{r}_3 \quad . \end{aligned} \tag{4.188}$$

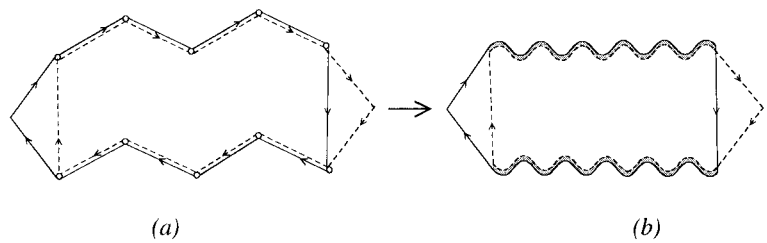


FIG. 4.28 – *Représentation diagrammatique (b) de la fonction de corrélation $K^{(2)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$, obtenue en itérant à l'infini une suite de séquences de collisions dont un exemple est représenté en (a).*

En introduisant la fonction $f^{2,1}$ définie par la relation (3.105), elle se met sous la forme[31]

$$K_d^{(2)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = \frac{1}{\gamma_e^2}|f^{2,1}(0)|^2\Gamma_\omega(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}) \quad . \tag{4.189}$$

La quantité $f^{2,1}(0)$, donnée dans la table 3.8 et par la relation (3.107), est égale à $-i\tau_e$.

Ainsi, à l'approximation de diffusion, la fonction de corrélation $K_d^{(2)}$ apparaît comme le produit de quatre quantités distinctes, représentées sur la figure 4.28 : deux facteurs de structure $\Gamma_\omega(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ qui décrivent la diffusion entre $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$, et deux « boîtes » qui décrivent comment les points libres sont reliés aux impuretés. Dans le régime diffusif, le facteur de structure Γ_ω est proportionnel à la probabilité P_d (relation 4.37), de sorte que :

$$\boxed{K_d^{(2)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)P_d(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r},\omega)} \tag{4.190}$$

Le calcul de la contribution (4.187) associée au produit de deux cooperons est calqué sur le précédent et donne, toujours dans l'approximation de diffusion :

$$K_c^{(2)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = \frac{1}{\gamma_e^2}|f^{2,1}(0)|^2\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}) \quad . \tag{4.191}$$

Le facteur de structure Γ'_ω est celui intervenant dans le calcul du cooperon. Comme Γ_ω, il est solution de l'équation de diffusion (4.34). On peut récrire la fonction de corrélation $K_c^{(2)}$ à l'aide de $P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ définie en (4.48)

$$\boxed{K_c^{(2)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'\omega)P_c(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r},\omega)} \tag{4.192}$$

[31] Dans la limite $\omega\tau_e \ll 1$ on néglige la dépendance en ω des fonctions de Green.

Finalement, en regroupant les contributions (4.184) et (4.190), on obtient pour la fonction de corrélation K_d, la somme d'un terme à courte portée et d'un terme à longue portée :

$$\boxed{K_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = 2\pi\rho_0 g^2(\boldsymbol{R})P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega) + P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'\omega)P_d(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r},\omega)} \tag{4.193}$$

à laquelle il faut rajouter la contribution des cooperons

$$\boxed{K_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = 2\pi\rho_0 g^2(\boldsymbol{R})P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega) + P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'\omega)P_c(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r},\omega)} \tag{4.194}$$

Cette fonction de corrélation intervient dans la description des corrélations spectrales dans un métal (chap. 10) et dans l'étude de l'effet des interactions électroniques sur diverses propriétés physiques (chap. 13).

Complément C4.5 Autres fonctions de corrélation

C4.5.1 Corrélations de fonctions de Green retardées

Ce complément contient un certain nombre de résultats techniques utiles dans cet ouvrage. À ce stade, ce complément peut être considéré par le lecteur comme un ensemble d'exercices destinés à parfaire sa compréhension du chapitre 4.

• On montre d'abord la relation suivante, obtenue dans la limite de faible désordre $kl_e \gg 1$:

$$\boxed{\mathrm{Tr}\left(\overline{\mathrm{Im}\hat{G}^R \mathrm{Im}\hat{G}^R}\right) = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}\mathrm{Re}\left(\overline{\hat{G}^R\hat{G}^A}\right)} \tag{4.195}$$

où $\mathrm{Im}\hat{G}$ est l'opérateur défini par (3.21). Pour cela, on considère le produit $\overline{\mathrm{Im}G^R \mathrm{Im}G^R}$. En utilisant la relation (3.21), on voit que ce produit contient en plus du terme $\overline{G^R G^A}$ déjà étudié, des termes du type $\overline{G^R G^R}$ et $\overline{G^A G^A}$. Afin d'étudier ces autres termes, on peut effectuer un développement itératif du produit $\overline{\hat{G}^R\hat{G}^R}$. On fait ainsi apparaître des puissances $[\overline{\hat{G}^R}]^{2n}$, dont la trace est une puissance de $1/(kl_e)$ et peut donc être négligée. Par exemple, d'après l'exercice 3.15,

$$\mathrm{Tr}\left(\overline{\hat{G}^R}\ \overline{\hat{G}^R}\right) \ll \mathrm{Tr}\left(\overline{\hat{G}^R}\ \overline{\hat{G}^A}\right) \quad . \tag{4.196}$$

On en déduit que $\mathrm{Tr}\left[(\overline{\hat{G}^R})^{2n}\right] \simeq 0$ et que $\mathrm{Tr}\left(\overline{\hat{G}^R\hat{G}^R}\right) \simeq \mathrm{Tr}\left(\overline{\hat{G}^R}\ \overline{\hat{G}^R}\right)$. De même, $\mathrm{Tr}\left[(\overline{\hat{G}^A})^{2n}\right] \simeq 0$. Par conséquent, dans la trace du produit $\overline{\mathrm{Im}G^R \mathrm{Im}G^R}$, les termes du type $\overline{G^R G^R}$ et $\overline{G^A G^A}$ sont négligeables, d'où la relation (4.195). Dans la limite $kl_e \gg 1$, on a aussi la relation

$$\overline{\mathrm{Im}G^R \mathrm{Im}G^R}^c = \frac{1}{2}\mathrm{Re}\left[\overline{G^R G^A}^c\right] \tag{4.197}$$

puisque dans cette limite $\overline{G^R G^R} \simeq \overline{G^R}\ \overline{G^R}$ et $\overline{G^A G^A} \simeq \overline{G^A}\ \overline{G^A}$. Le symbole $\overline{\cdots}^c$ dénote la partie connectée de ces valeurs moyennes.

Exercice 4.9 : En utilisant la représentation spatiale et en se limitant au cas où $\omega = 0$, vérifier que

$$\mathrm{Tr}[\overline{\mathrm{Im}\hat{G}^R}\ \overline{\mathrm{Im}\hat{G}^R}] = \frac{1}{2}\mathrm{Tr}[\overline{\hat{G}^R}\ \overline{\hat{G}^A}] \tag{4.198}$$

qui constitue un cas particulier de la relation (4.195).

Le terme de gauche est égal à

$$\pi^2\rho_0^2\int_0^\infty \frac{\sin^2 kR}{k^2R^2}e^{-R/l_e}4\pi R^2 dR = \frac{2\pi^3\rho_0^2 l_e}{k^2}\frac{1}{1+\frac{1}{4k^2l_e^2}} \tag{4.199}$$

alors que le terme de droite est égal à

$$\frac{\pi^2\rho_0^2}{2}\int_0^\infty \frac{1}{k^2R^2}e^{-R/l_e}4\pi R^2 dR = \frac{2\pi^3\rho_0^2 l_e}{k^2} \quad . \tag{4.200}$$

Ces deux termes sont identiques dans la limite $kl_e \gg 1$. Cela revient à remplacer dans l'intégrale le terme $\sin^2 kR$ par sa moyenne $1/2$.

• Considérons maintenant les deux fonctions de corrélation de la densité d'états non locale (3.26) :

$$\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})} \quad \text{et} \quad \overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})}^c \tag{4.201}$$

ainsi que celle de la densité d'états locale (3.25) à des points différents :

$$\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r})\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}')} \quad \text{et} \quad \overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r})\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}')}^c \quad . \tag{4.202}$$

La relation (3.28) permet de relier la densité d'états non locale $\rho_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ à la partie imaginaire de la fonction de Green. À partir de (4.197), et en utilisant la définition (4.9) de la probabilité $P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$, on obtient

$$\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})}^c = \frac{\rho_0}{\pi}\mathrm{Re}[P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) - P_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)] \quad . \tag{4.203}$$

Rappelons que cette partie connectée de la probabilité contient deux termes, le diffuson $P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ et le cooperon $X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ qui est une fonction à courte portée donnée par (4.46) où la fonction $g(\boldsymbol{R})$ décroît exponentiellement avec la distance. On obtient ainsi :

$$\boxed{\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})}^c = \frac{\rho_0}{\pi}\mathrm{Re}\left[P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) + g^2(\boldsymbol{R})X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)\right]} \tag{4.204}$$

avec $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'$. À l'aide de (3.98), on en déduit l'expression de $\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})}$.

• En prenant $\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r}$ dans la relation (4.204), on relie ainsi les fluctuations de la densité d'états locale à la partie réelle de la probabilité quantique (connectée).

$$\boxed{\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r})\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r})} - \rho_0^2 = \frac{\rho_0}{\pi}\mathrm{Re}\left[P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega) + X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)\right]} \tag{4.205}$$

S'il y a invariance par renversement du sens du temps, les deux termes entre crochet sont égaux.

• À partir de la relation (4.197) et de la définition (4.181) de la fonction de corrélation $K(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$, la fonction de correlation $\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r})\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}')}^c$ de la densité d'états locale s'écrit

$$\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r})\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}')}^c = \frac{1}{2\pi^2}K(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) \quad . \tag{4.206}$$

En utilisant les relations (4.193) et (4.194), on obtient alors pour la contribution des diffusons à cette fonction de corrélation :

$$\boxed{\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r})\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}')}^c = \mathrm{Re}\left[\frac{\rho_0}{\pi}g^2(\boldsymbol{R})P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega) + \frac{1}{2\pi^2}P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)P_d(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r},\omega)\right]} \tag{4.207}$$

qui comprend donc une contribution à courte portée et une contribution à longue portée. Il convient aussi de rajouter la contribution des cooperons

$$\mathrm{Re}\left[\frac{\rho_0}{\pi}g^2(\boldsymbol{R})P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) + \frac{1}{\pi^2}P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)P_c(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r},\omega)\right] \tag{4.208}$$

où P_c est définie par la relation (4.48).

Exercice 4.10 : Montrer la relation :

$$\begin{aligned}\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1')\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}_2',\boldsymbol{r}_2)}^c = \frac{\rho_0}{\pi}\mathrm{Re}\Big[&P_d(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1',\omega)g(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)g(\boldsymbol{r}_1'-\boldsymbol{r}_2') \\ &+P_c(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1',\omega)g(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2')g(\boldsymbol{r}_1'-\boldsymbol{r}_2)\Big]\end{aligned} \tag{4.209}$$

où on n'a pris en compte que les contributions à un diffuson et un cooperon. Retrouver ainsi (4.204) et (4.207, 4.208).

C4.5.2 Une identité de Ward

Cette identité relie le produit de deux fonctions de Green retardées (ou avancées) à la dérivée par rapport à l'énergie d'une seule fonction de Green :

$$\sum_{\boldsymbol{k}_1} G_\epsilon^R(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}_1)G_\epsilon^R(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}') = -\frac{\partial}{\partial\epsilon}G_\epsilon^R(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') \quad . \tag{4.210}$$

Pour montrer cette relation, on utilise par exemple la représentation en impulsion (3.31) des fonctions de Green :

$$\sum_{\boldsymbol{k}_1} G_\epsilon^R(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}_1)G_\epsilon^R(\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}') = \sum_{n,m}\sum_{\boldsymbol{k}_1} \frac{\phi_n^*(\boldsymbol{k})\phi_n(\boldsymbol{k}_1)\phi_m^*(\boldsymbol{k}_1)\phi_m(\boldsymbol{k}')}{(\epsilon-\epsilon_n+i0)(\epsilon-\epsilon_m+i0)} \quad . \tag{4.211}$$

Puisque $\sum_{\boldsymbol{k}_1}\phi_n(\boldsymbol{k}_1)\phi_m^*(\boldsymbol{k}_1) = \delta_{n,m}$, on déduit immédiatement la relation (4.210), qui implique aussi que

$$\boxed{\mathrm{Tr}\left(\hat{G}_\epsilon^R\hat{G}_\epsilon^R\right) = -\frac{\partial}{\partial\epsilon}\mathrm{Tr}\hat{G}_\epsilon^R} \tag{4.212}$$

C4.5.3 Corrélations de fonctions d'ondes

À l'aide des résultats de la section C4.5.1, on peut obtenir simplement certains résultats pour les fonctions de corrélation de fonctions d'ondes [82]. Considérons d'abord la fonction de corrélation de fonctions propres $|\phi_k(\boldsymbol{r})|^2$ et $|\phi_l(\boldsymbol{r}')|^2$ d'énergies ϵ et $\epsilon-\omega$. Par définition,

$$\langle|\phi_k(\boldsymbol{r})|^2|\phi_l(\boldsymbol{r}')|^2\rangle_{\epsilon,\omega} = \frac{1}{\nu_0^2}\overline{\sum_{k,l}|\phi_k(\boldsymbol{r})|^2\delta(\epsilon-\epsilon_k)|\phi_l(\boldsymbol{r}')|^2\delta(\epsilon-\omega-\epsilon_l)} \quad . \tag{4.213}$$

En utilisant (3.25), on fait apparaître la fonction de corrélation de la densité d'états locale $\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r})\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}')}$ donnée par (4.207). Par conséquent,

$$\boxed{\Omega^2\langle|\phi_k(\boldsymbol{r})|^2|\phi_l(\boldsymbol{r}')|^2\rangle_{\epsilon,\omega} = 1 + \mathrm{Re}\left[g^2(\boldsymbol{R})\Pi_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega) + \tfrac{1}{2}\Pi_d^2(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)\right]} \tag{4.214}$$

où on a défini $\Pi_d = P_d/(\pi\rho_0)$. Il faut ajouter la contribution due aux cooperons, obtenue à partir de (4.208).

De même, on peut obtenir la fonction de corrélation

$$\langle\phi_k^*(\boldsymbol{r})\phi_k^*(\boldsymbol{r}')\phi_l^*(\boldsymbol{r}')\phi_l(\boldsymbol{r})\rangle_{\epsilon,\omega} = \frac{1}{\rho_0^2}\overline{\sum_{k,l}\phi_k^*(\boldsymbol{r})\phi_k^*(\boldsymbol{r}')\phi_l^*(\boldsymbol{r}')\phi_l(\boldsymbol{r})\delta(\epsilon-\epsilon_k)\delta(\epsilon-\omega-\epsilon_l)} \quad . \tag{4.215}$$

En faisant apparaître la fonction de corrélation de la densité d'états non locale $\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})}$ et en utilisant la relation (4.204), on obtient

$$\boxed{\begin{aligned}\Omega^2\langle\phi_k^*(\boldsymbol{r})\phi_k^*(\boldsymbol{r}')\phi_l^*(\boldsymbol{r}')\phi_l(\boldsymbol{r})\rangle_{\epsilon,\omega} = g^2(\boldsymbol{R}) &+ \mathrm{Re}\left[\Pi_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)\right.\\ &\left.+\, g^2(\boldsymbol{R})\Pi_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)\right]\end{aligned}} \tag{4.216}$$

où $\Pi_c = P_c/(\pi\rho_0)$.

À travers les fonctions $P_{d,c}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$, ces expressions expriment la relation qui existe entre corrélations spectrales et corrélations spatiales. Ainsi, les fonctions d'onde correspondant à des énergies séparées de ω sont corrélées spatialement sur une distance R telle que $R^2 \simeq D/\omega$. Réciproquement, dans un échantillon de taille L donnée, les fonctions d'onde sont corrélées sur l'échelle d'énergie $\omega \simeq D/L^2$.

Ces expressions sont valables pour des énergies $\omega \gg \Delta$. Les méthodes développées ici ne permettent pas de décrire le cas $\omega \simeq \Delta$. On utilise pour cela le modèle σ non-linéaire supersymétrique [82] (voir aussi la section 10.1.2).

Chapitre 5

Propriétés de l'équation de diffusion

5.1 Introduction

Dans le chapitre 4, on a établi des expressions générales pour la probabilité de diffusion quantique $P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$ et pour le facteur de structure $\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$. Ces quantités, solutions des équations intégrales (4.24) et (4.25), permettent de décrire tous les phénomènes physiques étudiés dans cet ouvrage. Il est donc nécessaire de détailler ces solutions pour les géométries habituellement rencontrées. De plus, nous avons montré que pour un milieu infini et dans le régime des variations lentes, P_d et Γ_ω sont solutions d'une équation de diffusion. On étudie ici les solutions de cette équation pour certaines géométries. La validité de l'équation de diffusion sera discutée pour les cas d'un milieu infini et d'un milieu semi-infini dans les compléments C5.1 et C5.3.

On s'intéresse particulièrement à la transformée de Laplace $P_\gamma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ de la probabilité $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$. Elle mesure la somme des contributions à la probabilité des trajectoires de diffusion reliant les points $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$ pour des temps inférieurs à $1/\gamma$. Dans le cas de la diffusion multiple des ondes électromagnétiques, $P_\gamma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ représente l'intensité en un point $\boldsymbol{r}'$ émise par une source située en $\boldsymbol{r}$. Dans les systèmes électroniques, c'est la probabilité de retour à l'origine $P_\gamma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})$ qui joue un rôle essentiel et qui permet de définir un temps caractéristique, le temps de récurrence. Celui-ci décrit le temps intégré passé autour d'un point donné quelconque du milieu. Il dépend de la dimensionnalité d'espace et de la géométrie du système.

Pour un système de taille finie, typiquement un cube d'arête L, il apparaît une nouvelle échelle de temps caractéristique τ_D définie par $L^2 = D\tau_D$. Elle sépare les régimes de temps court où le rôle des conditions aux limites peut être négligé, des régimes de temps long où la sensibilité à ces conditions devient essentielle. Dans le cas particulier des électrons, on associe à τ_D l'énergie $E_c = \hbar/\tau_D$ appelée *énergie de Thouless*.

Nous serons amenés à considérer différents types de conditions aux limites qui décriront essentiellement les cas d'un système isolé ou couplé à un environnement extérieur. La dimensionnalité d'espace effective peut aussi dépendre de la nature de la source. Par exemple, dans le cas de la diffusion des ondes électromagnétiques, suivant la géométrie du faisceau incident, on peut avoir affaire à un problème de diffusion effectivement unidimensionnel comme dans le cas d'un faisceau large (c'est-à-dire assimilable à une onde plane) ou à un problème tridimensionnel pour un faisceau collimaté, c'est-à-dire de section petite par rapport à l'interface du milieu. Le cas de l'onde plane est particulièrement utile et nous serons donc amenés à étudier en détail la diffusion unidimensionnelle.

Le lecteur pourrait penser qu'un chapitre complet dédié à l'étude des solutions de l'équation de diffusion est superflu étant donnée la très vaste littérature existant sur ce sujet tant en physique qu'en mathématique [83, 84]. Notre but n'est pas d'être exhaustifs mais plutôt de présenter d'une manière directement utilisable un certain nombre de résultats clé qui seront utiles ultérieurement, en les complétant par des références bibliographiques.

5.2 Quantités caractéristiques

Plaçons nous d'emblée dans la situation où la probabilité de diffusion quantique $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$ est solution d'une équation de diffusion. Ceci constitue une approximation des équations intégrales (4.24) et (4.25) valide dans la limite des variations spatiale et temporelle lentes (section 4.5). Une étude détaillée de la validité de cette approximation est présentée dans les compléments C5.1 et C5.3.

La probabilité de diffusion quantique $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$ contient deux contributions, le diffuson et le cooperon [1]. À l'approximation de diffusion, chacune de ces contributions est la solution de Green de l'équation différentielle, transformée de Fourier temporelle de (4.34)

$$\boxed{\left[\frac{\partial}{\partial t} - D\Delta\right] P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')\delta(t)} \tag{5.1}$$

Dans la suite de ce chapitre, $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$ désigne la solution de l'équation (5.1). Nous avons montré dans la section 4.5 que dans le cadre de l'approximation de diffusion, le facteur de structure est simplement proportionnel à la probabilité de diffusion quantique par la relation (4.37). On va donc s'intéresser au comportement de $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$ sachant que celui du facteur de structure s'en déduit automatiquement. L'équation (5.1) est aussi appelée *équation de la chaleur* et a été établie par Fourier pour décrire la nature diffusive de sa propagation.

[1] Pour le cooperon, il faut cependant considérer la limite $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}'$. Voir la section 4.6.

5.2.1 Noyau de la chaleur - Probabilité de retour à l'origine

Dans un volume Ω quelconque, la solution générale de l'équation (5.1) est de la forme :

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) = \theta(t) \sum_n \psi_n^*(\boldsymbol{r}) \psi_n(\boldsymbol{r}') e^{-E_n t} \tag{5.2}$$

ou encore

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) = \sum_n \frac{\psi_n^*(\boldsymbol{r}) \psi_n(\boldsymbol{r}')}{-i\omega + E_n} \tag{5.3}$$

où E_n et ψ_n sont les valeurs propres (ou fréquences propres) [2] et les fonctions propres normalisées (ou modes) de l'équation :

$$-D\Delta\psi_n(\boldsymbol{r}) = E_n \psi_n(\boldsymbol{r}) \quad . \tag{5.4}$$

Une quantité importante qui caractérise les propriétés de la diffusion est la probabilité de retour à l'origine intégrée sur le point de départ. Cette fonction, notée $Z(t)$ et appelée *noyau de la chaleur* est définie pour tout $t > 0$ par

$$\boxed{Z(t) = \int_\Omega P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t) d\boldsymbol{r} = \sum_n e^{-E_n t}} \tag{5.5}$$

et ne dépend donc que du spectre des valeurs propres [3]. Le noyau de la chaleur peut aussi s'écrire comme la trace d'un opérateur

$$Z(t) = \mathrm{Tr} e^{Dt\Delta} \tag{5.6}$$

où Δ est l'opérateur laplacien. Le calcul de $Z(t)$ pour la diffusion dans l'espace libre est simple et sera présenté dans la section 5.3. Pour la diffusion dans un domaine fini, il n'y a pas toujours d'expression analytique simple pour $Z(t)$. Il est cependant possible d'obtenir des développements asymptotiques (complément C5.4). Dans la suite, on appellera le plus souvent cette quantité, la *probabilité intégrée de retour à l'origine*. La forme (5.4) de l'équation aux valeurs propres est celle de l'équation de Schrödinger d'une particule libre de masse $m = \hbar/(2D)$. Par conséquent, $Z(t)$ peut aussi s'interpréter comme la *fonction de partition* associée à cette équation de Schrödinger, où le temps jouerait le rôle de l'inverse de la température. Cette remarque nous permettra d'utiliser certaines solutions connues de l'équation de Schrödinger afin de les transposer au cas de la diffusion.

---

[2] Les valeurs propres E_n sont homogènes à l'inverse d'un temps. Malgré tout on parlera souvent d'énergie pour désigner ces valeurs propres de l'équation de diffusion.

[3] Ceci n'est pas toujours exact *stricto sensu* et nous en verrons un contre-exemple dans le complément C6.1.

Exercice 5.1 : Loi de semi-groupe pour l'équation de diffusion

Montrer que la solution de l'équation de diffusion (5.1) satisfait la relation dite de semi-groupe :

$$\int dr' P(r, r', t_1) P(r', r'', t_2) = P(r, r'', t_1 + t_2) \tag{5.7}$$

pour des temps t_1 et t_2 définis positifs.
On considère pour cela la solution générale (5.2). On vérifie en utilisant la normalisation des fonctions propres, $\int dr' \psi_n^*(r')\psi_n(r) = \delta_{n\,n'}$, que l'on a

$$\begin{aligned}\int dr' P(r, r', t_1) P(r', r'', t_2) &= \int dr' \sum_{n,n'} \psi_n(r)\psi_n^*(r')\psi_{n'}(r')\psi_{n'}^*(r'') e^{-E_n t_1} e^{-E_{n'} t_2} \\ &= \sum_n \psi_n(r)\psi_{n'}^*(r'') e^{-E_n(t_1+t_2)}\end{aligned} \tag{5.8}$$

ce qui conduit au résultat.

5.2.2 Temps de récurrence

Il existe de nombreuses manières de caractériser un processus de diffusion. L'une d'elles consiste à calculer le temps passé par une particule diffusive au voisinage d'un point donné. Ce temps dépend de la dimensionnalité d'espace, de la géométrie et des conditions aux limites imposées.

Considérons une particule diffusive située au point $\boldsymbol{r}$ à un instant initial $t = 0$. Son évolution aux temps ultérieurs est donnée par la probabilité $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$. En particulier la probabilité que, au bout d'un temps t, la particule se trouve dans un volume v donné [4], est égale à

$$\int_v P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) d\boldsymbol{r}' \quad . \tag{5.9}$$

Durant un laps de temps T donné, le temps $\tau(\boldsymbol{r}, v, T)$ passé par la particule diffusive dans le volume v est donné par l'intégrale

$$\tau(\boldsymbol{r}, v, T) = \int_0^T \int_v P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) d\boldsymbol{r}' dt \tag{5.10}$$

qui dépend à la fois de l'élément de volume v choisi, du point de départ $\boldsymbol{r}$ et de T. Dans la limite $T \to \infty$, le temps $\tau(\boldsymbol{r}, v, T)$ peut avoir une limite finie ou au contraire dépendre asymptotiquement de T.

Au lieu de considérer un intervalle de temps fini T, imaginons plutôt une particule diffusive ayant un temps de vie fini τ_γ. Ce temps de vie n'est, pour l'instant, qu'un intermédiaire de calcul auquel on donnera ultérieurement une

[4] Le point $\boldsymbol{r}$ n'est pas nécessairement dans le volume v.

signification physique. Il n'a rien à voir avec le temps élastique τ_e introduit dans le chapitre 3. Le temps passé dans le volume v peut alors se récrire

$$\tau(\boldsymbol{r}, v, \tau_\gamma) = \int_0^\infty \int_v P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) e^{-t/\tau_\gamma} d\boldsymbol{r}' dt \tag{5.11}$$

et en introduisant la transformée de Laplace

$$\boxed{P_\gamma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \int_0^\infty P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) e^{-\gamma t} dt} \tag{5.12}$$

on a

$$\tau(\boldsymbol{r}, v, \gamma) = \int_v P_\gamma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') d\boldsymbol{r}' \tag{5.13}$$

où $\gamma = 1/\tau_\gamma$ est un nombre réel. La transformée de Laplace $P_\gamma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ obéit à l'équation de diffusion (4.38) mais où maintenant $\omega = i\gamma$,

$$\boxed{(\gamma - D\Delta)\, P_\gamma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')} \tag{5.14}$$

Si $\tau(\boldsymbol{r}, v, \gamma)$ diverge lorsque $\gamma \to 0$, on dit que le processus de diffusion est récurrent. Parmi tous les choix possibles pour le temps $\tau(\boldsymbol{r}, v, \gamma)$, on peut singulariser celui correspondant au temps passé au voisinage du point de départ $\boldsymbol{r}$. Ce voisinage est défini à partir de l'élément de volume $v = A_d l_e^d$ où le libre parcours moyen élastique l_e est l'échelle de longueur élémentaire associée à la diffusion et où A_d est le volume de la sphère unité (relation 15.2). Le temps ainsi défini est appelé *temps de récurrence* et il est directement relié à la probabilité de retour *à l'origine* :

$$\boxed{\tau_R(\boldsymbol{r}, \gamma) = A_d l_e^d \; P_\gamma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r})} \tag{5.15}$$

Le temps de récurrence est donc le temps total passé par la particule autour de son point de départ. Il ne prend en compte que la contribution des trajectoires diffusives dont la longueur développée est inférieure à $l_e \tau_\gamma / \tau_e$. Le temps de récurrence peut éventuellement diverger lorsque l'on prend en compte toutes les trajectoires, c'est-à-dire lorsque $\tau_\gamma \to \infty$ [5]. Nous en verrons un exemple dans la section suivante à propos de la diffusion libre en dimension $d \leq 2$.

Pour conclure cette section, insistons à nouveau sur le fait que le temps de vie τ_γ a été introduit ici de façon formelle comme intermédiaire de calcul.

[5] Pour une diffusion uniforme dans un volume Ω, $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$ est constante et égale à $= 1/\Omega$. Le temps de récurrence est alors donné par $\tau_\gamma (A_d l_e^d / \Omega)$.

Nous verrons cependant, en particulier dans le chapitre 6, que ce temps de vie peut avoir de nombreuses origines physiques liées à l'apparition d'un déphasage entre les deux trajectoires qui forment le cooperon ou le diffuson.

On va maintenant caractériser la nature de la diffusion, c'est-à-dire ses propriétés de récurrence pour des dimensionnalités et des géométries différentes.

5.3 Diffusion libre

La solution de l'équation (5.1) dans l'espace libre de dimension d est donnée par la loi gaussienne. Pour l'obtenir, on peut partir de la transformée de Fourier $P(\boldsymbol{q}, t)$ qui obéit à l'équation

$$(\frac{\partial}{\partial t} + Dq^2)P(\boldsymbol{q}, t) = \delta(t) \tag{5.16}$$

dont la solution est

$$\boxed{P(\boldsymbol{q}, t) = \theta(t)e^{-Dq^2 t}} \tag{5.17}$$

On en déduit que sa transformée de Fourier

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) = \int \frac{d\boldsymbol{q}}{(2\pi)^d} P(\boldsymbol{q}, t)e^{i\boldsymbol{q}.(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} \tag{5.18}$$

s'écrit, pour $t > 0$:

$$\boxed{P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{d/2}} e^{-|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|^2/4Dt}} \tag{5.19}$$

Parmi tous les moments associés à cette fonction de distribution, on utilise souvent celui donnant la distance typique atteinte par diffusion après un temps t

$$\langle R^2(t) \rangle = 2dDt \quad . \tag{5.20}$$

On obtient aussi la moyenne du facteur de phase $e^{i\boldsymbol{q}.\boldsymbol{R}(t)}$:

$$\left\langle e^{i\boldsymbol{q}.\boldsymbol{R}(t)} \right\rangle = e^{-Dq^2 t} \tag{5.21}$$

qui est la fonction caractéristique associée à la probabilité $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$. Enfin, la probabilité de retour à l'origine après un temps t s'obtient à partir de (5.19) en prenant $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}'$, soit

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{d/2}} \quad , \tag{5.22}$$

de sorte que la probabilité intégrée $Z(t)$ définie par (5.5) s'écrit, pour un volume Ω :

$$Z(t) = \frac{\Omega}{(4\pi Dt)^{d/2}} \quad . \tag{5.23}$$

De même, on peut calculer la transformée de Fourier temporelle,

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, \omega) = \frac{1}{4\pi D|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} e^{-(1-i)|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|\sqrt{\omega/2D}} \tag{5.24}$$

et en utilisant la relation (15.70), on obtient

$$Z(\omega) = \frac{\Omega}{(4\pi D)^{d/2}} \Gamma\left(1 - \frac{d}{2}\right) (-i\omega)^{\frac{d}{2}-1} \quad . \tag{5.25}$$

Exercice 5.2 : Transformée de Laplace en dimension d pour la diffusion libre, et temps passé dans une sphère autour de l'origine

• La probabilité intégrée sur le temps d'aller d'un point origine à un point $\boldsymbol{r}$ est donnée par la transformée de Laplace $P_\gamma(0, \boldsymbol{r})$ (relation 5.12) et dépend de la dimension d comme :

$$P_\gamma^{(3)}(0, \boldsymbol{r}) = \frac{1}{4\pi Dr} e^{-r/L_\gamma} \ , \ P_\gamma^{(2)}(0, \boldsymbol{r}) = \frac{1}{2\pi D} K_0(r/L_\gamma) \ , \ P_\gamma^{(1)}(0, \boldsymbol{r}) = \frac{L_\gamma}{2D} e^{-r/L_\gamma} \tag{5.26}$$

où $L_\gamma = \sqrt{D\tau_\gamma}$ est la longueur de diffusion associée. À trois dimensions cette probabilité converge dans la limite $\gamma \to 0$ et on retrouve le résultat bien connu

$$P(0, \boldsymbol{r}, \omega = 0) = \frac{1}{4\pi D|\boldsymbol{r}|} \quad . \tag{5.27}$$

• À partir de $P_\gamma(0, \boldsymbol{r})$, on obtient par l'intégrale (5.13), le temps $\tau_v(\gamma)$ passé dans un volume $v = A_d R^d$ autour de l'origine. Dans la limite $R \ll L_\gamma$, il s'écrit

$$\tau_v^{(3)}(\gamma) = \frac{R^2}{2D} \ , \ \tau_v^{(2)}(\gamma) = \frac{R^2}{2D} \ln b \frac{L_\gamma}{l_e} \ , \ \tau_v^{(1)}(\gamma) = \frac{L_\gamma R}{D} \tag{5.28}$$

où $b \simeq 1{,}747$. On voit que, à $d = 3$, la particule passe un temps fini dans un volume fini autour de l'origine. Par contre, à $d = 1$, ce temps est infini dans la limite d'un temps de vie infini et il diverge comme $\sqrt{\tau_\gamma}$. Le cas $d = 2$ est marginal avec une divergence logarithmique en fonction de τ_γ.

On voit que la dimensionnalité d'espace joue un rôle essentiel quant à la nature de la diffusion. Voyons comment le temps de récurrence $\tau_R(\gamma)$, donné par la relation (5.15), en dépend [6]. On peut l'évaluer à partir de l'intégrale [7]

$$\tau_R \simeq A_d l_e^d \int_{\tau_e}^{\infty} \frac{e^{-\gamma t}}{(4\pi Dt)^{d/2}} dt \quad . \tag{5.29}$$

[6] Pour un milieu infini, le temps de récurrence ne dépend pas du point de départ.

[7] Il se déduit aussi des relations (5.28) de l'exercice précédent en prenant un volume de rayon l_e.

On obtient alors

$$\boxed{\begin{array}{ll} d=3 & \dfrac{\tau_R}{\tau_e} \propto 1 \\[2ex] d=2 & \dfrac{\tau_R}{\tau_e} \propto \ln \dfrac{L_\gamma}{l_e} \\[2ex] d=1 & \dfrac{\tau_R}{\tau_e} \propto \dfrac{L_\gamma}{l_e} \end{array}} \tag{5.30}$$

où les coefficients de proportionnalité s'obtiennent à partir de l'exercice 5.2.

En dimension $d = 3$, τ_R est fini, c'est-à-dire qu'une particule diffusive initialement en un point donné de l'espace s'échappe du volume élémentaire l_e^3 après une seule collision et n'y revient plus ultérieurement. La diffusion n'est pas récurrente. En d'autres termes, l'espace des phases est suffisamment grand pour qu'une particule diffusive s'échappe à l'infini sans repasser par son point de départ.

Par contre, pour $d \leq 2$, l'intégrale (5.29) diverge aux temps longs et dépend donc de la coupure τ_γ qui supprime la contribution des longues trajectoires de diffusion. Cette divergence de τ_R dans la limite $\tau_\gamma \to \infty$ s'interprète en disant que *la particule diffusive repasse une infinité de fois près de son point de départ.* La diffusion est donc récurrente en dimension $d \leq 2$. On peut réexprimer ce résultat en disant qu'au terme d'une trajectoire diffusive de n collisions, la particule a passé typiquement un temps $\tau_e\sqrt{n}$ ($d = 1$) (ou $\propto \ln n$ pour $d = 2$) autour de son point de départ. Ces résultats constituent le théorème de Polya [83] sur les propriétés de récurrence de la marche au hasard dans l'espace libre.

Ces différences de comportement en fonction de la dimensionnalité ont des conséquences physiques essentielles. Nous en verrons plusieurs exemples comme la correction quantique à la conductivité électrique (chap. 7), ou la correction de densité d'états au voisinage du niveau de Fermi pour un gaz d'électrons en interaction (section 13.4). Plus généralement, il est possible de caractériser la nature même du milieu dans lequel se propagent les ondes ou les électrons à partir de la propriété de récurrence. Ainsi, si la diffusion n'est pas récurrente on parlera de métal et d'ondes délocalisées tandis que dans le cas récurrent on parlera d'isolant et d'ondes localisées au sens d'Anderson.

La notion de récurrence que nous venons de discuter est définie à partir de la probabilité de retour en un point (l'origine). On pourrait généraliser cette notion au cas de la probabilité de retour sur une ligne ou sur un plan (un hyperplan). Par exemple l'albédo cohérent est relié à la probabilité de retour sur un plan (section 8.4).

5.4 Diffusion dans une boîte périodique

Considérons maintenant la solution de l'équation de diffusion dans une boîte parallèlépipédique de dimension d, de côtés L_i ($i = 1, ..., d$) et de volume Ω avec des conditions aux limites périodiques (le volume Ω est donc un tore). Cette limite permet de décrire la diffusion libre au moyen de fonctions propres normalisées et d'un spectre discret.

Les fonctions propres de l'équation (5.4) sont des ondes planes normalisées $\psi(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\boldsymbol{q}.\boldsymbol{r}}$, et les valeurs propres sont égales à Dq^2, où les valeurs de $\boldsymbol{q}$ sont quantifiées : $q_i = 2\pi n_i / L_i$ avec $n_i = 0, \pm 1, \pm 2, \pm 3, \cdots$ [8]. À partir de (5.2), il vient

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) = \frac{1}{\Omega} \theta(t) \sum_{\boldsymbol{q}} e^{-Dq^2 t} e^{i\boldsymbol{q}.(\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r})} \quad . \tag{5.31}$$

L'ensemble des valeurs propres constitue un réseau Γ^* rectangulaire en dimension d. Sur ce réseau, on définit les vecteurs $\boldsymbol{x}$ de coordonnées $x_i = 2\pi n_i \frac{\sqrt{D}}{L_i}$. On en déduit l'expression du noyau de la chaleur

$$Z(t) = \sum_{\boldsymbol{x} \in \Gamma^*} e^{-|\boldsymbol{x}|^2 t} \tag{5.32}$$

Γ^* peut être compris comme le réseau réciproque d'un réseau réel Γ qui serait l'ensemble des points $\boldsymbol{y}$ de coordonnées $y_i = \frac{L_i}{\sqrt{D}} m_i$. En appliquant la formule de sommation de Poisson (15.95), on obtient

$$Z(t) = \sum_{\boldsymbol{x} \in \Gamma^*} e^{-|\boldsymbol{x}|^2 t} = \frac{\Omega}{(4\pi D t)^{d/2}} \sum_{\boldsymbol{y} \in \Gamma} e^{-\frac{|\boldsymbol{y}|^2}{4t}} \quad . \tag{5.33}$$

Le développement de $Z(t)$ en fonction des entiers m_i s'interprète comme la probabilité de retour à l'origine après avoir effectué m_i tours autour de la direction caractérisée par la longueur L_i. Les entiers m_i sont appelés *nombres d'enroulements* ou nombres d'homotopie et ils réalisent une partition des trajectoires possibles de diffusion sur le tore [85]. Ce sont des nombres topologiques, c'est-à-dire qu'ils ne dépendent pas de la forme géométrique exacte du tore mais seulement de sa nature topologique, plus précisément de son nombre de trous, ici égal à un. Par conséquent, la probabilité de retour à l'origine, le temps de récurrence, ainsi que toutes les quantités spectrales, sont identiques pour les systèmes ayant la topologie d'un tore. On montre dans le complément C5.4 comment $Z(t)$ dépend de la topologie de l'espace dans lequel on résout l'équation de diffusion.

[8] On peut vérifier que les entiers n_i ainsi définis décrivent les valeurs propres du moment angulaire associées à chacun des anneaux de longueur L_i.

5.5 Diffusion dans les systèmes finis

5.5.1 Temps de diffusion et énergie de Thouless

Considérons maintenant un domaine de taille finie, par exemple un cube d'arête L et des particules diffusives initialement à l'intérieur de ce domaine. À des temps suffisamment petits, les particules diffusent comme dans un milieu infini, jusqu'à ce que la probabilité d'atteindre les bords devienne non négligeable. On peut ainsi définir un temps typique à partir duquel une particule diffusive commence à « sentir » l'effet des bords. Au-delà de ce temps, la probabilité de trouver une particule en un point donné devient spatialement uniforme et donc la particule diffusive explore de manière ergodique tout le volume mis à sa disposition. On définit habituellement ce temps τ_D en utilisant la relation (5.20) établie pour un milieu infini et en prenant pour taille typique $\langle R^2(t)\rangle = L^2$ soit

$$\tau_D = \frac{L^2}{D} \tag{5.34}$$

τ_D est appelé temps de diffusion ou temps ergodique, ou encore *temps de Thouless* [9]. L'inverse de ce temps définit une fréquence ou, pour les systèmes électroniques, une énergie caractéristique appelée *énergie de Thouless* ou fréquence de Thouless [10].

$$\boxed{E_c = \frac{\hbar}{\tau_D} = \frac{\hbar D}{L^2}} \tag{5.35}$$

Cette énergie joue un rôle fondamental pour la description des propriétés physiques des milieux faiblement désordonnés.

5.5.2 Conditions aux limites pour l'équation de diffusion

On veut maintenant décrire l'effet des bords dans le processus de diffusion. Il faut donc préciser les conditions aux limites. Nous en rencontrerons essentiellement deux types :

- **Condition de Neumann.** Le courant associé à la probabilité de diffusion s'annule sur les bords :

$$\boldsymbol{n}.\nabla_{\boldsymbol{r}'} P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)|_{\boldsymbol{r}' \in \partial\Omega} = 0 \tag{5.36}$$

  où $\boldsymbol{n}$ est un vecteur unitaire normal en chaque point du bord $\partial\Omega$. Cette condition décrit un système isolé. Pour le cas des électrons, cela signifie

[9] Cette expression de τ_D est celle utilisée dans la littérature. Il est à noter qu'elle ne fait pas intervenir la dimensionnalité d'espace d qui apparaît cependant dans (5.20).

[10] Dans les chapitres où on prend $\hbar = 1$, on gardera la même notation pour l'énergie et la fréquence de Thouless : $E_c = D/L^2$.

que les électrons ne peuvent sortir de l'échantillon. Pour les ondes, cela décrit une *paroi réfléchissante.*

- **Condition de Dirichlet.** La probabilité s'annule sur les bords :

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)|_{\boldsymbol{r}' \in \partial\Omega} = 0 \quad . \tag{5.37}$$

Pour un système électronique, cette condition correspond au couplage du système à un « réservoir », de telle manière qu'une particule qui quitte le milieu n'y retourne plus (système connecté). Pour les ondes dans un milieu diffusant, une onde qui touche le bord sort du milieu pour ne plus y revenir. On parle de *paroi absorbante.*

Remarque

Notons que les sens physiques des conditions de Neumann et Dirichlet sont ici inverses de ce qu'elles sont pour une équation de Schrödinger où un système isolé est limité par une barrière de potentiel infinie, ce qui correspond à la condition de Dirichlet.

Remarque

Il n'y a *a priori* aucune raison pour que les conditions aux limites imposées à l'équation de diffusion se déduisent simplement de celles de l'équation intégrale initiale (4.25) pour la probabilité de diffusion quantique $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$. On verra que la résolution de cette équation à l'approximation de diffusion conduit à prendre une condition aux limites mixte (complément C5.3) :

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) - z_0 \boldsymbol{n}.\nabla_{\boldsymbol{r}'} P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)|_{\boldsymbol{r}' \in \partial\Omega} = 0 \tag{5.38}$$

où z_0 est une longueur reliée au libre parcours moyen.

5.5.3 Volume fini et « mode zéro »

Considérons un système fini de volume Ω. Le spectre du laplacien (5.4) est discret et il est décrit par la séquence de valeurs propres $\{E_n\}$. La probabilité intégrée de retour à l'origine s'écrit :

$$Z(t) = \sum_n e^{-E_n t} \quad . \tag{5.39}$$

Pour un système isolé, les conditions aux limites de Neumann (5.36) impliquent que l'état fondamental de l'équation de diffusion est d'énergie nulle c'est-à-dire $E_0 = 0$. Lorsque le temps t tend vers l'infini, la probabilité (5.39) est contrôlée par le comportement du mode de plus basse énergie. Comme celui-ci est nul, la probabilité tend vers 1. Ce résultat exprime simplement que, du fait des parois réfléchissantes, la particule ne peut pas sortir du volume Ω. Dans un système fini, la particule repasse donc nécessairement une infinité de fois près de son point de départ. Ceci définit le *régime ergodique.* La diffusion est donc récurrente et, si la particule a un temps de vie fini, le temps de récurrence diverge comme τ_γ. Le comportement de la probabilité de

retour à l'origine lorsque $t \to \infty$ est contrôlé uniquement par τ_γ, soit

$$Z(t) = \frac{1}{\Omega} e^{-t/\tau_\gamma} \qquad \text{(Neumann)} \quad . \tag{5.40}$$

Pour un système ouvert, la condition de Dirichlet (5.37) impose à l'état fondamental d'avoir une énergie strictement supérieure à celle du fondamental de Neumann. Le mode $E_0 = 0$ est exclu et l'énergie du fondamental est finie et proportionnelle à l'énergie de Thouless E_c. Ce gap contrôle le comportement aux temps longs de la probabilité de retour à l'origine. Ceci traduit l'existence d'une probabilité d'absorption finie de la particule aux bords du système et la diffusion n'est donc pas récurrente. On a

$$Z(t) = e^{-t/\tau_D - t/\tau_\gamma} \qquad \text{(Dirichlet)} \tag{5.41}$$

et pour $\tau_\gamma \to \infty$, les longues trajectoires sont dans ce cas naturellement coupées après un temps fini de l'ordre du temps de Thouless τ_D. Le temps de récurrence τ_R s'exprime de manière analogue à (5.30), mais où le temps de coupure τ_γ est maintenant remplacé par τ_D, c'est-à-dire que la longueur L_γ est remplacée par la taille typique du système $L = \Omega^{-1/d}$.

5.5.4 Diffusion dans un domaine anisotrope

On considère l'exemple de la diffusion dans un domaine anisotrope [11] c'est-à-dire dont les dimensions $L_x > L_y > L_z$ sont très différentes. Le comportement des solutions de l'équation de diffusion pour une particule placée initialement au centre du domaine dépend de l'échelle de temps considérée. On peut définir maintenant trois temps caractéristiques $\tau_D^{(x)} > \tau_D^{(y)} > \tau_D^{(z)}$ et donc trois énergies de Thouless $E_c^{(x)} < E_c^{(y)} < E_c^{(z)}$. On distingue alors les régimes suivants :

- $t < \tau_D^{(z)}$: la diffusion est tridimensionnelle et la probabilité de retour à l'origine est proche de celle du milieu infini correspondant. Par conséquent, en utilisant (5.23), on a $Z(t) \simeq \Omega/(4\pi Dt)^{3/2}$ où $\Omega = L_x L_y L_z$ est le volume du domaine.
- $\tau_D^{(z)} < t < \tau_D^{(y)}$: pour ces temps intermédiaires la diffusion est bidimensionnelle et donc $Z(t) \simeq L_x L_y / 4\pi Dt$.
- $\tau_D^{(y)} < t < \tau_D^{(x)}$: la diffusion devient unidimensionnelle, soit $Z(t) \simeq L_x/(4\pi Dt)^{1/2}$.
- $t > \tau_D^{(x)}$: la probabilité est uniforme, on est dans le régime ergodique défini dans la section 5.5.1. On parle alors de régime zéro-dimensionnel.

[11] On suppose le mouvement diffusif dans les trois directions, c'est-à-dire $L_i \gg l_e$, avec un coefficient de diffusion isotrope qui reflète l'isotropie du problème au niveau microscopique.

La figure 5.1 résume ces différentes situations pour le cas d'un système initialement bidimensionnel.

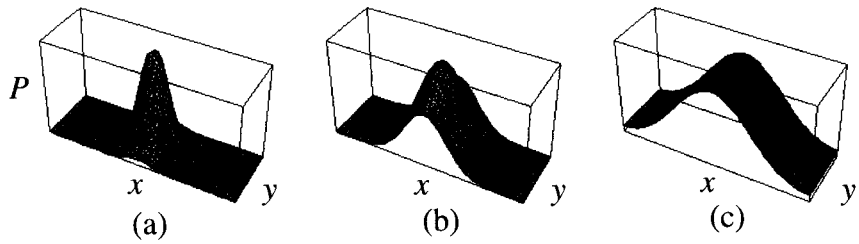


FIG. 5.1 – *Solution de l'équation de diffusion dans un domaine bidimensionnel anisotrope. (a) Aux temps courts $t \ll \tau_D^{(y)}$ la diffusion est isotrope. (b) Pour un temps comparable à $\tau_D^{(y)}$ la diffusion est modifiée par les effets des bords perpendiculaires à la direction y et finalement elle devient unidimensionnelle (c) pour $t \gg \tau_D^{(y)}$.*

5.6 Diffusion unidimensionnelle

Dans cette section, on étudie les solutions de l'équation de diffusion dans des géométries unidimensionnelles, une situation physique fréquemment rencontrée. Par exemple, un métal désordonné peut souvent être assimilé à un fil unidimensionnel, si sa géométrie est très anisotrope et si on considère des temps suffisammment longs par rapport au temps de Thouless transverse (voir la section précédente et la fig. 5.1.c) [12].

Une autre situation effectivement unidimensionnelle est rencontrée en optique, lorsque la source incidente émet une onde plane dirigée selon l'axe Oz, qui éclaire un milieu diffusant semi-infini ou une tranche d'épaisseur L et de section infinie. Dans ce cas, du fait de l'invariance par translation dans le plan xOy, la probabilité $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$ est de la forme $P(\boldsymbol{\rho}, z, z', t)$ où $\boldsymbol{\rho} = (\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')_\perp$ est la projection du vecteur $(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')$ sur le plan xOy.

L'équation de diffusion à l'intérieur du milieu est alors séparable et la solution générale correspond au produit d'une diffusion libre dans le plan xOy décrite par la relation (5.19) et de la solution unidimensionnelle de l'équation de diffusion le long de l'axe Oz soit

$$P(\boldsymbol{\rho}, z, z', t) = \frac{e^{-\rho^2/4Dt}}{4\pi Dt} \, P(z, z', t) \quad . \tag{5.42}$$

Inversement on a

$$P(z, z', t) = \int d^2\boldsymbol{\rho} \, P(\boldsymbol{\rho}, z, z', t) \quad . \tag{5.43}$$

[12] La diffusion est unidimensionnelle mais les séquences de collisions multiples microscopiques sont toujours tridimensionnelles.

On définit aussi la transformée de Fourier bidimensionnelle $P(\boldsymbol{k}_\perp, z, z', t)$:

$$P(\boldsymbol{k}_\perp, z, z', t) = \int d^2\boldsymbol{\rho}\, e^{i\boldsymbol{k}_\perp\cdot\boldsymbol{\rho}} P(\boldsymbol{\rho}, z, z', t) \quad . \tag{5.44}$$

Sa transformée de Laplace $P_\gamma(\boldsymbol{k}_\perp, z, z') = \int P(\boldsymbol{k}_\perp, z, z', t) e^{-\gamma t} dt$ obéit à l'équation différentielle obtenue à partir de (5.14) :

$$\left(\gamma + Dk_\perp^2 - D\frac{\partial^2}{\partial z^2}\right) P_\gamma(\boldsymbol{k}_\perp, z, z') = \delta(z - z') \quad . \tag{5.45}$$

On utilisera souvent les quantités et notations suivantes :

$$\boxed{\begin{array}{lll} P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) & \xrightarrow{Laplace} P_\gamma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') & \xrightarrow{\gamma=0} P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \\ P(\boldsymbol{\rho}, z, z', t) & \longrightarrow P_\gamma(\boldsymbol{\rho}, z, z') & \longrightarrow P(\boldsymbol{\rho}, z, z') \\ P(\boldsymbol{k}_\perp, z, z', t) & \longrightarrow P_\gamma(\boldsymbol{k}_\perp, z, z') & \longrightarrow P(\boldsymbol{k}_\perp, z, z') \end{array}} \tag{5.46}$$

On note aussi les correspondances

$$\begin{aligned} P_\gamma(z, z') &\longleftrightarrow P(\boldsymbol{k}_\perp, z, z') \\ \gamma &\longleftrightarrow Dk_\perp^2 \\ \frac{1}{L_\gamma} &\longleftrightarrow k_\perp \end{aligned} \tag{5.47}$$

$$P_\gamma(k_\perp, z, z') \longleftrightarrow P\left(\sqrt{k_\perp^2 + \frac{1}{L_\gamma^2}}, z, z'\right) \quad . \tag{5.48}$$

On considère maintenant les solutions de l'équation de diffusion à une dimension pour les différentes conditions aux limites définies précédemment. En particulier, on décrit la diffusion dans un fil refermé sur lui-même (anneau), dans un fil connecté à des réservoirs, et dans un fil isolé.

5.6.1 L'anneau - conditions aux limites périodiques

On considère un anneau de périmètre L. Le spectre des modes propres s'obtient directement à partir des résultats de la section 5.4. Les fréquences propres sont $q = 2n\pi/L$ avec $n = 0, \pm1, \pm2, \pm3, \cdots$ où n est le moment angulaire autour de l'anneau. La probabilité $P(z, z', t)$ s'écrit :

$$P(z, z', t) = \frac{1}{L}\sum_n e^{-4\pi^2 E_c n^2 t} e^{2in\frac{\pi}{L}(z-z')} \tag{5.49}$$

où z décrit la coordonnée d'un point courant le long de l'anneau et où $E_c = D/L^2$ est l'énergie de Thouless. Du fait de l'invariance par translation

le long de l'anneau, la probabilité ne dépend que de la distance $|z - z'|$ et la probabilité de retour à l'origine $P(z, z, t)$ ne dépend donc pas du point de départ. La fonction $P_\gamma(z, z')$ est obtenue par transformation de Laplace et intégration sur les modes de la relation (5.49)[13], ou encore en résolvant directement l'équation de diffusion (5.14)

$$P_\gamma(z, z') = \frac{L_\gamma}{2D} \frac{\cosh(L - 2|z - z'|)/2L_\gamma}{\sinh L/2L_\gamma} \quad . \tag{5.50}$$

Le temps de récurrence $\tau_R(\gamma) = 2l_e P_\gamma(z, z)$ s'écrit donc :

$$\tau_R(\gamma) = \tau_e \frac{L_\gamma}{l_e} \coth \frac{L}{2L_\gamma} \quad . \tag{5.51}$$

Dans la limite $L_\gamma \ll L$, les trajectoires ne font pas le tour de l'anneau et le résultat est donc le même que pour le fil infini (5.30). Dans la limite inverse $L_\gamma \gg L$, la particule peut diffuser un grand nombre de fois autour de l'anneau. Le temps de récurrence devient de l'ordre de $2\tau_\gamma l_e/L$, ce qui correspond à une diffusion uniforme sur l'anneau. Ce comportement exprime l'existence du mode zéro, c'est-à-dire le fait que la particule ne peut pas sortir de l'anneau et $Z(t)$ tend vers l'unité lorsque t tend vers l'infini.

En utilisant les considérations de la section 5.4, on peut identifier l'ensemble dual du moment angulaire à celui des nombres d'enroulement autour de l'anneau en utilisant la transformation de Poisson (15.95). On en déduit pour la probabilité $P(z, z', t)$ l'expression

$$P(z, z', t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{-(z-z'+mL)^2/4Dt} \quad . \tag{5.52}$$

Le terme m de cette série représente la probabilité d'aller de z à z' après avoir effectué m tours autour de l'anneau. La description de $P(z, z, t)$ au moyen des nombres d'enroulement réalise donc une classification des trajectoires possibles. Le nombre d'enroulement est un nombre topologique indépendant de la forme exacte de l'anneau.

Il existe une dualité intéressante entre le développement (5.49) en modes et le développement (5.52) en nombres d'enroulement. Ne garder que le mode zéro (probabilité indépendante du temps pour $t \gg \tau_D$) dans la relation (5.49) correspond à une somme continue sur tous les nombres d'enroulement. Inversement, lorsque $t \ll \tau_D$, le nombre d'enroulement $m = 0$ correspond à une somme continue sur tous les modes.

5.6.2 Bords absorbants : fil connecté

Un fil de longueur L relié à des contacts est décrit par les conditions aux limites de Dirichlet puisqu'une particule ou une onde qui diffuse près d'un bord

[13] On utilise la formule (15.56).

est absorbée par les contacts. Les solutions de l'équation (5.4) compatibles avec la contrainte (5.37) sont $\psi(z) = \sqrt{2/L}\sin qz$ où z est la coordonnée le long du fil et les modes propres sont $q = n\pi/L$ avec $n = 1, 2, 3, \cdots$ La probabilité est donc :

$$P(z, z', t) = \frac{2}{L}\sum_{n>0} e^{-\pi^2 E_c n^2 t} \sin n\pi\frac{z}{L} \sin n\pi\frac{z'}{L} \quad . \tag{5.53}$$

La probabilité dépend maintenant des positions z et z' et non plus uniquement de leur distance. La fonction de partition $Z(t)$ s'obtient à partir de (5.53)

$$Z(t) = \sum_{n>0} e^{-\pi^2 E_c n^2 t} \tag{5.54}$$

qui tend vers 0 lorsque $t \to \infty$, ce qui traduit l'absence de mode zéro. En utilisant la relation (15.56) ou en résolvant directement l'équation de diffusion (5.14), on montre que la transformée de Laplace $P_\gamma(z, z')$ définie par (5.12) est égale à

$$\boxed{P_\gamma(z, z') = \frac{L_\gamma}{D}\frac{\sinh z_m/L_\gamma \sinh(L - z_M)/L_\gamma}{\sinh L/L_\gamma}} \tag{5.55}$$

ou encore

$$P_\gamma(z, z') = \frac{L_\gamma}{2D}\frac{\cosh(L - z_-)/L_\gamma - \cosh(L - z_+)/L_\gamma}{\sinh L/L_\gamma} \tag{5.56}$$

avec

$$\begin{aligned} z_+ &= z + z' \\ z_- &= |z - z'| \\ z_m &= \min(z, z') = \frac{1}{2}(z + z' - |z - z'|) \\ z_M &= \max(z, z') = \frac{1}{2}(z + z' + |z - z'|) \end{aligned} \tag{5.57}$$

$P_\gamma(z, z')$ converge dans la limite $\tau_\gamma \to \infty$:

$$\boxed{P_{\gamma=0}(z, z') = \frac{z_m}{D}(1 - \frac{z_M}{L})} \tag{5.58}$$

Cette convergence est due au fait que les bords absorbants suppriment les longues trajectoires. Le temps de récurrence $\tau_R(z, \gamma) = 2l_e P_\gamma(z, z)$ dépend de la position z sur le fil. Comme le montre la figure 5.2, il est nul sur les

bords puisque la particule y est immédiatement absorbée. Il est maximum au centre $z = L/2$, où, pour $\gamma = 0$, il vaut $\tau_R(L/2) = \tau_e\ L/2l_e$. En comparant avec (5.30), on voit que, lorsque $L_\gamma \to \infty$, c'est la taille qui joue le rôle de la longueur de coupure et le temps passé dans le fil dans la limite $\tau_\gamma \to \infty$ est convergent et d'ordre τ_D.

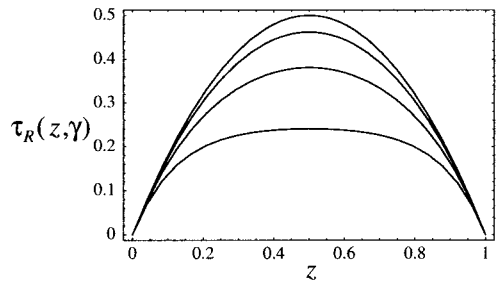


FIG. 5.2 – *Temps de récurrence $\tau_R(z,\gamma)$ correspondant à des conditions aux limites absorbantes (Dirichlet) pour $L/L_\gamma = 0, 1, 2, 4$. Le temps reste fini lorsque $L_\gamma = \infty$. Il est maximum au centre, égal à $L/2v$, s'annule aux bords et diminue lorsque L_γ diminue.*

5.6.3 Bords réfléchissants : fil isolé

Pour un fil métallique isolé, les électrons ne peuvent pas sortir et le courant de probabilité doit donc s'annuler aux bords. Ceci correspond aux conditions aux limites de Neumann (5.36). Pour une onde plane, solution de l'équation de Helmholtz, elles décrivent un bord parfaitement réfléchissant. Dans ce cas, on obtient un spectre de modes propres identique à celui obtenu dans la section précédente à ceci près que la valeur $n = 0$, qui correspond à une solution constante, est maintenant permise, car c'est le courant et non la fonction propre qui s'annule aux extrémités du fil. Les valeurs permises du vecteur d'onde sont $q = n\pi/L$ avec $n = 0, 1, 2, 3, \cdots$, où L est la longueur du fil. Par contre, les solutions propres sont différentes et données par $\psi_n(r) = \sqrt{2/L}\cos(qz)$, de telle sorte que la probabilité est :

$$P(z, z', t) = \frac{1}{L} + \frac{2}{L}\sum_{n>0} e^{-\pi^2 E_c n^2 t} \cos n\pi \frac{z}{L} \cos n\pi \frac{z'}{L} \quad . \tag{5.59}$$

La fonction de partition $Z(t)$ est donnée par

$$Z(t) = 1 + \sum_{n>0} e^{-\pi^2 E_c n^2 t} \tag{5.60}$$

et diffère de l'expression (5.54) obtenue pour les conditions aux limites absorbantes par un terme constant correspondant au mode zéro. Contrairement au

cas des bords absorbants, le temps de récurrence doit maintenant diverger du fait des réflexions multiples sur les bords. On obtient la fonction $P_\gamma(z,z')$ par transformation de Laplace de (5.59) ou en résolvant directement l'équation de diffusion (5.14)

$$\begin{aligned} P_\gamma(z,z') &= \frac{L_\gamma}{D}\frac{\cosh z_m/L_\gamma \cosh(L-z_M)/L_\gamma}{\sinh L/L_\gamma} \\ &= \frac{L_\gamma}{2D}\frac{\cosh(L-z_-)/L_\gamma + \cosh(L-z_+)/L_\gamma}{\sinh L/L_\gamma} \end{aligned} \tag{5.61}$$

où z_m, z_M, z_+ et z_- ont été définis en (5.57). Le temps de récurrence est représenté sur la figure 5.3. Il est maximum près des bords à cause de la réflexion qui augmente la probabilité de retour.

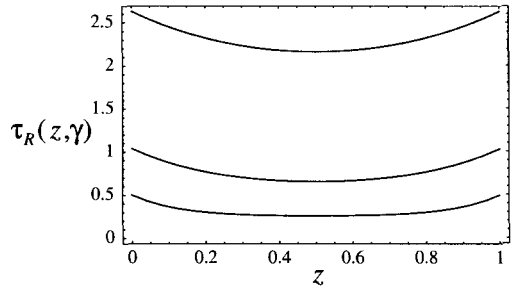


FIG. 5.3 – *Temps de récurrence $\tau_R(z,\gamma)$ correspondant à des conditions aux limites de bord dur (Neumann) pour $L/L_\gamma = 1,2,4$. Ce temps augmente avec L_γ et diverge lorsque $L_\gamma \to \infty$. Il est maximum sur les bords.*

Dans la limite $L \gg L_\gamma$, les trajectoires sont coupées à L_γ. On vérifie qu'au centre du fil, c'est-à-dire loin des bords, les conditions aux limites ne jouent pas de rôle appréciable et on retrouve donc les résultats (5.30) du fil infini :

$$\tau_R(L/2) \to \frac{\tau_e}{2}\frac{L_\gamma}{l_e} \quad .$$

Exercice 5.3 : Temps moyen passé dans un fil

D'après la relation (5.13), on peut définir le temps moyen passé dans un fil de longueur L par

$$T = \frac{1}{L}\int_0^L P_\gamma(z,z')dzdz' \quad . \tag{5.62}$$

Si le fil est connecté à des bords absorbants, l'intégration de la relation (5.55) conduit à

$$T = \frac{\tau_D}{\alpha^3}\left(\alpha - 2\tanh\frac{\alpha}{2}\right) \tag{5.63}$$

avec $\alpha = L/L_\gamma$. Dans la limite $L \ll L_\gamma$, ce temps converge vers $\tau_D/12$. Dans la limite $L_\gamma \ll L$, il tend vers τ_γ.

En revanche, pour un fil connecté à des bords réfléchissants, on montre que le temps passé dans le fil est τ_γ, ce qui exprime simplement que la particule ne s'échappe pas du fil.

Exercice 5.4 : Montrer que, pour un fil isolé de longueur $L \gg L_\gamma$, le temps de récurrence au bord est le double de sa valeur au centre.

5.6.4 Fil semi-infini

Le cas du domaine semi-infini est intéressant car il décrit la diffusion d'une onde plane dans un milieu semi-infini, une situation que l'on étudiera dans les chapitres 8 et 9. Il se déduit simplement des deux sections précédentes en prenant la limite $L \to \infty$. Pour le bord absorbant par exemple, la probabilité $P(z, z', t)$ s'obtient à partir de la relation (5.53) de sorte que

$$P(z, z', t) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-Dq^2 t} \sin qz \sin qz' dq \tag{5.64}$$

qui peut aussi se mettre sous la forme :

$$P(z, z', t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \left[e^{-(z-z')^2/4Dt} - e^{-(z+z')^2/4Dt} \right] \quad . \tag{5.65}$$

La transformée de Laplace

$$P_\gamma(z, z') = \frac{L_\gamma}{2D} \left[e^{-\frac{|z-z'|}{L_\gamma}} - e^{-\frac{(z+z')}{L_\gamma}} \right] \tag{5.66}$$

a une limite finie pour $L_\gamma \to \infty$ qui est

$$P(z, z') = \frac{z_m}{D} = \frac{1}{2D} (z + z' - |z - z'|) \quad . \tag{5.67}$$

De même, pour le cas d'un bord réfléchissant, on obtient, à partir de la relation (5.59),

$$P(z, z', t) = \frac{2}{\pi} \int_0^\infty e^{-Dq^2 t} \cos qz \cos qz' dq \tag{5.68}$$

ou encore

$$P(z, z', t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} \left[e^{-(z-z')^2/4Dt} + e^{-(z+z')^2/4Dt} \right] \quad . \tag{5.69}$$

5.7 La méthode des images

Les relations (5.65) et (5.69) pour le cas d'un fil semi-infini peuvent s'interpréter simplement à l'aide de la méthode des images utilisée en électrostatique pour décrire les solutions de l'équation de Poisson avec des bords. Pour un bord réfléchissant, la relation (5.69) s'interprète comme la superposition des contributions de deux charges, l'une placée en z et son image placée en $-z$. Pour le cas d'une paroi absorbante où la probabilité doit s'annuler en $z' = 0$, l'image doit avoir une « charge » négative, comme le montre la relation (5.65).

De même, dans un milieu semi-infini tridimensionnel avec un bord absorbant en $z = 0$, une source située en $\boldsymbol{r} = (\boldsymbol{r}_\perp, z)$ a son image située en $\boldsymbol{r}^* = (\boldsymbol{r}_\perp, -z)$. La probabilité $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ donnée par (5.27) est donc égale à

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \frac{1}{4\pi D}\left(\frac{1}{|\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|} - \frac{1}{|\boldsymbol{r}^* - \boldsymbol{r}'|}\right) \quad . \tag{5.70}$$

La probabilité unidimensionnelle intégrée sur le temps est obtenue à partir de (5.43) et est donnée par

$$P(z, z') = \int d^2\boldsymbol{\rho}\, P(\boldsymbol{\rho}, z, z') \quad . \tag{5.71}$$

L'intégrale se récrit :

$$\begin{aligned} P(z, z') &= \frac{1}{4\pi D}\int_S d^2\boldsymbol{\rho}\left(\frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z - z')^2}} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z + z')^2}}\right) \\ &= \frac{1}{2D}\left(z + z' - |z - z'|\right) = \frac{z_m}{D} \end{aligned} \tag{5.72}$$

où $z_m = \min(z, z')$. On retrouve ainsi l'expression (5.55).

Le cas de l'anneau unidimensionnel de longueur L peut aussi être décrit par la méthode des images. On place une infinité d'images aux positions $z + mL$, ce qui permet d'interpréter le développement (5.52) de la probabilité en nombres d'enroulement m.

Finalement, pour un fil ouvert de longueur finie, une transformation de Poisson des expressions (5.53) et (5.59) permet d'écrire la probabilité sous la forme

$$P(z, z', t) = \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}}\sum_{m=-\infty}^{\infty}\left[e^{-(z-z'+2mL)^2/4Dt} \pm e^{-(z+z'+2mL)^2/4Dt}\right] \quad . \tag{5.73}$$

Le signe + correspond aux conditions aux limites de bord dur et le signe − correspond aux parois absorbantes. La forme obtenue s'interprète simplement comme la diffusion à partir d'une infinité d'images de charge positive situées au points d'abscisse $z + 2mL$ et d'images situées aux points d'abscisse $-z + 2mL$. Selon la condition aux limites choisie, ce deuxième ensemble d'images possède des charges positives ou négatives.

Complément C5.1 Validité de l'approximation de diffusion pour un milieu infini

La probabilité de diffusion quantique et le facteur de structure sont, à l'approximation du diffuson, et *dans la limite de variations spatiales et temporelles lentes*, solutions d'une équation de diffusion (4.34, 4.38). Au-delà de cette limite, on a pu calculer exactement la transformée de Fourier de l'équation intégrale (4.29). Ainsi, pour la probabilité totale $P(\boldsymbol{q},\omega) = P_d + P_0$, on a obtenu (4.86) :

$$P(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{P_0(\boldsymbol{q},\omega)}{1 - P_0(\boldsymbol{q},\omega)/\tau_e} = \tau_e \frac{\arctan ql_e}{ql_e - \arctan ql_e} \tag{5.74}$$

où $P_0(\boldsymbol{q},\omega)$ est donnée à $d = 3$ par (4.78). Le comportement spatial de $P(\boldsymbol{r},\omega = 0)$ est donné par la transformée de Fourier inverse

$$P(\boldsymbol{r},\omega = 0) = \frac{1}{4i\pi^2 vr} \int_{-\infty}^{+\infty} dq\, e^{iqr} \frac{\arctan ql_e}{1 - \frac{\arctan ql_e}{ql_e}} \tag{5.75}$$

avec $l_e = v\tau_e$. On calcule l'intégrale par la méthode des résidus. Pour cela, on utilise la représentation : $\arctan x = \frac{1}{2i} \ln \frac{1+ix}{1-ix}$. Les singularités de l'intégrande sont, d'une part, un pôle à l'origine provenant de la racine de l'équation $\arctan ql_e = ql_e$ et, d'autre part, deux coupures le long de l'axe imaginaire allant de $q = i/l_e$ jusqu'à $q = i\infty$ et de $q = -i/l_e$ jusqu'à $q = -i\infty$.

On peut donc évaluer l'intégrale (5.75) en utilisant le contour représenté sur la figure 5.4 et en prenant ensuite la limite $Q \to \infty$. Pour avoir la contribution du pôle en zéro, on développe l'intégrande autour de $q = 0$, soit $\frac{\arctan ql_e}{1 - \frac{\arctan ql_e}{ql_e}} \simeq 3/ql_e$. La contribution de ce pôle à l'intégrale est $3i\pi/l_e$. La contribution de la coupure est donnée par l'intégrale

$$\int_1^{+\infty} e^{-rx/l_e} f(x) \quad , \tag{5.76}$$

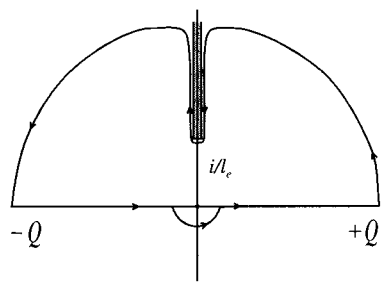


FIG. 5.4 – *Contour utilisé dans le plan complexe pour le calcul de l'intégrale (5.75).*

où on a posé $x = -iql_e$ et où la fonction $f(x)$ est donnée par

$$f(x) = \left[1 + \frac{1}{x}\ln\frac{x-1}{x+1} + \frac{1}{4x^2}\left(\pi^2 + \ln^2\frac{x-1}{x+1}\right)\right]^{-1} \quad . \tag{5.77}$$

Finalement, d'après le lemme de Jordan, la contribution à l'intégrale des deux quarts de cercle $q = Qe^{i\theta}$ tend vers zéro lorsque $Q \to \infty$. Il reste :

$$P(r, \omega = 0) = \frac{1}{4\pi Dr}\left(1 + \frac{1}{3}\int_1^{+\infty} e^{-rx/l_e} f(x)\right) \quad . \tag{5.78}$$

Le premier terme correspond à la solution de l'équation de diffusion (4.39). Le second terme, qui donne les corrections à l'approximation de diffusion, décroît exponentiellement avec le libre parcours moyen élastique. Par conséquent, pour des distances $r \geq l_e$, les solutions de l'équation de diffusion constituent une excellente approximation pour le calcul de la probabilité totale $P(r, \omega = 0)$ dans un milieu infini.

De même, on déduit le comportement de la probabilité $P_d = P - P_0$ où $P_0(r, \omega = 0)$ est donné par (4.17). On obtient :

$$\begin{aligned} P_d(r, \omega = 0) &= P(r, \omega = 0) - \frac{1}{4\pi v r^2} e^{-r/l_e} \\ &= \frac{1}{4\pi Dr}\left(1 + \alpha(r/l_e)\right) \end{aligned} \tag{5.79}$$

où la fonction $\alpha(y)$ est définie par

$$\alpha(y) = \frac{1}{3}\left[\int_1^{+\infty} e^{-yx} f(x)dx - \frac{e^{-y}}{y}\right] \tag{5.80}$$

et où $f(x)$ est définie par (5.77). Cette fonction, représentée sur la figure 5.5, décroît exponentiellement avec le libre parcours moyen élastique l_e. On en

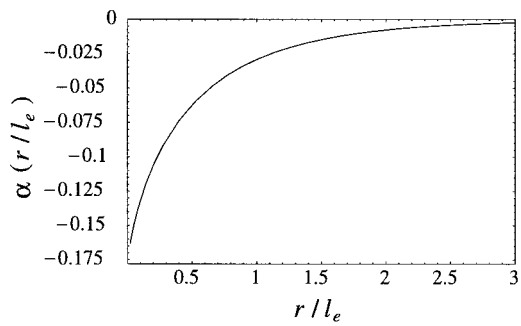


FIG. 5.5 – *Comportement de la fonction $\alpha(r/l_e)$ donnant l'amplitude relative du terme correctif à l'approximation de diffusion pour la probabilité P_d. De plus, $\alpha(0) = \pi^2/12 - 1 \simeq 0{,}178$.*

déduit que la probabilité $P_d(r, \omega = 0)$ est aussi solution d'une équation de diffusion avec des corrections exponentielles petites. Cette correction relative est très faible, elle vaut 0,029 pour $r = l_e$.

On peut donc conclure que l'expression $P_d(r, \omega = 0) = 1/(4\pi Dr)$ pour un milieu infini constitue une très bonne approximation. Ceci justifie l'utilisation de l'équation de diffusion (4.38) pour des distances supérieures à l_e, et des échelles de temps supérieures à τ_e. En présence de bords, il y a très peu de cas pour lesquels il soit possible d'obtenir une solution exacte. On étudie le cas d'un milieu semi-infini sans source (problème dit de Milne) dans le complément C5.3.

Complément C5.2 Équation de transfert radiatif

La probabilité de diffusion quantique P est solution de l'équation intégrale (4.29) qui, dans la limite de variations spatiales lentes, se ramène à la solution d'une équation de diffusion. On présente ici une formulation différente de cette équation intégrale qui, dans le contexte de la propagation des ondes électromagnétiques, est appelée *équation de transfert radiatif*. On obtient ici cette équation dans le cas général de collisions anisotropes.

C5.2.1 Intensité totale

Dans le complément C4.3, on a montré que, dans le cas de collisions anisotropes, il est nécessaire de généraliser la notion de facteur de structure et de définir une fonction $\Gamma(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})$ solution de l'équation (4.157). De même, pour la probabilité, on part de la relation (4.12) et on définit, pour les solutions de l'équation de Helmholtz, la fonction [14]

$$P(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) = \frac{4\pi}{c\Omega} \sum_{k,k'} \overline{G^R(k\hat{\boldsymbol{s}} + \frac{\boldsymbol{q}}{2}, k'\hat{\boldsymbol{s}}' + \frac{\boldsymbol{q}}{2}) G^A(k'\hat{\boldsymbol{s}}' - \frac{\boldsymbol{q}}{2}, k\hat{\boldsymbol{s}} - \frac{\boldsymbol{q}}{2})} \tag{5.81}$$

où la somme ne porte que sur les modules de $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$. D'après la relation (4.12), la probabilité $P(\boldsymbol{q})$ s'exprime comme

$$P(\boldsymbol{q}) = \left\langle P(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) \right\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}'} \quad . \tag{5.82}$$

On peut décomposer $P(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})$ comme la somme $P(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) = P_0(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{q})\delta_{\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}'} + P_d(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})$ où $P_0(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{q})$ est définie par (4.76).

Pour des collisions isotropes, la relation entre P_d et Γ est donnée par (4.83). Puisque, dans le cas anisotrope, Γ dépend des directions $\hat{\boldsymbol{s}}$ et $\hat{\boldsymbol{s}}'$, les sommes sur $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$ ne peuvent pas se factoriser, la relation (4.84) devient :

$$\boxed{P_d(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) = \frac{\tau_e}{\gamma_e} f(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{q}) f(\hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})\, \Gamma(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})} \tag{5.83}$$

où la fonction $f(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{q})$ est donnée par (4.77). On en déduit pour la probabilité totale

$$P(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) = \tau_e f(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{q}) \left[\delta_{\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}'} + \frac{f(\hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})}{\gamma_e} \Gamma(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) \right] \quad . \tag{5.84}$$

[14] Dans tout ce qui suit, on considère la limite de fréquence nulle $\omega = 0$. La généralisation à une fréquence finie est immédiate.

De l'équation intégrale (4.163) pour $\Gamma(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})$, on déduit celle donnant $P(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})$:

$$P(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) = \tau_e f(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{q}) \left[\delta_{\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}'} + \frac{1}{\gamma_e \tau_e} \Big\langle P(\hat{\boldsymbol{s}}'', \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) B(\hat{\boldsymbol{s}}'' - \hat{\boldsymbol{s}}) \Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}''} \right] \quad . \tag{5.85}$$

Définissons maintenant

$$P(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{q}) = \langle P(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) \rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'} \quad . \tag{5.86}$$

Sa transformée de Fourier $P(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r})$ apparaît souvent dans la littérature sous le nom d'*intensité spécifique* [86]. Elle est notée $I(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r})$. L'intensité [15] $I(\boldsymbol{r}) = \langle I(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r}) \rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}}$ n'est autre que la probabilité $P(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r})$ pour une source située en $\boldsymbol{r}_0$. On définit aussi le courant $\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r})$ appelé « flux d'énergie » (ou aussi flux de photons) par

$$\boldsymbol{J}(\boldsymbol{r}) = c \Big\langle \hat{\boldsymbol{s}} I(\boldsymbol{r}, \hat{\boldsymbol{s}}) \Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}} \quad . \tag{5.87}$$

L'étude de l'intensité spécifique constitue le point de départ de la théorie du transport. Celle-ci s'est révélée être une approche particulièrement féconde pour l'étude de la propagation des ondes électromagnétiques à travers l'atmosphère [86–89] ou certains milieux turbides. Le développement de cette théorie résulte du fait qu'il est généralement difficile d'obtenir la solution des équations de Maxwell dans un milieu diffusant, en dehors de la limite des grandes dilutions.

Pour obtenir l'équation à laquelle obéit l'intensité spécifique $I(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r})$, il suffit de prendre la moyenne angulaire de la relation (5.85), soit

$$P(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{q}) = \tau_e f(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{q}) \left[1 + \frac{1}{\gamma_e \tau_e} \Big\langle P(\hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) B(\hat{\boldsymbol{s}}' - \hat{\boldsymbol{s}}) \Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'} \right] \quad . \tag{5.88}$$

Compte tenu de (4.77) et en définissant

$$p(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}') = B(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}')/\gamma_e \quad , \tag{5.89}$$

tel que $\langle p(\hat{s} - \hat{s}') \rangle = 1$, on obtient pour l'intensité spécifique à fréquence nulle l'équation

$$(1 + i\boldsymbol{q}.\hat{\boldsymbol{s}} l_e) P(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{q}) = \tau_e + \Big\langle P(\hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})\, p(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}') \Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'} \tag{5.90}$$

dont la transformée de Fourier s'écrit

$$\boxed{\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{\nabla} I(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r}) = -\frac{1}{l_e} I(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r}) + \frac{1}{l_e} \Big\langle I(\hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{r})\, p(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}') \Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'} + \frac{\delta(\boldsymbol{r})}{c}} \tag{5.91}$$

[15] On note ici $I(\boldsymbol{r})$ l'intensité totale moyennée sur le désordre définie par la relation (4.55). C'est la somme de deux contributions (cf. 4.60), $I(\boldsymbol{r}) = I_0(\boldsymbol{r}) + I_d(\boldsymbol{r})$, associées à Drude-Boltzmann et au diffuson.

Cette relation constitue l'*équation de transfert radiatif* [86]. Elle décrit la variation d'intensité spécifique de l'onde dans une direction donnée $\hat{\boldsymbol{s}}$ comme résultant d'une part de l'atténuation dans cette même direction due à la diffusion élastique et d'autre part de la contribution diffusée dans les autres directions. Cette dernière est contrôlée par la fonction $p(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}')$ que l'on suppose ne dépendre que de l'angle entre les directions $\hat{\boldsymbol{s}}$ et $\hat{\boldsymbol{s}}'$. Le terme source est ici une fonction $\delta(\boldsymbol{r})$, mais peut être remplacé par une source quelconque que l'on notera $c\ \varepsilon(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r})$.

C5.2.2 Intensité diffusée

Avec l'équation de transfert radiatif, on dispose d'un moyen de description de l'évolution de l'intensité d'une onde en diffusion multiple pour des collisions anisotropes. Il est possible de simplifier cette équation et de la résoudre à l'approximation de diffusion. Pour cela, on suit la démarche proposée dans la référence [86]. On sépare l'intensité totale I en deux parties, la composante de Drude-Boltzmann I_0 et la composante associée aux trajectoires de diffusion multiple I_d, que l'on appelle aussi *intensité diffusée* et qui correspond au diffuson. Cette séparation a déja été présentée dans la section 4.7. Son intérêt est de permettre de déterminer des conditions aux limites et donc de résoudre l'équation de transfert radiatif pour $I(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r})$. Il n'existe pas de condition aux limites simple pour l'intensité totale à cause du terme de Drude-Boltzmann. Par contre, on peut trouver une condition aux limites pour la contribution I_d de diffusion multiple.

L'intensité I_0 correspond à l'onde émise par une source lumineuse (on considère plus loin le cas particulier d'une source extérieure) et elle décroît exponentiellement sur la longueur l_e. Cette composante balistique $I_0(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r})$ est solution de l'équation différentielle :

$$\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{\nabla} I_0(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r}) = -\frac{1}{l_e} I_0(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r}) \quad . \tag{5.92}$$

De cette relation et de l'équation de transfert radiatif (5.91) pour $I(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r})$, on déduit que la contribution $I_d(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r})$ est solution de :

$$\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{\nabla} I_d(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r}) = -\frac{1}{l_e} I_d(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r}) + \frac{1}{l_e} \Big\langle I_d(\hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{r})\, p(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}') \Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'} + \varepsilon(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r}) + \varepsilon_0(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r}) \tag{5.93}$$

avec maintenant deux termes source. Le premier, noté $\varepsilon(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r})$, est lié à une source située à l'intérieur du milieu désordonné et le second, $\varepsilon_0(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r})$, est engendré par l'intensité propagative incidente. Ce second terme est relié à la composante de Drude-Boltzmann $I_0(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r})$:

$$\varepsilon_0(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r}) = \frac{1}{l_e} \Big\langle I_0(\hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{r})\, p(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}') \Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'} \tag{5.94}$$

de sorte que

$$\left\langle \varepsilon_0(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r})\right\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}} = \frac{I_0(\boldsymbol{r})}{l_e} \qquad \text{et} \qquad c\left\langle \hat{\boldsymbol{s}}\ \varepsilon_0(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r})\right\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}} = \left(\frac{1}{l_e}-\frac{1}{l^*}\right)\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{r}) \tag{5.95}$$

où $I_0(\boldsymbol{r}) = \langle I_0(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r})\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}}$ et $\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{r}) = c\ \langle \hat{\boldsymbol{s}}.I_0(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r})\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}}$ sont respectivement l'intensité et le courant qui caractérisent le terme de Drude-Boltzmann $I_0(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r})$. On a introduit le libre parcours moyen de transport l^* (voir aussi le complément C4.3 et la relation 4.170) :

$$\frac{l_e}{l^*} = 1 - \left\langle p(\hat{\boldsymbol{s}}-\hat{\boldsymbol{s}}')\hat{\boldsymbol{s}}.\hat{\boldsymbol{s}}'\right\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'} \tag{5.96}$$

ou encore

$$\boxed{\frac{l_e}{l^*} = 1 - \left\langle p(\theta)\cos\theta\right\rangle} \tag{5.97}$$

L'intensité $I_0(\boldsymbol{r})$ et le courant $\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{r})$ sont reliés par :

$$\mathrm{div}\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{r}) = -\frac{c}{l_e}I_0(\boldsymbol{r}) \tag{5.98}$$

obtenue à partir de (5.92).

Dans l'approximation de diffusion, il est possible de suivre la démarche effectuée pour calculer $\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{q})$ dans le complément C4.3. On suppose que l'intensité spécifique $I_d(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r})$ est faiblement anisotrope et qu'elle peut se développer sous la forme (voir aussi la relation 4.165)

$$I_d(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r}) = I_d(\boldsymbol{r}) + \frac{3}{c}\boldsymbol{J}_d(\boldsymbol{r}).\hat{\boldsymbol{s}} \tag{5.99}$$

où $\boldsymbol{J}_d(\boldsymbol{r})$ est le courant associé à $I_d(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r})$:

$$\boldsymbol{J}_d(\boldsymbol{r}) = c\left\langle \hat{\boldsymbol{s}}\ I_d(\boldsymbol{r},\hat{\boldsymbol{s}})\right\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}} \tag{5.100}$$

En insérant le développement (5.99) dans (5.93) et utilisant la relation

$$\left\langle p(\hat{\boldsymbol{s}}-\hat{\boldsymbol{s}}')\hat{\boldsymbol{s}}'\right\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'} = \hat{\boldsymbol{s}}\left\langle p(\hat{\boldsymbol{s}}-\hat{\boldsymbol{s}}')\hat{\boldsymbol{s}}.\hat{\boldsymbol{s}}'\right\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'} \quad , \tag{5.101}$$

on obtient

$$\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{\nabla}I_d(\boldsymbol{r}) + \frac{3}{c}\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{\nabla}[\boldsymbol{J}_d(\boldsymbol{r}).\hat{\boldsymbol{s}}] = -\frac{3}{cl^*}\boldsymbol{J}_d(\boldsymbol{r}).\hat{\boldsymbol{s}} + \varepsilon(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r}) + \varepsilon_0(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r}) \tag{5.102}$$

qui constitue l'équation de transfert radiatif pour l'intensité spécifique $I_d(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r})$ *à l'approximation de diffusion.* En la moyennant sur tous les angles, on

obtient [16]

$$\mathrm{div}\boldsymbol{J}_d(\boldsymbol{r}) = c\langle\varepsilon(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r})\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}} + \frac{c}{l_e}I_0(\boldsymbol{r}) \tag{5.103}$$

qui exprime la conservation du flux. En multipliant les deux membres de (5.102) par $\hat{\boldsymbol{s}}$, en prenant la moyenne angulaire et en utilisant (5.95), on montre que

$$\boldsymbol{J}_d(\boldsymbol{r}) = -D^*\boldsymbol{\nabla}I_d(\boldsymbol{r}) + \left(\frac{l^*}{l_e} - 1\right)\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{r}) + l^*c\langle\hat{\boldsymbol{s}}\ \varepsilon(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r})\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}} \tag{5.104}$$

où $D^* = cl^*/3$. Cette relation généralise la *loi de Fick*. Enfin, en combinant (5.103) et (5.104), et compte tenu de (5.98), on retrouve l'équation de diffusion qui s'écrit ici [17] :

$$\boxed{\Delta I_d(\boldsymbol{r}) = -\frac{3}{l_e^2}I_0(\boldsymbol{r}) - \frac{3}{l^*}\Big\langle\varepsilon(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r}) - l^*\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{\nabla}\varepsilon(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r})\Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}}} \tag{5.105}$$

qui est à comparer à l'équation (4.66), et qui la généralise au cas d'une source non ponctuelle et anisotrope.

Finalement, il est utile d'insérer (5.104) dans (5.99), afin d'obtenir le développement angulaire de l'intensité spécifique diffusée $I_d(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r})$:

$$I_d(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r}) = I_d(\boldsymbol{r}) - l^*\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{\nabla}I_d(\boldsymbol{r}) + \frac{3}{c}\left(\frac{l^*}{l_e} - 1\right)\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{r}) + 3l^*c\Big\langle\hat{\boldsymbol{s}}\ \varepsilon(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r})\Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}} \tag{5.106}$$

C5.2.3 Conditions aux limites

La résolution de l'équation (5.105) nécessite de préciser les conditions aux limites pour l'intensité diffusée $I_d(\boldsymbol{r})$. Puisque le comportement diffusif n'existe qu'à l'intérieur du milieu désordonné, l'intensité diffusée *entrant* dans ce milieu doit être nulle :

$$I_d(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r}) = 0 \qquad \text{pour tout } \hat{\boldsymbol{s}} \text{ entrant} \tag{5.107}$$

et pour tout point $\boldsymbol{r}$ de l'interface. Compte tenu de l'approximation de diffusion (5.99), cette condition ne peut pas être satisfaite exactement. On la

[16] On utilise les relations

$$\Big\langle\hat{\boldsymbol{s}}\langle\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{A}\rangle\Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}} = \frac{\boldsymbol{A}}{3} \qquad \Big\langle\hat{\boldsymbol{s}}.[\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{\nabla}(\boldsymbol{A}.\hat{\boldsymbol{s}})]\Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}} = 0$$

valable pour tout vecteur $\boldsymbol{A}$.

[17] Pour une source ponctuelle, $\langle\varepsilon(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r}) - l^*\hat{\boldsymbol{s}}.\boldsymbol{\nabla}\varepsilon(\hat{\boldsymbol{s}},\boldsymbol{r})\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}} = \delta(\boldsymbol{r})/c$. On retrouve ainsi la relation (4.66).

remplace par la condition approchée imposant que le flux diffusé *entrant* :

$$J^{+}_{d,z}(\boldsymbol{r}) = c\Big\langle s_z I_d(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r})\Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}_+} \tag{5.108}$$

s'annule pour tout point $\boldsymbol{r}$ de l'interface. s_z est la composante normale à l'interface et la moyenne angulaire $\langle \cdots \rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}_+}$ est effectuée sur le demi-espace $s_z > 0$.

Il faut maintenant évaluer ce flux diffusé *entrant* pour la géométrie de la figure 5.6. À partir de l'équation (5.106) pour l'intensité spécifique diffusée $I_d(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r})$, on peut déterminer le flux qui traverse l'interface $z = 0$. Pour le milieu semi-infini, les différentes quantités ne dépendent que de la coordonnée d'espace z. Lorsque ce milieu est éclairé par une onde plane en incidence normale, l'intensité spécifique de Drude-Boltzmann est donnée par

$$I_0(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r}) = I_0 \delta(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{z}}) e^{-z/l_e} \tag{5.109}$$

et vérifie [18]

$$I_0(\boldsymbol{r}) = \frac{I_0}{4\pi} e^{-z/l_e} \qquad \text{et} \qquad \boldsymbol{J}_0(\boldsymbol{r}) = \frac{c I_0}{4\pi} \hat{\boldsymbol{z}} e^{-z/l_e} \quad . \tag{5.110}$$

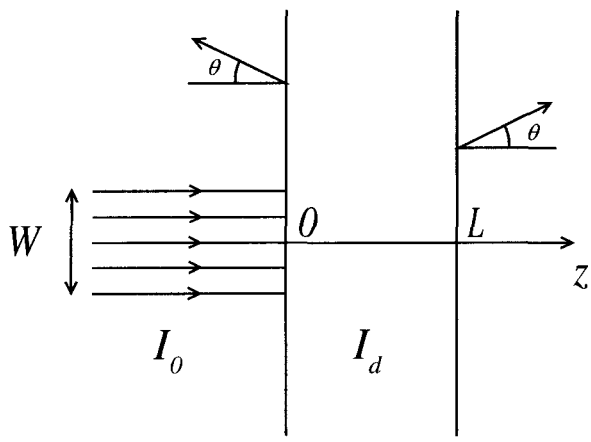


FIG. 5.6 – *Milieu diffusant ayant la géométrie d'une tranche, d'épaisseur L, éclairé par une onde plane (éventuellement collimatée). On mesure les coefficients de réflexion et de transmission dans une direction θ. L'intensité I_d n'est non nulle qu'à l'intérieur de la tranche.*

À partir de la relation (5.106), on obtient pour le flux diffusé $J^{+}_{d,z}(z)$:

$$J^{+}_{d,z}(z) = \langle s_z \rangle I_d(z) - l^{\star} \langle s_z^2 \rangle \frac{\partial I_d(z)}{\partial z} + \frac{3}{4\pi}\left(\frac{l^{\star}}{l_e} - 1\right) \langle s_z^2 \rangle I_0 e^{-z/l_e} \tag{5.111}$$

[18] Ces relations sont à comparer avec (4.58) qui correspond à une source ponctuelle. Ici, la source est une onde plane.

où la moyenne angulaire, effectuée sur le demi-espace $s_z > 0$, donne $\langle s_z \rangle = 1/2$ et $\langle s_z^2 \rangle = 1/3$, soit :

$$J_{d,z}^{+}(z) = \frac{I_d(z)}{2} - \frac{l^*}{3}\frac{\partial I_d(z)}{\partial z} + \frac{1}{4\pi}\left(\frac{l^*}{l_e} - 1\right) I_0 e^{-z/l_e} \quad . \tag{5.112}$$

Considérons d'abord le cas où il n'existe pas de source extérieure, c'est-à-dire $I_0 = 0$. La condition d'annulation du flux diffusé entrant, $J_{d,z}^{+}(0) = 0$, s'écrit alors

$$\boxed{I_d - \frac{2}{3} l^* \frac{\partial I_d}{\partial z}\bigg|_{z=0} = 0} \tag{5.113}$$

On la prendra comme condition aux limites pour un milieu semi-infini en l'absence de source. Le comportement de $I_d(z)$ au voisinage de l'interface est donc linéaire et donné par

$$I_d(z) \simeq I_d(0)\left(1 + \frac{z}{z_0}\right) \quad . \tag{5.114}$$

L'intensité s'annule au point de coordonnée $z = -z_0$ avec $z_0 = 2l^*/3$. Puisqu'elle résulte de la condition (5.108), cette condition aux limites est approchée. Ce résultat est à comparer avec la solution exacte du problème de Milne (5.140), obtenue pour un milieu semi-infini et des collisions isotropes, pour laquelle on obtient $z_0 = 0{,}71044\ l_e$ en l'absence de source (complément C5.3). Le faible écart justifie d'utiliser l'approximation de diffusion, qui est plus intéressante car elle permet de décrire aussi le cas de collisions anisotropes et de géométries variées à l'aide de la condition (5.113), ce que ne permet pas la solution du problème de Milne. Nous allons considérer maintenant quelques exemples.

Exercice 5.5 : Conditions aux limites et réflexions internes

À cause de la différence d'indice entre le milieu extérieur et le milieu diffusant ($n > 1$), il existe des réflexions sur la paroi interne de l'interface de sorte que le flux diffusif entrant n'est pas tout à fait nul, mais vérifie

$$J_{d,z}^{+}(0) = R\ J_{d,z}^{-}(0) \quad ,$$

où $J_{d,z}^{-}(0)$ est le flux diffusif sortant et où R est un coefficient de réflexion interne convenablement moyenné sur les angles de réflexion [90]. En déduire que la condition aux limites (5.113) s'écrit alors

$$I_d - z_0 \frac{\partial I_d}{\partial z}\bigg|_{z=0} = 0 \tag{5.115}$$

avec

$$z_0 = \frac{2}{3} l^* \frac{1+R}{1-R} \quad . \tag{5.116}$$

Exercice 5.6 : Conditions aux limites en dimension d

Montrer que, en toute dimension, et en l'absence de source, l'intensité varie linéairement au voisinage de l'interface (relation 5.114), avec

$$\frac{z_0}{l^*} = \frac{\langle s_z^2 \rangle_+}{\langle s_z \rangle_+} = \frac{\int_0^{\pi/2} \sin^{d-2}\theta \cos^2\theta d\theta}{\int_0^{\pi/2} \sin^{d-2}\theta \cos\theta d\theta} = \frac{A_d}{2A_{d-1}} \quad . \tag{5.117}$$

Les moyennes angulaires sont effectuées sur le demi-espace $z > 0$. A_d est le volume de la sphère de rayon unité (15.2). En dimension 2, $\langle s_z \rangle = 2/\pi$ et $\langle s_z^2 \rangle = 1/2$, de sorte que $z_0 = \pi/4$.

C5.2.4 Tranche éclairée par une source étendue

On considère le cas d'une tranche d'épaisseur L éclairée par une onde plane d'incidence normale (fig. 5.6). D'après (5.112), la condition d'annulation du flux diffusé entrant correspond à

$$I_d(0) - \frac{2l^*}{3}\frac{\partial I_d}{\partial z}\bigg|_0 + \frac{1}{2\pi}\left(\frac{l^*}{l_e} - 1\right) I_0 = 0 \quad . \tag{5.118}$$

Cette même condition, mais pour le flux diffusé entrant en provenance de la région $z > L$, s'écrit $J_{d,z}^-(z = L) = 0$, c'est-à-dire :

$$I_d(L) + \frac{2l^*}{3}\frac{\partial I_d}{\partial z}\bigg|_L - \frac{1}{2\pi}\left(\frac{l^*}{l_e} - 1\right) I_0 e^{-L/l_e} = 0 \quad . \tag{5.119}$$

Pour $L \gg l_e$, le dernier terme est négligeable. La résolution de l'équation de diffusion (5.105) dans cette géométrie unidimensionnelle ne pose pas de problème. Sa solution est

$$I_d(z) = \frac{5}{4\pi}\frac{L + z_0 - z}{L + 2z_0} - \frac{3}{4\pi}e^{-z/l_e} \tag{5.120}$$

où $z_0 = 2l^*/3$. Le flux diffusé $\boldsymbol{J}_d(\boldsymbol{r})$ s'obtient à partir de la relation (5.104). Dans la limite $L \gg l_e$, on a :

$$\boldsymbol{J}_d(z) = -\frac{cI_0}{4\pi}\hat{\boldsymbol{z}}e^{-z/l_e} \quad . \tag{5.121}$$

En particulier, $\boldsymbol{J}_d(z = 0) = -cI_0/4\pi\hat{\boldsymbol{z}}$. Le flux diffusé est donc égal et opposé au flux incident $\boldsymbol{J}_0(z = 0)$. Enfin, à partir de (5.106) et (5.120), on obtient pour l'intensité en $z = 0$ ainsi que pour l'intensité spécifique rétrodiffusée dans la direction $-\hat{\boldsymbol{z}}$:

$$I_d(z = 0) = \frac{I_0}{2\pi} \qquad \text{et} \qquad I_d(-\hat{\boldsymbol{z}}, 0) = \frac{5}{4\pi}I_0 \quad . \tag{5.122}$$

- **Transmission**

À partir de l'intensité spécifique en $z = L$, on obtient le coefficient de transmission dans une direction θ, défini par

$$\mathcal{T}(\theta) = s_z \frac{I_d(\hat{\boldsymbol{s}}, L)}{I_0} \quad . \tag{5.123}$$

En insérant (5.120) dans (5.106), on obtient $I_d(\hat{\boldsymbol{s}}, L)$ et, compte tenu de $z_0 = 2l^*/3$, on en déduit

$$\mathcal{T}(\theta) = \frac{5}{4\pi} \frac{l^*}{L + 2z_0} \mu \left(\frac{z_0}{l^*} + \mu \right) \tag{5.124}$$

où $\mu = \cos\theta$. Le coefficient de transmission total $\mathcal{T} = 2\pi \int_0^{\pi/2} \mathcal{T}(\theta) \sin\theta d\theta$ est égal à

$$\mathcal{T} = \frac{5}{3} \frac{l^*}{L + 2z_0} \quad . \tag{5.125}$$

- **Réflexion**

À partir de l'intensité spécifique en $z = 0$, on obtient le coefficient de réflexion dans une direction θ

$$\mathcal{R}(\theta) = s_z \frac{I_d(\hat{\boldsymbol{s}}, 0)}{I_0} \quad . \tag{5.126}$$

En insérant (5.120) dans (5.106), on obtient $I_d(\hat{\boldsymbol{s}}, 0)$ et, compte tenu de la valeur de $z_0 = 2l^*/3$, on en déduit le coefficient de réflexion dans une direction θ

$$\mathcal{R}(\theta) = \frac{3}{4\pi} \mu \left(\frac{z_0}{l^*} + \mu \right) - \frac{5}{4\pi} \frac{l^*}{L + 2z_0} \mu \left(\frac{z_0}{l^*} + \mu \right) \quad . \tag{5.127}$$

Dans la limite du milieu semi-infini, $L \to \infty$, le dernier terme disparaît. On vérifie que le coefficient de réflexion total $\mathcal{R} = 2\pi \int_0^{\pi/2} \mathcal{R}(\theta) \sin\theta d\theta$ est égal à 1. Dans le cas où L est fini, on vérifie que $\mathcal{R} + \mathcal{T} = 1$.

C5.2.5 Milieu semi-infini éclairé par un faisceau collimaté

On considère maintenant le cas d'un milieu semi-infini dont l'interface est illuminée par un faisceau collimaté de largeur W, caractérisé par l'intensité

$$I_0(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r}) = F_0(\boldsymbol{\rho}) \delta(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{z}}) e^{-z/l_e} \tag{5.128}$$

où $\boldsymbol{\rho}$ est un vecteur bidimensionnel perpendiculaire à l'axe Oz. On considère un profil gaussien $F_0(\boldsymbol{\rho}) = I_0 e^{-\rho^2/W^2}$. L'intensité diffusée $I_d(\boldsymbol{r})$ est solution de l'équation (5.105) avec la condition aux limites à l'interface $\boldsymbol{r} = (\boldsymbol{\rho}, z = 0)$:

$$I_d(\boldsymbol{r}) - \frac{2l^*}{3} \frac{\partial I_d(\boldsymbol{r})}{\partial z}\Big|_{z=0} + \frac{1}{2\pi} \left(\frac{l^*}{l_e} - 1 \right) F_0(\boldsymbol{\rho}) = 0 \quad . \tag{5.129}$$

La solution de ce problème est détaillée pour le cas d'une tranche dans la référence [91]. En prenant la limite $L \to \infty$, on obtient, pour le milieu semi-infini :

$$I_d^W(\boldsymbol{\rho}, z=0) = \frac{I_0}{4\pi}\frac{l^*}{l_e}\int_0^\infty d\lambda\ J_0(\lambda\rho) W^2 e^{-\lambda^2 W^2/4}\ \frac{\lambda}{1+\frac{2}{3}l^*\lambda}\left(\frac{1}{1+\lambda l_e} - \eta\right) \tag{5.130}$$

où $\eta = 1 - l_e/l^*$ et où J_0 est la fonction de Bessel d'indice zéro. Par ailleurs,

$$I_d(-\hat{\boldsymbol{z}}, \boldsymbol{\rho}) = \frac{5}{2} I_d(\boldsymbol{\rho}, z=0) \quad . \tag{5.131}$$

Pour le cas d'un milieu uniformément éclairé ($W \to \infty$), on retrouve les résultats (5.122) pour l'onde plane. Pour le cas d'un faisceau infiniment fin et normalisé, $F_0(\boldsymbol{\rho}) = I_0\delta(\boldsymbol{\rho})$, on obtient

$$I_d^\delta(\boldsymbol{\rho}, z=0) = \frac{I_0}{4\pi^2}\frac{l^*}{l_e}\int_0^\infty d\lambda\ J_0(\lambda\rho)\ \frac{\lambda}{1+\frac{2}{3}l^*\lambda}\left(\frac{1}{1+\lambda l_e} - \eta\right) \tag{5.132}$$

et l'intensité spécifique en un point quelconque de l'interface est donnée par [91, 92] $I_d(-\hat{\boldsymbol{z}}, 0) = \frac{5}{2} I_d(\boldsymbol{\rho}, z=0)$. Il est intéressant de noter comment la solution pour le cas d'une onde plane étendue ($W \to \infty$) est reliée à celle de l'intensité diffusée par un faisceau δ :

$$I_d^{W\to\infty}(-\hat{\boldsymbol{z}}) = \frac{5}{2}\int d^2\boldsymbol{\rho}\, I_d^\delta(\boldsymbol{\rho}, z=0) = \frac{5}{4\pi} I_0 \quad . \tag{5.133}$$

Complément C5.3 Diffusion multiple dans un milieu fini

Pour un milieu infini et une source ponctuelle, la solution de l'équation de diffusion constitue une excellente approximation de la probabilité de diffusion P_d dans la limite des grandes distances $r \gg l_e$ (complément C5.1). Par ailleurs pour un milieu de taille finie, il est clair que l'approximation de diffusion est justifiée si l'on est suffisamment loin des bords. Il apparaît néanmoins une difficulté supplémentaire liée au choix de la condition aux limites sur le bord du système. En remplaçant l'équation intégrale (4.29) par une équation de diffusion, il n'est pas clair que la condition aux limites associée à cette dernière se déduit simplement de celles de l'équation initiale. Afin de voir dans quelle mesure ces deux problèmes sont liés, on étudie ici un cas (ils sont rares) pour lequel il est possible d'obtenir une solution exacte de l'équation intégrale (4.29), celui d'un milieu semi-infini sans source (problème de Milne).

Cette solution n'existe que pour le cas de collisions isotropes, c'est-à-dire lorsque $l^* = l_e$. Pour des collisions anisotropes, les équations intégrales (4.157) et (4.176), écrites pour le facteur de structure Γ et pour P, n'ont pas de solution simple. Il faut alors avoir recours à une méthode approchée qui part directement de l'équation de diffusion et non plus de l'équation intégrale. C'est l'approche du transfert radiatif présentée dans le complément C5.2.

C5.3.1 Diffusion multiple dans un demi-espace : le problème de Milne

On part de l'équation intégrale (4.29) pour la probabilité totale. À l'aide de l'expression (4.17) pour P_0, cette équation s'écrit

$$P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{\tau_e}{4\pi l_e |\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|^2} e^{-|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2|/l_e} + \frac{1}{4\pi l_e} \int d\boldsymbol{r}' \frac{e^{-|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}'|/l_e}}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}'|^2} P(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}_2) \quad . \tag{5.134}$$

Le premier terme est négligeable dès que les points $\boldsymbol{r}_1$ et $\boldsymbol{r}_2$ sont distants de plus de l_e. On le néglige donc en supposant le point $\boldsymbol{r}_2$ situé à l'infini à l'intérieur du milieu. Pour la géométrie d'un milieu semi-infini défini par le demi-espace $z \geq 0$, la probabilité $P(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = P(z_1, z_2)$ ne dépend pas de la projection $\boldsymbol{\rho}$ du vecteur $(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2)$ sur le plan $z = 0$. Ainsi, en plaçant la coordonnée z_2 à l'infini, l'équation (5.134) devient

$$P(z_1) = \frac{1}{4\pi l_e} \int_0^\infty dz' P(z') \int d^2\boldsymbol{\rho} \frac{e^{-|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}'|/l_e}}{|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}'|^2} \quad . \tag{5.135}$$

L'intégrale sur le plan $z = 0$ s'écrit

$$\int d^2\boldsymbol{\rho} \frac{e^{-\frac{1}{l_e}\sqrt{\rho^2 + (z_1 - z')^2}}}{\rho^2 + (z_1 - z')^2} = 2\pi \int_1^\infty \frac{dt}{t} e^{-t|z_1 - z'|/l_e} \quad . \tag{5.136}$$

En exprimant les longueurs en unité de l_e, on obtient pour $P(z)$ l'équation intégrale :

$$\boxed{P(z) = \frac{1}{2}\int_0^\infty dz' P(z') E_1(|z - z'|)} \tag{5.137}$$

où la fonction E_n est définie par :

$$E_n(z) = \int_1^\infty dt \frac{e^{-zt}}{t^n} \quad . \tag{5.138}$$

Le problème qui consiste à résoudre l'équation (5.137) s'appelle le problème de Milne. La méthode de Wiener-Hopf en donne la solution exacte au prix d'un calcul lourd d'une transformée de Laplace inverse [93]. Au lieu de présenter cette méthode, nous utilisons ici une approche variationnelle de ce problème [93]. Pour cela, on montre dans un premier temps que suffisamment loin de l'interface (située en $z = 0$), la probabilité $P(z)$ est une fonction linéaire. En effet, pour $z \to \infty$, $P(z)$ varie peu et on peut donc la développer sous la forme

$$P(z') = P(z) + (z' - z)P'(z) + \frac{1}{2}(z' - z)^2 P''(z) + \cdots \tag{5.139}$$

où P' et P'' sont les dérivées première et seconde de P. En insérant ce développement dans l'équation (5.137) et en utilisant les intégrales (15.49), on trouve que la probabilité est solution de l'équation $P''(z) = 0$. Loin de l'interface, elle admet donc le comportement asymptotique :

$$\boxed{P(z) \underset{z\to\infty}{\longrightarrow} z + z_0} \tag{5.140}$$

où z_0 est une constante. L'extrapolation de ce comportement jusqu'au voisinage de l'interface montre que la probabilité P ne s'annule pas en $z = 0$ mais à l'extérieur du milieu à une distance $-z_0$ de celui-ci (en unité de l_e). La valeur exacte de z_0, obtenue par la méthode de Wiener-Hopf [93], est égale à [19]

$$z_0 = 0{,}71044609\cdots \quad . \tag{5.141}$$

Ici on calcule cette longueur z_0 à l'aide d'une méthode variationnelle, qui permet aussi d'obtenir une expression de $P(z)$, valable pour tout z. Définissons

[19] z_0 est donnée par l'intégrale

$$z_0 = \frac{6}{\pi^2} + \frac{1}{\pi}\int_0^{\pi/2} dx \left(\frac{3}{x^2} - \frac{1}{1 - x\cot x}\right) \quad .$$

pour cela la fonction $Q(z) = P(z) - z$, de telle sorte que $Q(\infty) = z_0$. En reportant cette forme dans (5.137), on obtient pour $Q(z)$ l'équation intégrale [20]

$$Q(z) = \frac{1}{2}\int_0^\infty dz' Q(z') E_1(|z - z'|) + \frac{1}{2} E_3(z) \tag{5.142}$$

ainsi que la relation

$$z_0 = \frac{3}{2}\int_0^\infty dz Q(z) E_3(z) + \frac{3}{8} \quad . \tag{5.143}$$

Cette relation peut s'obtenir à partir d'un calcul exact [93] qui résulte du théorème suivant. La solution de l'équation intégrale

$$Q(z) = \frac{1}{2}\int_0^\infty dz' Q(z') \left[E_1(|z - z'|) - E_1(z + z')\right] + S(z) \quad , \tag{5.144}$$

où la fonction $S(z)$ est telle que $Q(z)$ soit bornée à l'infini, vérifie :

$$Q(\infty) = 3\int_0^\infty dz\ z S(z) \quad . \tag{5.145}$$

La fonction $S(z)$ correspondant à l'équation (5.142) est donnée par

$$S(z) = \frac{1}{2} E_3(z) + \frac{1}{2}\int_0^\infty dz' Q(z') E_1(z + z') \tag{5.146}$$

et ainsi,

$$z_0 = Q(\infty) = \frac{3}{2}\int_0^\infty dz\ z E_3(z) + \frac{3}{2}\int_0^\infty dz' Q(z') \int_0^\infty dz\ z E_1(z + z') \ . \tag{5.147}$$

L'évaluation des intégrales est immédiate et conduit à (5.143).

On résout maintenant l'équation intégrale (5.142) de façon approchée à l'aide d'une méthode variationnelle. À cette fin, on introduit la fonctionnelle :

$$\mathcal{F}(\hat{Q}) = \frac{\int_0^\infty dz \hat{Q}(z) \left[\hat{Q}(z) - \frac{1}{2}\int_0^\infty dz' \hat{Q}(z') E_1(|z - z'|)\right]}{\left[\int_0^\infty dz \hat{Q}(z) E_3(z)\right]^2} \quad . \tag{5.148}$$

Il est aisé de vérifier en faisant une variation autour de $\hat{Q}(z)$ que la fonctionnelle $\mathcal{F}(\hat{Q})$ est bien minimale pour la solution recherchée $Q(z)$. Par ailleurs, en utilisant les relations (5.142, 5.143), on montre que cette valeur minimale est reliée à z_0 par

$$\mathcal{F}_{\min} = \left(2\int_0^\infty dz Q(z) E_3(z)\right)^{-1} = \left(\frac{4}{3} z_0 - \frac{1}{2}\right)^{-1} \quad . \tag{5.149}$$

[20] Les intégrales utiles pour les calculs développés dans ce complément se trouvent dans le formulaire, p. 588.

Afin de déterminer z_0, on considère maintenant plusieurs fonctions d'essai. La plus simple consiste à prendre $\hat{Q}(z) = constante$. En insérant cette fonction dans (5.148) et en utilisant les intégrales données en (15.45), on obtient $\mathcal{F}_{\min} = 9/4 = 2{,}25$. En utilisant (5.149), on en déduit une estimation variationnelle de $z_0 = 17/24 \simeq 0{,}7083$. Afin d'obtenir une meilleure approximation pour $Q(z)$ et donc pour $P(z)$, on considère l'approximation d'ordre supérieur, obtenue en injectant $Q = z_0$ dans le membre de droite de (5.142), c'est-à-dire

$$Q(z) = z_0 - \frac{1}{2} z_0 E_2(z) + \frac{1}{2} E_3(z) \quad . \tag{5.150}$$

Ceci suggère de considérer la fonction d'essai

$$\hat{Q}(z) = z_0 \left[1 - \lambda E_2(z) + \mu E_3(z)\right] \quad . \tag{5.151}$$

En utilisant les intégrales (15.50), on obtient pour $\mathcal{F}(\hat{Q})$ l'expression

$$\mathcal{F}(\hat{Q}) = \frac{\frac{1}{4} + \frac{2}{3}\lambda(\ln 2 - 1) + \frac{1}{8}\mu - \frac{1}{3}\lambda\mu(1 - \ln 2) + \lambda^2(\frac{1}{2} - \frac{\pi^2}{24}) + \mu^2(\frac{\pi^2}{36} - \frac{2}{9}\ln 2 - \frac{13}{144})}{(\frac{1}{3} - \frac{1}{8}\lambda + \frac{1}{5}\mu(2\ln 2 - 1))^2} \tag{5.152}$$

En minimisant par rapport à λ et à μ, on obtient $\lambda = 0{,}342895$ et $\mu = 0{,}315870$. En reportant ces valeurs dans $\mathcal{F}(\hat{Q})$, on obtient $\mathcal{F}_{\min} = 2{,}23584$ et de la relation (5.149), on déduit la valeur $z_0 = 0{,}710445$. Finalement $P(z)$ s'obtient à partir de $Q(z)$:

$$P(z) = z + 0{,}710445 - 0{,}243608 E_2(z) + 0{,}244408 E_3(z) \quad . \tag{5.153}$$

On a représenté cette fonction sur la figure 5.7.

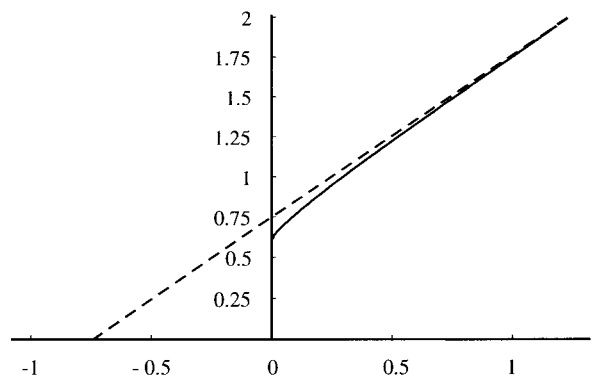


FIG. 5.7 – *Comportement spatial de la probabilité $P(z)$ pour un milieu semi-infini sans source. La courbe en trait plein correspond à la relation (5.153), tandis que celle en pointillé correspond à (5.140).*

L'approximation de diffusion définie par (5.140) reste donc excellente pour le milieu semi-infini puisque la correction au comportement linéaire, décrite

par les fonctions $E_n(z)$, décroît exponentiellement sur une échelle de l'ordre du libre parcours moyen élastique l_e.

Cette solution de l'équation intégrale (4.29) pour P au voisinage d'un plan infini n'est possible que pour des collisions isotropes. Pour des collisions anisotropes, c'est-à-dire lorsque $l^* \neq l_e$, on ne peut plus se ramener au problème de Milne. On peut par contre utiliser l'équation de transfert radiatif (complément C5.2).

C5.3.2 Diffusion dans un milieu fini

À partir de l'équation de transfert radiatif (complément C5.2), il a été possible de montrer que la probabilité obéit effectivement à une équation de diffusion, mais que la condition aux limites n'est pas celle de Dirichlet. Elle a été obtenue en écrivant que le flux diffusé doit s'annuler à l'extérieur du milieu désordonné. Ainsi, pour la géométrie d'un milieu semi-infini, on peut montrer qu'au voisinage de l'interface en $z = 0$, la probabilité P, compte tenu de la relation (4.63) entre I_d et P, obéit à la condition aux limites

$$P(z, z') - z_0 \left. \frac{\partial P(z, z')}{\partial z} \right|_{z=0} = 0 \quad . \tag{5.154}$$

P variant linéairement sur une distance de l'ordre de z_0, on remplace cette condition aux limites par la condition que la probabilité P s'annule à l'extérieur du milieu diffusant à une distance z_0

$$P(z, z')|_{z=-z_0} = 0 \quad . \tag{5.155}$$

La description basée sur l'équation de transfert radiatif permet d'obtenir $z_0 = 2/3\ l^*$ (voir la relation 5.113). L'autre description basée sur la solution exacte du problème de Milne donne $z_0 \simeq 0{,}710 l_e$ mais elle n'est valable que pour des collisions isotropes.

De ces deux approches, il ressort la conclusion suivante : Afin de calculer la probabilité P dans un milieu diffusant comportant des bords, on peut considérer les solutions de l'équation de diffusion (5.14) avec la condition aux limites de Dirichlet mais en imposant à la probabilité de s'annuler non pas sur l'interface mais à une distance finie z_0 à l'extérieur du milieu diffusant. Cette approche permet en fait d'obtenir assez facilement des expressions quantitatives et aisément interprétables en faisant l'économie de la recherche souvent fastidieuse des solutions de l'équation de transfert radiatif. Nous illustrons cette approche sur deux exemples qui s'avèreront particulièrement utiles.

• Milieu semi-infini

La solution obtenue pour l'équation de diffusion dans un demi-espace correspondait au cas d'une source située en $z' \to \infty$. On admettra que si z et z' sont tous les deux situés à distance finie, la probabilité $P(z, z')$ est obtenue à l'aide de la relation (5.67) correspondant à la condition aux limites de

Dirichlet (bord absorbant), en remplaçant z par $z + z_0$ et z' par $z' + z_0$. On obtient ainsi

$$P(z, z') = \frac{z_m + z_0}{D} = \frac{1}{2D}\left(z_+ + 2z_0 - z_-\right) \quad , \tag{5.156}$$

où $z_m = \min(z, z')$, $z_+ = z + z'$ et $z_- = |z - z'|$. De même, dans le cas où il existe une longueur de déphasage finie L_γ, on remplace la transformée de Laplace $P_\gamma(z, z')$ de la relation (5.66) par

$$P_\gamma(z, z') = \frac{L_\gamma}{2D}\left[e^{-\frac{|z-z'|}{L_\gamma}} - e^{-\frac{(z+z'+2z_0)}{L_\gamma}}\right] \quad , \tag{5.157}$$

la limite $L_\gamma \to \infty$ redonnant la relation (5.156). Ce résultat peut aussi s'obtenir par la méthode des images (voir section 5.7) mais en prenant le plan décalé $z = -z_0$ comme plan de symétrie.

• Tranche d'épaisseur finie

Dans le cas d'une tranche de largeur $L \gg l_e$ comprise entre deux plans infinis, on suppose, là encore, qu'on peut prendre la solution correspondant à la condition aux limites de Dirichlet (5.58) mais en remplaçant z par $z + z_0$, z' par $z' + z_0$ et l'épaisseur L par $L + 2z_0$, de sorte que [21]

$$\boxed{P(z, z') = \frac{z_m + z_0}{D}\left(1 - \frac{z_M + z_0}{L + 2z_0}\right)} \tag{5.158}$$

s'annule lorsque z ou z' sont égaux à $-z_0$ ou à $L + z_0$. Par la même substitution, pour le cas où la longueur de déphasage L_γ est finie, la relation (5.55) devient [22]

$$P_\gamma(z, z') = \frac{L_\gamma}{D}\frac{\sinh(z_m + z_0)/L_\gamma \sinh(L + z_0 - z_M)/L_\gamma}{\sinh(L + 2z_0)/L_\gamma} \quad . \tag{5.159}$$

Ces solutions seront utiles pour l'étude de l'albédo, de la spectroscopie des ondes diffusées et des corrélations de figures de speckle (chaps. 8, 9 et 12).

[21] z_m et z_M étant définis par la relation (5.57).

[22] La condition (5.154) conduit à une solution légèrement différente mais très proche dans la limite où z_0 est petit devant L.

Complément C5.4 Déterminant spectral

Dans la section 5.2.1, on a défini la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t)$ donnée par (5.5) et qui s'exprime en fonction du spectre des valeurs propres E_n de l'équation de diffusion. Dans la description d'un certain nombre de propriétés physiques, la fonction $Z(t)$ apparaît sous la forme de sa transformée de Laplace

$$\int_0^\infty Z(t)e^{-\gamma t}dt \tag{5.160}$$

où le nombre réel et positif γ est lié à la longueur maximale des chemins de diffusion et a été introduit dans la section 5.2.2. Par définition de $Z(t)$, l'intégrale précédente s'écrit formellement

$$\sum_n \frac{1}{\gamma + E_n} \tag{5.161}$$

et peut s'obtenir à partir du déterminant

$$\boxed{S(\gamma) = \det(-D\,\Delta + \gamma) = \prod_n (E_n + \gamma)} \tag{5.162}$$

sous la forme

$$\int_0^\infty Z(t)e^{-\gamma t}dt = \sum_n \frac{1}{\gamma + E_n} = \frac{\partial}{\partial \gamma} \ln S(\gamma) \quad . \tag{5.163}$$

Le déterminant $S(\gamma)$ est appelé *déterminant spectral* associé à l'équation de diffusion. De nombreuses propriétés physiques s'obtiennent à partir de $S(\gamma)$ ou de ses dérivées.

La fonction $S(\gamma)$ est définie formellement par le produit des valeurs propres de l'équation de diffusion. Ce produit est infini et les définitions précédentes n'ont donc qu'un caractère formel. Afin de donner un sens à $S(\gamma)$, on utilise une fonction auxiliaire, dite fonction ζ, associée au déterminant spectral et définie par

$$\zeta(s) = \sum_n \frac{1}{\lambda_n^s} \tag{5.164}$$

où $\lambda_n = E_n + \gamma$. Cette fonction est bien définie pour toute valeur de s telle que la série converge. En utilisant l'égalité

$$\frac{d}{ds}\lambda_n^{-s}|_{s=0} = -\ln\lambda_n \tag{5.165}$$

et l'intégrale

$$\frac{1}{\lambda^s} = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt\; t^{s-1}e^{-t\lambda} \tag{5.166}$$

on peut écrire

$$\zeta(s) = \frac{1}{\Gamma(s)} \int_0^\infty dt\ t^{s-1} Z(t) e^{-\gamma t} \quad . \tag{5.167}$$

Cette représentation fait apparaître $\zeta(s)$ comme la transformée de Mellin de $Z(t)e^{-\gamma t}$. La fonction $\zeta(s)$ ainsi définie converge et son prolongement analytique dans le plan complexe définit une fonction méromorphe de s analytique en $s = 0$. On utilise cette analyticité afin d'exprimer le déterminant spectral sous la forme

$$\boxed{\ln S(\gamma) = -\frac{d}{ds}\zeta(s)|_{s=0}} \tag{5.168}$$

qui est maintenant bien défini.

• Déterminant spectral et densité d'états

Le determinant spectral $S(\gamma)$ a des propriétés intéressantes et en particulier il permet d'obtenir le spectre des valeurs propres de l'équation de diffusion et la densité d'états $\rho(E) = \sum_n \delta(E - E_n)$. À partir de (5.163) on obtient

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \lim_{\eta \to 0^+} \mathrm{Im} \frac{d}{d\gamma} \ln S(\gamma) \tag{5.169}$$

où maintenant γ est complexe et donné par $\gamma = -E + i\eta$.

• Exemple : Diffusion dans le plan infini

On calcule $S(\gamma)$ sur l'exemple de la diffusion dans un plan. La probabilité intégrée de retour à l'origine est donnée par la relation (5.23)

$$Z(t) = \frac{1}{4\pi D t} \tag{5.170}$$

et la fonction $\zeta(s)$ associée, donnée par (5.167), s'écrit

$$\zeta(s) = \frac{1}{4\pi D \Gamma(s)} \int_0^\infty dt\ t^{s-1} \frac{1}{t} e^{-\gamma t} \tag{5.171}$$

qui s'intègre pour donner

$$\zeta(s) = \frac{1}{4\pi D} \frac{\gamma^{1-s}}{s-1} \quad . \tag{5.172}$$

On en déduit l'expression du déterminant spectral à l'aide de la relation (5.168), soit,

$$\ln S(\gamma) = \frac{1}{4\pi D} \gamma (1 - \ln \gamma) \quad . \tag{5.173}$$

La densité d'états se déduit de (5.169) et redonne l'expression (3.44) établie en dimension $d = 2$, moyennant toutefois de changer D en $1/2m$.

• Exemple : Invariant topologique

La probabilité $Z(t)$ peut inclure un terme additif constant C, dont l'origine est topologique. Le complément C5.5 en présente des exemples. Dans ce cas, la fonction $\zeta(s)$ et le déterminant spectral sont donnés par

$$\zeta(s) = \frac{C}{\gamma^s} \quad , \qquad \ln S(\gamma) = C \ln \gamma \quad . \tag{5.174}$$

De (5.169), on déduit qu'il existe une singularité dans la densité des modes de diffusion :

$$\rho(E) = C\delta(E) \quad . \tag{5.175}$$

Complément C5.5 Diffusion dans un domaine de forme quelconque - Développement de Weyl

Le chapitre 5 est consacré au calcul de la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t)$ associée à l'équation de diffusion pour quelques géométries simples – le milieu infini, les conditions aux limites périodiques, la diffusion à une dimension, etc. Pourtant les cas pour lesquels $Z(t)$ peut-être calculée exactement représentent l'exception plutôt que la règle. Pour un système de forme quelconque, on ne sait pas en général évaluer analytiquement ni les valeurs propres E_n ni, par conséquent, le noyau de la chaleur $Z(t)$ [23].

Néanmoins, dans la limite des temps $t \ll \tau_D$, où τ_D est le temps de diffusion(5.34), il est possible d'obtenir le développement asymptotique de $Z(t)$. Considérons l'exemple d'un domaine plan avec les conditions aux limites de Dirichlet. Une particule qui commence à diffuser à partir d'une position initiale située loin du bord ne sent pas sa présence et, en première approximation, on peut donc considérer que $Z(t) \simeq \frac{S}{4\pi Dt}$ où S est la surface du domaine (voir la relation 5.23). Au-delà, on peut se demander quelles sont les corrections à cette expression dues à l'existence du bord. La recherche de ce développement asymptotique, appelé aussi développement de Weyl est un problème célèbre de la physique mathématique contemporaine qui a été popularisé par M. Kac [94] sous le titre : « Peut-on entendre la forme d'un tambour ? ». Autrement dit, est-il possible de remonter, à partir du spectre E_n des valeurs propres et du développement asymptotique de $Z(t)$, aux caractéristiques géométriques du domaine et en particulier à la forme de son contour ? Cette question fut initialement posée en 1910 par H.A. Lorentz. Il se demandait pourquoi la loi de rayonnement de Jeans (c'est-à-dire à haute fréquence) pour un corps noir de volume fini ne dépendait pas de la forme de l'enceinte contenant le rayonnement mais seulement de son volume [94,95]. En fait, il se trouve que le terme suivant dans le développement de Weyl dépend de la longueur L du contour et il est donc possible d'« entendre » la longueur du contour. Pour évaluer ce terme de bord, on suppose dans un premier temps que la particule diffusive n'est sensible à la présence du bord le plus proche d'elle que par l'intermédiaire du plan tangent au bord. On obtient ainsi un terme correctif égal à $-\frac{L/4}{\sqrt{4\pi Dt}}$ (exercice 5.7).

Pour finir l'introduction quelque peu historique à ce problème, notons que la réponse à la question de M. Kac est négative, c'est-à-dire qu'il est possible de trouver des domaines isospectraux (ayant le même spectre de valeurs propres), de même surface et de même longueur mais ayant des formes différentes. Ce résultat, démontré en 1985, constitue le théorème de Sunada [96].

[23] On rencontre ce même problème pour les équations d'onde, de Schrödinger ou de Helmholtz. Cette constatation constitue le point de départ de l'étude des systèmes dits complexes ou chaotiques en mécanique quantique (à ce propos, voir le chap. 10 et en particulier la discussion de la section 10.1).

Exercice 5.7 : Diffusion dans un plan semi-infini

À l'aide de la relation (5.65) généralisée à $d = 2$, montrer que la probabilité de retour à l'origine au voisinage du bord s'écrit

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{4\pi Dt}\left[1 - e^{-z^2/Dt}\right] \tag{5.176}$$

où z est la distance du point $\boldsymbol{r}$ au bord. En déduire que le noyau de la chaleur $Z(t) = \int_S P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t)d\boldsymbol{r}$ est égal à

$$Z(t) = \frac{S}{4\pi Dt} - \frac{L/4}{\sqrt{4\pi Dt}} \tag{5.177}$$

où S est la surface du plan et L est la longueur du bord. Ces relations sont correctes aux temps courts, tels que $Dt \ll \min(S, L^2)$, ce qui justifie alors de parler de plan semi-infini.

Il est possible d'évaluer de manière systématique les termes du développement asymptotique de $Z(t)$ dans un domaine plan [97]. Sans entrer ici dans le détail, l'idée générale consiste à calculer le développement de Weyl pour le cas d'un disque, ce qui constitue un problème intégrable pour lequel tous les coefficients du développement peuvent être obtenus à partir de celui de fonctions de Bessel. Le cas d'un domaine borné par une courbe continue et infiniment dérivable s'obtient alors en définissant en chaque point des cercles osculateurs, ce qui conduit à pouvoir exprimer chaque terme du développement de Weyl comme une intégrale sur le bord, des puissances successives de la courbure locale $\kappa(l)$ où l est une coordonnée le long du bord. On obtient ainsi

$$Z(t) \underset{t\to 0}{\simeq} \frac{\Omega}{4\pi Dt} - \frac{L/4}{\sqrt{4\pi Dt}} + C + O(\sqrt{t}) \quad . \tag{5.178}$$

Le troisième terme de ce développement est *constant* et mérite une plus grande attention. On montre qu'il est égal à $C = \frac{1}{12\pi}\oint \kappa(l)dl$. C'est donc un terme indépendant de t et aussi de la forme du contour puisque l'intégrale de la courbure est égale à 2π de telle sorte que ce terme vaut $1/6$. Il reste inchangé si la surface n'est plus plane.

Le développement de la forme (5.178) reste valable pour une variété S quelconque. On peut montrer que $C = \chi(S)/6$, où $\chi(S)$ est un invariant topologique appelé caractéristique d'Euler-Poincaré de la variété. Le théorème de Gauss-Bonnet établit que

$$\chi(S) = \frac{1}{2\pi}\iint_S K dS + \frac{1}{2\pi}\oint_{\partial S} \kappa dl \tag{5.179}$$

où K est la courbure gaussienne de la surface S et κ est la courbure géodésique associée au bord ∂S.

Pour le cas d'une variété sans bord, par exemple une sphère ou un tore à un ou plusieurs trous, le terme de bord c'est-à-dire le second terme de (5.179) disparaît dans l'expression de $Z(t)$ et le terme constant reste égal à $\chi(S)/6$

où $\chi(S)$ ne dépend plus que de l'intégrale de la courbure gaussienne, puisque le terme de courbure géodésique n'existe pas. On peut montrer que $\chi(S) = 2(1-h)$ où h est la connectivité de la surface (son nombre de trous). Ainsi $\chi = 2$ pour la diffusion sur une sphère et χ s'annule pour un tore à un trou. Dans l'exercice 5.8, on vérifie directement par le calcul du spectre que le terme constant est bien égal à $1/3$ pour la sphère. Cet invariant peut aussi s'obtenir par triangulation de la variété et il est alors donné par la relation d'Euler $\chi = V - E + F$ où V, E et F sont respectivement ses nombres de vertex, d'arêtes et de faces. Une des conséquences de (5.178) est donc que l'on peut entendre la caractéristique d'Euler-Poincaré d'une variété quelconque.

Du développement de Weyl, on ne peut déduire que le comportement de $Z(t)$ aux petits temps, tandis que l'on a souvent besoin de connaître cette fonction à tous temps. Il y a cependant des situations où cette limite suffit. Un exemple concerne le comportement des corrélations spectrales (chap. 10) à haute énergie [98].

Exercice 5.8 : Développement de Weyl pour une sphère

Le spectre de l'équation de diffusion sur une sphère de rayon R est donné par $E_l = \frac{Dl(l+1)}{R^2}$, ces états ayant une dégénérescence $2l+1$. Montrer, en utilisant la formule d'Euler-Mac Laurin

$$\sum_{k=0}^{n} f(k) = \int_0^n f(k)dk + \frac{1}{2}(f(0)-f(n)) + \frac{1}{12}(f'(n)-f'(0)) - \frac{1}{720}(f'''(n)-f'''(0)) + \cdots \tag{5.180}$$

pour la fonction $f(l) = (2l+1)e^{-tE_l}$, que le noyau de la chaleur

$$Z(t) = \sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)e^{-tE_l} \tag{5.181}$$

admet le développement de Weyl

$$Z(t) = \frac{R^2}{Dt} + \frac{1}{3} - \frac{1}{60}\frac{Dt}{R^2} + \cdots \tag{5.182}$$

Exercice 5.9 : Montrer que la caractéristique d'Euler-Poincaré $\chi(S)$ de la carafe représentée sur la figure 5.8.*a* est égale à -1, et que celle du descendeur représenté sur la figure 5.8.*b* est égale à -2.

a) *b)*

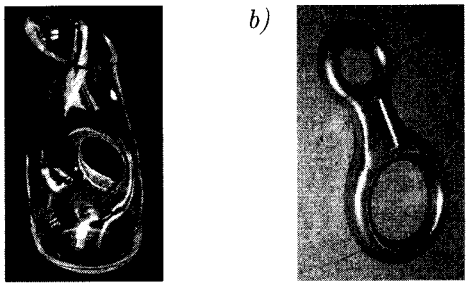


FIG. 5.8 – *a) Carafe (photo T. Akkermans). b) Descendeur (ou « huit ») utilisé pour les descentes en rappel (photo G. Montambaux).*

Complément C5.6 Diffusion sur des graphes

C5.6.1 Déterminant spectral sur un graphe

Jusqu'à présent, on a résolu l'équation de diffusion dans des géométries simples. On considère ici le cas de réseaux (ou graphes), formés de fils unidimensionnels au sens de la diffusion. Le déterminant spectral (5.162) sur un graphe fini s'écrit simplement en fonction de ses caractéristiques géométriques, à savoir les longueurs des fils et leur connectivité. Pour un graphe constitué de E fils unidimensionnels connectés entre eux par V nœuds (fig. 5.9), il s'écrit [24] :

$$\boxed{S(\gamma) = \gamma^{\frac{V-E}{2}} \prod_{(\alpha\beta)} \sinh\left(\frac{l_{\alpha\beta}}{L_\gamma}\right) \det M} \tag{5.183}$$

où $l_{\alpha\beta}$ est la longueur du lien $(\alpha\beta)$ et $L_\gamma = \sqrt{D/\gamma}$. M est une matrice carrée $V \times V$ dont les éléments diagonaux sont [99–102] :

$$M_{\alpha\alpha} = \sum_{\beta}^{m_\alpha} \coth(\frac{l_{\alpha\beta}}{L_\gamma}) \tag{5.184}$$

la somme est prise sur les m_α nœuds voisins du nœud α. Les éléments non diagonaux sont

$$M_{\alpha\beta} = -\frac{1}{\sinh(l_{\alpha\beta}/L_\gamma)} \tag{5.185}$$

si les nœuds α et β sont connectés par un lien. Ils sont nuls autrement.

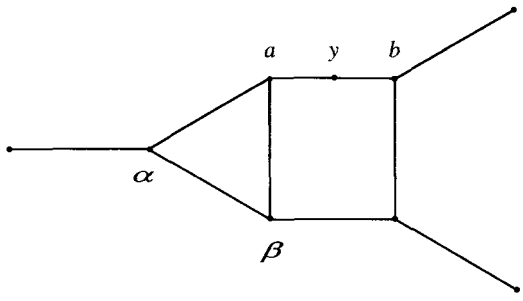


FIG. 5.9 – *Exemple de graphe : $(\alpha\beta)$ désigne un lien quelconque et (ab) désigne le lien auquel appartient le point source y.*

Afin d'obtenir ce résultat, on calcule d'abord la probabilité de retour à l'origine $P(y, y)$ depuis n'importe quel point y du graphe. Puis, par intégration

[24] Le préfacteur $\gamma^{\frac{V-E}{2}}$ est d'origine topologique. Il correspond à un terme constant additif $\frac{V-E}{2}$ dans la probabilité de retour à l'origine $Z(t)$ (voir le complément C5.5).

spatiale sur tout le graphe, on déduit le déterminant spectral par

$$\int dy\, P_\gamma(y,y) = \frac{\partial}{\partial\gamma} \ln S(\gamma) \quad . \tag{5.186}$$

En posant $D = 1$ dans l'équation (5.14) afin de simplifier les expressions, on commence par résoudre

$$(\gamma - \Delta_x) P_\gamma(x,y) = \delta(x-y) \tag{5.187}$$

sur chaque lien noté $(\alpha\beta)$. Pour une source placée en un point quelconque y du graphe, on obtient :

$$P_\gamma(x,y) = \frac{P_\gamma(\alpha,y)\sinh\sqrt{\gamma}(l-x) + P_\gamma(\beta,y)\sinh\sqrt{\gamma}x}{\sinh\sqrt{\gamma}l_{\alpha\beta}} \tag{5.188}$$

où x est la coordonnée d'un point courant sur le lien $(\alpha\beta)$ de longueur $l_{\alpha\beta}$. $P_\gamma(\alpha,y)$ et $P_\gamma(\beta,y)$ sont les valeurs prises aux extrémités du lien. La conservation du courant au nœud α s'écrit :

$$-\sum_\beta \partial_{x_{\alpha\beta}} P_\gamma(x_{\alpha\beta}=0,y) = \delta_{\alpha,y} \quad , \tag{5.189}$$

où la somme porte sur les nœuds β voisins de α. Ceci conduit au système linéaire

$$P_\gamma(\alpha,y)\sum_\beta \coth\eta_{\alpha\beta} - \sum_\beta \frac{P_\gamma(\beta,y)}{\sinh\eta_{\alpha\beta}} = \frac{\delta_{\alpha,y}}{\sqrt{\gamma}} \tag{5.190}$$

avec $\eta_{\alpha\beta} = \sqrt{\gamma}l_{\alpha\beta}$. C'est un système de $(V+1)$ équations linéaires pour les $(V+1)$ variables $P_\gamma(\alpha,y)$ où α est soit un nœud du graphe soit la source y :

$$M_y \begin{pmatrix} P_\gamma(\alpha_1,y) \\ \vdots \\ P_\gamma(y,y) \\ \vdots \\ P_\gamma(\alpha_V,y) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1/\sqrt{\gamma} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad . \tag{5.191}$$

La matrice carrée M_y de taille $(V+1)\times(V+1)$ est définie par les équations (5.184, 5.185).

On peut maintenant calculer $P_\gamma(y,y)$. Tout d'abord, en utilisant l'équation (5.190), on peut écrire $P_\gamma(y,y)$ en fonction de $P_\gamma(a,y)$ et $P_\gamma(b,y)$ où a et b sont les nœuds qui terminent le lien sur lequel se trouve le point y (fig. 5.9) :

$$P_\gamma(y,y)\left(\coth\eta_{ay} + \coth\eta_{yb}\right) - \frac{P_\gamma(a,y)}{\sinh\eta_{ay}} - \frac{P_\gamma(b,y)}{\sinh\eta_{by}} = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \tag{5.192}$$

de sorte que :

$$P_\gamma(y,y) = \frac{1}{\sinh \eta_{ab}} \left(\frac{\sinh \eta_{ay} \sinh \eta_{by}}{\sqrt{\gamma}} + P_\gamma(a,y) \sinh \eta_{by} + P_\gamma(b,y) \sinh \eta_{ay} \right). \tag{5.193}$$

En éliminant $P_\gamma(y,y)$ du système (5.190), on déduit $P_\gamma(a,y)$:

$$P_\gamma(a,y) \sum_\beta \coth \eta_{a\beta} - \sum_\beta P_\gamma(\beta,y) \frac{1}{\sinh \eta_{a\beta}} = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \frac{\sinh \eta_{yb}}{\sinh \eta_{ab}} \tag{5.194}$$

et une expression similaire pour $P_\gamma(b,\beta)$. Les $(V-2)$ équations restantes sont inchangées. On obtient donc maintenant un système $V \times V$ pour les variables $P_\gamma(\alpha,y)$:

$$M \begin{pmatrix} P_\gamma(\alpha_1,y) \\ \vdots \\ P_\gamma(a,y) \\ \vdots \\ P_\gamma(b,y) \\ \vdots \\ P_\gamma(\alpha_{V-2},y) \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{\gamma} \sinh \eta_{ab}} \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ \sinh \eta_{yb} \\ \vdots \\ \sinh \eta_{ay} \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} . \tag{5.195}$$

La matrice M est définie en (5.184, 5.185) et le point source est maintenant exclu. En inversant cette matrice, on obtient $P_\gamma(a,y)$ et $P_\gamma(b,y)$:

$$P_\gamma(a,y) = \frac{1}{\sqrt{\gamma} \sinh \eta_{ab}} \left(T_{aa} \sinh \eta_{yb} + T_{ab} \sinh \eta_{ay} \right) \tag{5.196}$$

où $T = M^{-1}$. En insérant les expressions de $P_\gamma(a,\beta)$ et $P_\gamma(b,\beta)$ dans la relation (5.193), on obtient finalement la probabilité de retour $P_\gamma(y,y)$ à partir de n'importe quel point du graphe :

$$\begin{aligned} P_\gamma(y,y) = \frac{1}{\sqrt{\gamma}} \Bigg\{ & \frac{\sinh \eta_{ay} \sinh \eta_{yb}}{\sinh \eta_{ab}} \\ & + \frac{1}{\sinh^2 \eta_{ab}} \left[T_{aa} \sinh^2 \eta_{by} + T_{bb} \sinh^2 \eta_{ay} + 2T_{ba} \sinh \eta_{ay} \sinh \eta_{yb} \right] \Bigg\} . \end{aligned} \tag{5.197}$$

L'intégration spatiale de $P_\gamma(y,y)$ sur le lien (ab) donne :

$$\begin{aligned} \int_a^b dy\, P_\gamma(y,y) = \frac{1}{2\gamma} \Big\{ & \eta_{ab} \coth \eta_{ab} - 1 \\ & + (T_{aa} + T_{bb})(1 + 2\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma}) \coth \eta_{ab} - 2T_{ba}(1 + 2\gamma \frac{\partial}{\partial \gamma}) \frac{1}{\sinh \eta_{ab}} \Big\} \end{aligned} \tag{5.198}$$

où on a utilisé les égalités :

$$\frac{-\eta}{\sinh^2\eta} = 2\gamma\frac{\partial}{\partial\gamma}\coth\eta \tag{5.199}$$

$$-\eta\frac{\cosh\eta}{\sinh^2\eta}\,, = 2\gamma\frac{\partial}{\partial\gamma}\frac{1}{\sinh\eta}\,. \tag{5.200}$$

En sommant sur tous les liens du graphe et en utilisant les identités :

$$\sum_{(ab)}\left((T_{aa}+T_{bb})\coth\eta_{ab} - 2\frac{T_{ba}}{\sinh\eta_{ab}}\right) = \mathrm{tr}(TM) = V \quad , \tag{5.201}$$

$$\sum_{(ab)}\left((T_{aa}+T_{bb})\frac{\partial}{\partial\gamma}\coth\eta_{ab} - 2T_{ba}\frac{\partial}{\partial\gamma}\frac{1}{\sinh\eta_{ab}}\right) = \mathrm{tr}(T\frac{\partial}{\partial\gamma}M) \quad , \tag{5.202}$$

$$\eta\coth\eta = 2\gamma\frac{\partial}{\partial\gamma}\ln\sinh\eta \quad , \tag{5.203}$$

on déduit que l'intégrale $\int_0^\infty dt\, e^{-\gamma t}Z(t) = \int_{\text{graphe}} dy\, P_\gamma(y,y)$ donnée par la relation (5.161) se simplifie considérablement et se met sous la forme

$$\frac{\partial}{\partial\gamma}\sum_{(ab)}\ln\sinh\eta_{ab} + \frac{V-E}{2\gamma} + \mathrm{tr}M^{-1}\frac{\partial}{\partial\gamma}M\,. \tag{5.204}$$

En utilisant la propriété $\mathrm{tr}M^{-1}\frac{\partial}{\partial\gamma}M = \frac{\partial}{\partial\gamma}\ln\det M$, on retrouve finalement la relation (5.163) pour le déterminant spectral :

$$\boxed{\int_0^\infty dt e^{-\gamma t}Z(t) = \frac{\partial}{\partial\gamma}\ln S(\gamma)} \tag{5.205}$$

où $S(\gamma)$ est donné par la relation (5.183).

C5.6.2 Exemples

On présente les expressions du déterminant spectral pour quelques géométries simples [103]. Dans chaque cas, il suffit d'obtenir le déterminant de la matrice M définie par (5.184, 5.185), donné par le produit de ses valeurs propres.

- Fil isolé de longueur L :

$$S(\gamma) = L/L_\gamma\,\sinh L/L_\gamma \quad . \tag{5.206}$$

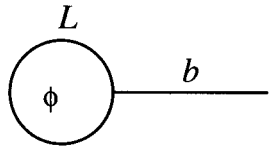
• Fil de longueur L connecté à des réservoirs :

$$S(\gamma) = \frac{L/L_\gamma}{\sinh L/L_\gamma} \quad . \tag{5.207}$$

• Anneau de circonférence L traversé par un flux Aharonov-Bohm ($\theta = 4\pi\phi/\phi_0$) :

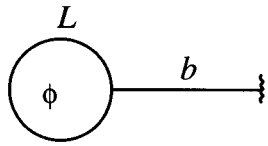
$$S(\gamma) = 2\left(\cosh\frac{L}{L_\gamma} - \cos\theta\right) \quad . \tag{5.208}$$

• Anneau de circonférence L relié à un bras libre de longueur b :



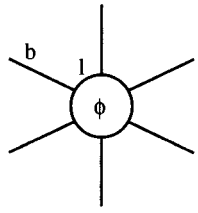
$$S(\gamma) = \sinh\frac{b}{L_\gamma}\sinh\frac{L}{L_\gamma} + 2\cosh\frac{b}{L_\gamma}\left(\cosh\frac{L}{L_\gamma} - \cos\theta\right) \quad . \tag{5.209}$$

• Anneau de circonférence L relié à un bras de longueur b connecté à un réservoir :



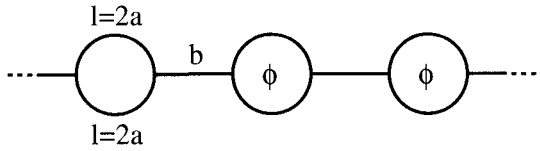
$$S(\gamma) = \cosh\frac{b}{L_\gamma}\sinh\frac{L}{L_\gamma} + 2\sinh\frac{b}{L_\gamma}\left(\cosh\frac{L}{L_\gamma} - \cos\theta\right) \quad . \tag{5.210}$$

• Anneau de circonférence $L = Nl$ relié à N bras de longueur b (ensemble isolé) :



$$S(\gamma) = \prod_{k=0}^{N-1}\left\{\sinh\frac{b}{L_\gamma}\sinh\frac{l}{L_\gamma} + 2\cosh\frac{b}{L_\gamma}\left(\cosh\frac{l}{L_\gamma} - \cos(\frac{1}{N}(\theta + 2\pi k)]\right)\right\} \quad . \tag{5.211}$$

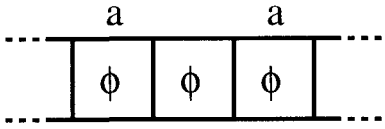
• Chaîne de N anneaux de périmètre $L = 4a$, reliés par des fils de longueur b (conditions aux limites périodiques) :



$$S(\gamma) = \left(\frac{L_\gamma}{2a}\right)^N \prod_{k=1}^{N} \left\{ \sinh\left(\frac{b}{L_\gamma}\right) \left[4\cosh^2\left(\frac{2a}{L_\gamma}\right) + \sinh^2\left(\frac{2a}{L_\gamma}\right) - 4\cos^2(\theta/2)\right] \right. \tag{5.212}$$

$$\left. + 4\sinh\left(\frac{2a}{L_\gamma}\right) \left[\cosh\left(\frac{2a}{L_\gamma}\right)\cosh\left(\frac{b}{L_\gamma}\right) - \cos(\theta/2)\cos(2k\pi/N)\right]\right\} \quad . \tag{5.213}$$

• Échelle de N carrés de périmètre $4a$ (conditions aux limites périodiques) :



$$S(\gamma) = \prod_{k=1}^{N} \left\{ \frac{L_\gamma}{a} \sinh\left(\frac{a}{L_\gamma}\right) \right.$$
$$\left. \times \left[\left(3\cosh\frac{a}{L_\gamma} - 2\cos\frac{\theta}{2}\cos\frac{2k\pi}{N}\right)^2 - \left(1 + 4\sin^2\frac{\theta}{2}\sin^2\frac{2k\pi}{N}\right)\right]\right\} \quad . \tag{5.214}$$

• Réseau carré :

On considère enfin une grille formée de N^2 mailles carrées de côté a, en présence d'un champ perpendiculaire, dans la limite $N \to \infty$. Le déterminant spectral est relié aux solutions du problème de liaisons fortes sur un réseau carré sous champ magnétique, popularisé par Hofstadter [104]. Pour un flux ϕ par maille tel que $2\phi/\phi_0 = p/q$ où $q \to \infty$, il s'écrit sous la forme simple [103] :

$$S(\gamma) = \frac{N^2}{q} \prod_{i=1}^{q} \left[\frac{L_\gamma}{a} \sinh\frac{a}{L_\gamma}\left(4\cosh\frac{a}{L_\gamma} - \epsilon_i\right)\right]^{N/q} \tag{5.215}$$

où les ϵ_i sont les q valeurs propres de l'équation de Harper :

$$\epsilon\psi_m = \psi_{m-1} + \psi_{m+1} + 2\cos(2\pi\frac{p}{q}m)\psi_m \quad . \tag{5.216}$$

C5.6.3 Thermodynamique, transport et déterminant spectral

Un certain nombre de quantités physiques sont reliées à la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t)$ ou plus précisement à sa transformée de Laplace, elle-même reliée au déterminant spectral par la relation (5.205). Le résultat (5.183) obtenu pour le déterminant spectral sur un graphe quelconque permet de calculer directement ces quantités physiques sur des réseaux de fils diffusifs. Par exemple, des quantités thermodynamiques comme la fluctuation du moment magnétique $\overline{\delta\mathcal{M}^2} = \overline{\mathcal{M}^2} - \overline{\mathcal{M}}^2$ ou l'aimantation moyenne $\mathcal{M}_{ee}$ s'expriment à partir de $Z(t)$. Grâce à (5.205), ces expressions (14.35 et 14.51) peuvent être récrites en fonction du déterminant spectral :

$$\overline{\delta\mathcal{M}^2} = \frac{\hbar^2}{2\pi^2} \int_\gamma^\infty d\gamma_1 (\gamma - \gamma_1) \frac{\partial^2}{\partial B^2} \ln S(\gamma_1) \tag{5.217}$$

$$\mathcal{M}_{ee} = \frac{F\hbar}{2\pi} \int_\gamma^\infty d\gamma_1 \frac{\partial}{\partial B} \ln S(\gamma_1) \quad . \tag{5.218}$$

À l'aide de (5.183), on en déduit très facilement l'aimantation d'un réseau quelconque de fils diffusifs [101].

Le cas des propriétés de transport est plus délicat. Il est également possible de relier la correction de localisation faible ou les fluctuations de conductance à la probabilité de retour à l'origine (relations 7.53 et 11.37), puis de les récrire en fonction du déterminant spectral pour obtenir :

$$\Delta\sigma = -\frac{se^2 D}{\pi\hbar\Omega} \frac{\partial}{\partial\gamma} \ln S(\gamma) \tag{5.219}$$

$$\overline{\delta\sigma^2} = 3\frac{s^2 e^4 D^2}{\beta\pi^2\hbar^2\Omega^2} \frac{\partial^2}{\partial\gamma^2} \ln S(\gamma) \quad . \tag{5.220}$$

Il convient toutefois d'être prudent. Ces relations ne sont pas *a priori* utilisables sur des réseaux. En effet, la conductivité est une fonction locale qui dépend de la position sur le réseau. Pour obtenir la conductance entre deux contacts sur ce réseau, il faut convenablement combiner les contributions des différents fils en suivant les lois de Kirchhoff [105]. Dans ce cas, la correction de localisation faible ou les fluctuations de conductance ne peuvent pas être écrites simplement en fonction du déterminant spectral.

Les relations (5.219, 5.220) sont toutefois utilisables pour des géométries simples comme le fil ou l'anneau, ou pour des réseaux réguliers infinis, comme le réseau carré où tous les fils jouent des rôles identiques. Par exemple, pour le fil et l'anneau, on retrouve simplement les résultats (7.61) et (7.88), à l'aide des expressions (5.207) et (5.208).

Chapitre 6

Déphasages

6.1 Déphasage et diffusion multiple

6.1.1 Généralités

Le diffuson et le cooperon font intervenir le produit de deux séquences de collisions multiples passant par les mêmes diffuseurs, soit dans le même ordre (diffuson), soit dans un ordre inversé (cooperon). Ces deux séquences sont décrites par deux amplitudes complexes conjuguées. Pour le diffuson, ces deux amplitudes correspondent à la même séquence de collisions de telle sorte que la phase totale disparaît pour laisser place à un objet classique. Pour le cooperon, les deux amplitudes correspondent à des séquences renversées l'une par rapport à l'autre. S'il y a invariance par renversement du sens du temps, les facteurs de structure associés au diffuson et au cooperon sont égaux.

Certains mécanismes peuvent donner lieu à l'apparition d'une phase relative $\Delta\phi(t)$ entre les deux amplitudes complexes formant le diffuson ou le cooperon. De tels mécanismes impliquent que ces amplitudes soient affectées différemment lors d'une séquence de collisions multiples sur les mêmes diffuseurs, donnant ainsi lieu à un déphasage $\Delta\phi(t)$. Dans ce chapitre, on montre qu'un déphasage affecte la probabilité de diffusion quantique moyenne par un facteur global, de sorte qu'en sommant sur toutes les séquences de collision multiples, on se ramène à des expressions du type

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) \left\langle e^{i\Delta\phi(t)} \right\rangle \tag{6.1}$$

où $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$ est la probabilité de diffusion quantique étudiée au chapitre 4. La phase relative $\Delta\phi(t)$ est généralement une variable aléatoire dont la distribution dépend du phénomène à l'origine du déphasage. On note $\langle \cdots \rangle$ la moyenne sur cette distribution. En général elle décroît exponentiellement avec

le temps [1]

$$\left\langle e^{i\Delta\phi(t)} \right\rangle = e^{-t/\tau_\gamma} \tag{6.2}$$

ce qui permet de donner un sens physique au temps de coupure τ_γ (et à la longueur $L_\gamma = \sqrt{D\tau_\gamma}$) introduit phénoménologiquement dans la section 5.2.2. De nombreuses propriétés s'expriment au moyen de la probabilité intégrée sur le temps et sont donc des mesures directes de la transformée de Laplace (5.12)

$$\int_0^\infty dt P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) \left\langle e^{i\Delta\phi(t)} \right\rangle = \int_0^\infty dt P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) e^{-t/\tau_\gamma} \quad . \tag{6.3}$$

Les processus de déphasage peuvent aussi bien affecter le diffuson que le cooperon. Ceci peut sembler paradoxal car le diffuson associé à la probabilité $P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$ est une quantité classique liée à la conservation du nombre de particules ou de l'énergie (normalisation de la probabilité, p. 129). Dans cette définition du diffuson, les deux amplitudes complexes qui le constituent correspondent à une même réalisation du potentiel de désordre. On peut cependant imaginer l'appariement de deux amplitudes complexes appartement à des *configurations distinctes du désordre*, ou mettant en jeu des *paramètres extérieurs différents*. On obtient alors une quantité ayant encore la structure du diffuson mais pouvant inclure un déphasage. Ce type de diffuson ne correspond donc plus au mode de Goldstone décrivant la conservation du nombre de particules ou de l'énergie.

6.1.2 Mécanismes de déphasage : introduction

Afin de préciser ces idées, revenons à l'expression du facteur de structure du diffuson (ou du cooperon) telle qu'elle apparaît dans l'équation intégrale (4.26) [2]

$$\Gamma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \gamma_e \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') + \int \Gamma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'') w_0(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}') d\boldsymbol{r}'' \tag{6.4}$$

où $w_0(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}') = P_0(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}')/\tau_e$. En transformée de Fourier, cette équation intégrale prend la forme simple :

$$\Gamma(\boldsymbol{q}) = \gamma_e + \Gamma(\boldsymbol{q}) w_0(\boldsymbol{q}) \tag{6.5}$$

où $w_0(q) = P_0(\boldsymbol{q}, \omega = 0)/\tau_e$ (voir le complément C4.1). Le facteur de structure a donc la forme

$$\boxed{\Gamma(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_e}{1 - w_0(q)}} \tag{6.6}$$

[1] Ce comportement n'est pas nécessairement exponentiel. Ce peut être plus généralement une fonction $f(t/\tau_\gamma)$, voir par exemple la section 13.7.3 et l'exercice 13.13.

[2] Afin d'alléger les notations, on omet d'écrire la fréquence ω.

Dans la limite des variations lentes ($ql_e \ll 1$), l'équation intégrale (6.4) est équivalente à une équation de diffusion. Dans cette limite, le développement (4.74) :

$$w_0(\boldsymbol{q}) \simeq 1 - Dq^2\tau_e \tag{6.7}$$

conduit à

$$\boxed{\Gamma(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_e/\tau_e}{Dq^2}} \tag{6.8}$$

Ce pôle de diffusion est caractéristique du mode de Goldstone. Il est intimement lié à la structure du terme élémentaire $w_0(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_{i+1})$ qui dépend du processus quantique (ou ondulatoire) mis en jeu lors de la diffusion sur les impuretés. La présence de degrés de liberté supplémentaires affecte ce terme élémentaire conduisant ainsi à une modification du facteur de structure. On rencontrera plusieurs cas de figure.

• Le terme élémentaire w_0 est affecté d'un déphasage supplémentaire :

$$w(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_{i+1}) = w_0(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_{i+1}) e^{i\Delta\varphi(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_{i+1})} \quad . \tag{6.9}$$

L'équation intégrale (6.4) devient alors

$$\Gamma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \gamma_e \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}') + \int \Gamma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'') w_0(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}') e^{i\Delta\varphi(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}')} d\boldsymbol{r}'' \quad . \tag{6.10}$$

Si le déphasage $\Delta\varphi(\boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}')$ est une fonction simple bien déterminée, il suffit de résoudre l'équation intégrale (6.10) à l'approximation de diffusion. Cette situation est, par exemple, celle d'un champ magnétique uniforme appliqué à un gaz d'électrons. Le déphasage donné par l'intégrale du potentiel vecteur, est nul pour le diffuson mais reste fini pour le cooperon (section 6.3).

• Le déphasage peut résulter de l'existence de degrés de liberté non contrôlés par l'expérimentateur. C'est le cas de la diffusion multiple par des particules en mouvement. On peut alors définir un nouveau diffuson en appariant deux séquences de collisions multiples correspondant à des diffuseurs dont les positions sont prises à des temps différents, 0 et T, c'est-à-dire appartenant à *des configurations différentes de désordre.* La position des diffuseurs n'étant en général pas connue, il faut moyenner sur celle-ci le déphasage entre les deux amplitudes appariées. On montre (section 6.7) que l'on peut alors définir un nouveau pas élémentaire de la forme

$$\langle w(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_{i+1}) \rangle_T = b(T)\ w_0(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_{i+1}) \tag{6.11}$$

où le paramètre $b = \langle e^{i\Delta\phi} \rangle < 1$, est la moyenne du déphasage associé au pas élémentaire et dépend du déplacement des impuretés pendant l'intervalle de temps T. Dans l'équation (6.10), l'intégrale est simplement multipliée par b et le facteur de structure, en transformée de Fourier, obéit à :

$$\Gamma(\boldsymbol{q}) = b\ \gamma_e + \Gamma(\boldsymbol{q})\ b\ w_0(\boldsymbol{q}) \quad , \tag{6.12}$$

soit encore

$$\Gamma(\boldsymbol{q}) = \frac{b\ \gamma_e}{1 - b\ w_0(\boldsymbol{q})} \quad . \tag{6.13}$$

Le paramètre $b < 1$ modifie le pôle de diffusion qui, à l'aide de (6.7), devient :

$$\boxed{\Gamma(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_e/\tau_e}{1/\tau_\gamma + Dq^2}} \tag{6.14}$$

La moyenne du déphasage associé à des degrés de liberté non contrôlés fait donc apparaître un temps caractéristique de la forme :

$$\boxed{\tau_\gamma = \tau_e \frac{b}{1-b}} \tag{6.15}$$

Le pôle de $\Gamma(\boldsymbol{q})$ décrit l'atténuation du mode de diffusion. Le diffuson est obtenu à partir du facteur de structure (6.14) en rétablissant la fréquence et en prenant la transformée de Fourier. On obtient alors pour la probabilité l'expression

$$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) e^{-t/\tau_\gamma} \quad . \tag{6.16}$$

Le temps τ_γ ainsi défini exprime la perte de cohérence de phase.

• Il peut aussi apparaître un déphasage lorsque l'onde qui diffuse n'est plus scalaire mais possède des degrés de liberté supplémentaires comme le spin de l'électron ou la polarisation de l'onde électromagnétique. Si le potentiel de diffusion avec les impuretés dépend de ces degrés de liberté, ceci donne lieu à un déphasage et donc à un temps τ_γ fini. C'est le cas, d'une part, de la diffusion spin-orbite et de la diffusion sur des impuretés magnétiques pour les électrons, et, d'autre part, de la rotation de la polarisation en diffusion Rayleigh ou de la diffusion des photons sur des atomes ayant des degrés de liberté internes.

Le couplage à ces nouveaux degrés de liberté peut, comme dans l'exemple précédent, être décrit en toute généralité par une modification du processus élémentaire de diffusion, qui se trouve alors avoir une forme tensorielle $\gamma_e\ b_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ où les indices décrivent soit le spin de l'électron, soit la polarisation de l'onde. Plus précisément, et en prenant l'exemple du spin de l'électron, le tenseur $b_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ décrit la diffusion de deux états initiaux de spin (α, β) vers deux états finaux (γ, δ). L'équation d'itération pour le facteur de structure acquiert maintenant une forme tensorielle qui généralise (6.5) :

$$\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{q}) = \gamma_e\ b_{\alpha\beta,\gamma\delta} + \sum_{\mu,\nu} \Gamma_{\alpha\beta,\mu\nu}(\boldsymbol{q})\ b_{\mu\nu,\gamma\delta}\ w(\boldsymbol{q}) \quad . \tag{6.17}$$

La diagonalisation de cette équation fait apparaître les sous-espaces propres associés au spin total (ou l'équivalent pour la polarisation) des deux états

appariés. Dans chacun des sous-espaces, singulet ou triplet, l'équation du diffuson se met sous la forme (6.12), et on obtient donc un diffuson (ou un cooperon) caractérisé par le spin total $J = 0$ ou $J = 1$:

$$\boxed{\Gamma_J(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_e/\tau_e}{1/\tau_J + Dq^2}} \tag{6.18}$$

avec un temps caractéristique de la forme :

$$\boxed{\tau_J = \tau_e \frac{b_J}{1 - b_J}} \tag{6.19}$$

où b_J décrit, dans chaque sous-espace, la contribution du processus élémentaire de diffusion – appelé aussi *vertex élémentaire d'interaction.*

On voit ainsi comment le spin-orbite et le couplage à des impuretés magnétiques affectent le diffuson ou le cooperon, et introduisent naturellement un déphasage. On reviendra en détail sur ces exemples et on traitera de manière analogue l'effet de la polarisation pour la diffusion multiple de la lumière par des dipôles classiques ou par des atomes ayant une structure quantique interne.

• Il existe enfin des situations où le déphasage ne peut pas être mis simplement sous la forme d'un vertex local d'interaction. C'est par exemple le cas pour le cooperon dans un champ dépendant du temps. Nous y revenons dans le complément C6.3.

6.1.3 Le mode de Goldstone

La probabilité classique est normalisée (remarque p. 129). Cette normalisation rend compte de la conservation du nombre de particules et s'exprime par la divergence du facteur de structure (6.8) à basse fréquence et petit vecteur d'onde. L'introduction de nouveaux degrés de liberté (spin ou polarisation) et des processus de diffusion associés ne doit pas affecter cette normalisation. En effet, les deux séquences appariées de diffusion multiple du spin (ou de la polarisation) restent *identiques.* Il n'apparaît pas de déphasage et on obtient pour le diffuson le mode de Goldstone.

Plus généralement, on peut aussi construire un diffuson en appariant deux amplitudes correspondant à des rotations *indépendantes* du spin de l'électron (ou de la polarisation de l'onde électromagnétique). Le diffuson résultant acquiert alors un pôle de la forme (6.14) et un temps de déphasage fini. Nous sommes donc amenés à définir deux objets différents :

• L'un est le diffuson introduit dans le chapitre 4, c'est-à-dire le mode de Goldstone traduisant la conservation de l'énergie ou du nombre de

particules. C'est une grandeur classique et donc insensible au déphasage. Ce mode scalaire existe toujours même en présence d'autres degrés de liberté [3].

- L'autre a aussi la structure d'un diffuson, c'est-à-dire qu'il résulte de l'appariement de deux amplitudes se propageant dans la même direction mais associées soit à des réalisations différentes du désordre, soit à des configurations différentes du spin ou de la polarisation, soit encore à des champs magnétiques distincts. Dans tous les cas, ce diffuson peut inclure un déphasage et donc un temps caractéristique associé.

Dorénavant, nous serons amenés à utiliser ces deux diffusons pour lesquels nous garderons cependant la même dénomination. Le diffuson « sensible à la phase » joue un rôle important dans l'étude des fluctuations (voir chaps. 11 et 12).

Pour le cooperon, il est clair qu'il apparaîtra toujours un temps de cohérence fini puisque, par construction, on ne peut pas apparier deux amplitudes renversées l'une de l'autre dans le temps et correspondant aux mêmes configurations du spin ou de la polarisation.

6.2 Champ magnétique et cooperon

Afin d'établir l'expression du cooperon X_c dans la section 4.6, on a explicitement utilisé la propriété d'invariance par renversement du sens du temps. Du fait de cette invariance, le facteur de structure Γ'_ω associé au cooperon est identique à celui, Γ_ω, associé au diffuson P_d.

Ce n'est plus le cas lorsque cette invariance disparaît. Une situation importante pour laquelle il n'y a effectivement plus invariance par renversement du sens du temps est celle d'une particule chargée en présence d'un champ magnétique $\boldsymbol{B} = \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A}$.

Remarque : Champ magnétique et théorème de réciprocité

En présence d'un champ magnétique B, le théorème de réciprocité (2.115) se généralise en

$$T_{dir}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}', B) = T_{rev}(-\boldsymbol{k}', -\boldsymbol{k}, -B) \tag{6.20}$$

puisque le renversement du sens du temps change le signe du champ magnétique. Dans la direction de rétrodiffusion $\boldsymbol{k}' = -\boldsymbol{k}$, cette condition devient

$$T_{dir}(\boldsymbol{k}, -\boldsymbol{k}, B) = T_{rev}(\boldsymbol{k}, -\boldsymbol{k}, -B) \tag{6.21}$$

de sorte que, pour un champ B fixé, les processus direct $T_{dir}(\boldsymbol{k}, -\boldsymbol{k}, B)$ et inverse $T_{rev}(\boldsymbol{k}, -\boldsymbol{k}, B)$ sont différents sauf en champ nul. On dit que le champ magnétique brise l'invariance par renversement du sens du temps (on pourra aussi consulter [106]).

[3] Sauf en présence d'absorption, auquel cas il est atténué puisque l'énergie ou le nombre de particules ne sont plus conservés.

L'hamiltonien pour un électron dans un potentiel aléatoire et en présence d'un champ magnétique s'écrit (on prend $e > 0$)

$$\mathcal{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}(\boldsymbol{\nabla} + \frac{ie}{\hbar}\boldsymbol{A})^2 + V(\boldsymbol{r}) \quad . \tag{6.22}$$

Classiquement, l'effet du champ magnétique exprimé par la force de Lorentz est de courber la trajectoire des particules chargées. Le rayon de courbure associé est le rayon cyclotron égal, pour des électrons de vitesse v, à $r_c = mv/eB$. La longueur r_c apparaît donc comme une échelle supplémentaire qu'il faut comparer au libre parcours moyen élastique l_e. On ne va considérer ici que le cas d'un champ magnétique faible, tel que la courbure des trajectoires électroniques entre deux collisions élastiques est négligeable. En d'autres termes, on suppose $l_e \ll r_c$ soit $\omega_c \tau_e \ll 1$ où $\omega_c = eB/m$ est la fréquence cyclotron.

En mécanique quantique, négliger la courbure des trajectoires n'implique pas l'absence d'effet du champ magnétique. L'effet Aharonov-Bohm discuté dans le chapitre d'introduction en est une illustration. Dans la limite appelée *approximation eikonale* de variation lente du potentiel vecteur $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$, l'effet du champ magnétique est uniquement de modifier la phase de la fonction d'onde (et donc de la fonction de Green) [107,108]. En présence du champ, la fonction de Green moyenne, notée $\overline{G}_\varepsilon^{R,A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', B)$, s'écrit :

$$\overline{G}_\varepsilon^{R,A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', B) = \overline{G}_\varepsilon^{R,A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')e^{i\varphi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')} \tag{6.23}$$

avec

$$\varphi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = -\frac{e}{\hbar}\int_{\boldsymbol{r}}^{\boldsymbol{r}'} \boldsymbol{A}.d\boldsymbol{l} \tag{6.24}$$

où $\overline{G}_\varepsilon^{R,A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \overline{G}_\varepsilon^{R,A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', B = 0)$ est la fonction de Green en champ nul. La circulation du potentiel vecteur est calculée le long du segment $(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$. Dans cette approximation, le potentiel vecteur ne peut changer de manière appréciable que sur des distances très supérieures au libre parcours moyen l_e qui contrôle la décroissance de la fonction de Green moyenne. L'approximation eikonale est aussi utilisée pour décrire l'effet du champ magnétique sur un supraconducteur de type II, une situation pour laquelle on néglige habituellement les effets liés à la quantification de Landau [108].

En présence du champ magnétique la fonction de Green moyenne n'est plus invariante par translation et le formalisme dans l'espace réel développé dans les sections 4.4 et 4.6 est bien adapté.

Étudions d'abord le cas du diffuson P_d. Celui-ci ne nécessite pour son calcul que les combinaisons du type $\overline{G}_\varepsilon^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', B)\overline{G}_{\varepsilon-\omega}^A(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}, B)$ qui apparaissent dans les relations (4.23) et (4.24). À l'approximation eikonale, ce produit reste indépendant du champ puisque les termes de phase se compensent :

$$\overline{G}_\varepsilon^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', B)\overline{G}_{\varepsilon-\omega}^A(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}, B) = \overline{G}_\varepsilon^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\overline{G}_{\varepsilon-\omega}^A(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}) \quad . \tag{6.25}$$

Donc dans cette limite, c'est-à-dire lorsqu'on néglige la courbure des trajectoires électroniques, les contributions de Drude-Boltzmann P_0 et de diffusion classique sont indépendantes du champ [4].

Par contre pour le cooperon, la combinaison élémentaire des fonctions de Green moyennées qui apparaît dans (4.43) est $\overline{G}^R_\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',B)\overline{G}^A_{\varepsilon-\omega}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',B)$. En présence du champ, ce produit n'est plus égal à $\overline{G}^R_\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\overline{G}^A_{\varepsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})$, mais à :

$$\begin{aligned}\overline{G}^R_\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',B)\overline{G}^A_{\varepsilon-\omega}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',B) &= \overline{G}^R_\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\overline{G}^A_{\varepsilon-\omega}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')e^{2i\varphi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')}\\ &= \overline{G}^R_\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\overline{G}^A_{\varepsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})e^{2i\varphi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')}\\ &= 2\pi\rho_0 P_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)e^{2i\varphi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')} \quad . \qquad (6.26)\end{aligned}$$

Il apparaît donc un facteur de phase *double* de celui qui affecte la fonction de Green moyenne. Ceci provient du fait que chacune des deux trajectoires électroniques joignant les points $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$ donne un facteur de phase de même signe. Ce facteur 2 est essentiel pour la compréhension des effets du champ magnétique sur les propriétés de transport électronique (voir par exemple la section 7.6.3). L'équation intégrale (4.43) pour le facteur de structure Γ'_ω associé au cooperon dépend de la phase et devient :

$$\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) = \gamma_e\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2) + \frac{1}{\tau_e}\int \Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}'')P_0(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}_2,\omega)e^{2i\varphi(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}_2)}d\boldsymbol{r}'' \quad . \qquad (6.27)$$

Il est donc différent de Γ_ω donné par (4.26). À l'approximation de diffusion, c'est-à-dire pour des variations spatiales lentes, on peut linéariser cette équation. La relation

$$\nabla_{\boldsymbol{r}}\left[\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r})e^{2i\varphi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_2)}\right] = e^{2i\varphi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_2)}\left[\nabla_{\boldsymbol{r}} + 2i\frac{e}{\hbar}\boldsymbol{A}\right]\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}) \qquad (6.28)$$

et un calcul identique à celui de la section 4.5 conduisent pour Γ'_ω à l'équation :

$$\boxed{\left(-i\omega - D\left[\nabla_{\boldsymbol{r}_2} + i\frac{2e}{\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_2)\right]^2\right)\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\omega) = \frac{\gamma_e}{\tau_e}\delta(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)} \qquad (6.29)$$

Le facteur de structure Γ'_ω obéit donc à une équation de diffusion covariante, c'est-à-dire pour laquelle la contribution du champ magnétique est prise en compte par la substitution

$$\boxed{\nabla \to \nabla + i\frac{2e}{\hbar}\boldsymbol{A}} \qquad (6.30)$$

[4] Il est cependant important de noter qu'il y a des situations particulières (remarque de la p. 224, sections 11.4.4 et 14.2.3) pour lesquelles le diffuson peut dépendre du champ appliqué.

Cette substitution est analogue à la substitution covariante $\nabla + ie\boldsymbol{A}/\hbar$ du gradient dans l'équation de Schrödinger (2.2), mais avec une charge effective égale à $(-2e)$ au lieu de $(-e)$. La forme covariante de l'équation différentielle (6.29) est aussi similaire [5] à celle obtenue lors de l'établissement des équations de Ginzburg-Landau pour un supraconducteur [110] et elle résulte simplement de l'exigence d'invariance de jauge.

Il reste maintenant à déterminer le cooperon X_c. En présence du champ magnétique, l'équation (4.44) devient :

$$X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) \simeq \frac{\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})}{2\pi\rho_0}\left[\int \overline{G}^R_\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)\overline{G}^A_\varepsilon(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_1)e^{i\varphi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)+i\varphi(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_1)}d\boldsymbol{r}_1\right]^2 \quad . \tag{6.31}$$

Les fonctions de Green moyennes décroissent exponentiellement sur la longueur l_e. On peut donc négliger la dépendance en champ de l'intégrale et on obtient finalement :

$$X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = \frac{\tau_e}{\gamma_e}\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})g^2(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{6.32}$$

où la fonction $g^2(\boldsymbol{R})$ définie par (3.97) est à courte portée et $g^2(0) = 1$. Les équations (6.29) et (6.32) permettent de calculer la contribution du cooperon à la probabilité de retour à l'origine en présence d'un champ magnétique.

Remarque importante

Le cooperon X_c n'est pas solution d'une équation de diffusion (puisqu'il est nul dès que $|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'| > l_e$). Dans la section 4.6, on a défini la quantité P_c par

$$P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = \frac{\tau_e}{\gamma_e}\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \quad . \tag{6.33}$$

D'après (6.29), P_c est solution de l'équation de diffusion covariante

$$\boxed{\left(-i\omega - D\left[\nabla_{\boldsymbol{r}'} + i\frac{2e}{\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\right]^2\right)P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} \tag{6.34}$$

dont on prendra la solution pour $\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r}$ afin d'en déduire $X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega) = P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)$.

Notons que l'équation de diffusion covariante (6.29, 6.34) a la même structure qu'une équation de Schrödinger, moyennant les substitutions :

$$\begin{aligned} \frac{\hbar}{2m} &\rightarrow D \\ e &\rightarrow 2e \quad . \end{aligned} \tag{6.35}$$

Afin de décrire les effets du champ magnétique sur la probabilité de retour à l'origine $P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},t)$, on sera essentiellement amené à résoudre cette équation pour des géométries bidimensionnelles et pour différentes configurations

[5] Cette similarité a été exploitée dans [109].

du champ magnétique. Ainsi, on étudiera successivement le cas d'un champ magnétique uniforme, celui d'un anneau ou d'un cylindre et, dans le complément C6.1, celui d'une ligne de flux magnétique traversant un plan. On calculera la probabilité de retour $P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},t)$ et le noyau de la chaleur $Z_c(t)$ donné par (5.5) où $\{E_n\}$ sont les valeurs propres de l'équation (6.34).

Remarque

Dans l'introduction à ce chapitre, on a vu que le diffuson pouvait être déphasé lorsque les deux amplitudes qui le composent correspondent à des réalisations différentes du désordre. De même, il existe des situations où les amplitudes qui constituent le diffuson ou le cooperon correspondent à des champs magnétiques *différents* B et B'. Dans ce cas, les combinaisons du type $\overline{G}^R_\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',B)\overline{G}^A_{\varepsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r},B')$ qui constituent le diffuson contiennent un facteur de phase lié à la *différence* des phases associées à chaque amplitude :

$$\overline{G}^R_\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',B)\overline{G}^A_{\varepsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r},B') = \overline{G}^R_\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\overline{G}^A_{\varepsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})e^{i[\varphi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')-\varphi'(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')]} \tag{6.36}$$

où $\varphi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = -\frac{e}{\hbar}\int_{\boldsymbol{r}}^{\boldsymbol{r}'} \boldsymbol{A}.d\boldsymbol{l}$ et $\varphi'(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = -\frac{e}{\hbar}\int_{\boldsymbol{r}}^{\boldsymbol{r}'} \boldsymbol{A}'.d\boldsymbol{l}$. Par contre, les combinaisons de la forme $\overline{G}^R_\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',B)\overline{G}^A_{\varepsilon-\omega}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',B')$ qui constituent le cooperon contiennent un facteur de phase lié à la *somme* des phases φ et φ' :

$$\overline{G}^R_\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',B)\overline{G}^A_{\varepsilon-\omega}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',B') = \overline{G}^R_\varepsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\overline{G}^A_{\varepsilon-\omega}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')e^{i[\varphi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')+\varphi'(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')]} \tag{6.37}$$

P_c et P_d sont donc solutions de l'équation différentielle :

$$\left(-i\omega - D\left[\nabla_{\boldsymbol{r}'} + i\frac{e}{\hbar}[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}') \pm \boldsymbol{A}'(\boldsymbol{r}')]\right]^2\right) P_{c,d}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \quad . \tag{6.38}$$

Le diffuson dépend des champs magnétiques B et B', sauf ci ceux-ci sont égaux, auquel cas on retrouve l'équation différentielle (6.34) pour le cooperon.

6.3 Probabilité de retour à l'origine dans un champ magnétique uniforme

Considérons la diffusion d'un électron dans un milieu bidimensionnel infini soumis à un champ magnétique uniforme B perpendiculaire au plan. Afin d'obtenir l'effet du champ sur le cooperon, il faut résoudre l'équation de diffusion covariante (6.34). Ses valeurs propres sont les solutions de l'équation de Schrödinger d'une particule libre de masse $m = \hbar/2D$ et de charge $-2e$ dans le champ uniforme B, moyennant la substitution (6.30). On obtient ainsi les valeurs propres E_n de l'équation de diffusion et leur dégénérescence g_n à partir de celles de l'équation de Schrödinger (les niveaux de Landau) :

$$\begin{array}{ccc} E_n = \left(n+\dfrac{1}{2}\right)\dfrac{\hbar eB}{m} & \rightarrow & E_n = \left(n+\dfrac{1}{2}\right)\dfrac{4eDB}{\hbar} \\ \text{énergie} & \rightarrow & \text{fréquence} \end{array} \tag{6.39}$$

où n est un entier naturel [6]. Ces niveaux sont infiniment dégénérés pour un plan infini et, par unité de surface S, on a

$$g_n = \frac{eB}{h}S \quad \rightarrow \quad g_n = \frac{2eB}{h}S \quad . \tag{6.40}$$

La probabilité intégrée de retour à l'origine $Z_c(t)$ associée au cooperon s'obtient à partir de la fonction de partition (5.5) pour une particule libre de masse $m = \hbar/2D$ et de charge $(-2e)$ dans un champ magnétique, le temps jouant le rôle de l'inverse de la température. On obtient :

$$\boxed{Z_c(t,B) = \frac{BS/\phi_0}{\sinh(4\pi BDt/\phi_0)}} \tag{6.41}$$

où on note $\phi_0 = h/e$ le quantum de flux. On vérifie que Z_c est effectivement sans dimension et qu'elle s'exprime en fonction du flux $4\pi BDt$ à travers la surface $\pi\langle R^2(t)\rangle$ engendrée par une trajectoire brownienne après un temps t. Dans la limite $B \rightarrow 0$, on retrouve bien le résultat (5.22) pour la diffusion libre dans un plan infini : $S/(4\pi Dt)$. Le comportement aux temps longs de $Z_c(t,B)$ est de la forme

$$Z_c(t,B) \simeq 2\frac{BS}{\phi_0}e^{-t/\tau_B} \tag{6.42}$$

où le temps caractéristique τ_B est donné par

$$\boxed{\tau_B = \phi_0/4\pi BD} \tag{6.43}$$

À ce temps on peut associer la longueur magnétique $L_B = \sqrt{\hbar/2eB}$ qui joue ici le rôle de la longueur de coupure L_γ introduite dans la section 5.2.2. Contrairement au cas de la diffusion libre dans un plan, le temps de récurrence, c'est-à-dire le temps passé autour de l'origine, ne diverge plus avec la taille du système. Il est donné par :

$$\tau_R = \frac{\pi l_e^2}{S}\int_{\tau_e}^{\infty} Z_c(t,B)dt \simeq \tau_e \ln\frac{\tau_B}{\tau_e} \quad . \tag{6.44}$$

On peut interpréter le résultat (6.41) de la façon suivante : $Z_c(t,B)$ mesure la probabilité de retour à l'origine après un temps t, intégrée sur tout

[6]Noter que malgré l'utilisation de la même notation, E_n, on décrit une énergie dans le cas de l'équation de Schrödinger et une fréquence dans celui de la diffusion.

l'espace. Elle résulte de la somme des contributions des trajectoires browniennes fermées, chacune d'elles étant affectée d'un facteur de phase $e^{-i\frac{4\pi}{\phi_0}B\mathcal{A}}$ proportionnel au flux $B\mathcal{A}$ qui la traverse, $\mathcal{A}$ étant la surface algébrique limitée par cette trajectoire. On peut donc récrire $Z_c(t,B)$ comme la transformée de Fourier :

$$Z_c(t,B) = Z(t)\int_{-\infty}^{+\infty} \mathcal{P}(\mathcal{A},t)\cos\left(\frac{4\pi}{\phi_0}B\mathcal{A}\right)d\mathcal{A} \tag{6.45}$$

soit encore

$$Z_c(t,B) = Z(t)\left\langle \exp\left(-i\frac{4\pi}{\phi_0}B\mathcal{A}\right)\right\rangle \tag{6.46}$$

où $\mathcal{P}(\mathcal{A},t)$ est la distribution de probabilité (normée à 1) de l'aire algébrique $\mathcal{A}$ contenue à l'intérieur d'une courbe brownienne fermée au bout du temps t. Sous cette forme, on constate effectivement que le déphasage associé à un champ magnétique uniforme se met sous la forme (6.1) annoncée. La transformée de Fourier inverse de (6.45)

$$\mathcal{P}(\mathcal{A},t) = \frac{2}{\phi_0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{Z_c(t,B)}{Z(t)}\cos\left(\frac{4\pi}{\phi_0}B\mathcal{A}\right)dB$$

conduit à

$$\boxed{\mathcal{P}(\mathcal{A},t) = \frac{\pi}{4Dt}\frac{1}{\cosh^2\frac{\pi\mathcal{A}}{2Dt}}} \tag{6.47}$$

Cette distribution est connue sous le nom de loi de Lévy des aires algébriques.

Exercice 6.1 : Vérifier que, pour la loi de Lévy des aires algébriques (6.47), on a $\langle\mathcal{A}\rangle = 0$ et que l'aire typique $\sqrt{\langle\mathcal{A}^2\rangle}$ varie linéairement avec le temps :

$$\sqrt{\langle\mathcal{A}^2\rangle} = \frac{1}{\sqrt{3}}Dt \quad .$$

La probabilité totale de retour à l'origine dans un champ uniforme est la somme des contributions du diffuson et du cooperon. Elle s'écrit donc,

$$Z(t,B) = S\left[\frac{1}{4\pi Dt} + \frac{B/\phi_0}{\sinh(4\pi BDt/\phi_0)}\right] \quad . \tag{6.48}$$

En champ nul, cette probabilité est le double de la probabilité classique. Pour un champ tel que $BDt \simeq \phi_0$, la contribution du cooperon disparaît. Ce résultat s'interprète simplement. Au bout d'un temps t, la distance typique associée à une trajectoire brownienne est $\langle R(t)^2\rangle = 4Dt$ et la surface typique décrite par une particule brownienne est $\mathcal{A}(t) = \pi\langle R(t)^2\rangle = 4\pi Dt$. On voit donc que la contribution du cooperon disparaît dès qu'il y a un quantum de flux dans une aire $\mathcal{A}(t)$.

6.4 Probabilité de retour à l'origine pour un flux Aharonov-Bohm

Le cas d'un champ magnétique uniforme décrit une large variété de situations physiques, en particulier le transport dans des films métalliques désordonnés (section 7.5). Une autre situation importante est celle où le champ peut-être décrit par un flux Aharonov-Bohm. On se restreint ici aux géométries de l'anneau et du cylindre. Le cas du plan infini traversé par une ligne de flux est décrit dans le complément C6.1.

6.4.1 L'anneau

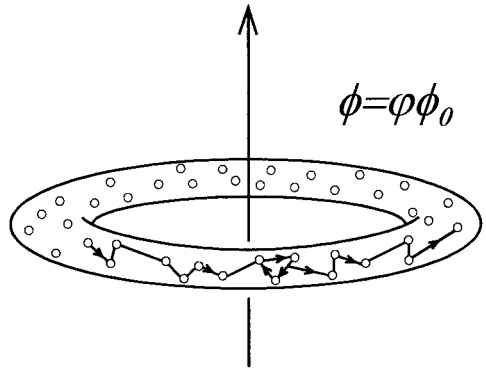


FIG. 6.1 – *Anneau traversé par un flux magnétique Aharonov-Bohm ϕ. Le flux adimensionné est $\varphi = \phi/\phi_0$.*

Considérons la diffusion multiple d'un électron le long d'un anneau de périmètre $L = 2\pi R$ et de section πa^2 (avec $L \gg a$) traversé par un flux Aharonov-Bohm ϕ (fig. 6.1). On suppose $a \gg l_e$ de sorte que la diffusion est tridimensionnelle avec un coefficient $D = v_F l_e/3$. Aux temps courts devant le temps de Thouless a^2/D associé à la dimension transverse a, la diffusion est tridimensionnelle et isotrope. Par contre aux temps plus longs, elle devient unidimensionnelle et anisotrope (voir la section 5.5.4). C'est la limite que nous considérons [7]. Le potentiel vecteur dans cette géométrie est azimuthal et, en supposant que $a \ll L$, il ne varie pas dans l'anneau et s'écrit :

$$\boldsymbol{A} = \frac{\phi}{L}\boldsymbol{e}_\theta \tag{6.49}$$

où ϕ est le flux magnétique à travers l'anneau. Puisque le potentiel vecteur est constant, le champ magnétique est nul. Il n'y a donc plus de force de

[7] On rappelle que, même si la diffusion est unidimensionnelle, le mouvement des électrons est tridimensionnel puisque la longueur d'onde λ_F reste très inférieure à a.

Lorentz sur les électrons et l'approximation eikonale (champ faible) devient exacte. Les modes propres de l'équation (6.34) sont donnés par les solutions de l'équation :

$$-D(\nabla + 2i\pi\varphi)^2\psi_n(x) = E_n\psi_n(x) \tag{6.50}$$

avec la condition de continuité

$$\psi_n(x+L) = \psi_n(x) \tag{6.51}$$

c'est-à-dire

$$E_n = D\frac{4\pi^2}{L^2}(n-2\varphi)^2 = 4\pi^2 E_c(n-2\varphi)^2 \tag{6.52}$$

où $\varphi = \phi/\phi_0$. L'entier $n \in \mathbb{Z}$ est le moment angulaire (voir section 5.6.1) et $E_c = D/L^2$ est la fréquence de Thouless (5.35). Le noyau de la chaleur pour le cooperon s'écrit donc :

$$Z_c(t,\phi) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-4\pi^2 E_c t(n-2\varphi)^2} \quad . \tag{6.53}$$

La transformation de Poisson (15.95) permet d'exprimer Z_c en fonction du nombre de tours m le long de l'anneau

$$\boxed{Z_c(t,\phi) = \frac{L}{\sqrt{4\pi Dt}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-m^2L^2/4Dt} \cos 4\pi m\varphi} \tag{6.54}$$

Chaque harmonique

$$P(m,t) = \frac{L}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-m^2L^2/4Dt} \tag{6.55}$$

de ce développement représente la probabilité de retour à l'origine après m tours autour de l'anneau (section 5.6.1). Il est donc possible de mettre Z_c sous la forme (6.1) soit

$$Z_c(t,\phi) = Z(t)\left\langle e^{im\varphi}\right\rangle \quad . \tag{6.56}$$

Cette formulation est tout à fait analogue à la représentation (6.46) du cooperon pour un champ magnétique uniforme en fonction de la distribution des aires algébriques $\mathcal{P}(\mathcal{A},t)$. La quantité qui est ici couplée au flux magnétique est le nombre de tours. Il est possible d'obtenir ce résultat à partir de la représentation fonctionnelle de la diffusion (section C6.2.2) en exprimant la contrainte que dans la loi de diffusion le nombre de tours est fixé. Le nombre typique de tours effectués après un temps t est :

$$\langle m^2(t)\rangle = \frac{2Dt}{L^2} = 2\frac{t}{\tau_D} \tag{6.57}$$

où $\tau_D = L^2/D$ est le temps de Thouless. La probabilité totale de retour à l'origine, qui inclut le diffuson et le cooperon, s'écrit :

$$Z(t,\phi) = \frac{L}{\sqrt{4\pi Dt}} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-m^2L^2/4Dt}\Big(1+\cos 4\pi m\varphi\Big) \tag{6.58}$$

et admet les deux comportements limites suivants :

- $t \ll \tau_D$: puisque τ_D est le temps typique pour faire un tour de l'anneau, seul le terme $m = 0$ contribue de manière significative à la somme. La probabilité de faire un ou plusieurs tours est négligeable. La dépendance en fonction du flux est donc aussi négligeable et

$$Z(t,\phi) \simeq 2\frac{L}{\sqrt{4\pi Dt}} \quad . \tag{6.59}$$

- $t \gg \tau_D$: la somme sur m peut être remplacée par l'intégrale gaussienne

$$Z(t,\phi) = \frac{L}{\sqrt{4\pi Dt}} \int_{-\infty}^{+\infty} dm\; e^{-m^2L^2/4Dt}\Big(1+\cos 4\pi m\varphi\Big) \quad . \tag{6.60}$$

  La probabilité de retour devient, à petit flux :

$$Z(t,\phi) \simeq 1 + e^{-16\pi^2\varphi^2 t/\tau_D} \quad . \tag{6.61}$$

  Dans ce cas, le nombre d'enroulements est grand. Ne contribue à la probabilité que le mode zéro ($n = 0$) qui, pour le cooperon, acquiert une valeur finie en présence d'un flux, ce qu'on retrouve directement à partir de l'expression (6.53).

Cette dualité entre modes de diffusion et nombres d'enroulements a été discutée dans la section 5.6.1. Ces comportements limites sont visibles sur la figure 6.2.

6.4.2 Le cylindre

Un autre cas important est celui d'un cylindre de périmètre L, d'épaisseur a et de hauteur L_z traversé par une ligne de flux (fig. 6.3). On suppose que $a \ll L, L_z$, de sorte que la diffusion puisse être considérée comme bidimensionnelle et que la probabilité n'ait pas de dépendance radiale. De plus, puisque $a \ll L$, le potentiel vecteur n'a qu'une composante azimuthale constante dans l'anneau :

$$\boldsymbol{A} = \frac{\phi}{L}\boldsymbol{e}_\theta \quad . \tag{6.62}$$

Dans la direction x, c'est-à-dire le long de l'anneau, les conditions aux limites périodiques impliquent $q_x = \frac{2\pi}{L}(n - 2\varphi)$ avec $n \in \mathbb{Z}$, comme pour l'anneau.

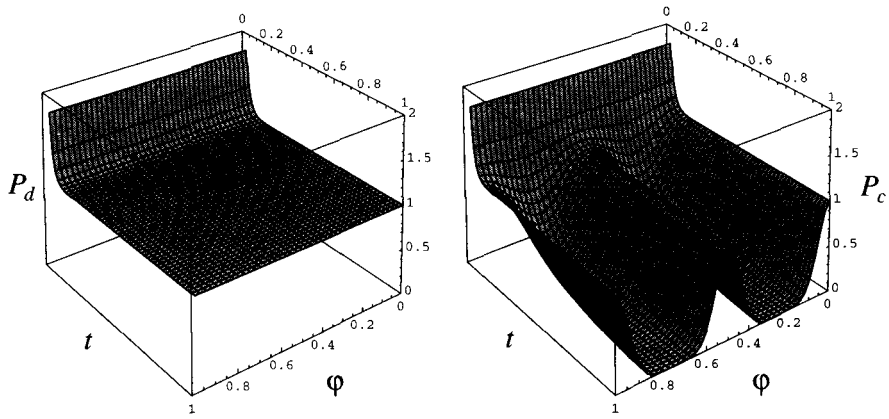


FIG. 6.2 – *Contributions du diffuson $P_d(t,\varphi)$ et du cooperon $P_c(t,\varphi)$ à la probabilité de retour à l'origine sur un anneau, avec $\varphi = \phi/\phi_0$. Le diffuson est indépendant du flux. Le cooperon en dépend peu lorsque $t \ll \tau_D$, et pour $t \gg \tau_D$ il oscille avec la période $\phi_0/2$. Il est négligeable lorsque $\sqrt{\frac{t}{\tau_D}} < \varphi < \frac{1}{2} - \sqrt{\frac{t}{\tau_D}}$.*

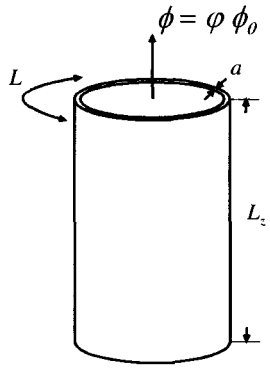


FIG. 6.3 – *Cylindre traversé par un flux magnétique Aharonov-Bohm ϕ.*

Dans les deux autres directions y et z, les modes sont quantifiés par les conditions aux limites de Neumann (section 5.5.2) : $q_z = \frac{\pi}{L_z} n_z$ où $n_z \in \mathbb{N}$. De plus, seul le mode $q_y = 0$ contribue dans la direction radiale y, puisque la diffusion y est uniforme.

Les valeurs propres de l'équation de diffusion (6.34) sont alors données par

$$E(n_x, n_z) = \frac{4\pi^2 D}{L^2}(n - 2\varphi)^2 + \pi^2 D \frac{n_z^2}{L_z^2} \tag{6.63}$$

et la fonction de partition associée s'écrit sous la forme factorisée :

$$Z_c(t,\phi) = \sum_{n_z \geq 0} e^{-\frac{\pi^2 D n_z^2}{L_z^2} t} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{4\pi^2 D t}{L^2}(n-2\varphi)^2} \quad . \tag{6.64}$$

On peut distinguer deux géométries particulières :

- Cylindre court : $L_z \ll L_x$. Dès que $t > L_z^2/D$, on a une diffusion uniforme le long de z, la première somme est dominée par le mode $n_z = 0$ et on retrouve le cas de l'anneau (6.54).

- Cylindre long : $L_z \gg L_x$. Tant que $t < L_z^2/D$, la diffusion dans la direction z est libre et on obtient :

$$Z_c(t,\phi) = \frac{L L_z}{4\pi D t} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-m^2 L^2/4Dt} \cos 4\pi m\varphi \quad . \tag{6.65}$$

6.5 Couplage spin-orbite et impuretés magnétiques

Jusqu'à présent on a supposé que l'hamiltonien électronique était indépendant du spin. En fait, un électron de vitesse $\dot{\boldsymbol{r}}$ se déplaçant dans un potentiel $v(\boldsymbol{r})$ est soumis à un champ électrostatique tel que $-e\boldsymbol{E} = -\boldsymbol{\nabla} v$. Il apparaît dans le référentiel propre un champ magnétique $\boldsymbol{B} = -\frac{1}{c^2}\dot{\boldsymbol{r}} \times \boldsymbol{E}$. L'interaction du spin avec ce champ magnétique est de la forme $-\mu_B \boldsymbol{B}.\vec{\sigma}$, et elle conduit à un terme supplémentaire dans l'hamiltonien (2.1) [8] :

$$\mathcal{H}_{so} = \frac{\hbar}{4mc^2} \vec{\sigma}.(\boldsymbol{\nabla} v(\boldsymbol{r}) \times \dot{\boldsymbol{r}}) \quad . \tag{6.66}$$

Les composantes de l'opérateur $\vec{\sigma}$ sont les matrices de Pauli σ_x, σ_y et σ_z, dont les expressions sont rappelées en (15.33). L'importance de ce couplage, appelé *spin-orbite*, dépend des impuretés considérées et augmente quadratiquement avec leur numéro atomique [111].

Par ailleurs, dans un métal, les électrons peuvent aussi interagir avec des moments magnétiques localisés. Cette interaction locale est décrite par un hamiltonien de la forme

$$\mathcal{H}_m = J\delta(\boldsymbol{r})\vec{S}.\vec{\sigma} \quad , \tag{6.67}$$

où $\vec{S}$ est le spin d'une impureté et $\vec{\sigma}$ est l'opérateur dont les composantes sont les matrices de Pauli.

[8] Dans l'argument simple qui conduit à (6.66), il manque un facteur 1/2 dont l'origine provient de la précession de Thomas.

On cherche maintenant à déterminer la forme du diffuson et celle du cooperon en présence de couplage spin-orbite et d'impuretés magnétiques. Pour cela, on doit tout d'abord modifier le temps de collision élastique l_e afin de tenir compte des potentiels de diffusion associés à ces nouveaux couplages. Puis on étudie les facteurs de structure associés au diffuson et au cooperon. Chacun est solution d'une équation intégrale dont la diagonalisation fait apparaître explicitement les propriétés de symétrie du spin 1/2. On développe ici la présentation de la référence [112]. Une autre présentation [113], plus qualitative, est developpée dans le complément C6.4.

6.5.1 Potentiel d'interaction

L'interaction spin-orbite constitue un potentiel de diffusion supplémentaire pour les électrons. La section efficace associée s'obtient à partir des éléments de matrice de l'hamiltonien d'interaction spin-orbite (6.66) évalués pour les états $|\boldsymbol{k}\alpha\rangle$ correspondant à un électron de vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$ et de spin α :

$$\langle \boldsymbol{k}\alpha|\mathcal{H}_{so}|\boldsymbol{k}'\beta\rangle = i\frac{\hbar^2}{4m^2c^2}\vec{\sigma}_{\alpha\beta}.(\boldsymbol{k}\times\boldsymbol{k}')v(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}') \tag{6.68}$$

où $v(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$, transformé de Fourier du potentiel $v(\boldsymbol{r})$, est pris constant. On note ces éléments de matrice sous la forme

$$\langle \boldsymbol{k}\alpha|\mathcal{H}_{so}|\boldsymbol{k}'\beta\rangle = iv_{so}\ \vec{\sigma}_{\alpha\beta}.(\hat{\boldsymbol{k}}\times\hat{\boldsymbol{k}}') \tag{6.69}$$

avec $\hat{\boldsymbol{k}} = \boldsymbol{k}/k$ et $\vec{\sigma}_{\alpha\beta} = \langle\alpha|\vec{\sigma}|\beta\rangle$.

De même, l'interaction du spin électronique avec une impureté magnétique est décrite par l'élément de matrice :

$$\langle \boldsymbol{k}\alpha|\mathcal{H}_m|\boldsymbol{k}'\beta\rangle = J\vec{S}.\vec{\sigma}_{\alpha\beta} \tag{6.70}$$

qui ne dépend pas des vecteurs d'onde puisque l'interaction correspondante est locale. En regroupant ces éléments de matrice on obtient :

$$\boxed{v_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = v_0\delta_{\alpha\beta} + iv_{so}(\hat{\boldsymbol{k}}\times\hat{\boldsymbol{k}}').\vec{\sigma}_{\alpha\beta} + J\vec{S}.\vec{\sigma}_{\alpha\beta}} \tag{6.71}$$

avec la propriété $v^*_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = v_{\beta\alpha}(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})$. Ce potentiel généralise le potentiel de diffusion scalaire décrit par v_0 dans le cadre du modèle d'Edwards (section 2.2.2). Ici, on se ramène à nouveau à un modèle gaussien en prenant la limite d'une forte densité n_i d'impuretés faiblement diffusantes [9]. Ce modèle

[9] Il n'y aucune raison pour que les densités d'impuretés statiques, d'impuretés à fort couplage spin-orbite (numéro atomique grand) et d'impuretés magnétiques soient identiques. On garde cependant la même notation n_i pour chacune d'elles. Cela est sans grande importance puisque l'on se place dans le cadre du modèle gaussien, c'est-à-dire dans la limite où la densité n_i tend vers l'infini et le potentiel vers zéro.

gaussien est maintenant entièrement caractérisé par le paramètre

$$B_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = n_i v_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') v^*_{\beta\delta}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') \tag{6.72}$$

qui généralise ainsi la relation (2.41).

Remarque : Théorème de réciprocité

• Couplage spin-orbite

En présence de couplage spin-orbite, le théorème de réciprocité énoncé en (2.112) pour le cas de la diffusion simple, s'écrit, pour un électron de spin σ [114] :

$$T_{dir}(\boldsymbol{k},\sigma;\boldsymbol{k}',\sigma') = (-1)^{\sigma-\sigma'} T_{rev}(-\boldsymbol{k}',-\sigma';-\boldsymbol{k},-\sigma) \quad . \tag{6.73}$$

Cette relation implique que les amplitudes associées aux processus direct $T_{dir}(\boldsymbol{k},\sigma;\boldsymbol{k}',\sigma')$ et inverse $T_{rev}(\boldsymbol{k},\sigma;\boldsymbol{k}',\sigma')$ sont égales (à un signe près) si

$$\boldsymbol{k}' = -\boldsymbol{k} \qquad \text{et} \qquad \sigma' = -\sigma \quad . \tag{6.74}$$

Le couplage spin-orbite préserve donc l'invariance par renversement du sens du temps. Mais le spin doit changer de signe entre les deux trajectoires conjuguées par renversement du sens du temps.

• Impuretés magnétiques

Les spins $\{S_j\}$ constituent des degrés de liberté internes des diffuseurs et c'est maintenant l'ensemble (électron + diffuseurs) qui doit obéir au principe de réciprocité. Pour un électron de spin σ, le théorème de réciprocité, énoncé en (2.113) pour le cas de la diffusion simple, s'écrit [114] :

$$T_{dir}(\boldsymbol{k},\sigma,\{S_j\};\boldsymbol{k}',\sigma',\{S_j\}') = \\ (-1)^{\sigma-\sigma'}(-1)^{\sum_j (S_j - S'_j)} T_{rev}(-\boldsymbol{k}',-\sigma',\{-S'_j\};-\boldsymbol{k},-\sigma,\{-S_j\}) \quad . \tag{6.75}$$

Les amplitudes associées aux processus direct et inverse sont égales si

$$T_{dir}(\boldsymbol{k},\sigma,\{S_j\};\boldsymbol{k}',\sigma',\{S'_j\}) = T_{rev}(\boldsymbol{k},\sigma,\{S_j\};\boldsymbol{k}',\sigma',\{S'_j\}) \tag{6.76}$$

c'est-à-dire lorsque

$$\boldsymbol{k}' = -\boldsymbol{k} \qquad \sigma' = -\sigma \qquad S'_j = -S_j \quad . \tag{6.77}$$

Il faut donc que les signes de *tous les spins* soient changés. Cette condition ne peut pas être réalisée pour une configuration donnée des diffuseurs. Les amplitudes associées aux deux trajectoires ne peuvent donc pas être identiques : le couplage aux impuretés magnétiques brise l'invariance par renversement du sens du temps.

6.5.2 Temps de collision

En présence d'impuretés magnétiques et de diffusion spin-orbite, le temps de collision τ_e est modifié. Le nouveau temps, noté τ_{tot}, est encore relié à la partie imaginaire de la self-énergie donnée par le diagramme de la figure 6.4. En utilisant les résultats de la section 3.2.2, en particulier la relation (3.72), on obtient

$$\frac{1}{2\tau_{tot}} = -\mathrm{Im}\Sigma_1^R = \pi\rho_0 \sum_\beta \langle B_{\alpha\alpha,\beta\beta}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\rangle = \pi\rho_0 n_i \sum_\beta \langle |v_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')|^2\rangle \tag{6.78}$$

où $\langle \cdots \rangle$ désigne la moyenne angulaire prise à la fois sur les directions $\boldsymbol{k}'$ du vecteur d'onde et sur les directions du spin $\vec{S}$ des impuretés magnétiques. Compte tenu de (6.71), le temps de collision τ_{tot} est tel que

$$\frac{1}{\tau_{tot}} = \frac{1}{\tau_e} + \frac{1}{\tau_{so}} + \frac{1}{\tau_m} \tag{6.79}$$

avec [10]

$$\frac{1}{2\pi\rho_0\tau_e} = n_i v_0^2 \ , \quad \frac{1}{2\pi\rho_0\tau_{so}} = n_i v_{so}^2 \langle (\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{k}}')^2 \rangle_{\hat{\boldsymbol{k}}'} \ , \quad \frac{1}{2\pi\rho_0\tau_m} = n_i J^2 \langle S^2 \rangle \ . \tag{6.81}$$

Les contributions à l'inverse du temps de collision sont donc additives. Ceci constitue la règle de Matthiessen (remarques p. 92 et p. 295).

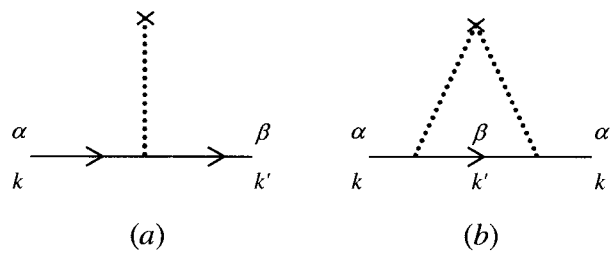


FIG. 6.4 – *a) Représentation du potentiel d'interaction $v_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}')$. b) Diagramme donnant, à l'ordre le plus bas, la self-énergie Σ_1^R de l'électron en présence de spin-orbite et d'impuretés magnétiques.*

Comme dans le cas d'un potentiel scalaire (relation 3.3), on introduit la notation

$$\gamma_{tot} = \sum_{\beta} \langle B_{\alpha\alpha,\beta\beta}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \rangle \tag{6.82}$$

qui prend la forme

$$\gamma_{tot} = \gamma_e + \gamma_{so} + \gamma_m \tag{6.83}$$

[10] On utilise pour cela la relation

$$\langle (\boldsymbol{s}.\mathbf{A})(\boldsymbol{s}.\mathbf{B}) \rangle = \frac{\langle s^2 \rangle}{3} \mathbf{A}.\mathbf{B} \tag{6.80}$$

pour tous vecteurs $\mathbf{A}$ et $\mathbf{B}$. On note $\langle \cdots \rangle$ la moyenne angulaire sur $\boldsymbol{s}$. Par ailleurs, $\vec{\sigma}^2 = 3$.

avec

$$\boxed{\begin{aligned} \gamma_e &= \frac{1}{2\pi\rho_0\tau_e} = n_i v_0^2 \\ \gamma_{so} &= \frac{1}{2\pi\rho_0\tau_{so}} = n_i v_{so}^2 \langle |\hat{\boldsymbol{k}} \times \hat{\boldsymbol{k}}'|^2 \rangle_{\hat{\boldsymbol{k}}'} \\ \gamma_m &= \frac{1}{2\pi\rho_0\tau_m} = n_i J^2 \langle S^2 \rangle \end{aligned}} \tag{6.84}$$

Remarque : Impuretés magnétiques et effet Kondo

Pour décrire le couplage du spin électronique à celui des impuretés magnétiques, l'approximation de Born est insuffisante. Kondo a montré que, à l'ordre suivant en perturbation, la constante de couplage est modifiée sous la forme [115]

$$J \longrightarrow J\left(1 - 2J\rho_0 \ln\frac{\epsilon_F}{T}\right) \quad . \tag{6.85}$$

Le temps de vie τ_m est donc modifié en conséquence

$$\frac{1}{\tau_m} = 2\pi\rho_0 n_i S(S+1)J^2\left(1 - 2J\rho_0 \ln\frac{\epsilon_F}{T}\right)^2 \quad . \tag{6.86}$$

Pour un couplage antiferromagnétique ($J < 0$), ceci conduit, lorsque la température décroît, à une augmentation de la résistance électrique. La correction logarithmique fait apparaître une température appelée température de Kondo et donnée par

$$T_K = \epsilon_F e^{-1/2|J|\rho_0} \quad . \tag{6.87}$$

En fait, les termes suivants de la série de perturbation sont tous du même ordre et, pour les températures approchant T_K, le développement en perturbation diverge et doit être resommé. Nous ne détaillons pas ici les différentes approches qui ont permis de résoudre ce problème [115]. Cet effet peut être bien décrit par une constante d'échange effective dépendant de la température [116, 117] :

$$J \longrightarrow J(T) = \frac{1}{2\rho_0\left[\ln^2\frac{T}{T_K} + S(S+1)\pi^2\right]^{1/2}} \tag{6.88}$$

conduisant à une dépendance en température du temps de vie $\tau_m(T)$ de la forme [118]

$$\frac{1}{\tau_m(T)} = \frac{n_i}{2\pi\rho_0}\frac{\pi^2 S(S+1)}{\ln^2\frac{T}{T_K} + \pi^2 S(S+1)} \quad . \tag{6.89}$$

Ainsi lorsque la température diminue, le temps caractérisque $\tau_m(T)$ décroît, avec un minimum autour de la température de Kondo.

6.5.3 Facteur de structure

Pour construire les facteurs de structure associés au diffuson et au cooperon, il est important de distinguer les situations où ces objets apparaissent dans des quantités moyennes (comme la conductance moyenne) ou

pour les fluctuations de ces quantités (comme les fluctuations de conductance au chapitre 12). Dans le premier cas, les deux trajectoires constitutives correspondent à la *même* configuration de désordre et d'impuretés magnétiques. Dans le second cas, on apparie deux trajectoires correspondant à des systèmes physiques *différents*. La configuration de spin des impuretés est donc différente. Cette distinction joue un rôle important. Dans le premier cas, la moyenne $\langle S^2 \rangle$ sur les spins des impuretés est finie. Dans le second, les deux configurations de spin étant différentes, la corrélation $\langle SS' \rangle$ est nulle. Les deux trajectoires ne sont donc pas reliées par des lignes d'impuretés magnétiques.

• Vertex élémentaire d'interaction

Comme dans le cas du potentiel scalaire (chap. 4), le diffuson et le cooperon s'obtiennent à partir de leur facteur de structure respectif, la nouveauté étant qu'il faut en plus spécifier les états de spin entre chaque collision (fig. 6.5). L'équation intégrale pour le facteur de structure a maintenant la forme représentée sur la figure 6.6. Le vertex élémentaire d'interaction dépend maintenant de quatre états de spin et son amplitude $\gamma_e = \langle B(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \rangle = n_i v_0^2$ dans le cas sans spin est remplacée par la quantité suivante :

$$\langle B^{(d)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \rangle = n_i \langle v_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') v^*_{\beta\delta}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \rangle = n_i \langle v_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') v_{\delta\beta}(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) \rangle \quad (6.90)$$

dans le cas du diffuson. Il est à noter que la moyenne du vertex élémentaire de collision est prise à chaque pas de la séquence de diffusion multiple. Les indices $(\alpha\beta)$ et $(\gamma\delta)$ décrivent respectivement les états de spin électroniques avant et après la collision (fig. 6.6). Pour le cooperon, il faut inverser $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$, *et les spins* β et δ de sorte que :

$$\langle B^{(c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \rangle = n_i \langle v_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') v^*_{\delta\beta}(\boldsymbol{k}', \boldsymbol{k}) \rangle = n_i \langle v_{\alpha\gamma}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') v_{\beta\delta}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \rangle \quad . \quad (6.91)$$

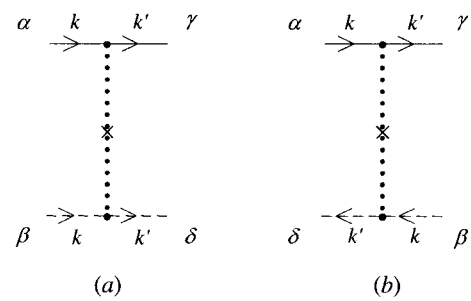


FIG. 6.5 – *Représentation des vertex élémentaires* $\langle B^{(d,c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') \rangle$ *d'interaction associés respectivement a) au diffuson et b) au cooperon.*

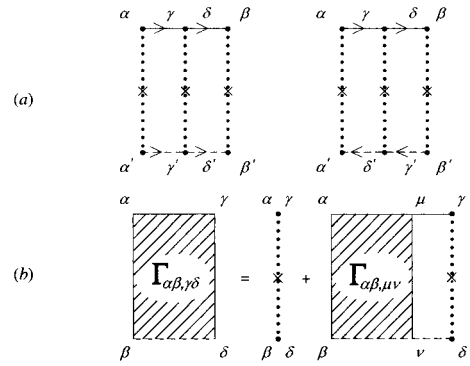


FIG. 6.6 – *a) Exemple d'appariement de deux amplitudes de diffusion multiples correspondant à des séquences de spin différentes. b) Équation intégrale pour le facteur de structure* $\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}$. *Le vertex élémentaire est de la forme* $\gamma_e\, b_{\alpha\beta,\gamma\delta}$.

À partir des éléments de matrice $v_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')$ du potentiel d'interaction (6.71) et de la relation (6.80), le calcul des moyennes angulaires conduit à :

$$\langle B^{(d,c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}\rangle = \gamma_e\; b^{(d,c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} \tag{6.92}$$

où on introduit deux tenseurs d'ordre 4 sans dimension $b^{(d,c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ associés respectivement au diffuson et au cooperon :

$$\boxed{\begin{aligned} b^{(d)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} &= \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + A^{(d)}\;\vec{\sigma}_{\alpha\gamma}.\vec{\sigma}_{\delta\beta} \\ b^{(c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} &= \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + A^{(c)}\;\vec{\sigma}_{\alpha\gamma}.\vec{\sigma}_{\beta\delta} \end{aligned}} \tag{6.93}$$

Les coefficients $A^{(d,c)}$ sont différents selon que l'on considère des diffusons (ou des cooperons) associés à une *même* configuration (pour le calcul d'une quantité physique moyenne) ou à des configurations *différentes* (pour le calcul de fluctuations) de désordre :

Moyenne	*Fluctuations*
$A^{(d)} = \dfrac{\gamma_m + \gamma_{so}}{3\gamma_e}$	$A^{(d)} = \dfrac{\gamma_{so}}{3\gamma_e}$
$A^{(c)} = \dfrac{\gamma_m - \gamma_{so}}{3\gamma_e}$	$A^{(c)} = -\dfrac{\gamma_{so}}{3\gamma_e}$

(6.94)

On note que pour les fluctuations, les deux trajectoires constitutives du diffuson ou du cooperon ne sont pas reliées par des lignes d'impuretés magnétiques,

ce qui revient à prendre $\gamma_m = 0$. Le terme lié à l'interaction spin-orbite est *positif* pour le diffuson et *négatif* pour le cooperon. Ce changement de signe résulte du retournement d'une des deux séquences pour le cooperon. Dans la base $|\alpha\beta >= |++>, |+->, |-+>, |-->$, les deux tenseurs $b^{(d,c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ s'écrivent sous la forme matricielle [11]

$$b^{(d)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + A^{(d)} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 2 \\ 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 \\ 2 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \tag{6.97}$$

$$b^{(c)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + A^{(c)} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 2 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad . \tag{6.98}$$

• Équation intégrale

Le facteur de structure obtenu par itération du vertex élémentaire d'interaction dépend maintenant de quatre états de spin. On le note $\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{q})$ où les indices $(\alpha\beta)$ et $(\gamma\delta)$ décrivent respectivement les états de spin initiaux et finaux. L'équation intégrale pour le diffuson et pour le cooperon dans l'espace réciproque (4.81 et 4.91) se généralise sous la forme [12]

$$\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{q}) = \gamma_e \; b_{\alpha\beta,\gamma\delta} + \frac{\gamma_e}{\Omega} \sum_{\mu,\nu,\boldsymbol{k}} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) \; \Gamma_{\alpha\beta,\mu\nu}(\boldsymbol{q}) \; b_{\mu\nu,\gamma\delta} \quad . \tag{6.99}$$

On rappelle que le produit des fonctions de Green moyennes est relié à la probabilité $P_0(\boldsymbol{q})$ par la relation (4.68). Ainsi, l'équation intégrale, pour le diffuson comme pour le cooperon, prend la forme

$$\boxed{\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{q}) = \gamma_e \; b_{\alpha\beta,\gamma\delta} + \sum_{\mu,\nu} \Gamma_{\alpha\beta,\mu\nu}(\boldsymbol{q}) \; b_{\mu\nu,\gamma\delta} \; w(\boldsymbol{q})} \tag{6.100}$$

avec $w(\boldsymbol{q}) = 2\pi\rho_0\gamma_e P_0(\boldsymbol{q}) = P_0(\boldsymbol{q})/\tau_e$. La probabilité $P_0(\boldsymbol{q})$ est ici définie à l'aide des nouvelles fonctions de Green moyennes caractérisées par le temps

[11] Ou encore

$$b^{(d)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + A^{(d)} \; (2\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} - \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}) \tag{6.95}$$

$$b^{(c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + A^{(c)} \; (2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} - \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}) \quad . \tag{6.96}$$

[12] Afin d'alléger les notations, on choisit de faire le calcul à fréquence nulle. Par ailleurs, lorsqu'il n'y a pas ambiguïté, on ne précise pas l'indice (d) ou (c) pour le diffuson ou le cooperon. On rappelle que $G^A_\epsilon(\boldsymbol{q}-\boldsymbol{k}) = G^A_\epsilon(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})$.

de collision τ_{tot}. Dans la limite diffusive, le développement de $P_0(\boldsymbol{q})$ s'écrit $P_0(\boldsymbol{q}) \simeq \tau_{tot}(1 - Dq^2\tau_{tot})$, avec une nouvelle expression du coefficient de diffusion

$$D = \frac{1}{d} v_F^2 \tau_{tot} \quad . \tag{6.101}$$

La fonction $w(\boldsymbol{q})$ varie comme

$$w(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{\tau_e} P_0(\boldsymbol{q}) \simeq \frac{\tau_{tot}}{\tau_e}(1 - Dq^2\tau_{tot}) = \frac{\gamma_e}{\gamma_{tot}}(1 - Dq^2\tau_{tot}) \quad . \tag{6.102}$$

Remarque : Équation de Bethe-Salpeter

Le facteur de structure associé au diffuson (ou au cooperon) est obtenu en itérant un vertex élémentaire d'interaction $\langle B_{\alpha\beta,\gamma\delta}\rangle$ (6.90) construit à partir du produit des deux amplitudes complexes de diffusion $v_{\alpha\gamma}v^*_{\beta\delta}$ (ou $v_{\alpha\gamma}v^*_{\delta\beta}$ pour le cooperon). Ce produit, qui correspond à quatre valeurs *a priori* distinctes du spin, est plus général que la section efficace différentielle donnée par $v_{\alpha\beta}v^*_{\alpha\beta}$. L'équation intégrale (6.100) obtenue en itérant le vertex élémentaire d'interaction est connue dans la littérature sous le nom d'équation de Bethe-Salpeter (voir note 6, p. 111 et équation 4.156). Elle est l'équivalent, pour le facteur de structure, de l'équation de Dyson pour la fonction de Green moyenne (chap. 3). Dans la limite d'un potentiel scalaire, c'est-à-dire sans degré de liberté supplémentaire, le vertex élémentaire d'interaction se ramène à la section efficace différentielle.

• Diagonalisation

Afin de résoudre l'équation intégrale (6.100), il faut la diagonaliser. Pour cela, il faut d'abord diagonaliser le tenseur b afin d'obtenir une équation intégrale dans chaque sous-espace associé à chaque valeur propre b_J du vertex élémentaire :

$$\Gamma_J(\boldsymbol{q}) = \gamma_e\, b_J + \Gamma_J(\boldsymbol{q})\, b_J\, w(\boldsymbol{q}) \quad . \tag{6.103}$$

À l'aide de (6.102), on obtient les modes propres

$$\boxed{\Gamma_J(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_{tot}/\tau_{tot}}{1/\tau_J + Dq^2}} \tag{6.104}$$

avec

$$\boxed{\tau_J = \tau_{tot}\frac{b_J}{\tau_e/\tau_{tot} - b_J}} \tag{6.105}$$

ou encore

$$\gamma_J = \gamma_{tot}\frac{\gamma_{tot}/\gamma_e - b_J}{b_J} \quad . \tag{6.106}$$

En rétablissant la fréquence ω, on obtient des pôles de la forme $-i\omega + Dq^2 + 1/\tau_J$. Ces modes propres sont donc atténués, c'est-à-dire qu'ils ont une dépendance temporelle qui décroît exponentiellement avec un temps caractéristique τ_J.

Finalement, on obtient le facteur de structure $\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{q})$ à partir des Γ_J et des formules habituelles de changement de base. On étudie maintenant séparément les cas du diffuson et du cooperon.

Remarque : Symétries du diffuson et du cooperon

Le facteur de structure résulte de l'itération d'un vertex élémentaire d'interaction. Il est intéressant de noter que ce facteur de structure reproduit à l'échelle macroscopique les symétries du problème quantique microscopique sous-jacent (singulet ou triplet). Ce n'est pas *a priori* évident puisque le facteur de structure a été construit comme un objet classique (chap. 4).

6.5.4 Le diffuson

La diagonalisation de la matrice (6.97) qui décrit le vertex élémentaire se fait dans la base singulet-triplet. Elle permet d'obtenir les deux valeurs propres

$$\begin{aligned} b_S^{(d)} &= 1 + 3A^{(d)} \\ b_T^{(d)} &= 1 - A^{(c)} \quad . \end{aligned} \tag{6.107}$$

La première, non dégénérée, correspond au vecteur propre

$$|\tilde{S}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle + |--\rangle) \quad . \tag{6.108}$$

La seconde est dégénérée trois fois et correspond aux vecteurs propres

$$|\tilde{T}_i\rangle = \begin{cases} |+-\rangle \\ |-+\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle - |--\rangle) \end{cases} \quad . \tag{6.109}$$

La base de vecteurs « singulet » et « triplet » est ici inhabituelle. Elle correspond, non pas à l'addition de deux spins, mais à l'addition d'un spin et d'un autre avec une conjugaison complexe [13]. À l'aide des coefficients de changement de base, on obtient pour $b^{(d)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ la décomposition suivante :

$$b^{(d)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = b_T^{(d)}\ \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \frac{1}{2}(b_S^{(d)} - b_T^{(d)})\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} \quad . \tag{6.110}$$

Étant données les valeurs propres (6.107) du vertex élémentaire $b^{(d)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$, on obtient, à l'aide de (6.106), les temps caractéristiques pour le diffuson et le

[13] L'action de la conjugaison complexe sur un état propre du spin en représentation σ_z est donnée par l'opérateur $K = e^{-i\frac{\pi}{2}\sigma_y} = -i\sigma_y$, de sorte que $K|+\rangle = |-\rangle$ et $K|-\rangle = -|+\rangle$ [119], d'où les expressions inhabituelles des états singulet (6.108) et triplet (6.109).

cooperon dans les canaux singulet et triplet. Selon que les trajectoires appariées correspondent à des configurations de désordre identiques ou différentes, les coefficients $A^{(d,c)}$ prennent des valeurs différentes (6.94). Ainsi, dans la limite où les effets du spin-orbite et des impuretés magnétiques sont faibles, c'est-à-dire pour $\tau_{tot} \simeq \tau_e$, les temps caractéristiques sont donnés par :

Moyenne	*Fluctuations*
$\frac{1}{\tau_S^{(d)}} = 0$	$\frac{1}{\tau_S^{(d)}} \simeq \frac{1}{\tau_m}$
$\frac{1}{\tau_T^{(d)}} \simeq \frac{4}{3\tau_{so}} + \frac{4}{3\tau_m}$	$\frac{1}{\tau_T^{(d)}} \simeq \frac{4}{3\tau_{so}} + \frac{1}{\tau_m}$

(6.111)

Les deux modes correspondants, singulet et triplet, sont donnés par la relation (6.104) :

- pour le diffuson correspondant à une *même* configuration de désordre :

$$\Gamma_T(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_{tot}/\tau_{tot}}{Dq^2 + \frac{4}{3\tau_{so}} + \frac{4}{3\tau_m}} \qquad \Gamma_S(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_{tot}/\tau_{tot}}{Dq^2} \quad ; \tag{6.112}$$

- pour le diffuson correspondant à des configurations de désordre *différentes* :

$$\Gamma_T(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_{tot}/\tau_{tot}}{Dq^2 + \frac{4}{3\tau_{so}} + \frac{1}{\tau_m}} \qquad \Gamma_S(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_{tot}/\tau_{tot}}{Dq^2 + \frac{1}{\tau_m}} \quad . \tag{6.113}$$

On note que le diffuson constitué par l'appariement de trajectoires identiques reste un mode de Goldstone (sections 6.1.3 et 6.5.6). À l'aide de ces expressions, on déduit les facteurs de structure associés à des deux diffusons :

$$\boxed{\Gamma^{(d)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \Gamma_T^{(d)}\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \frac{1}{2}(\Gamma_S^{(d)} - \Gamma_T^{(d)})\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}} \tag{6.114}$$

Ainsi, $\Gamma^{(d)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{q})$ dépend de la diffusion spin-orbite et des impuretés magnétiques. Ce résultat est important car il montre que le diffuson qui est *a priori* un objet classique peut être déphasé en présence de spin-orbite ou d'impuretés magnétiques.

6.5.5 Le cooperon

Pour diagonaliser le facteur de structure associé au cooperon, on cherche d'abord les valeurs propres du vertex élémentaire d'interaction $b^{(c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$, c'est-à-

dire que l'on diagonalise la matrice (6.98), ce qui se fait dans la base singulet-triplet,

$$|S\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle - |-+\rangle)$$

$$|T_i\rangle = \begin{cases} |++\rangle \\ |--\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|+-\rangle + |-+\rangle) \end{cases} \quad . \tag{6.115}$$

Les deux valeurs propres correspondantes s'obtiennent aisément

$$\begin{aligned} b_S^{(c)} &= 1 - 3A^{(c)} \\ b_T^{(c)} &= 1 + A^{(c)} \end{aligned} \tag{6.116}$$

et à l'aide des coefficients de changement de base

$$b^{(c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \sum_{T_i} b_T \langle\alpha\beta|T_i\rangle\langle T_i|\gamma\delta\rangle + b_S \langle\alpha\beta|S\rangle\langle S|\gamma\delta\rangle \tag{6.117}$$

on obtient pour $b^{(c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ la décomposition suivante :

$$b^{(c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \frac{1}{2}(b_T^{(c)} + b_S^{(c)})\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \frac{1}{2}(b_T^{(c)} - b_S^{(c)})\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} \quad . \tag{6.118}$$

Remarque : Changement de base et coefficients de Clebsch-Gordan

Les coefficients de changement de base de la relation (6.117) ne sont autres que les coefficients de Clebsh-Gordan. De façon générale, pour des particules de spin j (ici $j = 1/2$), on diagonalise l'équation du diffuson selon les états propres du spin total J. Il y a donc $2j + 1$ valeurs possibles de J comprises entre $J = 0$ et $J = 2j$. Ces états J sont $2J + 1$ fois dégénérés. Ainsi, pour le spin, l'état $J = 0$ est non dégénéré (singulet) et l'état $J = 1$ est trois fois dégénéré (triplet). Le changement de base est de la forme

$$b_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \sum_J \sum_{m=-J}^{J} b_{Jm} C^{Jm}_{\alpha\beta} C^{Jm}_{\gamma\delta} \tag{6.119}$$

où les coefficients $C^{Jm}_{m_1 m_2} = \langle jjm_1m_2|Jm\rangle$ sont les coefficients de Clebsh-Gordan. Dans le cas présent, b_{Jm} ne dépend pas de m. Pour décrire la diffusion multiple d'une onde polarisée, on aura à résoudre le même genre d'équation intégrale mais avec $j = 1$, ce qui conduira à trois valeurs possibles de J : $J = 0$ non dégénéré, $J = 1$ de dégénérescence 3 et $J = 2$ de dégénérescence 5 (voir la section 6.6).

Le facteur de structure $\Gamma^{(c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{q})$ a la même structure que le vertex élémentaire $b^{(c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ donné par (6.118) et il admet donc la décomposition

$$\boxed{\Gamma^{(c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \frac{1}{2}(\Gamma_T^{(c)} + \Gamma_S^{(c)})\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \frac{1}{2}(\Gamma_T^{(c)} - \Gamma_S^{(c)})\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}} \tag{6.120}$$

Les valeurs propres du vertex élémentaire $b^{(c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ sont données par (6.116). À l'aide de la relation (6.106), on en déduit les temps caractéristiques pour le cooperon dans les deux canaux, singulet et triplet. Ces temps caractéristiques sont différents selon que le cooperon apparie des trajectoires appartenant à une même configuration ou à des configurations différentes. Dans la limite $\tau_{tot} \simeq \tau_e$, on obtient :

Moyenne	*Fluctuations*
$\frac{1}{\tau_S^{(c)}} \simeq \frac{2}{\tau_m}$	$\frac{1}{\tau_S^{(c)}} \simeq \frac{1}{\tau_m}$
$\frac{1}{\tau_T^{(c)}} \simeq \frac{4}{3\tau_{so}} + \frac{2}{3\tau_m}$	$\frac{1}{\tau_T^{(c)}} \simeq \frac{4}{3\tau_{so}} + \frac{1}{\tau_m}$

(6.121)

Le facteur de structure du cooperon se décompose donc selon les modes propres singulet et triplet,

- pour une même configuration de désordre :

$$\Gamma_T^{(c)}(\boldsymbol{Q}) = \frac{\gamma_{tot}/\tau_{tot}}{DQ^2 + \frac{4}{3\tau_{so}} + \frac{2}{3\tau_m}} \qquad \Gamma_S^{(c)}(\boldsymbol{Q}) = \frac{\gamma_{tot}/\tau_{tot}}{DQ^2 + \frac{2}{\tau_m}} \quad ; \tag{6.122}$$

- pour des configurations de désordre différentes :

$$\Gamma_T^{(c)}(\boldsymbol{Q}) = \frac{\gamma_{tot}/\tau_{tot}}{DQ^2 + \frac{4}{3\tau_{so}} + \frac{1}{\tau_m}} \qquad \Gamma_S^{(c)}(\boldsymbol{Q}) = \frac{\gamma_{tot}/\tau_{tot}}{DQ^2 + \frac{1}{\tau_m}} \quad . \tag{6.123}$$

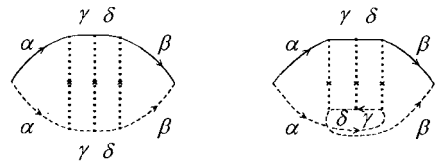
On remarque que *la diffusion spin-orbite n'affecte pas le canal singulet du cooperon* $\Gamma_S^{(c)}(\boldsymbol{Q})$ et qu'en l'absence d'impuretés magnétiques ($\tau_m \to \infty$), on retrouve le cas du potentiel scalaire (4.94) [14].

6.5.6 La probabilité de diffusion

On a construit deux objets constitués par l'appariement de deux amplitudes ayant des configurations de spin *indépendantes*. Ceci a permis de sommer indépendamment sur les états de spin intermédiaires dans l'itération du processus de diffusion élémentaire, d'où la forme simple de l'équation intégrale (6.100).

La probabilité classique P_d est de nature particulière. Elle s'obtient en appariant deux amplitudes de diffusion multiple avec des configurations de spins *identiques* à chaque pas de l'itération (fig. 6.7.*a*). Par conséquent, le

[14] La constante de diffusion (6.101) est néanmoins modifiée par le couplage spin-orbite.



(a) (b)

FIG. 6.7 – *(a) Diffuson P_d et (b) cooperon X_c avec une interaction dépendant du spin.*

facteur de structure associé est solution de l'équation (6.100) dans un sous-espace de dimension 2 :

$$\Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\beta\beta}(\boldsymbol{q}) = \gamma_e \, b^{(d)}_{\alpha\alpha,\beta\beta} + \sum_{\mu} \Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\mu\mu}(\boldsymbol{q}) \, b^{(d)}_{\mu\mu,\beta\beta} \, w(\boldsymbol{q}) \tag{6.124}$$

avec

$$b^{(d)}_{\alpha\alpha,\beta\beta} = \delta_{\alpha\beta} + \frac{\gamma_m + \gamma_{so}}{3\gamma_e} \vec{\sigma}_{\alpha\beta}.\vec{\sigma}_{\beta\alpha} \tag{6.125}$$

qui admet la représentation matricielle [15]

$$b^{(d)} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + \frac{\gamma_m + \gamma_{so}}{3\gamma_e} \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 1 \end{pmatrix} \quad . \tag{6.127}$$

Ce tenseur admet les deux vecteurs propres $\frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle + |--\rangle)$ et $\frac{1}{\sqrt{2}}(|++\rangle - |--\rangle)$ avec les valeurs propres $b^{(d)}_S$ et $b^{(d)}_T$ données par (6.107). La relation (6.105) montre que le mode singulet n'est pas atténué (c'est le mode de Goldstone [16]) et que le mode triplet est caractérisé par le temps $\tau^{(d)}_T$ donné par (6.111).

La solution de (6.124) s'écrit :

$$\Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\beta\beta} = \Gamma_T \delta_{\alpha\beta} + \frac{1}{2}(\Gamma_S - \Gamma_T) \quad . \tag{6.128}$$

Ainsi, si on considère un faisceau électronique polarisé en spin, la probabilité de rester dans le même canal est proportionnelle à

$$\Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\alpha\alpha} = \frac{1}{2}(\Gamma_S + \Gamma_T) \tag{6.129}$$

---

[15] Ou encore

$$b^{(d)}_{\alpha\alpha,\beta\beta} = \delta_{\alpha\beta} + \frac{\gamma_m + \gamma_{so}}{3\gamma_e} \, (2 - \delta_{\alpha\beta}) \quad . \tag{6.126}$$

[16] Le mode de Goldstone dépend néanmoins de la diffusion spin-orbite et des impuretés magnétiques par l'intermédiaire de la renormalisation de la constante de diffusion D.

et la probabilité d'avoir une polarisation de spin opposée ($\beta \neq \alpha$) est

$$\Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\beta\beta} = \frac{1}{2}(\Gamma_S - \Gamma_T) \quad . \tag{6.130}$$

On vérifie que

$$\sum_\beta \Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\beta\beta} = \Gamma_S \quad . \tag{6.131}$$

Le mode singulet étant un mode de Goldstone, on retrouve bien la conservation du nombre de particules.

6.5.7 Le cooperon X_c

Dans le cas du cooperon X_c (section 4.6), on apparie deux trajectoires de collisions multiples renversées dans le temps. La figure 6.7.*b* montre que les deux séquences de spin sont inversées et que les vertex successifs d'interaction sont *corrélés*. Le facteur de structure met donc en jeu une succession de vertex d'interaction qui ne sont pas indépendants. Dans la limite des longues séquences, on néglige cette corrélation et on suppose que les deux séquences sont indépendantes. On peut alors sommer sur toutes les configurations de spin intermédiaires pour obtenir le facteur de structure comme solution d'une équation intégrale identique à celle du diffuson. La figure 6.7.*b* indique que le cooperon X_c est proportionnel à $\sum_\beta \Gamma^{(c)}_{\alpha\beta,\beta\alpha}$. À l'aide de (6.120), on obtient

$$\sum_\beta \Gamma^{(c)}_{\alpha\beta,\beta\alpha}(\boldsymbol{Q}) = \frac{3}{2}\Gamma^{(c)}_T(\boldsymbol{Q}) - \frac{1}{2}\Gamma^{(c)}_S(\boldsymbol{Q}) \quad . \tag{6.132}$$

En rétablissant la dépendance en fréquence dans les pôles de diffusion des facteurs de structure (6.122), on obtient la généralisation de (4.96), soit

$$X_c^{so+m}(\omega) = \frac{\tau_{tot}}{2\pi\rho_0\Omega}\sum_{\boldsymbol{Q}}\left(\frac{3}{-i\omega + DQ^2 + \frac{4}{3\tau_{so}} + \frac{2}{3\tau_m}} - \frac{1}{-i\omega + DQ^2 + \frac{2}{\tau_m}}\right) . \tag{6.133}$$

Par transformation de Fourier, on obtient la dépendance temporelle du cooperon. En présence du seul couplage spin-orbite, cette dépendance est de la forme $X_c^{so}(t) = X_c(t)\langle Q_{so}(t)\rangle$ où $X_c(t)$ est la contribution scalaire et où le facteur de réduction

$$\boxed{\langle Q_{so}(t)\rangle = \tfrac{1}{2}\left(3e^{-4t/3\tau_{so}} - 1\right)} \tag{6.134}$$

représente une moyenne sur les trajectoires de diffusion du déphasage induit par le couplage spin-orbite. Lorsque $t \ll \tau_{so}$, $\langle Q_{so}(t)\rangle = 1$, c'est-à-dire que le cooperon n'est pas modifié. Pour $t \gg \tau_{so}$, le terme « triplet » disparaît.

Mais la contribution négative du singulet n'est pas affectée. Ainsi $\langle Q_{so}(t)\rangle$ devient négatif et égal à $-1/2$. La probabilité $P(0,\boldsymbol{r},t) = P_d(0,\boldsymbol{r},t) + X_c(0,\boldsymbol{r},t)$ est maintenant *diminuée* d'un facteur 2 en $\boldsymbol{r} = 0$, comme le montre la figure 6.8.

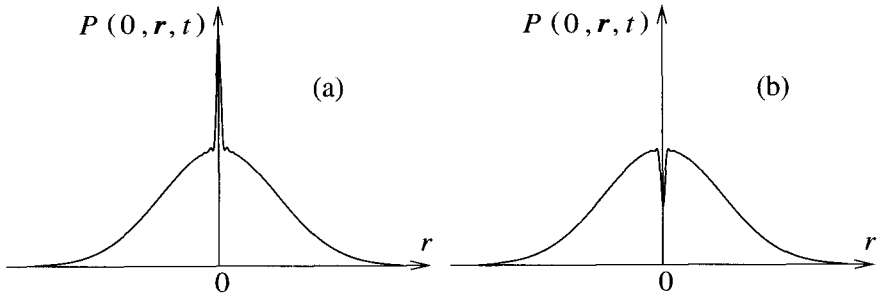


FIG. 6.8 – *Probabilité de diffusion $P(0,\boldsymbol{r},t)$. a) En l'absence de couplage spin-orbite ($1/\tau_{so} = 0$, $\langle Q_{so}(t)\rangle = 1$), la probabilité de retour à l'origine est doublée. b) En présence de fort couplage spin-orbite ($t \gg \tau_{so}$, $\langle Q_{so}(t)\rangle = -1/2$), elle est diminuée d'un facteur 2.*

En présence d'impuretés magnétiques, le cooperon est de la forme $X_c^m(t) = X_c(t)\langle Q_m(t)\rangle$. Le facteur de réduction donné par

$$\boxed{\langle Q_m(t)\rangle = \tfrac{1}{2}\left(3e^{-2t/3\tau_m} - e^{-2t/\tau_m}\right)} \tag{6.135}$$

décrit la moyenne sur les trajectoires de diffusion du déphasage induit par les impuretés. On note que les contributions singulet et triplet sont toutes deux réduites pas les impuretés magnétiques, de sorte que la contribution du cooperon disparaît aux temps longs.

Finalement, l'effet du couplage spin-orbite et des impuretés magnétiques s'ajoutent dans chaque canal, singulet ou triplet, de sorte que le cooperon devient [120] $X_c^{so+m}(t) = X_c(t)\langle Q_{so+m}(t)\rangle$ avec

$$\boxed{\langle Q_{so+m}(t)\rangle = \tfrac{1}{2}\left(3e^{-4t/3\tau_{so}-2t/3\tau_m} - e^{-2t/\tau_m}\right)} \tag{6.136}$$

6.5.8 Conclusion

Les résultats obtenus dans cette section mettent en relief l'existence de deux quantités bien distinctes. D'une part, la probabilité classique correspond à l'appariement de deux séquences affectées des *mêmes valeurs du spin.* Des quantités comme la conductance moyenne sont construites à partir de

cette probabilité. Pour obtenir le cooperon, on apparie deux séquences avec les mêmes valeurs *dans un ordre opposé* et on en déduit la correction de localisation faible (section 7.5.2).

D'autre part, on peut imaginer apparier des séquences correspondant *à des valeurs différentes et non corrélées du spin.* C'est ce qui se passe si on considère les fonctions de corrélation d'une quantité physique prise pour des configurations différentes du désordre, par exemple les fluctuations de conductance (chap. 11). L'appariement entre des séquences de spin indépendantes correspond au calcul de la section 6.5.3. Cet appariement conduit à un temps de cohérence de phase fini.

6.6 Polarisation des ondes électromagnétiques

Dans les métaux, l'existence d'un degré de liberté supplémentaire, le spin de l'électron, affecte le diffuson et le cooperon. Il modifie la relation de phase entre les trajectoires de diffusion multiple appariées. Pour le cas des photons, on obtient un comportement qualitativement similaire du fait de la nature vectorielle du champ électrique, c'est-à-dire de la polarisation. Celle-ci modifie les résultats obtenus dans le cas d'une onde scalaire de deux manières :

- Elle introduit un déphasage entre les séquences de diffusion multiple appariées et modifie donc le diffuson et le cooperon.
- Pour une direction donnée de la polarisation incidente, elle modifie le poids relatif de l'intensité dans chaque canal de polarisation, à la fois pour le diffuson et pour le cooperon.

On se place d'emblée dans le régime de diffusion Rayleigh pour lequel la longueur d'onde est grande par rapport à la taille des diffuseurs (section C2.3.1). Cette approximation est bien justifiée dans beaucoup de situations, en particulier pour la diffusion des photons par des atomes froids. De plus, elle permet une étude assez exhaustive des effets de la polarisation [121–124].

La relation (2.122) permet de déterminer la polarisation $\boldsymbol{P}'$ du champ électrique après une collision en fonction de la polarisation incidente $\boldsymbol{P}$ et du vecteur d'onde diffusé $\hat{\boldsymbol{k}}' = \boldsymbol{k}'/k'$:

$$\boldsymbol{P}' = -\hat{\boldsymbol{k}}' \times \left(\hat{\boldsymbol{k}}' \times \boldsymbol{P}\right) \quad . \tag{6.137}$$

Cette relation est spécifique de la diffusion Rayleigh par un dipole et elle devient incorrecte dans le cas d'un diffuseur quelconque. Elle peut s'écrire sous la forme matricielle

$$\boldsymbol{P}' = M(\hat{\boldsymbol{k}}')\boldsymbol{P} \qquad \text{où} \qquad M(\hat{\boldsymbol{k}}) = \begin{pmatrix} 1-\hat{k}_x^2 & -\hat{k}_x\hat{k}_y & -\hat{k}_x\hat{k}_z \\ -\hat{k}_x\hat{k}_y & 1-\hat{k}_y^2 & -\hat{k}_y\hat{k}_z \\ -\hat{k}_x\hat{k}_z & -\hat{k}_y\hat{k}_z & 1-\hat{k}_z^2 \end{pmatrix} \tag{6.138}$$

est une matrice symétrique réelle et $\hat{\boldsymbol{k}} = (\hat{k}_x, \hat{k}_y, \hat{k}_z)$. En utilisant la notation tensorielle, la diffusion Rayleigh est donc décrite par un potentiel de diffusion de la forme

$$\boxed{v_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}, \boldsymbol{k}') = v_0 M_{\alpha\beta}(\boldsymbol{k}') = v_0(\delta_{\alpha\beta} - \hat{k}'_\alpha \hat{k}'_\beta)} \tag{6.139}$$

avec $v_0 = \alpha_0 k_0^2$, où α_0 est la polarisabilité classique et k_0 le vecteur d'onde (relation 2.124). Ce potentiel diffère du potentiel scalaire v_0 du modèle d'Edwards (section 2.2.2). Le modèle gaussien est ici caractérisé par le paramètre

$$B_{\alpha\beta,\gamma\delta} = n_i v_{\alpha\gamma} v_{\beta\delta} \tag{6.140}$$

qui généralise (2.41). Il est intéressant de comparer ce potentiel de diffusion à celui (6.71) agissant sur les électrons en présence d'impuretés magnétiques ou de couplage spin-orbite. Dans les deux cas, la diffusion est caractérisée par un tenseur d'ordre 2 qui décrit le spin des électrons ou la polarisation pour la lumière. Dans le cas des électrons, la partie non scalaire s'ajoute à la composante scalaire tandis qu'elle la multiplie dans le cas de la lumière. Pour les électrons, le tenseur est défini dans un espace à deux dimensions associé au spin 1/2 tandis que, pour les ondes, il est défini dans un espace à trois dimensions associé au spin 1. Les deux problèmes sont donc qualitativement similaires mais correspondent à des symétries différentes. On va donc suivre une présentation analogue à celle utilisée pour le couplage spin-orbite et les impuretés magnétiques.

Remarque : Polarisation et théorème de réciprocité

L'invariance par renversement du temps, lorsqu'elle existe, se traduit pour une onde électromagnétique de polarisation $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}$ par la relation (2.111) entre amplitudes complexes. Ceci constitue le théorème de réciprocité.
Pour une polarisation $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$ de l'onde incidente, les amplitudes associées aux processus direct et inverse sont égales si en vertu de (2.111), la polarisation finale $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'$ vérifie $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}' = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^*$. Dans le cas où la polarisation $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$ est linéaire, ceci suppose que la lumière émergente soit mesurée selon la même direction de polarisation ($l \parallel l$).
Lorsque la polarisation $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$ est circulaire, d'hélicité donnée, la condition $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}' = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i^*$ impose de mesurer la lumière émergente dans le canal d'hélicité conservée ($h \parallel h$).

Exercice 6.2 : Montrer que, puisque la polarisation est transverse ($\boldsymbol{k} \perp \boldsymbol{P}$), la matrice M vérifie la propriété :

$$M(\hat{\boldsymbol{k}})\boldsymbol{P} = \boldsymbol{P} \quad , \tag{6.141}$$

qui traduit le fait que $\boldsymbol{P}$ et $\hat{\boldsymbol{k}}$ ne sont pas des quantités indépendantes.

6.6.1 Libre parcours moyen

La polarisation du champ électromagnétique ne constitue pas un potentiel de diffusion supplémentaire contrairement au cas de la diffusion spin-orbite (6.71). Cependant la polarisation modifie aussi le libre parcours moyen élastique (relations 3.76 et 3.77). On note l_{pol} sa nouvelle expression qui s'écrit

$$\frac{1}{l_{pol}} = \frac{1}{c\tau_{pol}} = -\frac{1}{k_0}\mathrm{Im}\Sigma_1^R = \frac{\gamma_{pol}}{4\pi} \tag{6.142}$$

avec

$$\gamma_{pol} = \sum_\beta \langle B_{\alpha\alpha,\beta\beta}\rangle = \gamma_e \sum_\beta \langle M_{\alpha\beta}M_{\beta\alpha}\rangle = \frac{2}{3}\,\gamma_e \tag{6.143}$$

$\langle\ldots\rangle$ représente la moyenne angulaire sur les directions de $\hat{\boldsymbol{k}}'$. La prise en compte de la polarisation réduit donc la section efficace d'un facteur 2/3, qui n'est autre que la moyenne du terme $\sin^2\chi$ dans la relation (2.126). On a finalement

$$l_{pol} = \frac{4\pi}{\gamma_{pol}} = \frac{3}{2}\,l_e \qquad\qquad \tau_{pol} = \frac{3}{2}\,\tau_e \quad . \tag{6.144}$$

6.6.2 Facteur de structure

• Vertex élémentaire d'interaction

Afin de calculer le facteur de structure du diffuson ou du cooperon, il faut d'abord spécifier les états de polarisation initiaux (α,β) et finaux (γ,δ) associés au vertex élémentaire du facteur de structure (fig. 6.6). Ces états définissent le tenseur écrit en coordonnées cartésiennes :

$$b_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \langle M_{\alpha\gamma}M_{\beta\delta}\rangle = \left\langle (\delta_{\alpha\gamma} - \hat{k}'_\alpha\hat{k}'_\gamma)\,(\delta_{\beta\delta} - \hat{k}'_\beta\hat{k}'_\delta)\right\rangle \quad . \tag{6.145}$$

Contrairement au cas du couplage spin-orbite (relations 6.90 et 6.91), ce tenseur qui décrit le vertex élémentaire de rotation de la polarisation est le même pour le diffuson et le cooperon. Il est à noter que la moyenne angulaire du vertex élémentaire de rotation de la polarisation est prise à chaque pas de la séquence de diffusion multiple.

Afin de calculer explicitement $b_{\alpha\beta,\gamma\delta}$, on utilise les moyennes angulaires suivantes

$$\begin{aligned}
\langle \hat{k}_\alpha\hat{k}_\beta\rangle &= 0 && \text{si} \quad \alpha \neq \beta \\
\langle \hat{k}_\alpha^2\rangle &= 1/3 \\
\langle \hat{k}_\alpha\hat{k}_\beta\hat{k}_\gamma\hat{k}_\delta\rangle &= 0 && \text{si} \quad \text{trois indices sont différents} \\
\langle \hat{k}_\alpha^2\hat{k}_\beta^2\rangle &= 1/15 && \text{si} \quad \alpha \neq \beta \\
\langle \hat{k}_\alpha^4\rangle &= 1/5
\end{aligned} \tag{6.146}$$

que l'on peut récrire sous la forme condensée (en coordonnées cartésiennes) :

$$\begin{aligned} \langle \hat{k}_\alpha \hat{k}_\beta \rangle &= \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta} \\ \langle \hat{k}_\alpha \hat{k}_\beta \hat{k}_\gamma \hat{k}_\delta \rangle &= \frac{1}{15}(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}) \quad , \end{aligned} \tag{6.147}$$

de sorte que

$$\boxed{b_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \frac{1}{15}(6\ \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma})} \tag{6.148}$$

On peut représenter $b_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ sous la forme matricielle

$$\frac{1}{15}\begin{pmatrix} 8 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 6 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 6 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 8 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 6 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 6 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 8 \end{pmatrix} \quad . \tag{6.149}$$

Le facteur de structure $\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ itère la dépendance en polarisation du processus élémentaire de diffusion. Il est solution de l'équation intégrale (fig. 6.6) :

$$\boxed{\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{q}) = \gamma_e\ b_{\alpha\beta,\gamma\delta} + \sum_{\mu,\nu} \Gamma_{\alpha\beta,\mu\nu}(\boldsymbol{q})\ b_{\mu\nu,\gamma\delta}\ w(\boldsymbol{q})} \tag{6.150}$$

où la fonction $w(\boldsymbol{q})$ se déduit simplement de (6.102), en remplaçant τ_e par τ_{pol}, c'est-à-dire

$$w(\boldsymbol{q}) = \frac{\tau_{pol}}{\tau_e}(1 - Dq^2\tau_{pol}) = \frac{3}{2}(1 - Dq^2\tau_{pol}) \tag{6.151}$$

avec un nouveau coefficient de diffusion

$$D = \frac{1}{3}cl_{pol} = \frac{1}{3}c^2\tau_{pol} \quad . \tag{6.152}$$

Pour résoudre cette équation intégrale, il faut d'abord diagonaliser le tenseur $b_{\alpha\beta,\gamma\delta}$, c'est-à-dire la matrice (6.149). Celle-ci a trois valeurs propres que l'on peut classer selon les valeurs du spin total notées $k = 0, 1$ ou 2 :

$$\begin{aligned} b_{(k=0)} &= 2/3 \\ b_{(k=1)} &= 1/3 \\ b_{(k=2)} &= 7/15 \quad . \end{aligned} \tag{6.153}$$

Leur dégénérescence est égale à $2k+1$ c'est-à-dire respectivement $1, 3$ et 5. Les vecteurs propres correspondant sont donnés par

$$
\begin{aligned}
b_0 = \frac{2}{3} \quad &\longrightarrow \quad \left\{ \frac{1}{\sqrt{3}}(|xx\rangle + |yy\rangle + \ |zz\rangle) \right. \\
b_1 = \frac{1}{3} \quad &\longrightarrow \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}(|xy\rangle - |yx\rangle) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|xz\rangle - |zx\rangle) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|yz\rangle - |zy\rangle) \end{array} \right. \\
b_2 = \frac{7}{15} \quad &\longrightarrow \quad \left\{ \begin{array}{l} \frac{1}{\sqrt{2}}(|xy\rangle + |yx\rangle) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|xz\rangle + |zx\rangle) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|yz\rangle + |zy\rangle) \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|xx\rangle - |yy\rangle) \\ \frac{1}{\sqrt{6}}(|xx\rangle + |yy\rangle - 2|zz\rangle) \end{array} \right. .
\end{aligned}
\tag{6.154}
$$

En effectuant le changement de base (remarque de la p. 242), on obtient

$$
\boxed{b_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \frac{1}{2}(b_1 + b_2)\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \frac{1}{3}(b_0 - b_2)\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \frac{1}{2}(-b_1 + b_2)\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}}
\tag{6.155}
$$

Ce tenseur est le produit de deux tenseurs d'ordre 2 construits dans un espace de dimension 3 associé à la polarisation. Il est donc réductible et se décompose en la somme de ses composantes irréductibles $3 \otimes 3 = 1 \oplus 3 \oplus 5$ contenant respectivement $1, 3$ et 5 éléments indépendants :

$$
b_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \langle M_{\alpha\gamma} M_{\beta\delta} \rangle = \sum_{k=0}^{2} b_k \, T^{(k)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} \quad . \tag{6.156}
$$

Cette décomposition fait apparaître les trois tenseurs de base : scalaire, antisymétrique et symétrique de trace nulle :

$$
\begin{aligned}
T^{(0)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} &= \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} \\
T^{(1)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} &= \frac{1}{2}\left[\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} - \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}\right] \\
T^{(2)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} &= \frac{1}{2}\left[\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}\right] - \frac{1}{3}\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} \quad .
\end{aligned}
\tag{6.157}
$$

Dans chaque sous-espace propre, la diagonalisation de l'équation intégrale (6.150) est immédiate, puisqu'elle se réduit à l'équation scalaire :

$$\Gamma_k(\boldsymbol{q}) = \gamma_e \; b_k + \Gamma_k(\boldsymbol{q}) \; b_k \; w(\boldsymbol{q}) \quad . \tag{6.158}$$

On obtient ainsi les trois modes distincts

$$\boxed{\Gamma_k = \frac{\gamma_{pol}/\tau_{pol}}{1/\tau_k + Dq^2}} \tag{6.159}$$

caractérisés par les temps

$$\tau_k = \tau_{pol} \frac{b_k}{2/3 - b_k} \tag{6.160}$$

où on a utilisé l'expression (6.144) du rapport τ_{pol}/τ_e. De (6.153), on déduit l'expression des modes propres

$$\Gamma_0(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_{pol}/\tau_{pol}}{Dq^2} \quad \Gamma_1(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_{pol}/\tau_{pol}}{Dq^2 + \frac{1}{\tau_{pol}}} \quad \Gamma_2(\boldsymbol{q}) = \frac{\gamma_{pol}/\tau_{pol}}{Dq^2 + \frac{3}{7\tau_{pol}}} \quad . \tag{6.161}$$

On note que le mode Γ_0 coïncide [17] avec le mode scalaire obtenu en l'absence de polarisation. C'est le mode de Goldstone décrivant la conservation de l'énergie. Par contre – en rétablissant la fréquence – les deux autres modes sont caractérisés par des pôles de la forme $-i\omega + Dq^2 + 1/\tau_k$. En prenant la transformée de Fourier temporelle, ce résultat implique une atténuation exponentielle de leur contribution avec des temps caractéristiques τ_1 et τ_2 de l'ordre du temps de collision moyen τ_{pol}. Le facteur de structure $\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ s'écrit

$$\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \sum_{k=0}^{2} \Gamma_k \; T^{(k)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \Gamma_0 T^{(0)} + \Gamma_1 T^{(1)} + \Gamma_2 T^{(2)} \quad , \tag{6.162}$$

ce qui, compte tenu de (6.157) s'écrit aussi

$$\boxed{\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{2}(\Gamma_1 + \Gamma_2)\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \frac{1}{3}(\Gamma_0 - \Gamma_2)\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \frac{1}{2}(-\Gamma_1 + \Gamma_2)\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}} \tag{6.163}$$

6.6.3 Intensité classique

L'intensité diffusée est obtenue en appariant deux amplitudes de collisions multiples correspondant aux mêmes états initiaux ($\alpha\alpha$) et finaux ($\beta\beta$) de

[17] À la substitution $l_e \to l_{pol}$ près.

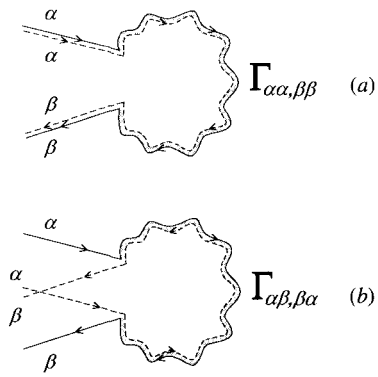


FIG. 6.9 – *L'intensité classique (a) et la contribution de rétrodiffusion cohérente (b) font intervenir deux contractions différentes du tenseur associé au facteur de structure.*

polarisation (fig. 6.9.a). Elle résulte donc d'un vertex élémentaire de la forme

$$b_{\alpha\alpha,\beta\beta} = (\delta_{\alpha\beta} - \hat{k}'_\alpha \hat{k}'_\beta)\ (\delta_{\alpha\beta} - \hat{k}'_\alpha \hat{k}'_\beta) \quad . \tag{6.164}$$

Bien que ce tenseur soit également d'ordre 4, il suffit pour avoir ses modes propres, de se ramener au sous-espace décrit par la matrice

$$\frac{1}{15}\begin{pmatrix} 8 & 1 & 1 \\ 1 & 8 & 1 \\ 1 & 1 & 8 \end{pmatrix} \tag{6.165}$$

extraite de (6.149). Ses valeurs propres sont b_0 et b_2 (doublement dégénérée) et les vecteurs propres correspondants sont

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\sqrt{3}}(|xx\rangle + |yy\rangle + |zz\rangle) \\ &\frac{1}{\sqrt{2}}(|xx\rangle - |zz\rangle) \\ &\frac{1}{\sqrt{6}}(|xx\rangle + |yy\rangle - 2|zz\rangle) \quad . \end{aligned} \tag{6.166}$$

Dans les canaux de polarisation parallèle, c'est-à-dire lorsque la lumière émergente est analysée dans la même direction de polarisation que la lumière incidente, l'intensité mesurée est proportionnelle à

$$\Gamma_{\alpha\alpha,\alpha\alpha} = \frac{1}{3}(\Gamma_0 + 2\Gamma_2) \quad . \tag{6.167}$$

Dans les canaux de polarisation perpendiculaire ($\alpha \neq \beta$), l'intensité mesurée est proportionnelle à

$$\Gamma_{\alpha\alpha,\beta\beta} = \frac{1}{3}(\Gamma_0 - \Gamma_2) \quad . \tag{6.168}$$

Le mode Γ_2 est rapidement atténué, et il ne reste dans ces deux cas que la contribution du mode scalaire Γ_0 réduit d'un tiers dans chaque canal du fait de la dépolarisation de la lumière incidente. Par conséquent, *l'intensité mesurée est la même dans tous les canaux de polarisation.*

Notons que la conservation de la probabilité s'exprime par

$$\sum_{\beta} \Gamma_{\alpha\alpha,\beta\beta} = \Gamma_0 \quad . \tag{6.169}$$

6.6.4 Rétrodiffusion cohérente

Dans les canaux de polarisation parallèle, le facteur de structure associé au cooperon est identique à celui du diffuson : ne contribue de manière significative que le mode scalaire Γ_0 réduit d'un tiers. La polarisation ne change donc pas la contribution relative du diffuson et du cooperon.

Par contre, dans les canaux de polarisation perpendiculaire ($\alpha \neq \beta$), la contribution du cooperon à la rétrodiffusion cohérente est proportionnelle à (fig. 6.9.*b*)

$$\Gamma_{\alpha\beta,\beta\alpha} = \frac{\Gamma_2 - \Gamma_1}{2} \quad . \tag{6.170}$$

Ces deux modes sont très rapidement atténués, et la contribution du cooperon analysée dans un canal de polarisation perpendiculaire disparaît.

Remarque : Diffuseurs de taille finie

On peut aisément étendre l'approche précédente à la diffusion du type Rayleigh-Gans (voir l'exercice 2.3) puisqu'à cette approximation il suffit de remplacer la relation (6.138) par

$$\boldsymbol{P}' = M(\hat{\boldsymbol{k}}')s(\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k})\boldsymbol{P} \tag{6.171}$$

où $s(\boldsymbol{k}' - \boldsymbol{k})$ est une fonction scalaire qui décrit le facteur de forme (2.130) du diffuseur. Dans ce cas la diffusion devient anisotrope, il apparaît un autre temps caractéristique, le temps de transport (complément C4.3).

En revanche, pour la diffusion de Mie, cette approche devient inopérante puisque la polarisation $\boldsymbol{P}'$ dépend de $\boldsymbol{k}$ et de $\boldsymbol{k}'$. Cependant, il est à noter que, pour des diffuseurs de Mie sphériques, on garde malgré tout la propriété importante que dans les canaux de polarisation parallèles, la polarisation ne change pas la contribution relative du diffuson et du cooperon. Pour s'en convaincre, on note que dans la section efficace différentielle associée à un événement de collision, les composantes de la polarisation parallèle et perpendiculaire au plan de diffusion sont multipliées par des facteurs qui ne dépendent que de l'angle entre $\boldsymbol{k}$ et $\boldsymbol{k}'$ et qui restent donc inchangés pour la séquence renversée dans le temps.

6.7 Déphasage associé au mouvement des diffuseurs

Nous venons de voir, sur plusieurs exemples, comment la diffusion multiple cohérente décrite par le cooperon est modifiée du fait du couplage d'une onde,

ou d'un électron à un champ extérieur, ou en présence de degrés de liberté supplémentaires. On étudie maintenant le déphasage induit par le mouvement des diffuseurs. Pour cela, on considère un milieu contenant des diffuseurs aléatoires et indépendants, que nous avons supposés fixes dans les chapitres 3 et 4. Cette hypothèse est justifiée dans le cas de la diffusion électronique, par contre elle ne l'est généralement pas dans le cas de la propagation des ondes électromagnétiques dans les milieux diffusants. Ces derniers sont constitués de diffuseurs qui effectuent un mouvement brownien dans le liquide environnant. Dans quelle mesure peut-on encore supposer que les diffuseurs sont fixes ? Pour cela il faut que, pendant le temps t mis par l'onde pour traverser le milieu diffusant, ceux-ci se déplacent d'une distance inférieure à la longueur d'onde λ du rayonnement. Autrement dit le temps τ_b, mis par un diffuseur brownien pour parcourir une distance de l'ordre de λ, doit être inférieur à t. Pour des ondes électromagnétiques se propageant dans des suspensions, on a $t = n\tau_e$ où $n \simeq 10^3$ est, en pratique, le nombre de collisions que subit l'onde avant d'émerger du milieu. En prenant $\tau_e \simeq 6.10^{-14}$ s, on a $t \simeq 6.10^{-11}$ s, tandis que τ_b qui s'exprime en fonction de la constante de diffusion D_b des diffuseurs est de l'ordre de $\tau_b \simeq \frac{\lambda^2}{D_b} \simeq 1$ ms. Donc le temps de vol associé à la lumière pour effectuer un chemin de diffusion multiple est négligeable devant le temps nécessaire pour modifier la longueur de ce chemin d'une distance λ. Il est alors tout à fait justifié de considérer des centres diffuseurs statiques.

Par contre, la question de la dynamique des diffuseurs devient tout à fait pertinente si on considère la corrélation temporelle entre des champs électriques $E(T)$ et $E^*(0)$ correspondant à des impulsions lumineuses émises à un intervalle de temps T suffisamment long [125–127]. Dans ce cas, les diffuseurs ont bougé chacun d'une certaine distance et la fonction de corrélation temporelle $G_1(T)$ entre ces champs est une mesure du déphasage entre les deux trajectoires représentées sur la figure 6.10. Dans ce qui suit, nous allons évaluer ce déphasage et montrer que la fonction de corrélation $G_1(T)$ s'obtient à partir de l'expression du diffuson établie dans le chapitre 4, affectée d'un terme de phase qui décrit l'effet du mouvement des diffuseurs.

6.7.1 Expression du déphasage

On considère le champ électrique associé à une onde électromagnétique scalaire, solution de l'équation (2.9). La fonction de corrélation temporelle $G_1(\boldsymbol{r}, T)$ du champ électrique est définie par

$$G_1(\boldsymbol{r}, T) = \frac{\langle E(\boldsymbol{r}, T) E^*(\boldsymbol{r}, 0)\rangle}{\langle |E(\boldsymbol{r}, 0)|^2\rangle} \quad , \tag{6.172}$$

où le champ $E(\boldsymbol{r}, T)$ est solution de l'équation de Helmholtz (3.57) avec une source que l'on situera en $\boldsymbol{r}_0$. Les trains d'onde qui se propagent respectivement aux instants 0 et T sont diffusés par des configurations statiques distinctes des diffuseurs. Le temps T joue donc ici le rôle d'un paramètre et ne rend pas compte du comportement temporel du champ. La notation $\langle \cdots \rangle$

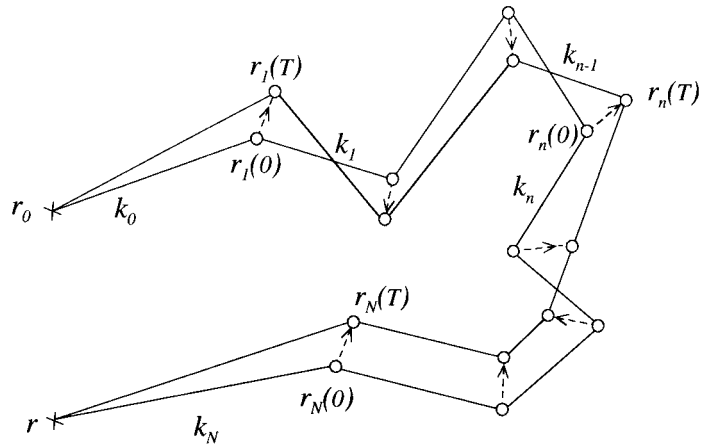


FIG. 6.10 – *Lors du mouvement des diffuseurs impliqués dans une séquence de collisions multiples, l'amplitude complexe de l'onde est modifiée. Dans cette représentation, on suppose que l'on peut ainsi déformer continûment la trajectoire, c'est-à-dire que les configurations* $\{\boldsymbol{r}_1(0), \cdots, \boldsymbol{r}_N(0)\}$ *et* $\{\boldsymbol{r}_1(T), \cdots, \boldsymbol{r}_N(T)\}$ *appartiennent à l'ensemble des configurations de désordre. Ceci résulte de l'hypothèse que l'ensemble statistique des séquences de collisions est indépendant du temps.*

décrit une moyenne prise à la fois sur tous les chemins de diffusion possibles dans le milieu ainsi que sur le mouvement aléatoire des diffuseurs dont on décrira plus loin les caractéristiques.

Rappelons que pour $T = 0$, c'est-à-dire lorsque les configurations de diffuseurs sont identiques, la fonction de corrélation $\langle |E(\boldsymbol{r}, 0)|^2 \rangle$ est reliée à l'intensité, c'est-à-dire à la probabilité [18] $P(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}, \omega = 0)$, par la relation (4.55)

$$\langle |E(\boldsymbol{r}, 0)|^2 \rangle = \frac{c}{4\pi} P(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}, \omega = 0) = \frac{c}{4\pi} \int_0^\infty P(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}, t) dt \quad . \tag{6.173}$$

Pour des configurations différentes de diffuseurs aux instants 0 et T, la fonction de corrélation a maintenant la forme

$$\langle E(\boldsymbol{r}, T) E^*(\boldsymbol{r}, 0) \rangle = \frac{c}{4\pi} \int_0^\infty P(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}, t) \left\langle e^{i[\phi(t,T) - \phi(t,0)]} \right\rangle dt \tag{6.174}$$

où $\phi(t, T)$ et $\phi(t, 0)$ sont les phases associées aux configurations des diffuseurs aux temps 0 et T. On cherche ici à déterminer le déphasage associé au mouvement des diffuseurs.

Dans l'approximation des collisions indépendantes (chap. 3), on peut écrire le champ électrique [19] comme la superposition des amplitudes associées à

[18] Ici P est donnée par l'expression générale (4.9) valable au-delà de l'approximation de diffusion.

[19] C'est une fonction de Green telle que celle donnée par la relation (4.21).

toutes les séquences $\mathcal{C}_N = (\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, ...\boldsymbol{r}_N)$ de collisions soit

$$E(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}, T) = \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\mathcal{C}_N} |A(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}, \mathcal{C}_N(T))| e^{i\phi_N(T)} \tag{6.175}$$

où la somme est prise sur toutes les trajectoires possibles, c'est-à-dire à la fois sur toutes les longueurs des séquences de collisions et sur les positions possibles des diffuseurs. La fonction de corrélation $\langle E(\boldsymbol{r}, T) E^*(\boldsymbol{r}, 0)\rangle$ peut donc s'écrire [20]

$$\langle E(\boldsymbol{r}, T) E^*(\boldsymbol{r}, 0)\rangle = \sum_{N,N'} \sum_{\mathcal{C}_N, \mathcal{C}_{N'}} \left\langle |A(\boldsymbol{r}, \mathcal{C}_N(T)) A^*(\boldsymbol{r}, \mathcal{C}_{N'}(0))| e^{i(\phi_N(T) - \phi_{N'}(0))} \right\rangle \quad . \tag{6.176}$$

On suppose maintenant que l'ensemble des séquences de collisions possibles est indépendant du temps, c'est-à-dire du mouvement des diffuseurs. On verra dans la section 8.8 que cette hypothèse d'ergodicité est expérimentalement justifiée. Les amplitudes A sont donc des variables aléatoires stationnaires et indépendantes des phases $\phi_N(T)$. On peut alors découpler la moyenne sur les amplitudes de celle sur les phases et récrire la relation précédente sous la forme

$$\langle E(\boldsymbol{r}, T) E^*(\boldsymbol{r}, 0)\rangle = \sum_{N,N'} \sum_{\mathcal{C}_N, \mathcal{C}_{N'}} \langle |A(\boldsymbol{r}, \mathcal{C}_N(T)) A^*(\boldsymbol{r}, \mathcal{C}_{N'}(0))|\rangle \left\langle e^{i(\phi_N(T) - \phi_{N'}(0))} \right\rangle \quad . \tag{6.177}$$

Il nous faut maintenant évaluer le terme de phase. Pour une séquence de collisions $\mathcal{C}_N = (\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, ...\boldsymbol{r}_N)$ et pour une onde scalaire dans l'approximation des collisions indépendantes, la phase est donnée par

$$\phi_N(T) = -\sum_{n=1}^{N} (\boldsymbol{k}_n - \boldsymbol{k}_{n-1}).\boldsymbol{r}_n(T) - \boldsymbol{k}_0.\boldsymbol{r}_0 + \boldsymbol{k}_N.\boldsymbol{r} \tag{6.178}$$

où les vecteurs d'onde $\boldsymbol{k}_0$ et $\boldsymbol{k}_N$ décrivent respectivement les ondes incidente et émergente pour cette séquence de collisions. Afin de calculer la différence de phase $\Delta\phi_N(T) = \phi_N(T) - \phi_N(0)$, on suppose de plus que le mouvement des centres diffuseurs est suffisamment lent pour qu'après le temps T on puisse négliger le changement de direction des vecteurs d'onde (qui est du second ordre) de telle sorte que

$$\Delta\phi_N(T) = -\sum_{n=1}^{N} (\boldsymbol{k}_n - \boldsymbol{k}_{n-1}).\Delta\boldsymbol{r}_n(T) \tag{6.179}$$

[20] Afin d'alléger les notations, nous ne spécifierons plus la position de la source en $\boldsymbol{r}_0$.

avec $\Delta \boldsymbol{r}_n(T) = \boldsymbol{r}_n(T) - \boldsymbol{r}_n(0)$. Pour des collisions élastiques, le module $k = |\boldsymbol{k}|$ est conservé et on pose $\boldsymbol{k}_n = k\hat{\boldsymbol{e}}_n$ où $\hat{\boldsymbol{e}}_n$ est un vecteur unitaire :

$$\Delta\phi_N(T) = -k\sum_{n=1}^{N}(\hat{\boldsymbol{e}}_n - \hat{\boldsymbol{e}}_{n-1}).\Delta\boldsymbol{r}_n(T) \quad . \tag{6.180}$$

À chaque collision, on peut donc associer un déphasage

$$\Delta\varphi(n,T) = -k(\hat{\boldsymbol{e}}_n - \hat{\boldsymbol{e}}_{n-1}).\Delta\boldsymbol{r}_n(T) \quad . \tag{6.181}$$

6.7.2 Déphasage associé à un mouvement brownien des diffuseurs

Afin d'estimer la moyenne du facteur de phase dans la relation (6.177), on suppose que les diffuseurs sont indépendants et que leur mouvement est brownien avec la loi de distribution [21] :

$$\mathcal{P}(\Delta\boldsymbol{r}_n, T) = \left(\frac{1}{4\pi D_b T}\right)^{d/2} e^{-\Delta\boldsymbol{r}_n^2/4D_bT} \quad . \tag{6.182}$$

On évalue d'abord la moyenne sur la position des diffuseurs. Puisqu'ils sont indépendants, on effectue la moyenne pour chacun d'entre eux. Cette moyenne s'écrit :

$$\begin{aligned} b(T) = \left\langle e^{i\Delta\varphi(n,T)}\right\rangle_{\Delta\boldsymbol{r}_n(T)} &= \int d\boldsymbol{r} e^{-i\boldsymbol{q}_n.\boldsymbol{r}}\left(\frac{1}{4\pi D_b T}\right)^{d/2} e^{-\boldsymbol{r}^2/4D_bT} \\ &= e^{-D_b q_n^2 T} \end{aligned} \tag{6.183}$$

où $\boldsymbol{q}_n = k(\hat{\boldsymbol{e}}_n - \hat{\boldsymbol{e}}_{n-1})$ de telle sorte que $q_n^2 = 4k^2\sin^2(\theta_n/2)$ avec $\theta_n = (\hat{\boldsymbol{e}}_n, \hat{\boldsymbol{e}}_{n-1})$. Il reste à moyenner sur la direction des ondes diffusées, c'est-à-dire à calculer

$$b(T) = \left\langle e^{-D_b q^2 T}\right\rangle = \frac{1}{2}\int_0^\pi d\theta \sin\theta e^{-4D_b k^2 T \sin^2\frac{\theta}{2}} \tag{6.184}$$

c'est-à-dire, après intégration [126] :

$$b(T) = \frac{\tau_b}{T}(1 - e^{-T/\tau_b}) \quad . \tag{6.185}$$

Le temps

$$\boxed{\tau_b = 1/4D_b k^2} \tag{6.186}$$

[21] On prendra garde à ne pas confondre la constante de diffusion D_b des diffuseurs avec la constante D qui décrit la diffusion des ondes.

est le temps caractéristique pour qu'un diffuseur se déplace d'une longueur de l'ordre de λ. La fonction $b(T)$ est très bien décrite par la forme exponentielle plus simple que nous utiliserons dorénavant

$$b(T) \simeq e^{-T/2\tau_b} \quad . \tag{6.187}$$

En utilisant (6.12) et (6.7), on obtient le facteur de structure dans la limite diffusive et à fréquence nulle. De la relation (4.37), on déduit l'expression de la probabilité $P_d(\boldsymbol{q})$:

$$P_d(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{\frac{1-b}{b}\frac{1}{\tau_e} + Dq^2} \quad . \tag{6.188}$$

Le pôle de diffusion apparaît donc avec un temps de coupure

$$\tau_\gamma(T) = \tau_e \frac{b(T)}{1-b(T)} \quad . \tag{6.189}$$

On voit que l'effet du déphasage consiste à introduire un pôle à une valeur finie de q. En d'autres termes, le déphasage conduit à la disparition du mode zéro discuté dans la section 5.5.3. Dans la limite des temps courts $T \leq \tau_b$, on a $b(T) \simeq 1 - T/2\tau_b$, c'est-à-dire

$$\boxed{\tau_\gamma = \tau_e \frac{2\tau_b}{T}} \tag{6.190}$$

Une transformation de Fourier de la relation (6.188) conduit finalement à

$$\frac{4\pi}{c}\langle E(\boldsymbol{r},T)E^*(\boldsymbol{r},0)\rangle = \frac{1}{4\pi Dr} e^{-\frac{r}{l_e}\sqrt{\frac{3T}{2\tau_b}}} \quad . \tag{6.191}$$

Pour $T = 0$, on retrouve l'intensité (4.67) au point $\boldsymbol{r}$. La fonction de corrélation temporelle $G_1(\boldsymbol{r},t)$ définie par (6.172) est donnée par

$$\boxed{G_1(\boldsymbol{r},T) = e^{-\frac{r}{l_e}\sqrt{\frac{3T}{2\tau_b}}}} \tag{6.192}$$

La dépendance temporelle de cette fonction de corrélation est une exponentielle étirée, un comportement très différent du résultat obtenu dans le cas de la diffusion simple par des diffuseurs browniens (section 9.3).

Notons, à nouveau, que la fonction de corrélation des champs mesure la transformée de Laplace de la probabilité. En effet, elle est de la forme

$$\frac{4\pi}{c}\langle E(\boldsymbol{r},T)E^*(\boldsymbol{r},0)\rangle = \int_0^\infty P(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r},t)e^{-t/\tau_\gamma}dt = P_\gamma(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}) \quad . \tag{6.193}$$

Le facteur exponentiel est bien la moyenne d'un facteur de phase, annoncé dans la relation (6.174) et le temps caractéristique $\tau_\gamma = 2\tau_e\tau_b/T$ a été obtenu

à partir d'une description microscopique du mouvement des impuretés. Enfin, la fonction de corrélation dynamique $G_1(\boldsymbol{r}, T)$ apparaît comme une mesure du rapport

$$G_1(\boldsymbol{r}, T) = \frac{P_\gamma(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r})}{P_{\gamma=0}(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r})} \quad . \tag{6.194}$$

6.8 Déphasage ou décohérence ?

Dans les exemples traités dans ce chapitre, il est apparu que l'effet d'un déphasage sur la diffusion multiple (cooperon ou diffuson) revient à modifier la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t)$, de telle sorte que

$$Z(t, X) = Z(t) \left\langle e^{i\Delta\phi(t,X)} \right\rangle \quad . \tag{6.195}$$

La phase $\Delta\phi(t, X)$ dépend des paramètres physiques X à l'origine du déphasage. Il en résulte, en général, pour $\left\langle e^{i\Delta\phi(t,X)} \right\rangle$ un comportement exponentiellement décroissant avec un temps caractéristique dit *temps de déphasage ou de cohérence de phase.*

Le déphasage est dû à la présence de degrés de liberté additionnels qu'il est possible de répartir en trois classes :

• Degrés de liberté de l'onde qui diffuse : spin de l'électron et polarisation des photons.

• Degrés de liberté des diffuseurs : spin des impuretés magnétiques, diffuseurs en mouvement, degrés de liberté quantiques internes (complément C6.5).

• Champ extérieur : champ magnétique uniforme, flux Aharonov-Bohm, champ électromagnétique fluctuant (complément C6.3 et section 13.7.2).

Dans quel cas parle-t-on de *déphasage* ou de *décohérence* ? Bien que ces deux notions soient le plus souvent confondues, on peut tenter ici une classification.

On réservera le mot de décohérence lorsque le déphasage est lié à la notion d'*irréversibilité.* Ainsi un déphasage, comme celui associé à un champ magnétique, modifie la figure d'interférence, mais n'induit pas de décohérence [22]. De même, la dépolarisation de la lumière ou l'effet du couplage spin-orbite sur le spin des électrons sont caractérisés par une réduction des effets d'interférence, mais sans impliquer une quelconque irréversibilité.

[22] Selon la géométrie, l'effet du champ magnétique est très différent. Ainsi pour un anneau, le champ modifie le terme d'interférence mais ne le réduit pas. En revanche, dans le cas d'un plan, le champ réduit le terme d'interférence à cause de la moyenne sur les trajectoires de diffusion. Cette différence peut se décrire en terme de *contraste*, rapport des contributions quantique et classique. On voit sur cet exemple que la notion de contraste est indépendante de celle de décohérence.

Dans le cas où le déphasage résulte de l'interaction de l'onde avec des degrés de liberté associés aux diffuseurs, il apparaît une nouvelle notion essentielle liée à l'*irréversibilité* du déphasage mis en jeu. Ces degrés de liberté externes à l'électron ou à l'onde électromagnétique ne sont pas contrôlés par l'expérimentateur. Ce manque d'information conduit alors à moyenner le vertex élémentaire d'interaction sur ces degrés de liberté. C'est cette moyenne qui introduit l'irréversibilité associée à la notion de décohérence. Par exemple, dans le cas des impuretés magnétiques, on moyenne le vertex élémentaire sur le spin des impuretés. Pour les atomes froids, on effectue la trace sur les sous-états Zeeman, avec une matrice densité convenablement choisie. Pour les diffuseurs en mouvement brownien, on moyenne sur la position de ces diffuseurs. Enfin, pour un champ électromagnétique fluctuant, on moyenne sur les fluctuations thermiques du champ. Chacune de ces moyennes traduit un manque d'information qui conduit à l'irréversibilité [23]. Par contre, le déphasage associé à la dépolarisation ou au couplage spin-orbite n'implique pas de moyenne sur des degrés de liberté extérieurs et donc pas d'irréversibilité (dans ce cas, le degré de liberté additionnel, polarisation ou spin, est attaché à l'onde qui diffuse et non à l'environnement).

On utilisera le mot décohérence, lorsque l'environnement est décrit par une moyenne statistique sur des degrés de liberté non contrôlés ou non mesurés. On parlera dans ce cas de *temps de cohérence de phase* que l'on notera τ_ϕ et on gardera la notation τ_γ pour les temps de déphasage qui n'impliquent pas de décohérence (tableau 6.11).

Temps de déphasage τ_γ	Temps de cohérence de phase τ_ϕ
Champ B : τ_B Spin-orbite : $3\tau_{so}/4$ (S=1)	Interaction coulombienne : $\tau_{ee}^{\phi}(T)$ Impuretés magnétiques : $3\tau_m/2$ (S=0) $\tau_m/2$ (S=1) Phonons : $\tau_{ph}(T)$
Polarisation Mvt. déterministe des diffuseurs	Dégénérescence Zeeman des atomes Mvt. non déterministe des diffuseurs

FIG. 6.11 – *On a regroupé différentes expressions du temps de déphasage τ_γ et du temps de cohérence de phase τ_ϕ correspondant à différents mécanismes de déphasage pour les électrons ou les photons.*

[23] Lorsque l'environnement est quantique, cela implique un changement d'état de cet environnement [128].

Complément C6.1 Effet Aharonov-Bohm dans un plan infini

Dans la section 6.4, nous avons étudié la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t, \phi)$ pour un anneau et un cylindre traversés par un flux magnétique Aharonov-Bohm $\phi = \varphi\phi_0$. Ces géométries sont caractérisées par un spectre de fréquences propres E_n qui dépendent du flux.

Dans ce complément, on calcule $Z(t, \phi)$ pour le cas d'un plan infini percé en un point par une ligne de flux Aharonov-Bohm [107]. À première vue, ce problème peut paraître académique puisque les géométries étudiées expérimentalement étant multiplement connexes, on peut toujours se ramener aux cas de l'anneau ou du cylindre. On verra cependant un exemple (section 7.6.4) pour lequel ce cas correspond à la bonne géométrie.

L'étude du plan infini percé par une ligne de flux a aussi un interêt pédagogique et méthodologique. Ce problème apparaît dans d'autres branches de la physique (mécanique quantique, théorie des champs, physique des polymères, etc.). La raison en est que la fonction $Z(t)$ associée a une dépendance particulière en fonction du flux qui découle de considérations topologiques. En effet, on pourrait faire *a priori* le raisonnement suivant. Pour la géométrie du plan infini, le spectre des modes propres de l'équation de diffusion est un continuum identique à celui du plan sans la ligne de flux, puisque celle-ci n'induit aucune force : le champ magnétique est nul partout, sauf au point exclu où la ligne traverse le plan. Si les spectres sont identiques, alors la probabilité $Z(t)$ est indépendante du flux et elle donnée par $S/4\pi Dt$, où S est la surface. On montre ici que ce résultat est incorrect.

Considérons un champ magnétique $B = \phi\delta(\boldsymbol{r})$ concentré en un seul point du plan[24] et décrit par le potentiel vecteur

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \frac{\phi}{2\pi r}\hat{\boldsymbol{e}}_\theta \tag{6.196}$$

où $\boldsymbol{e}_\theta$ est le vecteur unitaire azimuthal et ϕ le flux magnétique associé. La force de Lorentz s'exercant sur les électrons est donc identiquement nulle.

Tout comme dans le cas du champ uniforme, on peut chercher les valeurs propres et les fonctions propres du problème de Schrödinger équivalent. Les solutions normalisables de l'équation (6.34) sont

$$\psi_n(q, \boldsymbol{r}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} e^{in\theta} J_{|n-2\varphi|}(qr) \tag{6.197}$$

où $n \in \mathbb{Z}$ est le moment angulaire, q est un vecteur d'onde et $J_\alpha(x)$ est la fonction de Bessel de première espèce d'indice réel.

[24] La fonction δ est bidimensionnelle.

La probabilité $P_\varphi(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}, t)$ en présence du flux est donnée par la relation (5.2) qui s'écrit, en utilisant les fonctions propres (6.197),

$$P_\varphi(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}, t) = \int_0^\infty \frac{qdq}{2\pi} \sum_{n\in\mathbb{Z}} J_{|n-2\varphi|}(qr) J_{|n-2\varphi|}(qr_0) e^{in(\theta-\theta_0)} e^{-Dq^2 t} \quad . \tag{6.198}$$

En intégrant sur q, on obtient [25]

$$P_\varphi(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{4\pi Dt} e^{-\frac{r^2+r_0^2}{4Dt}} \sum_{n\in\mathbb{Z}} e^{in(\theta-\theta_0)} I_{|n-2\varphi|}\left(\frac{rr_0}{2Dt}\right) \tag{6.199}$$

où I est une fonction de Bessel modifiée. La probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t, \phi)$ est donnée par

$$\begin{aligned} Z(t,\phi) &= \int d\boldsymbol{r} P_\varphi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t) \\ &= \int_0^\infty dr \frac{r}{2Dt} e^{-r^2/2Dt} \sum_{n\in\mathbb{Z}} I_{|n-2\varphi|}\left(\frac{r^2}{2Dt}\right) \quad . \end{aligned} \tag{6.200}$$

En utilisant la relation de Poisson (15.95), on peut récrire

$$\sum_{n\in\mathbb{Z}} I_{|n-2\varphi|}\left(\frac{r^2}{2Dt}\right) = \sum_{m\in\mathbb{Z}} e^{-4i\pi m\varphi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\nu \;\; e^{2i\pi m\nu} I_{|\nu|}\left(\frac{r^2}{2Dt}\right) \tag{6.201}$$

où la somme sur m correspond maintenant à une description en terme de nombre d'enroulements. Afin d'évaluer $Z(t, \phi)$, on calcule la différence des fonctions de partition [26] :

$$\begin{aligned} &Z(t,\phi) - Z(t,0) = \\ &\quad \sum_{m\in\mathbb{Z}} \left(e^{-4i\pi m\varphi} - 1\right) \int_0^\infty dr \frac{r}{2Dt} e^{-r^2/2Dt} \int_{-\infty}^{+\infty} d\nu \;\; e^{2i\pi n\nu} I_{|\nu|}\left(\frac{r^2}{2Dt}\right) \quad . \end{aligned} \tag{6.202}$$

On intervertit les deux intégrales et on utilise le changement de variable

$$\int_0^\infty dr \frac{r}{2Dt} e^{-r^2/2Dt} I_{|\nu|}\left(\frac{r^2}{2Dt}\right) = \frac{1}{2} \int_0^\infty dx e^{-x} I_{|\nu|}(x) \tag{6.203}$$

de plus

$$\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\nu \;\; e^{2i\pi\nu m} \int_0^\infty dx e^{-x} I_{|\nu|}(x) = \frac{1}{4\pi^2 m^2} \tag{6.204}$$

[25] En utilisant (15.58), on vérifie que $P_{\varphi=0}(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}, t)$ est donné par son expression dans l'espace libre (5.19).

[26] Dans un volume infini, chacune des deux fonctions diverge (5.23).

lorsque $m \neq 0$. Il reste à évaluer la série [27]

$$Z(t,\phi) - Z(t,0) = \sum_{n\neq 0} \frac{e^{-4i\pi m\varphi} - 1}{4\pi^2 m^2} = -\frac{1}{\pi^2} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{\sin^2(2\pi n\varphi)}{n^2} = -\varphi(1-2\varphi) \tag{6.205}$$

Compte tenu de l'expression (5.23) pour $Z(t,0)$, on obtient finalement

$$\boxed{Z(t,\phi) = \frac{S}{4\pi Dt} - \varphi(1-2\varphi)} \tag{6.206}$$

pour $\varphi \in [0,1]$.

- Déterminant spectral et effet Aharonov-Bohm

Nous avons mentionné au début de ce complément que la distinction entre les fonctions $Z(t,\phi)$ et $Z(t,0)$ était d'origine topologique. Un argument en faveur de cette interprétation est que le terme associé au flux est indépendant du temps t. Nous avons en effet vu dans le complément C5.5 que l'existence d'un terme constant dans le développement asymptotique de Weyl pour $Z(t)$ correspond à la caractéristique d'Euler-Poincaré du domaine [28], qui est effectivement une caractéristique topologique du système. Celle-ci ne résulte pas de l'existence d'une échelle d'énergie caractéristique et ne peut donc que caractériser la nature des modes zéro (c'est-à-dire d'énergie nulle). C'est un résultat général qui découle de théorèmes puissants comme le théorème de l'indice [129] bien au-delà de nos considérations. Néanmoins, il est instructif de vérifier ce point dans le cas présent. Un terme constant dans la probabilité $Z(t)$ se traduit par une fonction $\delta(E)$ dans la densité d'états (complément C5.5). On obtient ainsi la densité d'états des modes de diffusion en présence d'une ligne de flux Aharonov-Bohm

$$\rho_\phi(E) - \rho_0(E) = -\varphi(1-2\varphi)\,\delta(E) \quad . \tag{6.207}$$

Cette expression fait bien apparaître l'identité des deux spectres de fréquence propres de l'équation de diffusion, excepté pour le mode zéro.

[27] Cette série de Fourier définit une fonction périodique de φ de période 1 qu'il suffit donc d'évaluer pour $0 \leq \varphi \leq 1$.

[28] Dans le cas d'un graphe fini, cette constante est égale à $\frac{V-B}{2}$, voir le complément C5.6 pour les notations.

Complément C6.2 Représentation fonctionnelle de l'équation de diffusion

C6.2.1 Représentation fonctionnelle

Dans la section 6.2, nous avons vu l'analogie qui existe entre l'équation de diffusion et l'équation de Schrödinger. On développe et on poursuit cette analogie afin d'obtenir une représentation fonctionnelle de l'équation de diffusion.

La fonction de Green G_0 associée à l'équation de Schrödinger pour une particule libre de charge q est solution de l'équation :

$$\left[-i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - \frac{\hbar^2}{2m}[\nabla_{\boldsymbol{r}'} - i\frac{q}{\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')]^2\right] G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t) = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta(t) \tag{6.208}$$

et elle admet la représentation fonctionnelle [130] :

$$G_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t) = \int_{\boldsymbol{r}(0)=\boldsymbol{r}}^{\boldsymbol{r}(t)=\boldsymbol{r}'} \mathcal{D}\{\boldsymbol{r}\}\ \exp\left(\frac{i}{\hbar}\int_0^t \mathcal{L}(\tau)d\tau\right) \tag{6.209}$$

où $\mathcal{L}$ est le lagrangien d'une particule libre dans un champ magnétique $\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{r},\dot{\boldsymbol{r}},t) = \frac{1}{2}m\dot{\boldsymbol{r}}^2 + q\dot{\boldsymbol{r}}.\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \quad . \tag{6.210}$$

Pour l'équation de diffusion, la probabilité $P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)$ associée au cooperon est solution de l'équation (relations 6.29 et 6.34) :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - D\left(\nabla_{\boldsymbol{r}'} + i\frac{2e}{\hbar}\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}')\right)^2\right] P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t) = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta(t) \tag{6.211}$$

où la charge de l'électron est notée $-e$. Cette solution peut s'écrire sous la forme fonctionnelle [130] :

$$P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t) = \int_{\boldsymbol{r}(0)=\boldsymbol{r}}^{\boldsymbol{r}(t)=\boldsymbol{r}'} \mathcal{D}\{\boldsymbol{r}\}\ \exp\left(-\int_0^t \mathcal{L}(\tau)d\tau\right) \tag{6.212}$$

avec [29]

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{r},\dot{\boldsymbol{r}},t) = \frac{\dot{\boldsymbol{r}}^2}{4D} + i\frac{2e}{\hbar}\dot{\boldsymbol{r}}.\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) \quad . \tag{6.213}$$

Dans un champ magnétique $\boldsymbol{B} = \nabla \times \boldsymbol{A}$ indépendant du temps, le noyau de la chaleur (5.5) s'exprime donc aussi à partir de la relation (6.212) et peut s'écrire

$$Z_c(t,B) = \oint \mathcal{D}\{\boldsymbol{r}\}\ \exp\left(-\int_0^t \mathcal{L}_0(\tau)d\tau\right)\exp\left(-i\frac{2e}{\hbar}\int_0^t \dot{\boldsymbol{r}}.\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})d\tau\right) \tag{6.214}$$

[29] Remarquer que ce lagrangien a les dimensions de l'inverse d'un temps.

où $\oint \mathcal{D}\{\boldsymbol{r}\} = \int d\boldsymbol{r} \int_{\boldsymbol{r}(0)=\boldsymbol{r}}^{\boldsymbol{r}(t)=\boldsymbol{r}} \mathcal{D}\{\boldsymbol{r}\}$ désigne l'intégrale sur toutes les trajectoires fermées et $\mathcal{L}_0 = \dot{\boldsymbol{r}}^2/4D$ est le lagrangien libre. La fonction $Z_c(t,B)$ se met sous la forme :

$$Z_c(t,B) = Z(t)\left\langle \exp\left(-i\frac{4\pi}{\phi_0}\int_0^t \dot{\boldsymbol{r}}.\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})d\tau\right)\right\rangle \tag{6.215}$$

où $Z(t)$ est la probabilité intégrée en champ nul et où $\langle\cdots\rangle$ est la valeur moyenne sur toutes les trajectoires fermées browniennes :

$$\langle\cdots\rangle = \frac{1}{Z(t)}\oint \mathcal{D}\{\boldsymbol{r}\}\ \cdots\ \exp\left(-\int_0^t \mathcal{L}_0(\tau)d\tau\right) \quad . \tag{6.216}$$

Dans le cas d'un champ uniforme l'utilisation de la jauge symétrique $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{2}\boldsymbol{B}\times\boldsymbol{r}$ permet d'obtenir pour $Z_c(t,B)$ la forme

$$\begin{aligned} Z_c(t,B) &= Z(t)\left\langle \exp\left(-i\frac{2\pi}{\phi_0}B\int_0^t \boldsymbol{r}\times d\boldsymbol{r}\right)\right\rangle \\ &= Z(t)\left\langle \exp\left(-i\frac{4\pi}{\phi_0}B\mathcal{A}(t)\right)\right\rangle \end{aligned} \tag{6.217}$$

où $\mathcal{A}(t) = \frac{1}{2}\int_0^t \boldsymbol{r}\times d\boldsymbol{r}$ est l'aire algébrique balayée par une trajectoire fermée de temps t.

C6.2.2 Lois contraintes pour le mouvement brownien et champ magnétique

L'expression (6.217) fait apparaître la fonction caractéristique d'une loi de diffusion contrainte. Plus généralement, pour une expression de la forme (6.3), la phase $\phi(t,X)$ qui dépend du mécanisme du déphasage peut s'interpréter directement comme une contrainte imposée par une caractéristique topologique ou géométrique de la loi de diffusion. Ainsi l'expression (6.217) permet de remonter à la distribution des aires limitées par des trajectoires browniennes. De même, le noyau de la chaleur pour le cas de l'anneau unidimensionnel permet de remonter à la distribution des nombres d'enroulements associés à un trajectoire brownienne sur un circuit fermé.

Les lois de diffusion contraintes ont été étudiées en détail dans la littérature et donnent lieu à une grande variété de comportements (loi de Lévy des aires algébriques, loi de Spitzer [131] pour les enroulements, etc.).

• Loi de Lévy des aires et champ uniforme

On veut déterminer la distribution $\mathcal{P}(\mathcal{A},t)$ de l'aire algébrique $\mathcal{A}$ contenue à l'intérieur d'une trajectoire plane brownienne fermée de temps t (fig. 6.12).

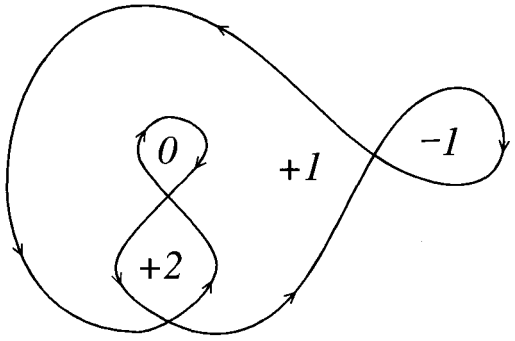


FIG. 6.12 – *Représentation d'une courbe brownienne fermée et de l'aire algébrique associée. Chaque secteur est caractérisé par un entier, son nombre d'enroulement. Le secteur 0 extérieur à la courbe a une aire infinie.*

Cette distribution de probabilité est donnée par [30]

$$\mathcal{P}(\mathcal{A},t) = \langle \delta[\mathcal{A} - \mathcal{A}(t)] \rangle = \frac{1}{2\pi} \int e^{ib\mathcal{A}} \langle e^{-ib\mathcal{A}(t)} \rangle db \quad , \tag{6.218}$$

expression qui permet de relier $\mathcal{P}(\mathcal{A},t)$ à la probabilité de retour à l'origine dans un champ magnétique uniforme $B = b\phi_0/4\pi$. En effet, d'après l'équation (6.217), on a

$$\langle e^{-ib\mathcal{A}(t)} \rangle = \frac{Z_c(t, b\phi_0/4\pi)}{Z(t)} \quad . \tag{6.219}$$

En utilisant la relation (6.41), on obtient

$$\langle e^{-ib\mathcal{A}(t)} \rangle = \frac{bDt}{\sinh(bDt)} \tag{6.220}$$

et la transformée de Fourier (6.218) conduit à

$$\mathcal{P}(\mathcal{A},t) = \frac{\pi}{4Dt} \frac{1}{\cosh^2 \frac{\pi \mathcal{A}}{2Dt}} \quad . \tag{6.221}$$

On obtient ainsi la loi de Lévy pour la distribution des aires à l'intérieur d'une trajectoire brownienne de temps t.

---

[30] Et inversement

$$\langle e^{-ib\mathcal{A}(t)} \rangle = \int \mathcal{P}(\mathcal{A},t) e^{-ib\mathcal{A}} d\mathcal{A} \quad .$$

• Distribution des enroulements sur un anneau

De la même façon, la distribution du nombre w d'enroulements sur un anneau est donnée par

$$\mathcal{P}(w,t) = \langle \delta[w - w(t)] \rangle = \frac{1}{2\pi} \int e^{ibw} \langle e^{-ibw(t)} \rangle db \tag{6.222}$$

et se déduit de l'expression du noyau de la chaleur $Z_c(t,\phi)$ pour le cas d'un flux Aharonov-Bohm. D'après l'équation (6.217), on a $b = 4\pi\phi/\phi_0$ et

$$\langle e^{-ibw(t)} \rangle = \frac{Z_c(t, \phi = b\phi_0/4\pi)}{Z(t)} \tag{6.223}$$

et de la relation (6.54), on obtient la distribution des enroulements :

$$\mathcal{P}(w,t) = \sum_m \frac{L}{\sqrt{4\pi D t}} e^{-\frac{m^2 L^2}{4Dt}} \delta(w - m) \quad . \tag{6.224}$$

• Flux Aharonov-Bohm dans un plan : le problème d'Edwards

Un autre exemple pour lequel il est possible de relier une loi de diffusion contrainte à une expression de la probabilité de retour est celui d'un flux Aharonov-Bohm traversant un plan infini.

On veut déterminer la distribution des enroulements autour d'un point O dans un plan infini (fig. 6.13). On note $\mathcal{P}(\theta,t)$ la distribution de probabilité pour l'angle θ balayé par une particule brownienne durant le temps t et repéré par rapport au point O. Ici, contrairement aux deux exemples précédents, il n'y pas invariance par translation, puisqu'un point particulier a été singularisé. Par conséquent, la distribution dépend aussi des points de départ $\boldsymbol{r}_0$

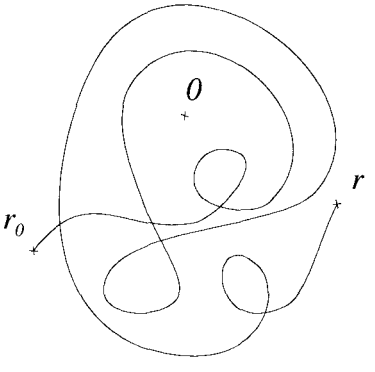


FIG. 6.13 – *Enroulements d'une trajectoire brownienne d'extrémités $\boldsymbol{r}_0$ et $\boldsymbol{r}$ autour du point O. On se limite ici au cas où $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_0$.*

et d'arrivée $\boldsymbol{r}$. On se limite au cas des trajectoires fermées, c'est-à-dire pour lesquelles $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}_0$ [31]. Par définition, la distribution $\mathcal{P}(\theta, t)$ s'écrit :

$$\mathcal{P}(\theta, t) = \langle \delta[\theta - \theta(t)] \rangle = \frac{1}{2\pi} \int e^{ib\theta} \langle e^{-ib\theta(t)} \rangle db \tag{6.225}$$

où $\theta(t) = \int_0^t d\tau d\theta/d\tau$ est l'angle balayé par la particule durant l'intervalle de temps $[0, t]$. La valeur moyenne $\langle e^{-ib\theta(t)} \rangle$ est prise sur l'ensemble des trajectoires browniennes fermées. C'est la fonction caractéristique associée à la loi contrainte : effectuer une trajectoire fermée avec un angle balayé $\theta(t)$. Cette fonction caractéristique est précisément celle qui intervient dans la probabilité $P(t, \varphi)$ d'effectuer une trajectoire fermée en présence d'un flux Aharonov-Bohm $\phi = \varphi\phi_0$. En effet, on peut écrire l'intégrale curviligne du potentiel vecteur sous la forme $\int \boldsymbol{A}.dl = \frac{\phi}{2\pi} \int_0^t \dot{\theta}(\tau) d\tau$. En vertu de la relation (6.212), la probabilité $P(t, \phi)$ peut s'écrire à partir de la représentation fonctionnelle :

$$\begin{aligned} P(t, \phi) &= \int_{\boldsymbol{r}(0)=\boldsymbol{r}_0}^{\boldsymbol{r}(t)=\boldsymbol{r}_0} \mathcal{D}\{\boldsymbol{r}\} \, \exp\left(- \int_0^t \frac{\dot{\boldsymbol{r}}^2}{4D} d\tau - 2i\varphi\theta(t) \right) \\ &= P(t, \phi = 0) \langle e^{-2i\varphi\theta(t)} \rangle \quad . \end{aligned} \tag{6.226}$$

Des expressions (6.225) et (6.226), on déduit la distribution $\mathcal{P}(\theta, t)$ des enroulements en fonction de la probabilité de retour à l'origine $P(t, \phi)$ en présence du flux Aharonov-Bohm $\phi = b\phi_0/2$:

$$\mathcal{P}(\theta, t) = \frac{1}{2\pi} \int e^{ib\theta} \frac{P(t, \phi = b\phi_0/2)}{P(t, \phi = 0)} db \quad . \tag{6.227}$$

En insérant l'expression (6.199) de $P(t, \phi) = P_\varphi(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r}_0, t)$, on obtient la loi de distribution des angles d'enroulements autour du point origine :

$$\mathcal{P}(\theta, t) = \frac{1}{2\pi} \int db \, e^{ib\theta} \sum_n I_{|n-b|} \left(\frac{r^2}{2Dt} \right) e^{-r^2/2Dt} \quad . \tag{6.228}$$

En intégrant sur tous les angles, on élimine la contrainte angulaire et on retrouve bien la probabilité d'effectuer une trajectoire fermée :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\theta \mathcal{P}(\theta, t) = P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t) \quad . \tag{6.229}$$

Cette dualité entre une loi de diffusion contrainte et la probabilité associée à l'équation de diffusion covariante (c'est-à-dire en présence d'un champ magnétique) a été initialement proposée par Edwards [132] dans le cadre de la description des polymères au moyen d'une marche au hasard auto-évitante.

[31] On peut généraliser sans difficulté ce calcul au cas où les extrémités de la trajectoire brownienne sont distinctes.

Complément C6.3 Le cooperon dans un champ dépendant du temps

On considère le comportement du cooperon dans un champ électromagnétique dépendant du temps [133] et caractérisés par les potentiels $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r},t)$ et $V(\boldsymbol{r},t)$. Les deux séquences de diffusion multiple, correspondant à des propagations dans des directions opposées, voient maintenant des potentiels différents et sont donc affectées de phases différentes. On cherche à déterminer le comportement du cooperon dans ce cas.

La figure 6.14 montre la différence entre les structures du diffuson et du cooperon. Pour le diffuson, les deux séquences « voient » le même potentiel. Pour le cooperon, si l'une des séquences voit les potentiels $\boldsymbol{A}(t)$ et $V(t)$, la seconde voit les potentiels $\boldsymbol{A}(\bar{t})$ et $V(\bar{t})$ correspondant au temps $\bar{t} = t_i + t_f - t$. Les deux séquences temporelles :

$$\begin{array}{ccccccccc} t_i & \rightarrow & \cdots & \rightarrow & t & \rightarrow & \cdots & \rightarrow & t_f \\ t_f & \rightarrow & \cdots & \rightarrow & \bar{t} = t_i + t_f - t & \rightarrow & \cdots & \rightarrow & t_i \end{array}$$

se déduisent l'une de l'autre par renversement du sens du temps (on note que $\overline{t_f} = t_i$ et $\overline{t_i} = t_f$).

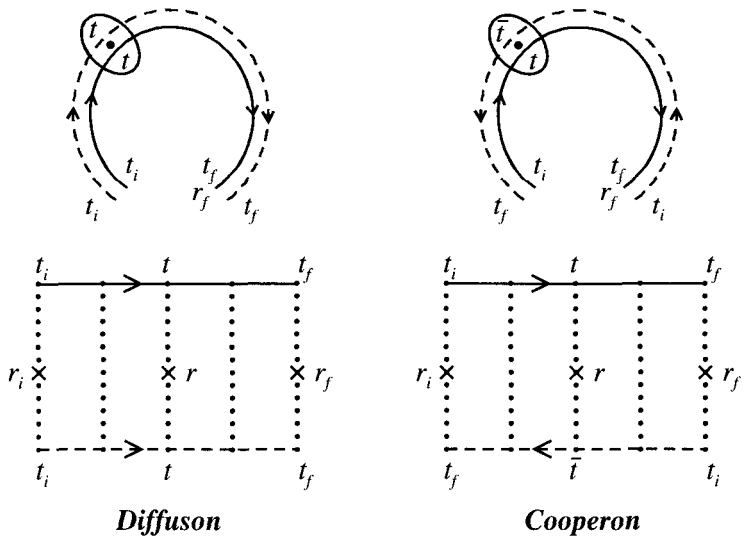


FIG. 6.14 – *En passant au point $\boldsymbol{r}$, Les deux trajectoires constitutives d'un diffuson P_d « voient » le même potentiel extérieur $\boldsymbol{A}(t)$. Par contre, les deux trajectoires d'un cooperon P_c voient des potentiels correspondant à des temps différents t et $\bar{t} = t_i + t_f - t$. Exemple de trajectoire de diffusion multiple avec cinq collisions.*

On cherche ici à obtenir une équation d'évolution pour le cooperon $P_c(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_f, t_i, t_f)$. Pour cela, il est instructif de comparer les structures du diffuson et du cooperon dans un champ dépendant du temps. Pour le diffuson, on

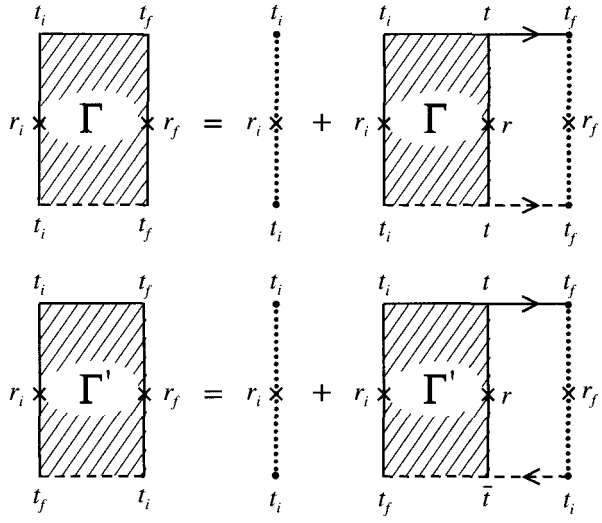


FIG. 6.15 – *Équations intégrales pour le diffuson* $\Gamma(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_f, t_i, t_f)$ *et pour le cooperon* $\Gamma'(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_f, t_i, t_f)$. *Le temps* $\bar{t}$ *est égal à* $t_i + t_f - t$.

récrit l'équation intégrale (4.24) pour le facteur de structure Γ sous la forme (fig. 6.15) :

$$\Gamma(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_f, t_i, t_f) = \gamma_e \delta(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_f)\delta(t_i - t_f) + \int \Gamma(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, t_i, t) K(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, t, t_f) d\boldsymbol{r} dt$$

où le noyau K de l'équation intégrale est donné par

$$K(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, t, t_f) = \gamma_e \overline{G}^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, t, t_f) \overline{G}^A(\boldsymbol{r}_f, \boldsymbol{r}, t_f, t) \tag{6.230}$$

c'est-à-dire, d'après (4.16, 4.18) :

$$K(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, t, t_f) = \frac{1}{\tau_e} P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, t, t_f) = \frac{\delta[R - v(t_f - t)] e^{-(t_f - t)/\tau_e}}{4\pi R^2 \tau_e} \tag{6.231}$$

où $R = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_f|$. En présence de potentiels extérieurs $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$ et $V(\boldsymbol{r}, t)$ lentement variables, la fonction de Green moyenne $\overline{G}^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, t, t_f)$ acquiert une phase supplémentaire $\phi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, t, t_f)$ donnée par [107, 108] [32]

$$\phi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, t, t_f) = -\frac{e}{\hbar} \int_t^{t_f} [\dot{\boldsymbol{r}}(\tau).\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}(\tau), \tau) - V(\boldsymbol{r}(\tau), \tau)] d\tau \quad . \tag{6.232}$$

[32] Les potentiels doivent varier lentement afin de satisfaire l'approximation eikonale pour laquelle seule la phase des fonctions d'onde est modifiée.

La fonction de Green $\overline{G}^A(\boldsymbol{r}_f, \boldsymbol{r}, t_f, t)$ acquiert la phase opposée $\phi(\boldsymbol{r}_f, \boldsymbol{r}, t_f, t) = -\phi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, t, t_f)$ de sorte que les deux phases disparaissent dans l'équation intégrale et le diffuson n'est pas affecté par les potentiels. Ceci est dû au fait que les deux séquences associées correspondent à des champs pris au même temps, de sorte que les déphasages aléatoires de chacune des séquences se compensent.

Le cooperon est obtenu en inversant la séquence temporelle de l'une des deux séquences $t \to \overline{t} = t_i + t_f - t$. Il faut donc, pour caractériser son évolution temporelle, introduire un couple de temps $\tilde{\boldsymbol{t}} = (t, \overline{t})$ associé aux deux séquences qui le constituent. On considère d'abord l'équation intégrale pour le facteur de structure Γ'. Sa structure itérative doit explicitement prendre en compte le couple $\tilde{\boldsymbol{t}} = (t, \overline{t})$ associé à la diffusion sur une impureté. L'équation intégrale, illustrée sur la figure 6.15, prend la forme [33] :

$$\Gamma'(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_f, \tilde{\boldsymbol{t}}_i, \tilde{\boldsymbol{t}}_f) = \gamma_e \delta(\boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_f)\delta(t_i - t_f) + \int \Gamma'(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}, \tilde{\boldsymbol{t}}_i, \tilde{\boldsymbol{t}}) K'(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, \tilde{\boldsymbol{t}}, \tilde{\boldsymbol{t}}_f) d\boldsymbol{r} dt$$

et son noyau K' est donné par :

$$K'(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, \tilde{\boldsymbol{t}}, \tilde{\boldsymbol{t}}_f) = \gamma_e \overline{G}^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, t, t_f) \overline{G}^A(\boldsymbol{r}_f, \boldsymbol{r}, \overline{t}_f, \overline{t}) \quad . \tag{6.233}$$

En présence de potentiels extérieurs $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}, t)$ et scalaire $V(\boldsymbol{r}, t)$, ce noyau acquiert la phase

$$\boxed{\Phi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, \tilde{\boldsymbol{t}}, \tilde{\boldsymbol{t}}_f) = \phi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, t, t_f) - \phi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, \overline{t}, \overline{t}_f) \quad \text{Cooperon}} \tag{6.234}$$

avec $\tilde{\boldsymbol{t}} = (t, \overline{t})$. Pour la séquence directe, la phase est donnée par :

$$\phi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, t, t_f) = \frac{e}{\hbar} \int_t^{t_f} [V(\boldsymbol{r}(\tau), \tau) - \dot{\boldsymbol{r}}(\tau).\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}(\tau), \tau)] d\tau \tag{6.235}$$

tandis que pour la séquence inversée, on change le sens du temps et le signe de la vitesse $\dot{\boldsymbol{r}}(\overline{\tau}) = -\dot{\boldsymbol{r}}(\tau)$:

$$\phi(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}_f, \overline{t}, \overline{t}_f) = \frac{e}{\hbar} \int_t^{t_f} [V(\boldsymbol{r}(\tau), \overline{\tau}) + \dot{\boldsymbol{r}}(\tau).\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}(\tau), \overline{\tau})] d\tau \tag{6.236}$$

[33] En toute rigueur, le premier terme de l'équation intégrale est le terme à deux impuretés puisque que le terme local à une impureté est déjà inclus dans le diffuson. La choix arbitraire d'inclure ici le terme à un impureté n'affecte pas la structure itérative non locale de Γ'. Voir les notes 14, p. 120 et 19, p. 130.

de sorte que

$$\Phi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_f,\tilde{\boldsymbol{t}},\tilde{\boldsymbol{t}}_f) = \frac{e}{\hbar}\int_t^{t_f}\Big([V(\boldsymbol{r}(\tau),\tau)-V(\boldsymbol{r}(\tau),\overline{\tau})]-\dot{\boldsymbol{r}}(\tau).[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}(\tau),\tau)+\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}(\tau),\overline{\tau})]\Big)d\tau \quad . \tag{6.237}$$

Le fait que la phase $\Phi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_f,\tilde{\boldsymbol{t}},\tilde{\boldsymbol{t}}_f)$ ne dépende pas que de t et t_f, mais aussi du temps t_i est une conséquence de la *structure temporelle non locale* du cooperon dans un champ dépendant du temps. Il n'est plus possible dans ce cas de se ramener à une équation locale en temps comme pour le diffuson. Toutefois, pour des champs indépendants du temps, le terme lié au potentiel scalaire disparaît tandis que celui contenant le potentiel vecteur donne un facteur 2 en accord avec les résultats de la section 6.2. La phase est alors une fonction de la différence $t-t_f$.

De façon analogue à ce qui a été fait dans le cas du problème indépendant du temps, dans la limite de variations lentes de Γ' et de la phase Φ, on peut développer $\Gamma'(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r},t_i,t)e^{i\Phi(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_f,t,t_f)}$ pour $(\boldsymbol{r},t)$ au voisinage de $(\boldsymbol{r}_f,t_f)$. Ce développement conduit à une équation différentielle pour Γ'. Puis, à l'aide de (4.48), on déduit l'équation différentielle pour $P_c(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_f,t_i,t_f)$:

$$\Big(\frac{\partial}{\partial t_f} - D\Big[\nabla_{\boldsymbol{r}_f}+i\frac{e}{\hbar}\left(\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_f,t_i)+\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}_f,t_f)\right)\Big]^2 - i\frac{e}{\hbar}[V(\boldsymbol{r}_f,t_f)-V(\boldsymbol{r}_f,t_i)]\Big)P_c(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_f,t_i,t_f) = \delta(\boldsymbol{r}_f-\boldsymbol{r}_i)\delta(t_f-t_i) \quad .$$

Dans ce cas, la probabilité garde la forme (6.212) [34] :

$$P_c(\boldsymbol{r}_i,\boldsymbol{r}_f,t_i,t_f) = \int_{\boldsymbol{r}(t_i)=\boldsymbol{r}_i}^{\boldsymbol{r}(t_f)=\boldsymbol{r}_f}\mathcal{D}\{\boldsymbol{r}\}\ \exp\Big(-\int_{t_i}^{t_f}\mathcal{L}(\tau)d\tau\Big) \tag{6.238}$$

mais le lagrangien $\mathcal{L}(\boldsymbol{r},\dot{\boldsymbol{r}},\tau)$ s'écrit maintenant [113] :

$$\mathcal{L}(\boldsymbol{r}(\tau),\dot{\boldsymbol{r}}(\tau),\tau) = \frac{\dot{\boldsymbol{r}}^2}{4D}+i\frac{e}{\hbar}\dot{\boldsymbol{r}}.\left[\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}(\tau),\tau)+\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}(\tau),\overline{\tau})\right] - i\frac{e}{\hbar}\left[V(\boldsymbol{r}(\tau),\tau)-V(\boldsymbol{r}(\tau),\overline{\tau})\right] \quad . \tag{6.239}$$

---

[34] On rappelle que la solution de l'équation différentielle :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t}-D\left(\nabla_{\boldsymbol{r}'}-i\boldsymbol{a}\right)^2+U(\boldsymbol{r}')\right]F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',0,t) = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta(t)$$

peut s'écrire sous la forme fonctionnelle :

$$F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',0,t) = \int\mathcal{D}\{\boldsymbol{r}\}\exp\Big(-\int_0^t\Big[\frac{\dot{\boldsymbol{r}}^2(\tau)}{4D}-i\dot{\boldsymbol{r}}.\boldsymbol{a}(\boldsymbol{r})+U(\boldsymbol{r})\Big]d\tau\Big) \quad .$$

La probabilité est donc de la forme

$$\begin{aligned} P_c(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_f, t_i, t_f) &= \int \mathcal{D}\{\boldsymbol{r}\} \exp\left(-\int_{t_i}^{t_f} \frac{\dot{\boldsymbol{r}}^2(\tau)}{4D} d\tau\right) . \left\langle e^{i\Phi(t_i,t_f)} \right\rangle \\ &= P_c^{(0)}(\boldsymbol{r}_i, \boldsymbol{r}_f, t_i, t_f) . \left\langle e^{i\Phi(t_i,t_f)} \right\rangle_{\mathcal{C}} \end{aligned} \tag{6.240}$$

où $\left\langle e^{i\Phi(t_i,t_f)} \right\rangle_{\mathcal{C}}$ est la moyenne du facteur de phase sur les trajectoires de diffusion.

Pour des potentiels $\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r})$ et $V(\boldsymbol{r})$ indépendants du temps, on retrouve bien la probabilité $P_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t_i, t_f)$ donnée par (6.212, 6.213).

Complément C6.4 Couplage spin-orbite et impuretés magnétiques : un point de vue heuristique

Dans la section 6.5, on a obtenu les effets conjugués de la diffusion spin-orbite et des impuretés magnétiques à partir de l'itération d'un tenseur $\gamma_e\, b_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ qui décrit un processus de diffusion élémentaire dépendant du spin. On présente ici une dérivation quelque peu différente et moins systématique mais qui a l'avantage de mettre en évidence de manière élégante le déphasage inhérent à la rotation du spin lors de ces processus de diffusion. Cette présentation est basée sur les références [113, 134].

C6.4.1 Couplage spin-orbite

Considérons l'évolution d'un état initial de spin $|s_0\rangle$. On note $|s_n\rangle$ l'état de spin après la $n^{\text{ième}}$ collision. La rotation du spin est décrite par l'opérateur rotation R_n

$$|s_{n+1}\rangle = R_n|s_n\rangle \tag{6.241}$$

où $R_n = e^{-i\frac{\alpha}{2}\hat{\boldsymbol{u}}.\vec{\sigma}}$. L'angle α décrit la rotation autour d'un axe défini par le vecteur unitaire $\hat{\boldsymbol{u}}$.

Après une séquence de N collisions $\mathcal{C}_N = \{\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \cdots, \boldsymbol{r}_N\}$, le spin au temps $t = N\tau_e$ est donné par

$$|s_t\rangle = \prod_{n=1}^{N} R_n|s_0\rangle = \prod_{n=1}^{N} e^{-i\frac{\alpha}{2}\hat{\boldsymbol{u}}_n.\vec{\sigma}_n}|s_0\rangle \quad . \tag{6.242}$$

En passant à la limite continue, on peut écrire l'état de spin à l'instant t sous la forme

$$|s_t\rangle = R_t|s_0\rangle \tag{6.243}$$

où l'opérateur R_t qui décrit la rotation du spin le long d'une séquence de collisions est donné par [35] :

$$R_t = T\exp\left(-i\int_0^t \boldsymbol{b}_t.\vec{\sigma}_t\, dt\right) \tag{6.244}$$

où la non-commutativité des matrices σ de Pauli impose d'introduire le produit chronologique T.

Le vecteur $\boldsymbol{b}_t$ est proportionnel à l'amplitude du couplage spin-orbite au temps t [113]

$$\boldsymbol{b}_t = \frac{1}{4mc^2}(\boldsymbol{\nabla}V(\boldsymbol{r}_t) \times \dot{\boldsymbol{r}}_t) \quad .$$

[35] L'écriture de l'intégrale d'un opérateur de spin n'est pas évidente. Elle est discutée dans la référence [113].

Pour décrire la propagation d'un électron qui reste dans l'état de spin $|s_0\rangle$, il faut considérer l'élément de matrice

$$\langle s_0|R_t|s_0\rangle = \langle s_0|T\exp\left(-i\int_0^t \boldsymbol{b}_t.\vec{\sigma}_t\,dt\right)|s_0\rangle \quad .$$

La moyenne sur les directions de rotation que l'on supposera être des variables aléatoires indépendantes et de distribution gaussienne est

$$\langle s_0|\langle R_t\rangle|s_0\rangle = \langle s_0|\exp\left(-\frac{1}{2}\left\langle[\int_0^t dt\,\boldsymbol{b}_t.\vec{\sigma}_t]^2\right\rangle\right)|s_0\rangle \quad . \tag{6.245}$$

L'argument de l'exponentielle fait intervenir la fonction de corrélation $\langle b_{\alpha t}b_{\beta t'}\rangle$. En supposant que les rotations de spin à chaque collision ne sont pas corrélées, on a

$$\langle b_{t\alpha}b_{t'\beta}\rangle = a_{so}\,\delta_{\alpha\beta}\delta(t-t') \tag{6.246}$$

où le paramètre a_{so} décrit l'amplitude du couplage spin-orbite. On obtient donc, à partir de (6.245)

$$\langle s_0|\langle R_t\rangle|s_0\rangle = \langle s_0|e^{-\frac{1}{2}a_{so}\vec{\sigma}^2 t}|s_0\rangle = e^{-\frac{3}{2}a_{so}t} \tag{6.247}$$

puisque pour un spin 1/2, $\vec{\sigma}^2$ a pour valeur propre 3. Cette expression, qui pondère l'amplitude de probabilité d'une séquence de durée t, est de la forme $e^{-t/2\tau_{so}}$ (c'est-à-dire que la fonction de Green moyenne à une particule $\overline{G}^R(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)$ est multipliée par $e^{-t/2\tau_{so}}$, voir à ce propos l'expression (3.75) et la remarque correspondante). Ceci définit le temps de collision spin-orbite τ_{so}

$$\frac{1}{\tau_{so}} = 3\,a_{so} \quad . \tag{6.248}$$

On considère maintenant *deux séquences conjuguées par renversement du sens du temps*. L'évolution dans une des deux directions est pondérée par le facteur $\langle s_f|R_t|s_0\rangle$ où $|s_f\rangle$ est le spin de l'état final. L'évolution dans la direction conjuguée contient le facteur $\langle s_f|R_{-t}|s_0\rangle^* = \langle s_0|R_{-t}^\dagger|s_f\rangle$. La contribution d'une trajectoire, c'est-à-dire du produit de deux séquences de collisions au cooperon $P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t)$, est donc pondérée par la moyenne $\langle Q_{so}(t)\rangle$ sur les trajectoires du terme [113]

$$Q_{so}(t) = \sum_{s_f=\pm}\langle s_0|R_{-t}^\dagger|s_f\rangle\langle s_f|R_t|s_0\rangle \quad . \tag{6.249}$$

Le couplage spin-orbite $\boldsymbol{b}_t$ est proportionnel à la vitesse de l'électron et change donc de signe par renversement du sens du temps :

$$\boldsymbol{b}_{-t} = -\boldsymbol{b}_t \quad . \tag{6.250}$$

Ce résultat correspond bien au théorème de réciprocité qui énonce que le spin doit changer de signe entre les deux trajectoires conjugées (remarque de la p. 233). Le couplage $\boldsymbol{b}_t$ doit donc changer de signe, de sorte que

$$R_{-t}^{\dagger} = R_t \quad . \tag{6.251}$$

Par conséquent, $Q_{so}(t)$ devient

$$Q_{so}(t) = \sum_{s_f=\pm} \langle s_0|T\exp\left(-i\int_0^t dt\,\boldsymbol{b}_t.\vec{\sigma}_t\right)|s_f\rangle\langle s_f|T\exp\left(-i\int_0^t dt\,\boldsymbol{b}_t.\vec{\sigma}_t\right)|s_0\rangle$$

qui se récrit, en remplaçant le produit des éléments de matrice par un seul élément de matrice dans l'espace produit :

$$Q_{so}(t) = \sum_{s_f=\pm} \langle s_f^a s_0^b|T\exp\left(-i\int_0^t dt\,\boldsymbol{b}_t.(\vec{\sigma}_t^a + \vec{\sigma}_t^b)\right)|s_0^a s_f^b\rangle \tag{6.252}$$

où $|s_0^a s_f^b\rangle$ désigne le produit tensoriel $|s_0^a\rangle \otimes |s_f^b\rangle$. La variable $\boldsymbol{b}_t$ étant supposée gaussienne, sa valeur moyenne est donnée par

$$\langle Q_{so}(t)\rangle = \sum_{s_f=\pm} \langle s_f^a s_0^b|\exp\left(-\frac{1}{2}\left\langle[\int_0^t dt\,\boldsymbol{b}_t.(\vec{\sigma}_t^a + \vec{\sigma}_t^b)]^2\right\rangle\right)|s_0^a s_f^b\rangle \quad . \tag{6.253}$$

Le spin total $(\vec{\sigma}_t^a + \vec{\sigma}_t^b)^2$ est conservé et ne dépend pas du temps. En utilisant l'expression (6.246) du corrélateur $\langle b_{t\alpha} b_{t'\beta}\rangle$, l'intégrale sur le temps est immédiate et on obtient :

$$\langle Q_{so}(t)\rangle = \sum_{s_f=\pm} \langle s_f^a s_0^b|\exp\left(-\frac{1}{2}a_{so}\,t\,(\vec{\sigma}^a + \vec{\sigma}^b)^2\right)|s_0^a s_f^b\rangle \tag{6.254}$$

qu'il faut maintenant comparer au facteur (6.247) qui définit le temps de collision spin-orbite. Introduisons pour cela l'état singulet $|S\rangle$ et les trois états triplets $|T_\alpha\rangle$, états propres du spin total $\vec{\sigma}^a + \vec{\sigma}^b$. Les éléments de matrice de $(\vec{\sigma}^a + \vec{\sigma}^b)^2$ dans la base de ces états sont donnés par

$$\begin{aligned} \langle S|(\vec{\sigma}^a + \vec{\sigma}^b)^2|S\rangle &= 0 \\ \langle T_\alpha|(\vec{\sigma}^a + \vec{\sigma}^b)^2|T_\alpha\rangle &= 8 \quad . \end{aligned} \tag{6.255}$$

En insérant la relation de fermeture $|S\rangle\langle S| + \sum_\alpha |T_\alpha\rangle\langle T_\alpha| = 1$, et en notant que

$$\begin{aligned} \sum_{s_f,\alpha} \langle s_0 s_f|T_\alpha\rangle\langle T_\alpha|s_f s_0\rangle &= \frac{3}{2} \\ \sum_{s_f} \langle s_0 s_f|S\rangle\langle S|s_f s_0\rangle &= -\frac{1}{2} \end{aligned} \tag{6.256}$$

on obtient finalement la relation (6.134) :

$$\langle Q_{so}(t)\rangle = \frac{1}{2}(3\,e^{-4t/3\tau_{so}} - 1) \quad . \tag{6.257}$$

On voit que la cohérence de phase ne disparaît que lorsque les deux spins $\vec{\sigma}^a$ et $\vec{\sigma}^b$ constituent un état triplet. L'état singulet n'est pas affecté par le couplage spin-orbite. La probabilité de retour à l'origine $P_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t)$ est pondérée par le facteur $\langle Q_{so}(t)\rangle$.

C6.4.2 Impuretés magnétiques

Considérons l'évolution du spin de l'électron de long d'une trajectoire de diffusion multiple :

$$|s_t\rangle = R_t|s_0\rangle \tag{6.258}$$

où l'opérateur R_t est maintenant de la forme

$$R_t = T\exp\left(-i\int_0^t \boldsymbol{h}_t.\vec{\sigma}_t\,dt\right) \quad . \tag{6.259}$$

Le champ $\boldsymbol{h}_t = -J\sum_j \delta(\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}_j)\boldsymbol{S}_j$ est celui vu par l'électron le long de sa trajectoire. La propagation d'un électron dans un état de spin donné $|s_0\rangle$ est pondérée par l'élément de matrice $\langle s_0|R_t|s_0\rangle$. En moyennant sur l'ensemble des séquences de collisions et sur la configuration des spins $\boldsymbol{S}_j$ que l'on suppose être des variables indépendantes et de distribution gaussienne, on obtient

$$\langle s_0|\langle R_t\rangle|s_0\rangle = \langle s_0|\exp\left(-\frac{1}{2}\left\langle[\int_0^t dt\,\boldsymbol{h}_t.\vec{\sigma}_t]^2\right\rangle\right)|s_0\rangle \quad . \tag{6.260}$$

L'argument de l'exponentielle fait intervenir la fonction de corrélation $\langle h_{\alpha t}h_{\beta t'}\rangle$ qui est de la forme

$$\langle h_{t\alpha}h_{t'\beta}\rangle = a_m\,\delta_{\alpha\beta}\delta(t - t') \tag{6.261}$$

où a_m décrit l'amplitude du couplage avec les impuretés. L'hypothèse (6.261) revient à considérer que les angles de rotation du spin électronique induits par chaque impureté magnétique ne sont pas corrélés. On obtient donc, puisque $\vec{\sigma}^2 = 3$:

$$\langle s_0|\langle R_t\rangle|s_0\rangle = \langle s_0|e^{-\frac{1}{2}a_m\vec{\sigma}^2 t}|s_0\rangle = e^{-\frac{3}{2}a_m t} \tag{6.262}$$

qui est de la forme $e^{-t/2\tau_m}$. Ceci définit le temps de retournement de spin τ_m

$$\frac{1}{\tau_m} = 3\,a_m \quad . \tag{6.263}$$

La fonction de Green moyenne est donc affectée, tout comme pour le spin-orbite, par la présence d'impuretés magnétiques. Ceci se traduit par l'existence du temps de relaxation τ_m en plus du temps moyen de collision élastique τ_e. Afin de décrire l'effet du couplage à des impuretés magnétiques sur

le cooperon, on considère maintenant deux séquences de collisions multiples conjuguées par renversement du sens du temps. L'évolution dans une des deux directions temporelles est pondérée par le facteur $\langle s_f|R_t|s_0\rangle$ tandis que l'évolution dans la direction conjuguée contient le facteur $\langle s_f|R_{-t}|s_0\rangle^* = \langle s_0|R_{-t}^\dagger|s_f\rangle$ où $|s_f\rangle$ est l'état de spin final. La contribution d'une trajectoire (produit de deux séquences de collision) au cooperon est donc pondérée par le terme [113]

$$Q_m(t) = \sum_{s_f=\pm} \langle s_0|R_{-t}^\dagger|s_f\rangle\langle s_f|R_t|s_0\rangle \quad .$$

Ne dépendant pas de la vitesse de l'électron, le champ $\boldsymbol{h}_t$ ne change pas de signe par renversement du sens du temps :

$$\boldsymbol{h}_{-t} = \boldsymbol{h}_t \tag{6.264}$$

de sorte que

$$R_{-t}^\dagger = R_t^* \tag{6.265}$$

brisant ainsi la réciprocité (voir la remarque de la p. 233).

Le calcul se déroule de manière analogue à celui du couplage spin-orbite et $Q_m(t)$ peut se récrire

$$Q_m(t) = \sum_{s_f=\pm} \langle s_f^a s_0^b|T\exp\left(-i\int_0^t dt\,\boldsymbol{h}_t.(\boldsymbol{\sigma}_t^a - \boldsymbol{\sigma}_t^b)\right)|s_0^a s_f^b\rangle \quad .$$

La variable $\boldsymbol{h}_t$ étant supposée gaussienne, on a

$$\langle Q_m(t)\rangle = \sum_{s_f=\pm} \langle s_f^a s_0^b|\exp\left(-\frac{1}{2}\left\langle[\int_0^t dt\,\boldsymbol{h}_t.(\vec{\sigma}_t^a - \vec{\sigma}_t^b)^2]\right\rangle\right)|s_0^a s_f^b\rangle \quad .$$

La quantité $(\vec{\sigma}_t^a - \vec{\sigma}_t^b)^2$ est conservée. En utilisant l'expression (6.261) de la fonction de correlation $\langle h_{\alpha t}h_{\beta t}\rangle$, l'intégrale sur le temps est immédiate et on obtient :

$$\langle Q_m(t)\rangle = \sum_{s_f=\pm} \langle s_f^a s_0^b|\exp\left(-\frac{1}{2}a_m\,t\,(\vec{\sigma}^a - \vec{\sigma}^b)^2\right)|s_0^a s_f^b\rangle$$

qu'il faut comparer au facteur (6.262) qui définit le temps de retournement du spin. On insère la relation de fermeture $|S\rangle\langle S| + \sum_\alpha |T_\alpha\rangle\langle T_\alpha| = 1$ où $|S\rangle$ est l'état singulet et $|T_\alpha\rangle$ sont les trois états triplets. Puisque

$$(\vec{\sigma}^a - \vec{\sigma}^b)^2 = 12 - (\vec{\sigma}^a + \vec{\sigma}^b)^2$$

on obtient immédiatement, à partir des équations (6.255) :

$$\begin{aligned}\langle S|(\vec{\sigma}^a - \vec{\sigma}^b)^2|S\rangle &= 12\\ \langle T_\alpha|(\vec{\sigma}^a - \vec{\sigma}^b)^2|T_\alpha\rangle &= 4 \quad .\end{aligned} \tag{6.266}$$

En utilisant les relations (6.256), on obtient finalement la relation (6.135) :

$$\langle Q_m(t)\rangle = \frac{1}{2}(3\,e^{-2t/3\tau_m} - e^{-2t/\tau_m}) \quad . \tag{6.267}$$

Ce résultat diffère de celui énoncé pour la diffusion spin-orbite (section C6.4.1). En effet, ici non seulement les modes triplets mais aussi le mode singulet sont affectés par les collisions sur les impuretés magnétiques.

Complément C6.5 Collisions photons-atomes froids

Dans l'exemple de la diffusion Rayleigh d'une onde polarisée, nous avons vu que la diffusion multiple a deux effets. D'une part, elle introduit une dépolarisation du faisceau incident qui affecte également le diffuson et le cooperon. D'autre part, il apparaît un déphasage supplémentaire dans le cooperon qui réduit sa contribution relativement à celle du diffuson. Cette réduction est décrite par un temps de déphasage qui se déduit de l'expression (6.170) du cooperon.

On étudie maintenant le cas où une lumière polarisée diffuse sur des atomes ayant une structure interne liée à la dégénérescence Zeeman des niveaux d'énergie. Dans la section C2.3.3, nous avons étudié les détails de la diffusion résonnante d'un photon par un atome modélisé comme un système à deux niveaux dégénérés. Nous allons voir que la moyenne sur les degrés de liberté atomiques internes conduit à un temps de cohérence de phase fini pour le cooperon [135–137]. Ce temps de cohérence de phase peut être calculé et mesuré, et il joue un rôle important dans la physique de la diffusion multiple des photons sur les gaz d'atomes froids.

C6.5.1 Potentiel d'interaction

Dans la section C2.3.3, nous avons obtenu une expression (2.165 et 2.157) pour l'amplitude associée à la diffusion résonnante photon-atome pour un photon diffusé d'un état $\boldsymbol{k}_i$ de polarisation $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$ vers un état $\boldsymbol{k}'$ de polarisation $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'$:

$$f(\boldsymbol{k}_i m_i, \boldsymbol{k}' m_f) = -\frac{3c}{2\omega}\frac{\Gamma/2}{\delta + i\Gamma/2}\langle J m_f|(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*)(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i)|J m_i\rangle \quad . \tag{6.268}$$

Elle dépend des vecteurs d'onde $\boldsymbol{k}_i$ et $\boldsymbol{k}'$ par l'intermédiaire des polarisations. On note dorénavant cette amplitude sous la forme

$$\boxed{v(\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}', \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*) = v_0 \ \langle J m_f|(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*)(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i)|J m_i\rangle} \tag{6.269}$$

où le potentiel v_0 est donné par (2.103) :

$$v_0 = -4\pi f = 3\lambda\frac{\Gamma/2}{\delta + i\Gamma/2} \quad . \tag{6.270}$$

En utilisant la relation (6.141), $M(\boldsymbol{k}_i)\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i = \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$, on peut écrire

$$v(\boldsymbol{k}_i, \boldsymbol{k}', \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i, \hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*) = v_0\langle J m_f|(\tilde{\boldsymbol{d}}.\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'^*)(\tilde{\boldsymbol{d}}.M(\boldsymbol{k}_i)\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i)|J m_i\rangle \quad . \tag{6.271}$$

Ceci nous permet de définir le tenseur d'ordre 2

$$v_{\alpha\beta} = v_0\langle J m_f|\tilde{d}_\beta \sum_\mu \tilde{d}_\mu M_{\mu\alpha}|J m_i\rangle \tag{6.272}$$

dans une base indépendante des polarisations $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}_i$ et $\hat{\boldsymbol{\varepsilon}}'$. Le potentiel $v_{\alpha\beta}$ généralise le cas du potentiel scalaire du modèle d'Edwards (section C2.2.2). Pour obtenir le vertex élémentaire d'interaction, on considère le produit

$$v_{\alpha\gamma}v^*_{\beta\delta} = |v_0|^2\langle Jm_f|\tilde{d}_\gamma \sum_\mu \tilde{d}_\mu M_{\mu\alpha}|Jm_i\rangle\langle Jm_f|\tilde{d}_\delta \sum_\nu \tilde{d}_\nu M_{\nu\beta}|Jm_i\rangle^* \quad . \tag{6.273}$$

Compte tenu de l'égalité $\langle Jm_f|\tilde{d}_\delta\tilde{d}_\nu M_{\nu\beta}|Jm_i\rangle^* = \langle Jm_i|\tilde{d}_\nu\tilde{d}_\delta M_{\nu\beta}|Jm_f\rangle$ et en utilisant la relation de fermeture pour la transition atomique fermée, on déduit pour le vertex élémentaire d'interaction $B_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ correspondant à une densité n_i d'atomes, l'expression

$$B_{\alpha\beta,\gamma\delta} = n_i v_{\alpha\gamma}v^*_{\beta\delta} = n_i|v_0|^2 \sum_{\mu\nu}\langle Jm_i|\tilde{d}_\nu\tilde{d}_\delta\tilde{d}_\gamma\tilde{d}_\mu|Jm_i\rangle M_{\nu\beta}M_{\mu\alpha} \quad . \tag{6.274}$$

Afin de calculer le facteur de structure associé, on moyenne cette quantité, d'une part, sur les degrés de liberté atomiques internes en supposant que les sous-états Zeeman $|Jm_i\rangle$ sont équiprobables, et, d'autre part, sur les angles pour la polarisation décrite par le terme $M_{\nu\beta}M_{\mu\alpha}$.

Le temps de collision élastique est modifié par le couplage atomes-photons. Le nouveau temps, noté τ_{at}, est donné par la partie imaginaire de la self-énergie qui s'écrit, en vertu des relations (2.160) et (2.164)

$$\frac{1}{l_{at}} = \frac{1}{c\tau_{at}} = \frac{1}{4\pi}\sum_\beta \langle B_{\alpha\alpha,\beta\beta}\rangle_{\boldsymbol{k}',int} = n_i\langle\sigma\rangle = A_{JJ_e}\frac{n_i|v_0|^2}{6\pi} \tag{6.275}$$

où $A_{JJ_e} = \frac{1}{3}\frac{2J_e+1}{2J+1}$. La notation $\langle\cdots\rangle_{\boldsymbol{k}',int}$ désigne la moyenne angulaire sur $\hat{\boldsymbol{k}}'$ ainsi que la moyenne statistique sur les états Zeeman. On en déduit l'expression de γ_{at} défini par

$$\gamma_{at} = \frac{4\pi}{l_{at}} = \sum_\beta \langle B_{\alpha\alpha,\beta\beta}\rangle_{\boldsymbol{k}',int} = \gamma_e\frac{2}{3}A_{JJ_e} \tag{6.276}$$

avec $\gamma_e = n_i|v_0|^2$. On retrouve le cas de la diffusion Rayleigh (relation 6.143) en prenant $(J, J_e) = (0, 1)$, c'est-à-dire $A_{JJ_e} = 1$.

C6.5.2 Diffuson et cooperon

• Moyenne du vertex atomique

Le diffuson et le cooperon s'obtiennent à partir de leur facteur de structure respectif. Dans le cas présent, la nouveauté provient des degrés de liberté atomiques et de la polarisation. Le facteur de structure du diffuson s'obtient à partir de l'itération du vertex élémentaire $b_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \langle B_{\alpha\beta,\gamma\delta}\rangle_{\boldsymbol{k}',int}/\gamma_e$. Dans la section 6.6, nous avons étudié le terme $M_{\nu\beta}M_{\mu\alpha}$ associé à la polarisation. Il faut maintenant également évaluer la moyenne de l'élément

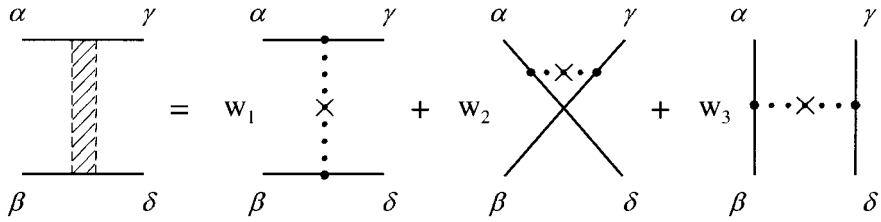


FIG. 6.16 – *Structure du vertex élémentaire d'interaction* $b^{(d)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ *associé au diffuson, pour un couplage à des atomes ayant une structure interne. Le vertex élémentaire* $b^{(c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ *associé au cooperon est obtenu en permutant les indices* β *et* δ*, c'est-à-dire en échangeant* w_2 *et* w_3*. Pour la diffusion Rayleigh par un dipole classique, seul le premier terme subsiste.*

de matrice $\langle Jm_i|\tilde{d}_\beta\tilde{d}_\delta\tilde{d}_\gamma\tilde{d}_\alpha|Jm_i\rangle$. On suppose que les sous-niveaux Zeeman sont tous équiprobables, c'est-à-dire qu'ils sont décrits par une matrice densité scalaire (voir la section C2.3.3). Dans ce cas, la moyenne statistique $\langle\langle Jm_i|\tilde{d}_\beta\tilde{d}_\delta\tilde{d}_\gamma\tilde{d}_\alpha|Jm_i\rangle\rangle_{int}$ est invariante par rotation et ne dépend donc que des produits scalaires entre les directions $(\alpha,\beta,\gamma,\delta)$. On la note sous la forme :

$$\langle\langle Jm_i|\tilde{d}_\beta\tilde{d}_\delta\tilde{d}_\gamma\tilde{d}_\alpha|Jm_i\rangle\rangle_{int} = A_{JJ_e}\left(w_1\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + w_2\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} + w_3\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}\right) \tag{6.277}$$

qui est représentée schématiquement sur la figure 6.16. Les trois coefficients $w_i(J,J_e)$ dépendent des caractéristiques de la transition atomique résonnante, c'est-à-dire, en définitive, des moments cinétiques des états fondamental (J) et excité (J_e). Le calcul complet est donné dans les références [136,137]. Il repose sur l'application du théorème de Wigner-Eckart qui permet de décomposer le tenseur $B_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ en composantes irréductibles [119,138] dont on peut ensuite prendre la moyenne statistique. On montre que

$$\begin{aligned} w_1 &= \frac{1}{3}(s_0 - s_2) \\ w_2 &= \frac{1}{2}(-s_1 + s_2) \\ w_3 &= \frac{1}{2}(s_1 + s_2) \end{aligned} \tag{6.278}$$

où les coefficients s_k s'expriment en fonction des symboles $6j$ et sont donnés par

$$s_k = 3(2J_e+1)\left\{\begin{array}{ccc} 1 & 1 & k \\ J & J & J_e \end{array}\right\}^2 \quad . \tag{6.279}$$

On retrouve la limite de la diffusion Rayleigh en prenant $J=0$ et $J_e=1$ qui donne $s_0=3$ et $s_1=s_2=0$, c'est-à-dire $(w_1,w_2,w_3)=(1,0,0)$.

Afin de diagonaliser ce tenseur, on diagonalise séparément le tenseur atomique et le tenseur de polarisation. L'expression (6.277) résulte de la diagonalisation du tenseur $\langle\langle Jm_i|\tilde{d}_\beta\tilde{d}_\delta\tilde{d}_\gamma\tilde{d}_\alpha|Jm_i\rangle\rangle_{int}$. Elle peut donc s'exprimer en

fonction des trois tenseurs de base (6.157)

$$\langle\langle Jm_i|\tilde{d}_\beta\tilde{d}_\delta\tilde{d}_\gamma\tilde{d}_\alpha|Jm_i\rangle\rangle_{int} = \sum_{k=0}^{2} \lambda_k^{(d)}\ T^{(k)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} \tag{6.280}$$

où les valeurs propres $\lambda_k^{(d)}$ sont données par

$$\begin{aligned}
\lambda_0^{(d)} &= A_{JJ_e}\,(w_1 + w_2 + 3w_3) = \frac{A_{JJ_e}}{3}(s_0 + 3s_1 + 5s_2) = A_{JJe} \\
\lambda_1^{(d)} &= A_{JJ_e}(w_1 - w_2) = \frac{A_{JJ_e}}{6}(2s_0 + 3s_1 - 5s_2) \\
\lambda_2^{(d)} &= A_{JJ_e}(w_1 + w_2) = \frac{A_{JJ_e}}{6}(2s_0 - 3s_1 + s_2) \quad .
\end{aligned} \tag{6.281}$$

Le fait que $\lambda_0^{(d)} = A_{JJe}$ résulte de la règle de somme $\sum_{k=0}^{2}(2k+1)s_k = 3$. Le cas limite de la diffusion Rayleigh classique ($J = 0, J_e = 1$) donne $\lambda_0^{(d)} = \lambda_1^{(d)} = \lambda_2^{(d)} = 1$, c'est-à-dire

$$\langle\langle Jm_i|\tilde{d}_\delta\tilde{d}_\gamma\tilde{d}_\beta\tilde{d}_\alpha|Jm_i\rangle\rangle_{int} = \sum_{k=0}^{2} T^{(k)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} \quad . \tag{6.282}$$

De la même manière, on peut évaluer la contribution des degrés de liberté internes atomiques au vertex élémentaire décrivant le cooperon. Cette contribution s'obtient à partir de la combinaison $\langle B_{\alpha\delta,\gamma\beta}\rangle_{int}$ et donc en intervertissant les indices β et δ dans l'expression (6.277). Cette opération revient donc à échanger w_2 et w_3 (fig. 6.16). Il en résulte une décomposition différente

$$\langle\langle Jm_i|\tilde{d}_\delta\tilde{d}_\beta\tilde{d}_\gamma\tilde{d}_\alpha|Jm_i\rangle\rangle_{int} = \sum_{k=0}^{2} \lambda_k^{(c)}\ T^{(k)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} \tag{6.283}$$

où

$$\begin{aligned}
\lambda_0^{(c)} &= A_{JJ_e}(w_1 + 3w_2 + w_3) = \frac{A_{JJ_e}}{3}(s_0 - 3s_1 + 5s_2) = A_{JJ_e}(1 - 2s_1) \\
\lambda_1^{(c)} &= A_{JJ_e}(w_1 - w_3) = \frac{A_{JJ_e}}{6}(2s_0 - 3s_1 - 5s_2) \\
\lambda_2^{(c)} &= A_{JJ_e}(w_1 + w_3) = \frac{A_{JJ_e}}{6}(2s_0 + 3s_1 + s_2) \quad .
\end{aligned} \tag{6.284}$$

De ces résultats [36] et de l'expression (6.274), on peut déduire l'expression du vertex élémentaire total associé à l'interaction photon-atome pour le diffuson et pour le cooperon. La décomposition de la partie du vertex élémentaire associée à la polarisation des photons et moyennée sur les directions angulaires a été obtenue dans la section 6.6. Elle est donnée par la relation (6.156),

$$\langle M_{\nu\beta} M_{\mu\alpha} \rangle = \sum_{k=0}^{2} b_k \; T^{(k)}_{\nu\mu,\beta\alpha} = \sum_{k=0}^{2} b_k \; T^{(k)}_{\alpha\beta,\mu\nu} \quad . \tag{6.285}$$

Le vertex total (6.274) est obtenu en multipliant les deux contributions (6.280) et (6.285), soit

$$b^{(d,c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \sum_{k,k'} b_k \; \lambda^{(d,c)}_{k'} \; \sum_{\mu\nu} T^{(k)}_{\alpha\beta,\mu\nu} T^{(k')}_{\mu\nu,\gamma\delta} \quad . \tag{6.286}$$

De la propriété d'orthogonalité des tenseurs $T^{(k)}_{\alpha\beta,\mu\nu}$, on déduit l'expression

$$\boxed{b^{(d,c)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} = \sum_{k=0}^{2} \lambda^{(d,c)}_{k} \; b_k \; T^{(k)}_{\alpha\beta,\gamma\delta}} \tag{6.287}$$

De ces résultats, on peut déduire les conclusions suivantes :

- Le vertex élémentaire d'interaction $b_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ a été obtenu comme le produit des contributions de la polarisation des photons et des degrés de liberté atomiques.
- Lorsqu'il y a une dégénérescence Zeeman des niveaux atomiques, les vertex élémentaires d'interaction (6.287) pour le diffuson et pour le cooperon ne coincident plus. En particulier, le mode de Goldstone existe pour le diffuson et correspond à $\lambda^{(d)}_0 = A_{JJe}$, mais il n'existe plus pour le cooperon pour lequel $\lambda^{(c)}_0 = A_{JJe}(1 - 2s_1)$. Donc, contrairement à la diffusion Rayleigh classique, le cooperon est atténué dans tous les modes de polarisation. On retrouve le cas de la diffusion Rayleigh en prenant $(J, J_e) = (0, 1)$, qui donne $s_1 = 0$, soit $\lambda^{(c)}_0 = 1$.

---

[36] Les quantités $\lambda^{(d)}_k$ et $\lambda^{(c)}_k$ peuvent se récrire en fonction de symboles $6j$ et $9j$ [137] :

$$\lambda^{(d)}_k = 3A_{JJ_e}(2J_e + 1) \left\{ \begin{array}{ccc} 1 & 1 & k \\ J_e & J_e & J \end{array} \right\}^2$$

$$\lambda^{(c)}_k = 3A_{JJ_e}(2J_e + 1) \left\{ \begin{array}{ccc} 1 & J_e & J \\ 1 & J & J_e \\ k & 1 & 1 \end{array} \right\} \quad .$$

- La diagonalisation du vertex élémentaire d'interaction $b_{\alpha\beta,\gamma\delta}$ conduit à celle de l'équation intégrale (6.150) pour laquelle [37] $w(\boldsymbol{q}) = (\tau_{at}/\tau_e)(1-Dq^2\tau_{at}) = \frac{3}{2A_{JJ_e}}(1-Dq^2\tau_{at})$. On obtient trois modes Γ_k de la forme

$$\Gamma_k = \frac{\gamma_{at}/\tau_{at}}{Dq^2 + \frac{1}{\tau_k}} \quad . \tag{6.289}$$

Les temps d'atténuation τ_k s'obtiennent à partir de la relation (6.287) pour le diffuson et pour le cooperon :

$$\tau_k^{(d,c)} = \tau_{at} \frac{b_k\ \lambda_k^{(d,c)}}{\frac{2}{3}A_{JJ_e} - b_k\ \lambda_k^{(d,c)}} \quad , \tag{6.290}$$

où les quantités $(b_k, \lambda_k^{(d)}, \lambda_k^{(c)})$ sont données respectivement par les relations (6.153, 6.281 et 6.284). Pour des transitions entre niveaux atomiques tels que $J_e = J$ ou $J_e = J \pm 1$, on peut exprimer simplement les temps caractéristiques $\tau_k^{(d,c)}$ sous forme de fractions rationnelles. Leurs valeurs sont données sur la figure 6.17 pour le cas $J_e = J + 1$.

	$\tau_0^{(d)}$	$\tau_1^{(d)}$	$\tau_2^{(d)}$	$\tau_0^{(c)}$	$\tau_1^{(c)}$	$\tau_2^{(c)}$
J	∞	$\frac{J+2}{3J+2}$	$\frac{7(J+2)(2J+5)}{3(62J^2+79J+10)}$	$\frac{1}{J(2J+3)}$	$\frac{1}{4J+1}$	$\frac{7(6J^2+12J+5)}{58J^2+66J+15}$
$J=0$	∞	1	7/3	∞	1	7/3
$J=1$	∞	0,6	0,32	0,2	0,2	1,16
$J=2$	∞	0,5	0,20	0,071	0,11	0,98
$J=3$	∞	0,45	0,16	0,037	0,077	0,90
$J=4$	∞	0,43	0,14	0,022	0,059	0,86

FIG. 6.17 – *Valeurs des temps de dépolarisation et d'atténuation du diffuson et du cooperon pour différentes transitions atomiques caractérisées par les nombres quantiques J et $J_e = J + 1$. Les temps sont exprimés en unités de τ_{at}.*

[37] La constante de diffusion est maintenant donnée par

$$D = \frac{1}{3} c l_{at} \quad . \tag{6.288}$$

Enfin on obtient, pour l'expression générale du facteur de structure, la décomposition à l'aide des tenseurs de base (6.157) :

$$\begin{aligned}\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta} &= \sum_{k=0}^{2} \Gamma_k T^{(k)}_{\alpha\beta,\gamma\delta} \\ &= \frac{1}{2}(\Gamma_1 + \Gamma_2)\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \frac{1}{3}(\Gamma_0 - \Gamma_2)\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \frac{1}{2}(-\Gamma_1 + \Gamma_2)\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma} \quad .\end{aligned} \tag{6.291}$$

De cette expression générale, nous pouvons maintenant déduire le comportement du diffuson et du cooperon.

Les modes propres du cooperon sont atténués avec un temps caractéristique $\tau_k^{(c)}$ donné par (6.290). Nous verrons dans la section 8.9.3 que les temps de déphasage $\tau_k^{(d)}$ décrivent la dépolarisation des photons. Le cooperon contient lui aussi cet effet de dépolarisation et on peut donc le séparer des effets de perte de cohérence de phase en écrivant $\tau_k^{(c)}$ sous la forme

$$\frac{1}{\tau_k^{(c)}} = \frac{1}{\tau_k^{(d)}} + \frac{\tau_e}{\tau_{at}^2 b_k} \frac{\lambda_k^{(d)} - \lambda_k^{(c)}}{\lambda_k^{(d)}\lambda_k^{(c)}} \quad . \tag{6.292}$$

On définit ainsi les temps de cohérence de phase $\tau_\phi(k)$, associés aux trois sous-espaces, par

$$\tau_\phi(k) = b_k \frac{\tau_{at}^2}{\tau_e} \frac{\lambda_k^{(d)}\lambda_k^{(c)}}{\lambda_k^{(d)} - \lambda_k^{(c)}} \quad . \tag{6.293}$$

Il apparaît que $1/\tau_\phi(k)$ est proportionnel à la différence $\lambda_k^{(d)} - \lambda_k^{(c)}$ et qu'il diverge en l'absence de dégénérescence du niveau fondamental J. Le temps de cohérence de phase est donc une mesure directe de la structure interne des niveaux atomiques.

Chapitre 7

Transport électronique

Dans ce chapitre, on rétablit $\hbar$ et on dénote par la lettre s la dégénérescence de spin. $e > 0$.

7.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'étude de la conductivité électrique d'un métal faiblement désordonné. La description générale du transport dans les métaux est un problème important où les idées de cohérence et de diffusion multiple jouent un rôle clé. Le but de ce chapitre est d'établir une expression de la conductivité électrique moyenne et d'en étudier le comportement. On étudiera particulièrement les corrections quantiques à la conductivité moyenne, corrections dont l'origine provient des trajectoires associées au cooperon. On obtiendra alors une description de ce qui est appelé habituellement le domaine de la *localisation faible*. L'étude des moments d'ordre supérieurs de la distribution de conductivité sera abordée dans le chapitre 11.

On considère la composante diagonale $\sigma_{xx}(\omega)$ le long d'une direction Ox du tenseur de conductivité électrique [1] $\sigma_{\alpha\beta}$, dont la dérivation est rappelée dans le complément C7.1. Pour un gaz d'électrons dégénéré à température $T \ll T_F = \epsilon_F/k_B$, $\sigma_{xx}(\omega)$ est donnée par son expression à $T = 0$ K [2]

$$\sigma_{xx}(\omega) = s\frac{\hbar}{\pi\Omega}\ \mathrm{Tr}\left[\hat{j}_x\ \mathrm{Im}\hat{G}^R_{\epsilon_F}\ \hat{j}_x\ \mathrm{Im}\hat{G}^R_{\epsilon_F-\omega}\right] \tag{7.1}$$

[1] On considère un milieu isotrope, de sorte que $\sigma_{xx} = \sigma_{yy} = \sigma_{zz}$.

[2] Cette expression « basse température » de la conductivité est celle d'un gaz dégénéré ($T \ll T_F$). Pour un gaz d'électrons non dégénéré, il faudrait utiliser la relation (7.123). Par ailleurs, l'expression « température nulle » n'exclut pas une éventuelle dépendance en température contenue dans les fonctions de Green, provenant du couplage à d'autres degrés de liberté (voir remarque de la p. 92). Nous gardons ici la notation $\hat{G}_{\epsilon_F-\omega}$ au lieu de $\hat{G}_{\epsilon_F-\hbar\omega}$.

où $\hat{j}_x = -e\hat{p}_x/m$ est l'opérateur courant dans la direction Ox. Le facteur $s = 2$ tient compte de la dégénérescence de spin. La fonction de Green est donnée par la relation (3.13) et l'hamiltonien $\mathcal{H}$ par (2.1).

La relation $\mathrm{Im}\hat{G}^R = (\hat{G}^R - \hat{G}^A)/2i$ fait apparaître les produits $\hat{G}^R\hat{G}^A$, $\hat{G}^R\hat{G}^R$ et $\hat{G}^A\hat{G}^A$. Dans le complément C4.5 on montre que les termes $\hat{G}^R\hat{G}^R$ et $\hat{G}^A\hat{G}^A$ donnent des contributions négligeables. Leur moyenne est d'ordre $1/k_F l_e$ par rapport aux termes $\hat{G}^R\hat{G}^A$. Par ailleurs, au moyen d'une identité de Ward (4.212), il est possible de relier le produit $\hat{G}^R\hat{G}^R$ à $\hat{G}^R$. Ce terme ne contribue ni aux effets d'interférence considérés dans ce chapitre, ni aux fluctuations étudiées dans le chapitre 11. On garde finalement

$$\boxed{\sigma_{xx}(\omega) = \frac{s\hbar}{2\pi\Omega}\mathrm{Re}\,\mathrm{Tr}\left[\hat{j}_x\,\hat{G}^R_{\epsilon_F}\,\hat{j}_x\,\hat{G}^A_{\epsilon_F-\omega}\right]} \tag{7.2}$$

L'opérateur courant est égal à $\hat{j}_x = -e\hbar\hat{k}_x/m = i\frac{e\hbar}{m}\partial/\partial x$. On peut évaluer la trace en utilisant la représentation spatiale, ce qui donne pour la conductivité moyennée sur le désordre $\overline{\sigma}_{xx}(\omega)$, que nous noterons dorénavant $\sigma(\omega)$:

$$\sigma(\omega) = \overline{\sigma}_{xx}(\omega) = -s\frac{e^2\hbar^3}{2\pi m^2\Omega}\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\ \mathrm{Re}\ \overline{\partial_x G^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\partial_{x'}G^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})} \tag{7.3}$$

tandis qu'en représentation impulsion, on obtient [3]

$$\boxed{\sigma(\omega) = s\frac{e^2\hbar^3}{2\pi m^2\Omega}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} k_x k'_x\ \mathrm{Re}\ \overline{G^R_\epsilon(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')G^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})}} \tag{7.4}$$

où la fonction de Green $G^R_\epsilon(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')$ est donnée par (3.31).

Remarque

La dépendance spatiale $\sigma(\boldsymbol{q},\omega)$ de la conductivité moyenne s'exprime par une relation analogue à (7.4) :

$$\sigma(\boldsymbol{q},\omega) = s\frac{e^2\hbar^3}{2\pi m^2\Omega}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} k_x k'_x\ \overline{G^R_\epsilon(\boldsymbol{k}_+,\boldsymbol{k}'_+)G^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{k}'_-,\boldsymbol{k}_-)}\quad , \tag{7.5}$$

où $\boldsymbol{k}_\pm = \boldsymbol{k} \pm \frac{\boldsymbol{q}}{2}$. Cette expression est similaire à celle obtenue pour la probabilité $P(\boldsymbol{q},\omega)$, donnée par la relation (4.12) (en rétablissant $\hbar$ à la fois dans les fonctions de Green et dans la densité d'états ρ_0) :

$$P(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{\hbar}{2\pi\rho_0\Omega}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}\overline{G^R_\epsilon(\boldsymbol{k}_+,\boldsymbol{k}'_+)G^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{k}'_-,\boldsymbol{k}_-)}\quad . \tag{7.6}$$

Cependant, le facteur supplémentaire $k_x k'_x$ dans la conductivité ne permet généralement pas d'obtenir une relation directe entre $\sigma(\boldsymbol{q},\omega)$ et $P(\boldsymbol{q},\omega)$.

[3] On note $\epsilon = \epsilon_F$ sans préciser systématiquement l'énergie de Fermi sauf lorsque cela est nécessaire.

On a vu dans le chapitre 4 que P est bien décrite par la somme de trois termes dont le premier $P_0(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$ représente la probabilité quantique qu'une particule atteigne le point $\boldsymbol{r}'$ sans avoir subi de collision (Drude-Boltzmann). Les deux premières contributions P_0 et P_d sont classiques et ne prennent en compte aucun effet de phase, tandis que la troisième, X_c, décrit le cooperon. On suit ici la même démarche et on représente (fig. 7.1) la conductivité moyenne comme la somme de trois termes correspondant respectivement à P_0, P_d et X_c. On évalue ces trois termes dans les sections suivantes.

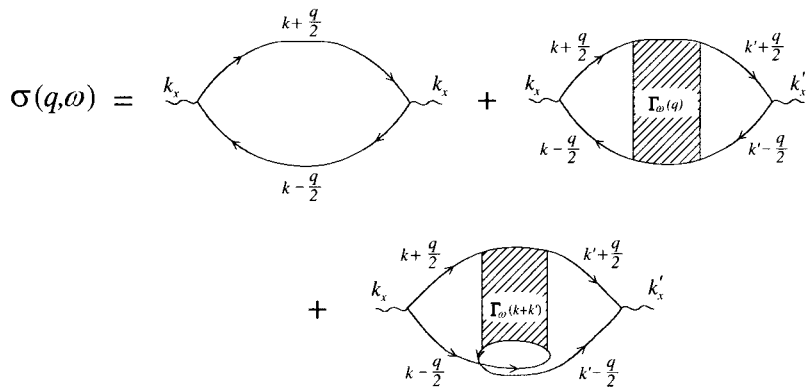


FIG. 7.1 – *Représentations des contributions de Drude-Boltzmann, du diffuson et du cooperon à la conductivité moyenne. Dans le cas de collisions isotropes, le second diagramme est nul (section 7.2.2). Dans le cas de collisions anisotropes, le troisième diagramme doit être « habillé » par une ligne d'impureté supplémentaire (complément C7.4).*

Remarque

La théorie de la réponse linéaire permet de définir une conductivité non locale $\sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$, réponse au champ électrique local $\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}')$ et telle que $j_\alpha(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r}' \sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') E_\beta(\boldsymbol{r}')$ [139] :

$$\sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = -s\frac{e^2\hbar^3}{2\pi m^2}\left[\partial_\alpha \mathrm{Im}G^R_\epsilon(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\partial'_\beta \mathrm{Im}G^R_\epsilon(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}) - \mathrm{Im}G^R_\epsilon(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\partial_\alpha\partial'_\beta \mathrm{Im}G^R_\epsilon(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r})\right] . \quad (7.7)$$

Contrairement à (7.3) où on les a éliminés, il est nécessaire de garder ici les produits $G^R G^R$ et $G^A G^A$ pour obtenir une expression correcte de $\sigma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ qui en particulier assure la conservation du courant. Leur contribution est négligeable après l'intégration (7.8). On vérifie que la conductivité σ définie par (7.1) est telle que :

$$\sigma = \frac{1}{\Omega}\iint d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\sigma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \quad . \quad (7.8)$$

En calculant la moyenne sur le désordre $\overline{\sigma}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ de la conductivité, on montre que, pour des collisions isotropes, elle s'écrit [139] :

$$\overline{\sigma}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \sigma_0\left[\frac{3}{4\pi l_e}\frac{R_\alpha R_\beta}{R^4}e^{-R/l_e} - D\partial_\alpha\partial'_\beta P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\right] \quad (7.9)$$

où $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'$ et $\sigma_0 = ne^2\tau_e/m$. La conservation du courant $\sum_\alpha \partial_\alpha \sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \sum_\beta \partial'_\beta \sigma_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = 0$ implique que P_d est solution de l'équation de diffusion $-D\Delta P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \overline{\delta}(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ où $\overline{\delta}$ est une fonction normalisée de portée l_e. En intégrant $\overline{\sigma}_{\alpha\beta}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ sur le volume (7.8), le second terme donne une contribution nulle, de sorte que l'on retrouve la conductivité de Drude $\overline{\sigma}_{\alpha\beta} = \sigma_0\delta_{\alpha\beta}$ (voir section suivante). Ce second terme est néanmoins essentiel car il assure la conservation du courant, c'est-à-dire du nombre de particules. La structure de l'expression (7.9) est très voisine de celle de la probabilité $P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = P_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') + P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ pour laquelle il a été montré dans la section 4.4 que le diffuson P_d assure la conservation du nombre de particules. On voit ainsi que, tout comme $P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$, la conductivité $\sigma(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ est une quantité essentiellement *non locale*. Sa structure permet de comprendre la relation profonde qui existe entre les formalismes de Kubo et de Landauer (voir p. 332).

7.2 Contribution incohérente à la conductivité

7.2.1 L'approximation de Drude-Boltzmann

Cette approximation est équivalente à celle utilisée pour le calcul de P_0. Elle consiste à prendre

$$\overline{G^R_\epsilon(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')G^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})} \simeq \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}) \tag{7.10}$$

où les fonctions de Green moyennes sont données par (3.87) :

$$\overline{G}^{R,A}_\epsilon(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}') = \overline{G}^{R,A}_\epsilon(\boldsymbol{k})\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} = \frac{\delta_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}}{\epsilon - \epsilon_{\boldsymbol{k}} \pm i\frac{\hbar}{2\tau_e}} \quad . \tag{7.11}$$

On obtient alors pour la conductivité (7.4) une contribution notée $\sigma_0(\omega)$:

$$\sigma_0(\omega) = s\frac{e^2\hbar^3}{2\pi m^2\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} k_x^2 \ \mathrm{Re}\ \frac{1}{(\epsilon_F - \epsilon_{\boldsymbol{k}} + i\frac{\hbar}{2\tau_e})}\frac{1}{(\epsilon_F - \omega - \epsilon_{\boldsymbol{k}} - i\frac{\hbar}{2\tau_e})} \quad . \tag{7.12}$$

Dans cette expression, on remplace la somme discrète par une intégrale, en utilisant

$$\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} f(\epsilon(k)) \to \int d\epsilon\rho_0(\epsilon)\int d\varpi f(\epsilon,\varpi) \tag{7.13}$$

où ϖ est l'angle solide normalisé ($\int d\varpi = 1$) et où ρ_0 est la densité d'états par unité de volume et par direction de spin. La dépendance en énergie de k_x^2 est régulière et on suppose que la densité d'états varie peu sur l'échelle d'énergie $\hbar/\tau_e$ autour de ϵ_F. Le produit $\rho_0 k_x^2$ peut donc être extrait de l'intégrale. Par ailleurs, la moyenne angulaire de k_x^2 donne k_F^2/d. En calculant l'intégrale par la méthode des résidus et en introduisant le coefficient de diffusion $D = v_F^2\tau_e/d$, on obtient finalement pour la conductivité à fréquence nulle $\sigma_0 = \sigma_0(\omega = 0)$:

$$\boxed{\sigma_0 = se^2\rho_0(\epsilon_F)D} \tag{7.14}$$

qui est la relation d'Einstein [140, 141]. Pour des électrons libres, la densité d'états s'exprime (à toute dimension d) en fonction de la densité électronique n par

$$\rho_0(\epsilon) = \frac{n(\epsilon)d}{2s\epsilon} \quad . \tag{7.15}$$

On en déduit l'expression usuelle de la conductivité de Drude [142] :

$$\sigma_0 = \frac{ne^2\tau_e}{m} \quad . \tag{7.16}$$

À partir de l'expression (3.44) de la densité d'états, on peut aussi écrire la conductivité sous la forme

$$\sigma_0 = sA_d\frac{e^2}{h}\left(\frac{k_F}{2\pi}\right)^{d-1} l_e \tag{7.17}$$

où $A_d = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(d/2+1)}$ est le volume de la sphère unité en dimension d.

À l'approximation de Drude, on a pu extraire, dans la relation (7.4), le terme $k_x k'_x$ de la somme sur les impulsions et le remplacer par k_F^2/d. En comparant les expressions (7.5) et (7.6), on voit que la conductivité de Drude est proportionnelle à la contribution correspondante P_0 à la probabilité classique :

$$\sigma_0(\omega) = se^2\rho_0\frac{v_F^2}{d}\mathrm{Re}P_0(\boldsymbol{q}=0,\omega) \tag{7.18}$$

ou encore

$$\sigma_0(\omega) = \frac{ne^2}{m}\int d\boldsymbol{r}'\mathrm{Re}P_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) \tag{7.19}$$

ce qui, compte tenu de la relation (4.20), donne

$$\sigma_0(\omega) = \frac{ne^2}{m}\mathrm{Re}\frac{\tau_e}{1-i\omega\tau_e} \quad . \tag{7.20}$$

Enfin, la conductance moyenne est donnée par la loi d'Ohm

$$\overline{G} = \sigma_0 L^{d-2} \quad . \tag{7.21}$$

C'est la généralisation à d dimensions de la forme habituelle $\overline{G} = \sigma_0 S/L$ pour un échantillon de longueur L et de section S. En dimension d, la conductance moyenne est égale à

$$\overline{G} = sA_d\frac{e^2}{h}\frac{k_F l_e}{2\pi}(k_F L)^{d-2} \quad . \tag{7.22}$$

Elle est indépendante de la taille en dimension $d = 2$. Pour un fil de longueur L et de section S, elle s'écrit

$$\overline{G} = s\frac{e^2}{h}\frac{k_F^2 l_e S}{3\pi L} \quad . \tag{7.23}$$

Remarque : Conductance et énergie de Thouless

La conductivité de Drude étant proportionnelle au coefficient de diffusion D, elle peut se récrire en fonction de l'énergie de Thouless $E_c = \hbar D/L^2$ définie dans la section 5.5.1 comme l'inverse du temps de diffusion à travers un système de taille finie L. En effet, puisque la densité d'états par unité de volume est égale à $1/(\Omega\Delta)$, où Δ est la distance moyenne entre niveaux d'énergie, la conductivité σ_0 donnée par la formule d'Einstein (7.14) se récrit $\sigma_0 = se^2D/\Omega\Delta$. La conductance moyenne est donnée par la loi d'Ohm $\overline{G} = \sigma_0 L^{d-2}$. Elle est donc égale à :

$$\overline{G} = s\frac{e^2}{\hbar}\frac{E_c}{\Delta} \quad . \tag{7.24}$$

Cette expression fait apparaître le quantum de conductance e^2/h dont l'inverse h/e^2 est égal à 25,8 $k\Omega$. Ainsi la conductance sans dimension $g = \overline{G}/(e^2/h)$ apparaît comme le rapport de deux énergies caractéristiques, l'énergie de Thouless et la distance entre niveaux :

$$\boxed{g = 2\pi s\frac{E_c}{\Delta}} \tag{7.25}$$

On notera que, dans la littérature, l'énergie de Thouless est parfois définie par $E_c = hD/L^2$, de sorte que l'on rencontre aussi l'expression $g = s\frac{E_c}{\Delta}$.

La conductance peut aussi s'interpréter comme une mesure de la sensibilité des niveaux d'énergie d'un système isolé à un changement des conditions aux limites. Ce point de vue a été développé par Thouless [143].

Remarque : La conductance comme mesure du désordre

La limite $k_F l_e \gg 1$ décrit le cas d'un système faiblement désordonné (relation 3.84), c'est-à-dire pour lequel les fonctions d'onde sont bien décrites par des ondes planes faiblement perturbées par le potentiel de désordre. Cette limite est celle d'un métal bon conducteur. Il existe cependant une autre manière tout aussi naturelle de caractériser la qualité d'un conducteur qui consiste à utiliser sa conductance électrique adimensionnée g mesurée en unité de $e^2/h = 1/(25{,}8\ k\Omega)$. Une valeur $g \gg 1$ correspond à un bon conducteur (et inversement $g \ll 1$ décrit un isolant). La question se pose alors de la correspondance entre ces deux critères. Pour y répondre, on utilise l'expression (7.17) de la conductivité de Drude σ_0. De la loi d'Ohm $\overline{G} = \sigma_0 L^{d-2}$, on déduit que

$$g \propto k_F l_e (k_F L)^{d-2} \quad . \tag{7.26}$$

Pour $d = 2$, g est directement proportionnelle à $k_F l_e$ et les deux critères sont équivalents. Pour $d = 3$, le critère $k_F l_e \gg 1$ implique $g \gg 1$. Dans la limite inverse $k_F l_e \ll 1$, la loi d'Ohm (7.26) n'est plus vérifiée et l'approche perturbative ne s'applique plus. Les états électroniques deviennent spatialement localisés. Dans ce cas, la conductance décroît exponentiellement avec la taille et $g \ll 1$. Pour $d = 1$, l'approche perturbative en $1/k_F l_e$ n'est pas valable (exercice 3.9). Les états électroniques sont localisés et g est toujours petite tant que $L > l_e$.
Ainsi la conductance g est une bonne mesure du désordre et elle peut être utilisée pour interpoler entre les deux limites $g \gg 1$ pour un conducteur et $g \ll 1$ pour un isolant [144]. Nous avons également vu que le paramètre $1/g$ mesure la probabilité de croisement de deux diffusons, c'est-à-dire l'importance des corrections quantiques au transport classique (section C4.2.3).

Remarque : Couplage à d'autres degrés de liberté

La conductivité de Drude (7.16) est proportionnelle au temps de collision élastique τ_e, c'est-à-dire directement reliée à l'inverse de la partie imaginaire de la self-énergie (3.73). Nous n'avons considéré ici que la contribution à la conductivité des collisions élastiques sur le potentiel aléatoire dû aux impuretés statiques. On pourrait de même prendre en compte le couplage à d'autres degrés de liberté (voir la section 6.5) découplés les uns des autres (impuretés magnétiques, couplage spin-orbite, etc.) et généraliser la relation (7.16) sous la forme

$$\sigma_0 = \frac{ne^2\tau_{tot}}{m} \tag{7.27}$$

où le temps effectif τ_{tot} est donné par la règle de Matthiessen (voir la remarque de la p. 92)

$$\frac{1}{\tau_{tot}} = \frac{1}{\tau_e} + \frac{1}{\tau_{so}} + \frac{1}{\tau_m} \quad . \tag{7.28}$$

Le couplage à des degrés de liberté dynamiques (phonons, interaction avec les autres électrons) peut aussi être incorporé de façon phénoménologique à cette expression de la conductivité. L'interaction électron-phonon n'est pas abordée dans cet ouvrage (on pourra consulter [142, 145]). Le cas de l'interaction coulombienne avec les autres électrons peut aussi se décrire par un temps caractéristique. Nous y reviendrons en détail dans la section 13.6.

En général, le temps de collision élastique est le plus petit, $\tau_e \ll \tau_{so}, \tau_m$. De plus, on se placera à suffisamment basse température pour que l'on puisse négliger l'interaction avec les phonons. Ce sont d'ailleurs les conditions nécessaires pour observer des effets de cohérence de phase. Dans ces conditions, la conductivité de Drude est égale à $ne^2\tau_e/m$.

7.2.2 Le régime de collisions multiples : le diffuson

La normalisation de la probabilité de diffusion quantique nécessite de prendre en compte, en plus du terme de Drude-Boltzmann, la contribution associée aux collisions multiples à l'approximation du diffuson (section 4.4). Voyons maintenant quelle est la contribution du diffuson à la conductivité. Celle-ci s'obtient à partir de la relation (7.4) où on introduit le diffuson (4.83) dans la moyenne des fonctions de Green. Cette contribution, notée σ_d, est égale à :

$$\sigma_d(\omega) = s\frac{e^2\hbar^3}{2\pi m^2\Omega^2}\left(\frac{2\pi\rho_0}{\hbar}\right)^2 \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} k_x k'_x \text{ Re } \tilde{P}_0(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\omega)\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}',\boldsymbol{q})\tilde{P}_0(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{q},\omega) \tag{7.29}$$

avec $\tilde{P}_0(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\omega) = \frac{\hbar}{2\pi\rho_0}\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k}_+)\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{k}_-)$ et où $\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}',\boldsymbol{q})$ est le facteur de structure (4.157) qui dépend *a priori* du vecteur de diffusion $\boldsymbol{q}$ et des directions d'incidence et d'émergence du processus de diffusion. Cette expression est similaire à celle (4.83) obtenue pour $P_d(\boldsymbol{q},\omega)$. Mais le produit $k_x k'_x$ joue ici un rôle crucial.

On note d'abord que la fonction $\tilde{P}_0$ est piquée autour de k_F. Puis, on sépare les sommes sur les modules k et k' et les intégrations angulaires.

On en déduit la contribution du diffuson à la conductivité, dans la limite $\boldsymbol{q} \to 0$, en regroupant les constantes afin de faire apparaître $\sigma_0(\omega)$:

$$\sigma_d(\omega) = \sigma_0(\omega)\mathrm{Re}\frac{1}{(1-i\omega\tau_e)}\frac{d}{\gamma_e}\Big\langle(\hat{\boldsymbol{s}}.\hat{\boldsymbol{x}})(\hat{\boldsymbol{s}}'.\hat{\boldsymbol{x}})\ \Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}')\Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}'} \tag{7.30}$$

où $\langle\cdots\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}'}$ est la moyenne sur les directions $\hat{\boldsymbol{s}}$ et $\hat{\boldsymbol{s}}'$ et où on note $\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}') = \Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}';\boldsymbol{q}=0)$. On pourra se reporter au complément C4.3 pour plus de détails.

• Pour des *collisions isotropes*, $\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}';\boldsymbol{q})$ ne dépend pas des directions incidente et émergente, la moyenne du produit $\hat{\boldsymbol{s}}.\hat{\boldsymbol{s}}'$ donne une contribution nulle. Par conséquent, la contribution du diffuson à la conductivité est nulle : $\sigma_d(\omega) = 0$.

• Si maintenant *les collisions sont anisotropes*, c'est-à-dire si le potentiel de collision $v(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$ a une structure angulaire, alors $\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}')$ dépend de $\hat{\boldsymbol{s}}$ et $\hat{\boldsymbol{s}}'$ et vérifie l'équation intégrale (4.163). Il reste une contribution finie du diffuson. Afin de calculer la moyenne angulaire dans (7.30), on introduit le vecteur [146, 147] :

$$\Lambda_\omega\hat{\boldsymbol{s}} = \Big\langle\hat{\boldsymbol{s}}'\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}')\Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}'} \tag{7.31}$$

colinéaire à $\hat{\boldsymbol{s}}$. En multipliant (4.163) par $\hat{\boldsymbol{s}}'$ et en moyennant sur celui-ci, on obtient l'équation

$$\Lambda_\omega\hat{\boldsymbol{s}} = \gamma_1\hat{\boldsymbol{s}} + \frac{1}{\gamma_e}f_\omega\Lambda_\omega\Big\langle\hat{\boldsymbol{s}}''B(\hat{\boldsymbol{s}}''-\hat{\boldsymbol{s}})\Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}}''} \tag{7.32}$$

où $f_\omega = f_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}'',\boldsymbol{q}=0) = 1/(1-i\omega\tau_e)$ définie par (4.77) n'a pas de dépendance angulaire pour $\boldsymbol{q}=0$. Cette expression de f_ω est valable pour tout $\omega\tau_e$, même au-delà du régime diffusif. L'équation (7.32) a pour solution

$$\Lambda_\omega = \frac{\gamma_1}{1-f_\omega\gamma_1/\gamma_e} \tag{7.33}$$

où les quantités γ_1 et γ_e sont définies par (4.159). Enfin, en notant s_x la composante de $\hat{\boldsymbol{s}}$ le long de Ox, on a

$$\Big\langle s_x s_x'\ \mathrm{Re}\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}',\boldsymbol{q})\Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}'} = \frac{\Lambda_\omega}{d} \tag{7.34}$$

d'où on déduit pour $\sigma_d(\omega)$:

$$\sigma_d(\omega) = \sigma_0(\omega)\ \mathrm{Re}\frac{1}{1-i\omega\tau_e}\frac{\gamma_1/\gamma_e}{1-f_\omega\gamma_1/\gamma_e} \tag{7.35}$$

de sorte que la conductivité totale, que nous notons $\sigma_{cl}(\omega) = \sigma_0(\omega) + \sigma_d(\omega)$, s'écrit :

$$\boxed{\sigma_{cl}(\omega) = se^2D^*\rho_0\ \mathrm{Re}\ \frac{1}{1-i\omega\tau^*}} \tag{7.36}$$

où le temps de transport τ^* est donné par [4]

$$\boxed{\frac{1}{\tau^*} = 2\pi\rho_0(\gamma_e - \gamma_1) = 2\pi\rho_0 n_i \Big\langle v^2(\theta)(1-\cos\theta)\Big\rangle} \tag{7.37}$$

et la constante de diffusion D^* est

$$D^* = \frac{v_F^2 \tau^*}{d} \quad . \tag{7.38}$$

On obtient finalement pour la conductivité totale $\sigma_{cl}(\omega)$ une expression identique à la conductivité de Drude (7.20) mais où le temps élastique moyen τ_e est remplacé par le temps de transport τ^*. Les deux expressions coïncident pour des collisions isotropes, auquel cas $\tau^* = \tau_e$.

Il est utile de revenir sur la structure des expressions de $P_d(\boldsymbol{q},\omega)$ et de $\sigma_d(\omega)$. On pourrait en effet se demander pourquoi ces deux quantités sont si différentes, alors que les expressions de départ (7.5) et (7.6) sont très analogues, au produit $k_x k'_x$ près qui intervient dans la conductivité. Les deux quantités s'écrivent en fonction du facteur de structure qui, dans la limite $\boldsymbol{q} \to 0$, a la structure angulaire suivante (voir la relation 4.165)

$$\Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q}) = \Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) + \hat{\boldsymbol{s}}.\hat{\boldsymbol{s}}'\Lambda_\omega \quad . \tag{7.39}$$

Le calcul de $P_d(\boldsymbol{q},\omega)$ implique la moyenne $\Big\langle \Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})\Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}'} = \Gamma_\omega(\boldsymbol{q})$ qui a un pôle en $\omega = 0$, alors que la conductivité $\sigma_d(\omega)$ fait intervenir la moyenne $\Big\langle s_x s_{x'} \Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}, \hat{\boldsymbol{s}}', \boldsymbol{q})\Big\rangle_{\hat{\boldsymbol{s}},\hat{\boldsymbol{s}}'}$ proportionnelle à Λ_ω et qui n'a pas de pôle en $\omega = 0$.

7.2.3 Temps de transport et renormalisation de vertex

On étudiera généralement les propriétés de transport en se limitant au cas le plus simple où la diffusion est isotrope, mais on peut se demander comment ces propriétés doivent être modifiées dans le cas où les collisions sont anisotropes. Il suffit, d'une part, de remplacer D par D^* dans le pôle de diffusion. D'autre part, *l'opérateur courant doit être renormalisé.* Pour voir pourquoi et comment mettre en œuvre cette renormalisation, reprenons l'exemple de la conductivité. Le calcul de $\sigma_{cl} = \sigma_0 + \sigma_d$ fait intervenir la somme des deux premiers diagrammes de la figure 7.1. À cause des propriétés du diffuson, tout se passe comme si on ne considérait que le diagramme pour σ_0 (le premier de la figure 7.1) mais en remplaçant le vertex impulsion entrant $\boldsymbol{k} = k\hat{\boldsymbol{s}}$ par

$$k\left[\hat{\boldsymbol{s}} + \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}'} \hat{\boldsymbol{s}}' G^R(\boldsymbol{k}') G^A(\boldsymbol{k}') \Gamma_\omega(\hat{\boldsymbol{s}}', \hat{\boldsymbol{s}})\right] \tag{7.40}$$

[4] On a déjà introduit le temps τ^* pour le calcul de la probabilité P_d avec des collisions anisotropes (relation 4.170).

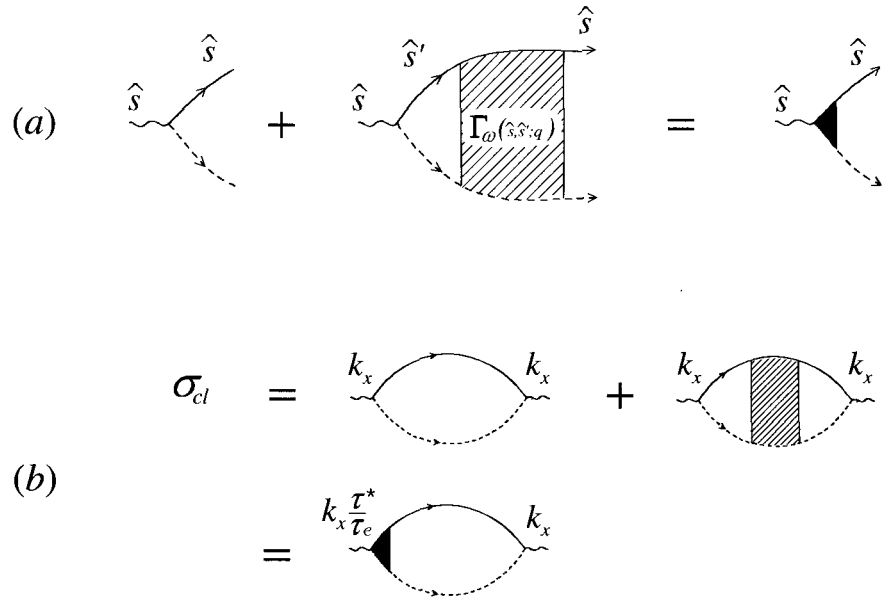


FIG. 7.2 – *a) Renormalisation du vertex de courant pour des collisions anisotropes. b) Conductivité classique σ_{cl} pour des collisions anisotropes.*

ou encore, à l'aide des relations (4.161, 7.31), en effectuant la substitution

$$\hat{s} \longrightarrow \hat{s} + \frac{f_\omega}{\gamma_e}\Big\langle \hat{s}'\Gamma_\omega(\hat{s}',\hat{s})\Big\rangle = \hat{s}\left(1 + f_\omega\frac{\Lambda_\omega}{\gamma_e}\right) \tag{7.41}$$

représentée sur la figure 7.2.*a*. À fréquence nulle la quantité Λ_0 donnée par (7.33) est égale à $\Lambda_0 = \gamma_1\gamma_e/(\gamma_e - \gamma_1)$ de sorte que $(1 + \Lambda_0/\gamma_e) = \gamma_e/(\gamma_e - \gamma_1) = \tau^*/\tau_e$. On doit donc effectuer la substitution :

$$\boxed{\hat{s} \longrightarrow \hat{s}\,\frac{\tau^*}{\tau_e}} \tag{7.42}$$

où τ^* est le temps de transport (7.37). Tout se passe donc comme si on remplaçait, dans le diagramme donnant σ_0, un des vecteurs d'onde k_x par $k_x(1 + \Lambda_0/\gamma_e) = k_x\tau^*/\tau_e$ (fig. 7.2.*b*). Le coefficient de diffusion $D = \langle v_x^2\tau_e\rangle$ doit donc être remplacé par $D^* = \langle v_x^2\tau^*\rangle$ [148].

7.3 Contribution du cooperon

Nous avons vu dans la section 4.6 qu'il existe une troisième contribution à la probabilité de diffusion quantique appelée cooperon et qui correspond aux

mêmes trajectoires que celles décrites par le diffuson mais parcourues en sens inverse l'une de l'autre (fig. 4.7). Le cooperon donne aussi une contribution à la conductivité (7.4) qui s'écrit

$$\sigma_c(\omega) = s\frac{e^2\hbar^3}{2\pi m^2\Omega^2}\left(\frac{2\pi\rho_0}{\hbar}\right)^2 \sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} k_x k'_x \mathrm{Re}\left[\tilde{P}_0(\boldsymbol{k},\boldsymbol{q},\omega)\tilde{P}_0(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{q},\omega)\Gamma'_\omega(\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}')\right] \tag{7.43}$$

et qui correspond au dernier diagramme de la figure 7.1. Notons la similitude entre cette expression et celle (4.90) obtenue pour $X_c(\boldsymbol{q},\omega)$. La fonction $\Gamma'_\omega = \Gamma_\omega$ est donnée par (4.93) et dépend de $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}'$. *Contrairement au cas du diffuson, la contribution du cooperon à la conductivité a une structure angulaire*, même si le potentiel de collision $v(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{k}')$ en est dépourvu. Cette contribution est singulière et diverge dans la limite $\omega \to 0$ et $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{k}' = 0$. Elle s'obtient donc en sélectionnant les directions angulaires autour de la valeur particulière $\boldsymbol{k} = -\boldsymbol{k}'$. Par conséquent, le produit $k_x k'_x$ se moyenne à $-k_F^2/d$. On peut écrire directement $\sigma_c(\omega)$ en fonction de la probabilité de diffusion quantique $X_c(\boldsymbol{q} = 0,\omega)$ associée au cooperon [5]

$$\sigma_c(\omega) = -se^2\rho_0\frac{v_F^2}{d}\mathrm{Re}\ X_c(\boldsymbol{q}=\boldsymbol{0},\omega) \quad . \tag{7.44}$$

En utilisant l'expression (4.96) de $X_c(\boldsymbol{q},\omega)$, on obtient finalement :

$$\boxed{\sigma_c(\omega) = -s\frac{e^2 D}{\pi\hbar\Omega}\sum_{\boldsymbol{Q}}\mathrm{Re}\frac{1}{-i\omega + DQ^2}} \tag{7.45}$$

ou encore, par transformation de Fourier, et pour un système invariant par translation

$$\sigma_c(\omega) = -\frac{ne^2}{m}\int d\boldsymbol{r}'\mathrm{Re}X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) \tag{7.46}$$

soit, pour la conductivité totale

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m}\int d\boldsymbol{r}'\mathrm{Re}\left[P_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) - X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)\right] \quad . \tag{7.47}$$

Compte tenu de (4.52), on a encore

$$\sigma_c(\omega) = -s\frac{e^2 D}{\pi\hbar}\mathrm{Re}X_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega) \quad . \tag{7.48}$$

[5] On néglige la dépendance en ω de $\tilde{P}_0(\boldsymbol{k},0,\omega)$ qui n'est pas singulière.

On peut donc exprimer la correction à fréquence nulle à la conductivité de Drude-Boltzmann en fonction de la probabilité $X_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t)$ de retour à l'origine d'un mouvement de diffusion par

$$\sigma_c(\omega = 0) = -s\frac{e^2 D}{\pi\hbar}\int_0^\infty dt X_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t) \tag{7.49}$$

ou encore, en utilisant (5.5),

$$\boxed{\sigma_c(\omega = 0) = -s\frac{e^2 D}{\pi\hbar\Omega}\int_0^\infty dt Z_c(t)} \tag{7.50}$$

où $Z_c(t)$ est la contribution du cooperon à la probabilité intégrée de retour à l'origine. Pour des collisions anisotropes, il suffit de changer τ_e en τ^*, et D en $D^* = v_F^2\tau^*/d$ (voir le complément C7.4).

7.4 Le régime de localisation faible

Les relations (7.45) ou (7.50) permettent de calculer la correction quantique à la conductivité de Drude-Boltzmann associée au cooperon. Le signe négatif de cette correction provient de la sélection de la direction $\boldsymbol{k}' \simeq -\boldsymbol{k}$ pour laquelle la contribution du processus de diffusion cohérente est maximale. Cette réduction de la conductivité par les effets d'interférence est appelée *localisation faible*. L'adjectif « faible » vient ici traduire le fait que cette correction est petite par rapport à la contribution principale de Drude par un facteur $1/k_F l_e \ll 1$. On verra dans la section 7.5.2 qu'en présence de couplage spin-orbite, la correction peut devenir positive.

De la relation (7.49), on peut déduire la correction relative $\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = \frac{\sigma_c}{\sigma_0}$ de localisation faible à fréquence nulle sous la forme intégrale :

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = -\frac{1}{\pi\hbar\rho_0}\int_0^\infty dt X_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t) \tag{7.51}$$

ce qui, compte tenu de (7.50), conduit à

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = -\frac{\Delta}{\pi\hbar}\int_0^\infty dt Z_c(t) \quad . \tag{7.52}$$

L'énergie définie par $\Delta = \frac{1}{\Omega\rho_0}$ représente l'espacement moyen par direction de spin (au niveau de Fermi) des niveaux d'énergie.

On a supposé jusque-là que les trajectoires conjuguées par renversement du sens du temps sont cohérentes de phase. Ceci n'est plus vrai si certains processus changent leur phase relative (voir chap. 6). Dans la suite de ce chapitre, on reprend certains d'entre eux : effet d'un champ magnétique, diffusion spin-orbite et diffusion par des impuretés magnétiques. On ne considère

pas ici le déphasage associé aux degrés de liberté dynamiques comme le couplage électron-phonon et l'interaction entre électrons qui sera étudiée dans le chapitre 13 (voir la discussion de la section 6.8). Suivant que le déphasage correspond à un processus déterministe ou non, on dira que l'on a affaire à un temps de coupure τ_γ ou de cohérence de phase τ_ϕ (voir la table 6.11). On peut ainsi récrire la correction (7.52) associée au cooperon sous la forme

$$\boxed{\Delta\sigma = -s\frac{e^2 D}{\pi\hbar\Omega}\int_0^\infty dt Z_c(t) e^{-\frac{t}{\tau_\phi}}} \tag{7.53}$$

qui prend en compte la disparition des longues trajectoires.

7.4.1 Rôle de la dimensionalité

Le comportement de la correction cohérente à la conductivité est contrôlé par le temps de récurrence τ_R défini par la relation (5.15), c'est-à-dire le temps passé par une particule qui diffuse au voisinage d'un point origine. Or pour un système infini ou dont la taille caractéristique est très supérieure à la longueur de cohérence de phase $L_\phi = \sqrt{D\tau_\phi}$, le comportement du temps de récurrence dépend de façon essentielle de la dimensionalité d'espace d, d'après les relations (5.30). On s'attend donc à ce que la correction de localisation faible, qui est proportionnelle à la probabilité intégrée de retour à l'origine, dépende aussi de d.

Notons d'abord que l'expression (7.53) n'a de sens que dans le régime diffusif, pour lequel $t > \tau_e$. Il convient donc de supprimer la divergence éventuelle de l'intégrale (7.53) aux temps courts en la bornant à τ_e. Pour cela, on récrit (7.53) sous la forme symétrique

$$\Delta\sigma = -s\frac{e^2 D}{\pi\hbar\Omega}\int_0^\infty dt Z_c(t)\left(e^{-\frac{t}{\tau_\phi}} - e^{-\frac{t}{\tau_e}}\right) \quad . \tag{7.54}$$

Considérons un milieu dont la taille caractéristique $L = \Omega^{1/d}$ est supérieure à L_ϕ. Aux échelles de temps inférieures à τ_ϕ, la diffusion est celle correspondant à un milieu infini et le noyau de la chaleur est donné par l'expression (5.23), $Z_c(t) = \Omega/(4\pi Dt)^{d/2}$. En utilisant la relation (15.74), l'intégrale prend, pour $d < 4$, la forme [6] :

$$\Delta\sigma = -s\frac{e^2}{\pi\hbar}\frac{1}{(4\pi)^{d/2}}\Gamma\left(1-\frac{d}{2}\right)\left[L_\phi^{2-d} - l_e^{2-d}\right] \quad . \tag{7.55}$$

[6] Avec les définitions habituelles de L_ϕ et l_e telles que $L_\phi^2 = D\tau_\phi$ et $l_e^2 = dD\tau_e$, la relation (7.55) devrait contenir la différence $L_\phi^{2-d} - (l_e/d)^{2-d}$. Mais la coupure τ_e est introduite de façon phénoménologique et la dépendance en l_e n'est donc obtenue qu'à une constante multiplicative près. On rencontre donc le plus souvent dans la littérature l'expression plus « symétrique » (7.55), d'où sont dérivées les relations (7.56) et (7.57). La dépendance en l_e n'est donc qu'indicative.

On en déduit, pour la conductivité exprimée en fonction du quantum de conductance e^2/h, les résultats importants :

$$\boxed{\begin{array}{ll} quasi-1d & \Delta\sigma = -s\dfrac{e^2}{h}\dfrac{1}{S}(L_\phi - l_e) \\[2ex] d=2 & \Delta\sigma = -s\dfrac{e^2}{\pi h}\ln\dfrac{L_\phi}{l_e} \\[2ex] d=3 & \Delta\sigma = -s\dfrac{e^2}{2\pi h}\left(\dfrac{1}{l_e} - \dfrac{1}{L_\phi}\right) \end{array}} \tag{7.56}$$

On ne considère pas ici le cas strictement unidimensionnel, pour lequel il n'existe pas de régime diffusif (voir exercice 3.9), mais plutôt celui d'un fil *quasi-unidimensionnel* de section finie S. « Quasi-unidimensionnel » signifie que la diffusion est unidimensionnelle, mais que le fil est néanmoins tridimensionnel dans la mesure où sa section est grande devant la longueur d'onde λ_F. Il admet un nombre suffisamment grand de canaux transverses (voir section C7.2.1) : cette limite correspond à un système tridimensionel très anisotrope. On utilise alors la relation (7.54) avec $\Omega = LS$ et $Z_c(t) = L/\sqrt{4\pi Dt}$.

Le résultat bidimensionnel correspond à un gaz d'électrons strictement confiné dans un plan. Pour un système quasi-$2d$ d'épaisseur a, la conductivité qui n'a alors plus les mêmes dimensions doit être divisée par a.

Compte tenu de l'expression (7.17) de σ_0, la correction relative de conductivité peut se récrire, pour $L_\phi \gg l_e$:

$$\begin{array}{ll} quasi-1d & \dfrac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = -\dfrac{3L_\phi}{4Ml_e} \\[2ex] d=2 & \dfrac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = -\dfrac{2}{\pi k_F l_e}\ln\dfrac{L_\phi}{l_e} \\[2ex] d=3 & \dfrac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = -\dfrac{3}{2(k_F l_e)^2} \quad . \end{array} \tag{7.57}$$

Pour le cas quasi-$1d$, on a fait apparaître le nombre de canaux $M = k_F^2 S/4\pi$ donné par la relation (7.142). À trois dimensions, la correction ne dépend pas de L_ϕ.

Exercice 7.1 : Montrer que l'on peut récrire la conductivité (7.53) sous la forme

$$\Delta\sigma(\omega) = -s\frac{e^2}{\pi\hbar\Omega}\sum_{\boldsymbol{Q}}\frac{1}{Q^2+\frac{1}{L_\phi^2}-i\frac{\omega}{D}} \quad . \tag{7.58}$$

En remplaçant la somme par une intégrale, c'est-à-dire à partir de la relation

$$\Delta\sigma(\omega) = -\frac{e^2 d}{\pi\hbar}A_d\int\frac{dQ}{(2\pi)^d}\frac{Q^{d-1}}{Q^2+\frac{1}{L_\phi^2}-i\frac{\omega}{D}} \tag{7.59}$$

où A_d est le volume de la sphère unité en dimension d donné par (15.2), montrer que l'on retrouve les expressions (7.56) et (7.57) pour la correction de localisation faible à fréquence nulle.
Lorsque $\omega = 0$ et $L_\phi \to \infty$, la convergence de l'intégrale (7.59) pour $Q = 0$ et pour $Q \to \infty$ dépend du signe de $d-2$. La divergence ultraviolette à $Q \to \infty$ est artificielle. En effet, l'approximation de diffusion $Ql_e \ll 1$, décrit des trajectoires électroniques dont la longueur est supérieure à l_e, donc l'intégrale sur Q admet $1/l_e$ pour borne supérieure. Pour $d \leq 2$, la divergence à $Q = 0$ est plus sérieuse et nécessite de garder une valeur finie de L_ϕ pour assurer la convergence de l'intégrale.

Exercice 7.2 : À partir de la relation (7.58), montrer que pour un fil quasi-unidimensionnel connecté et avec L_ϕ fini, la correction de localisation faible à la conductance moyenne, exprimée en unités de e^2/h, s'écrit :

$$\Delta g = -\frac{2s}{\pi^2}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{1}{n^2+(x/\pi)^2} \tag{7.60}$$

avec $x = L/L_\phi$. Cette somme est égale à

$$\Delta g = -s\left(\frac{1}{x}\coth x - \frac{1}{x^2}\right) \tag{7.61}$$

et elle admet les comportements limites

$$\begin{aligned} \Delta g &\to -\frac{s}{3} && \text{si } L_\phi \gg L \\ \Delta g &\to -s\frac{L_\phi}{L} && \text{si } L_\phi \ll L \quad . \end{aligned} \tag{7.62}$$

Quand doit-on considérer qu'un fil est uni- ou tridimensionnel au sens de la diffusion ? On a vu dans la section 5.5.4 que la dimensionalité effective dépend de l'échelle de temps considérée pour le processus de diffusion. Ainsi pour un fil de section finie, la diffusion est tridimensionnelle aux temps courts et unidimensionnelle aux temps longs. La correction de localisation faible, qui résulte de la contribution de toutes les trajectoires de diffusion, est donc tridimensionnelle aux temps petits devant le temps de diffusion transverse (section 5.5.4) et unidimensionnelle aux temps plus longs. La dépendance en L_ϕ de la conductivité sera donc donnée par le résultat tridimensionnel si L_ϕ est inférieure à la dimension transverse du fil et par le résultat unidimensionnel dans le cas contraire. Ainsi, en abaissant la température et donc en augmentant L_ϕ, on peut en principe observer le passage d'un comportement tridimensionnel à un comportement unidimensionnel [149].

7.4.2 Conducteurs de taille finie

Pour un conducteur de taille finie, on caractérise le transport par la conductance reliée à la conductivité par la loi d'Ohm $G = \sigma L^{d-2}$. En introduisant la conductance sans dimension $g = G/(e^2/h)$, on obtient, à partir de (7.17) et (7.56), la conductance de Drude g et la correction de localisation faible Δg :

$$\boxed{\begin{array}{lll} quasi-1d & g = s\dfrac{4}{3}\dfrac{Ml_e}{L} & \Delta g = -s\dfrac{L_\phi}{L} \\[2ex] d=2 & g = \dfrac{s}{2}k_F l_e & \Delta g = -\dfrac{s}{\pi}\ln\dfrac{L_\phi}{l_e} \\[2ex] d=3 & g = s\dfrac{k_F^2 L l_e}{3\pi} & \Delta g = -\dfrac{s}{2\pi}\dfrac{L}{l_e} \end{array}} \tag{7.63}$$

Ces résultats correspondent au cas où la longueur de cohérence de phase L_ϕ est plus petite que la taille L du système. Dans le cas contraire $L < L_\phi$, que l'on définit comme le *régime mésoscopique*, la correction de localisation faible est plus difficile à calculer car elle dépend explicitement des solutions de l'équation de diffusion et de l'expression de $Z(t)$ pour un système de taille finie. Or, il n'y a de solutions analytiques que pour certaines géométries simples (chap. 5). On conçoit cependant que le rôle de longueur de coupure joué par L_ϕ est maintenant assuré par la plus petite longueur, à savoir L. Il suffit donc, pour obtenir la correction de localisation faible à la conductance dans le régime mésoscopique, de remplacer L_ϕ par L dans les expressions (7.63). Dans l'exercice 7.2, le cas quasi-unidimensionnel est résolu exactement pour toute valeur du rapport L/L_ϕ. En particulier Δg tend vers une constante (égale à $-1/3$) pour le régime mésoscopique $L \ll L_\phi$ et vers le rapport L_ϕ/L pour $L_\phi \ll L$.

Remarque : Longueur de localisation

Le calcul de la correction de localisation faible à la conductance n'a de sens que si cette correction reste petite devant la conductance classique. Les relations (7.63) montrent qu'il s'introduit naturellement une nouvelle longueur caractéristique, appelée *longueur de localisation* et notée ξ, pour laquelle $\Delta g/g \simeq 1$.
Dans le cas quasi-1d, cette longueur est proportionnelle au libre parcours moyen élastique et au nombre de canaux :

$$\xi_{1d} \simeq Ml_e \quad . \tag{7.64}$$

Dans le cas bidimensionnel, la longueur de localisation est exponentiellement grande dans la limite de faible désordre $k_F l_e \gg 1$:

$$\xi_{2d} \simeq l_e \exp(\frac{\pi}{2}k_F l_e) \quad . \tag{7.65}$$

Ainsi, même si $k_F l_e \gg 1$, le calcul perturbatif devient incorrect dans le cas quasi-1d, si la longueur du système est plus grande que ξ_{1d}. À deux dimensions, cette longueur reste très grande tant que $k_F l_e \gg 1$. À trois dimensions, elle peut être considérée comme infinie dans la limite de faible désordre.

L'existence d'une longueur de localisation finie exprime le fait que les états électroniques changent complètement de nature sur des échelles plus grandes que ξ. Les fonctions d'ondes ne sont plus étendues mais localisées. Ainsi, pour un échantillon plus grand que ξ, un nouveau comportement est observé pour le transport, qui diffère de la loi d'Ohm. Mais il faut aussi que L_ϕ soit plus grand que ξ, ce qui rend ces effets difficilement observables. À trois dimensions, la longueur de localisation est finie lorsque $k_F l_e$ devient petit ou de l'ordre de l'unité. Il existe alors une transition, appelée transition d'Anderson, entre un régime où tous les états sont étendus et un régime où ils sont localisés. On n'abordera pas la physique de la localisation forte dans cet ouvrage, mais on pourra consulter [144, 150, 151].

7.4.3 Dépendance en température

La réduction de conductivité due à la localisation faible est petite. Expérimentalement, elle peut être mise en évidence en la modulant par un paramètre physique extérieur qui peut être la température, la fréquence ou un champ magnétique. Ainsi la température, en modifiant le temps de cohérence de phase $\tau_\phi(T)$ permet de faire varier la correction de localisation faible. En supposant une variation en loi de puissance $\tau_\phi \propto T^{-p}$, la diminution de la longueur de cohérence de phase $L_\phi(T) \propto T^{-p/2}$ avec la température conduit à une réduction de la conductivité qui dépend de la dimensionnalité d'espace d et qui s'obtient à partir de (7.56) :

$$\begin{array}{ll} d=1 & \Delta\sigma(T) \propto -T^{-p/2} \\ d=2 & \Delta\sigma(T) \propto \ln T \\ d=3 & \Delta\sigma(T) \propto T^{p/2} \quad . \end{array} \tag{7.66}$$

À titre d'exemple, la figure 7.3 montre la première mise en évidence expérimentale d'une variation proportionnelle à $\ln T$ dans des films métalliques. L'exposant p de la dépendance en température dépend du processus qui limite la cohérence de phase. Le couplage du gaz d'électrons aux phonons correspond à $p = 3$ tandis que l'interaction entre électrons donne $p = d/2$ pour $d = 2, 3$ et $p = 2/3$ pour $d = 1$ (voir section 13.7). Ces différents comportements ont été observés expérimentalement et sont discutés, entre autres, dans les revues [149, 151–154] [7].

[7] La prise en compte de l'interaction entre électrons donne une contribution supplémentaire à la conductivité qui varie comme $T^{\frac{d}{2}-1}$ pour $d = 1, 3$ et comme $\ln T$ pour $d = 2$. Celle-ci ne dépend pas du champ magnétique (voir la section 13.5).

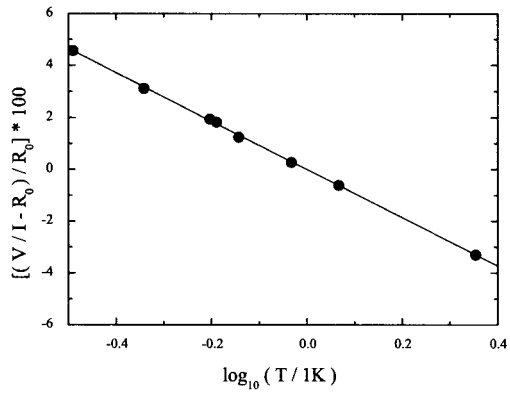


FIG. 7.3 – *Dépendance logarithmique de la résistivité en fonction de la température dans un film PdAu (G. Dolan et D. Osheroff,* Phys. Rev. Lett. **43**, *721 (1979)).*

7.5 Correction de localisation faible en champ magnétique

7.5.1 Magnétorésistance négative

Une autre manière de sonder la correction de localisation faible consiste à étudier sa dépendance en fonction d'un champ magnétique. Dans le chapitre 6, on a vu comment il affecte le cooperon. Comme la localisation faible donne une contribution négative à la conductivité (en l'absence de couplage spin-orbite), sa suppression conduit donc à une augmentation de la conductivité, c'est-à-dire à une *magnétorésistance négative* qui est certainement une des signatures les plus spectaculaires de la localisation faible [8].

On considère un champ magnétique suffisamment faible pour que $\omega_c\tau_e \ll 1$, c'est-à-dire pour que l'on puisse négliger la courbure des trajectoires entre deux collisions élastiques (section 6.3) [8]. La correction à la conductivité (7.53) associée au cooperon devient

$$\Delta\sigma(B) = -s\frac{e^2 D}{\pi\hbar\Omega}\int_0^\infty dt Z_c(t,B)e^{-\frac{t}{\tau_\phi}} \tag{7.67}$$

[8]Les effets discutés ici apparaissent en champ faible, c'est-à-dire dans une limite où on a négligé la force de Lorentz, donc la courbure des trajectoires électroniques. Dans cette limite, on ne peut pas retrouver la formule classique de Drude-Boltzmann qui, elle, prend en compte explicitement l'effet de la force de Lorentz et qui s'écrit

$$\sigma_0(B) = \frac{\sigma_0(0)}{1+(\omega_c\tau_e)^2}$$

pour la partie longitudinale, $\omega_c = eB/m$ étant la fréquence cyclotron. Ici σ_0 reste donc inchangée.

où $Z_c(t, B)$ est la fonction de partition associée aux modes propres de l'équation de diffusion en champ magnétique. Pour un gaz d'électrons bidimensionnel soumis à un champ magnétique uniforme et perpendiculaire au plan du film, la fonction de partition $Z_c(t, B)$ est donnée par (6.41) :

$$Z_c(t, B) = \frac{BS/\phi_0}{\sinh(4\pi DtB/\phi_0)} \tag{7.68}$$

et décroît exponentiellement aux temps longs comme e^{-t/τ_B}, où $\tau_B = \phi_0/(4\pi DB)$ est le temps caractéristique de coupure des trajectoires associées au cooperon. La convergence aux temps longs de l'intégrale (7.67) est donc pilotée par le plus petit des temps τ_B et τ_ϕ, de sorte que le champ magnétique n'aura d'effet important que lorsque $\tau_B < \tau_\phi$. En revanche, $Z_c(t, B)$ donne toujours une contribution divergente pour $t \to 0$, que l'on élimine comme précédemment en prenant τ_e comme borne inférieure. La correction de localisation faible s'écrit alors :

$$\Delta\sigma(B) = -s\frac{e^2 D}{\pi\hbar}\int_0^\infty \frac{B/\phi_0}{\sinh 4\pi BDt/\phi_0}\left(e^{-t/\tau_\phi} - e^{-t/\tau_e}\right) dt \quad . \tag{7.69}$$

Elle s'exprime comme la différence de deux fonctions Digamma $\Psi(x)$ (relation 15.40) :

$$\Delta\sigma(B) = -s\frac{e^2}{4\pi^2\hbar}\left[\Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\hbar}{4eDB\tau_e}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\hbar}{4eDB\tau_\phi}\right)\right] \quad . \tag{7.70}$$

Cette relation fait apparaître le champ caractéristique B_ϕ défini par $B_\phi = \phi_0/8\pi L_\phi^2$, c'est-à-dire correspondant à un quantum de flux à travers une surface de l'ordre de L_ϕ^2. La correction de localisation faible disparaît au-delà de ce champ qui est de l'ordre de $10^{-3}T$ pour $L_\phi \simeq 1\mu m$. Puisque $\tau_e \ll \tau_\phi$ et $B \ll \phi_0/4\pi l_e^2$, on peut remplacer l'expression précédente par :

$$\boxed{\Delta\sigma(B) = -s\frac{e^2}{4\pi^2\hbar}\left[\ln\left(\frac{\hbar}{4eDB\tau_e}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\hbar}{4eDB\tau_\phi}\right)\right]} \tag{7.71}$$

En champ nul, on retrouve bien l'expression (7.56) à $d = 2$. Puisque σ_0 ne dépend pas du champ (note 8, p. 306), la magnétoconductivité $\sigma(B) - \sigma(0)$ est la différence des corrections de localisation faible $\Delta\sigma(B) - \Delta\sigma(0)$. En utilisant les relations (7.56) à $d = 2$ et (7.71), la magnétoconductivité s'écrit :

$$\Delta\sigma(B) - \Delta\sigma(0) = -s\frac{e^2}{4\pi^2\hbar}\left[\ln\left(\frac{\hbar}{4eDB\tau_\phi}\right) - \Psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\hbar}{4eDB\tau_\phi}\right)\right] \quad . \tag{7.72}$$

La magnétorésistance donnée par $\Delta R(B) \propto -\Delta\sigma(B)/\sigma_0^2$ est donc négative. Dans la limite $B \ll B_\phi$, le développement asymptotique (15.38) permet d'écrire

$$\Delta\sigma(B) - \Delta\sigma(0) \simeq \frac{s}{96\pi^2}\frac{e^2}{\hbar}\left(\frac{B}{B_\phi}\right)^2 \quad . \tag{7.73}$$

La dépendance en champ de la correction de localisation faible a été étudiée très précisément, en particulier dans des films métalliques, comme le montre la figure 7.4 sur un exemple célèbre [154]. L'ajustement des résultats expérimentaux avec le comportement théorique permet de déduire la dépendance en température du temps de cohérence de phase $\tau_\phi(T)$. C'est la méthode habituellement utilisée pour mesurer la longueur de cohérence de phase et sa dépendance en température [149].

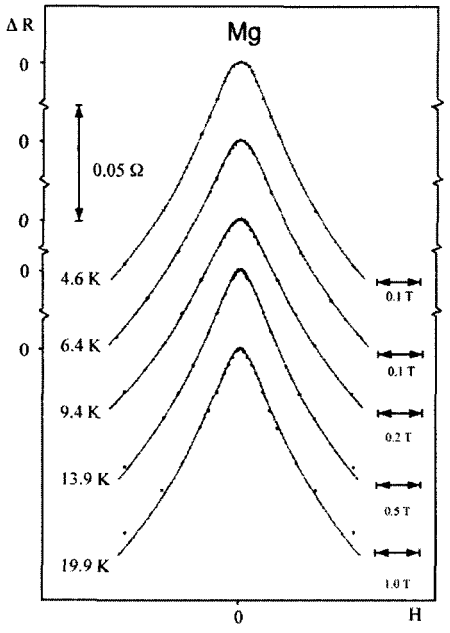


FIG. 7.4 – *Magnetorésistance d'un film de magnésium en fonction du champ appliqué, pour différentes températures. Les points sont les résultats expérimentaux et les courbes correspondent à la formule (7.71). Le temps τ_ϕ est un paramètre ajustable [154].*

Pour un conducteur de dimensions finies et inférieures à L_ϕ, il faudrait en principe calculer le noyau de la chaleur $Z_c(t, B)$ afin de l'insérer dans la relation (7.67). Ce calcul est difficile car les solutions dépendent de la géométrie de l'échantillon. En fait, il suffit de remplacer la longueur de coupure $L_\phi = \sqrt{D\tau_\phi}$ qui apparaît dans les expressions (7.63) par la taille du système. Si l'échantillon est anisotrope, de longueur L et de largeur W, la surface L_ϕ^2 doit être remplacée par la surface LW. Ainsi, la correction de localisation faible disparaît lorsqu'un quantum de flux traverse l'échantillon. Ce comportement est bien observé sur la figure 7.5, qui représente la magnétorésistance de fils de largeurs variables. On constate, d'une part, que la correction en champ diminue comme $1/W$ lorsque W augmente, ainsi que le prédit la relation (7.57), où le nombre M de canaux est proportionnel à W pour $d = 2$ (voir 7.169).

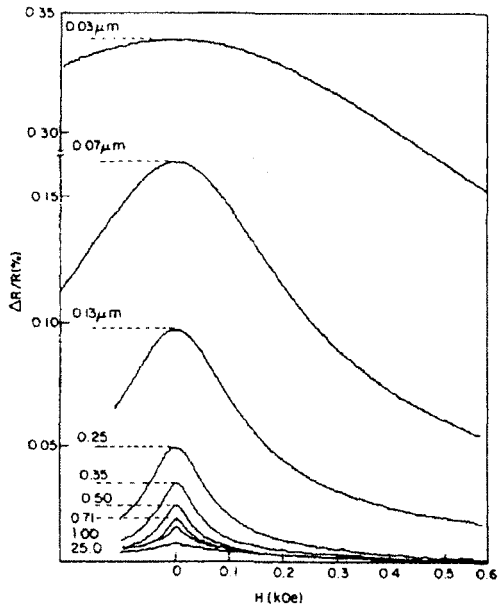


FIG. 7.5 – *Magnétorésistance de films de lithium de largeur W variable (J.C. Licini* et al., Phys. Rev. Lett. **54**, *1585 (1985)).*

D'autre part, le champ caractéristique B_ϕ correspond à un quantum de flux à travers la surface LW et varie donc aussi comme $1/W$.

Exercice 7.3 : Magnétorésistance d'un fil quasi-1d

On considère un fil de section carrée de côté W, soumis à un champ magnétique B perpendiculaire à son axe Ox. Montrer que, en champ faible, la correction de localisation faible est toujours donnée par l'expression quasi-1d (7.56), moyennant la substitution [155] :

$$\frac{1}{L_\phi^2} \longrightarrow \frac{1}{L_\phi^2(B)} = \frac{1}{L_\phi^2} + \frac{e^2B^2W^2}{3\hbar^2} = \frac{1}{L_\phi^2} + \frac{W^2}{12L_B^4} \tag{7.74}$$

où $L_B = \sqrt{\hbar/2eB}$ est la longueur magnétique. Pour cela, on résoud l'équation de diffusion en traitant le champ magnétique en perturbation. Le fil étant quasi-1d, cette équation est unidimensionnelle (les modes transverses sont $n_y = n_z = 0$). À fréquence nulle, les valeurs propres de l'équation de diffusion (6.34) sont solutions de

$$-D\left(\partial_x + i\frac{2eA_x}{\hbar}\right)^2 \psi_{n_x} = E_{n_x}\psi_{n_x} \quad . \tag{7.75}$$

On choisit la jauge $A_x = By$, $y \in [-y/2, y/2]$. En perturbation, la fréquence des modes de diffusion devient

$$DQ_{n_x}^2 \longrightarrow DQ_{n_x}^2 + D\left\langle \psi_{n_x} \left| \frac{4e^2B^2y^2}{\hbar^2} \right| \psi_{n_x} \right\rangle \quad . \tag{7.76}$$

L'état propre ψ_{n_x} n'ayant pas de dépendance en y (mode transverse uniforme), le calcul de l'élément de matrice conduit à un déplacement identique pour toutes les

valeurs propres et égal à $e^2B^2W^2/3\hbar^2$. La correction de localisation faible garde donc la forme quasi-1d (7.56, 11.53), moyennant la substitution (7.74). On remarque que le champ caractéristique décrivant la magnétorésistance du fil dans cette géométrie, correspond à un quantum de flux à travers une surface $L_\phi W$.

7.5.2 Couplage spin-orbite et impuretés magnétiques

L'application d'un champ magnétique donne lieu à un déphasage réversible qui modifie la correction de localisation faible. C'est aussi le cas du couplage spin-orbite. Celui-ci (section 6.5) a pour effet de multiplier la contribution du cooperon par le facteur $\langle Q_{so}(t)\rangle$ donné par l'expression (6.134), de sorte que la relation (7.67) devient

$$\Delta\sigma(B) = -s\frac{e^2D}{\pi\hbar\Omega}\int_0^\infty dt Z_c(t,B)\langle Q_{so}(t)\rangle\left(e^{-\frac{t}{\tau_\phi}} - e^{-\frac{t}{\tau_e}}\right) \quad . \tag{7.77}$$

Pour un fort couplage spin-orbite, ou plus précisément lorsque $t \gg \tau_{so}$, le facteur $\langle Q_{so}(t)\rangle$ change de signe et tend vers $-1/2$. Ceci a pour conséquence de changer le signe de la correction de localisation faible [156]. On parle alors d'*antilocalisation*. Celle-ci conduit à une *décroissance* de la résistance lorsqu'on abaisse la température. Comme le champ magnétique détruit le cooperon, on s'attend maintenant à observer une magnétorésistance *positive*. Une généralisation immédiate de la dérivation conduisant à (7.70) permet de calculer la correction à la conductivité en présence de champ magnétique et de couplage spin-orbite. On obtient

$$\begin{aligned}\Delta\sigma(B) = -s\frac{e^2}{4\pi^2\hbar}\Bigg[&\Psi\left(\frac{1}{2}+\frac{B_e}{B}\right)\\ &-\frac{3}{2}\Psi\left(\frac{1}{2}+\frac{B_\phi+4B_{so}/3}{B}\right)+\frac{1}{2}\Psi\left(\frac{1}{2}+\frac{B_\phi}{B}\right)\Bigg]\end{aligned} \tag{7.78}$$

où on a défini les champs caractéristiques

$$\boxed{\begin{aligned} B_e &= \frac{\hbar}{4eD\tau_e}\\ B_\phi &= \frac{\hbar}{4eD\tau_\phi}\\ B_{so} &= \frac{\hbar}{4eD\tau_{so}}\end{aligned}} \tag{7.79}$$

La diffusion des électrons par des impuretés magnétiques conduit, quant à elle, à un déphasage irréversible, c'est-à-dire à un temps de cohérence de phase fini (table 6.11). On a vu dans la section 6.5.7 que ce couplage affecte le cooperon par le facteur $\langle Q_m(t)\rangle$ donné par l'expression (6.135). En l'absence de couplage spin-orbite, ce terme pondère le noyau $Z_c(t,B)$ dans l'expression (7.67).

Lorsque le couplage spin-orbite et celui dû aux impuretés magnétiques sont tous les deux présents (relation 6.136), leur facteurs de pondération respectifs se multiplient *dans chaque canal*, triplet ou singulet, de sorte que le facteur de pondération global s'écrit

$$\langle Q_{so+m}(t)\rangle = \frac{1}{2}\left(3e^{-4t/3\tau_{so}-2t/3\tau_m} - e^{-2t/\tau_m}\right) \tag{7.80}$$

dont on déduit

$$\Delta\sigma(B) = -s\frac{e^2}{4\pi^2\hbar}\left[\Psi\left(\frac{1}{2}+\frac{B_e}{B}\right) - \frac{3}{2}\Psi\left(\frac{1}{2}+\frac{B_1}{B}\right) + \frac{1}{2}\Psi\left(\frac{1}{2}+\frac{B_2}{B}\right)\right] \tag{7.81}$$

où les champs B_1 et B_2 sont donnés par $B_1 = B_\phi + \frac{4}{3}B_{so} + \frac{2}{3}B_m$ et $B_2 = B_\phi + 2B_m$ avec [9]

$$\boxed{B_m = \frac{\hbar}{4eD\tau_m}} \tag{7.82}$$

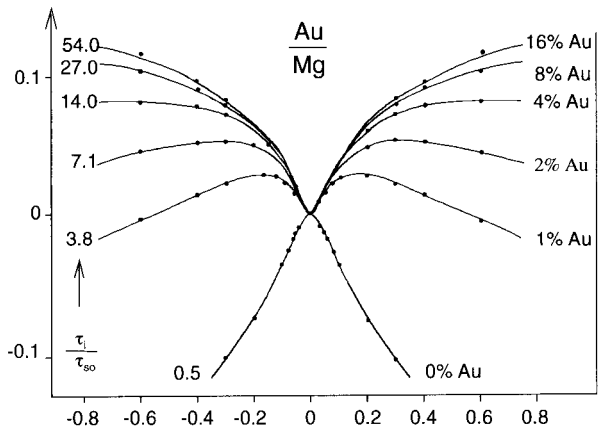


FIG. 7.6 – *Magnétorésistance d'un film de magnésium avec différentes concentrations d'impuretés d'or. En augmentant la concentration d'or, on augmente la diffusion spin-orbite et la magnétorésistance devient positive [154].*

[9] On note ici par B_ϕ la contribution des processus physiques donnant lieu à une valeur finie de τ_ϕ, autres que la diffusion sur les impuretés magnétiques.

Exercice 7.4 : Montrer que la correction de localisation faible à la conductivité à fréquence finie s'écrit aussi sous la forme :

$$\Delta\sigma(B) = -s\frac{e^2 D}{2\pi\hbar\Omega}\sum_n \left(\frac{3}{-i\omega + E_n + \frac{1}{\tau_\phi} + \frac{4}{3\tau_{so}} + \frac{2}{3\tau_m}} - \frac{1}{-i\omega + E_n + \frac{1}{\tau_\phi} + \frac{2}{\tau_m}} \right) \tag{7.83}$$

où E_n sont les valeurs propres de l'équation de diffusion. Pour les différents cas étudiés dans ce chapitre :

$$E_n \to \begin{cases} DQ^2 & \text{champ nul} \\ (n+\frac{1}{2})\frac{4eDB}{\hbar} & \text{champ uniforme (plan infini)} \\ 4\pi^2 E_c(n-2\varphi)^2 & \text{flux Aharonov-Bohm (anneau)} \end{cases}$$

7.6 Magnétorésistance associée à un flux Aharonov-Bohm

L'action d'un champ magnétique uniforme permet de mesurer très précisément la correction de localisation faible. C'est un succès de la description des effets cohérents dans les métaux désordonnés qui justifie l'équation de diffusion covariante (6.34) pour le cooperon. Par ailleurs, en mécanique quantique, une particule chargée est sensible au potentiel vecteur même en l'absence de champ magnétique. C'est l'effet Aharonov-Bohm (section 1.2). On a déjà relevé l'analogie existant entre l'équation de diffusion et l'équation de Schrödinger (section 6.2). Par conséquent, on s'attend à pouvoir détecter l'effet d'un flux Aharonov-Bohm sur les corrections de localisation faible puisque la fonction Z_c en dépend (voir section 6.4). Cet effet est un succès tout à fait spectaculaire de la théorie des milieux faiblement désordonnés. Nous allons tout d'abord l'étudier sur le cas d'un anneau.

7.6.1 Anneau

On considère un anneau désordonné de périmètre L et de section S (section 6.4.1). Une dépendance de la conductivité en fonction du flux ne peut provenir que des trajectoires de diffusion faisant au moins un tour complet autour de l'anneau. Par conséquent, nous nous intéressons aux temps plus longs que le temps de diffusion (temps de Thouless) transverse (section 5.5.4), c'est-à-dire que l'anneau est unidimensionnel pour la diffusion si $L \gg \sqrt{S}$. En présence

d'un flux Aharonov-Bohm ϕ, la correction de localisation faible (7.53) devient

$$\Delta\sigma(\phi) = -s\frac{e^2 D}{\pi\hbar\Omega}\int_0^\infty dt\, Z_c(t,\phi)e^{-\frac{t}{\tau_\phi}} \quad . \tag{7.84}$$

Pour un anneau traversé par un flux Aharonov-Bohm, la probabilité intégrée de retour à l'origine est donnée par l'expression (6.54). De ce développement de $Z_c(t,\phi)$ en fonction du nombre d'enroulements, on déduit le développement en harmoniques de la correction à la conductivité qui est de la forme

$$\Delta\sigma(\phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \Delta\sigma_m \cos(4\pi m\varphi) \tag{7.85}$$

où $\varphi = \phi/\phi_0$ et

$$\Delta\sigma_m = -s\frac{e^2}{\pi\hbar}\frac{L}{S}\sqrt{\frac{E_c}{4\pi}}\int_0^\infty \frac{e^{-m^2/4E_c t - t/\tau_\phi}}{\sqrt{t}}dt \quad . \tag{7.86}$$

La relation (15.61) permet d'écrire

$$\Delta\sigma = -s\frac{e^2}{h}\frac{L_\phi}{S}\left(1 + 2\sum_{m=1}^{\infty} e^{-mL/L_\phi}\cos 4\pi m\varphi\right) \tag{7.87}$$

qui conduit à [10] :

$$\boxed{\Delta\sigma = -s\frac{e^2}{h}\frac{L_\phi}{S}\frac{\sinh(L/L_\phi)}{\cosh(L/L_\phi) - \cos 4\pi\varphi}} \tag{7.88}$$

La conductance moyenne d'un anneau est donc une fonction périodique du flux ϕ de période $\frac{\phi_0}{2} = \frac{h}{2e}$. L'amplitude des oscillations décroît exponentiellement avec le périmètre L de l'anneau et devient négligeable lorsque $L \gg L_\phi$.

La périodicité $\frac{\phi_0}{2}$ est une conséquence directe de la structure du cooperon. En effet, l'équation de diffusion (6.34) à laquelle il obéit, décrit une charge fictive $(-2e)$ qui a son origine dans l'existence des deux trajectoires conjuguées du cooperon.

Il est difficile d'observer cet effet sur un seul anneau car celui-ci n'est pas automoyennant. Cependant, des expériences effectuées sur des chaînes d'anneaux [157] ont effectivement fait apparaître cette périodicité. Nous reviendrons sur le cas de l'anneau unique dans le chapitre 14 à propos du comportement de l'aimantation.

[10] Dans le cas $\phi = 0$, cette expression a déjà été obtenue pour le calcul du temps de récurrence sur un anneau (5.51).

7.6.2 Long cylindre : l'effet Sharvin-Sharvin

Considérons maintenant la géométrie d'un cylindre de périmètre L, de hauteur L_z et d'épaisseur a telle qu'elle a été présentée dans la section 6.4.2. Dans ce cas, $Z_c(t,\phi)$ a une dépendance temporelle différente de celle de l'anneau. Ceci provient de la diffusion libre dans la direction z le long de l'axe du cylindre. En insérant dans la relation (7.53), l'expression (6.65) de $Z_c(t,\phi)$ obtenue dans ce cas, on obtient pour la conductivité un développement analogue à (7.85) dont les harmoniques sont :

$$\Delta\sigma_m = -s\frac{e^2}{\pi\hbar a}\int_0^\infty \frac{e^{-m^2/4E_c t - t/\tau_\phi}}{4\pi t}dt = -s\frac{e^2}{\pi h a}K_0(mL/L_\phi) \tag{7.89}$$

où $K_0(x)$ est une fonction de Bessel modifiée [158] qui décroît exponentiellement pour les grands arguments (15.64). Pour $m \neq 0$, l'intégrale est donnée par (15.59). Pour $m = 0$, elle diverge aux temps courts et doit être bornée inférieurement par le temps élastique τ_e :

$$\int_0^\infty \frac{e^{-t/\tau_\phi} - e^{-t/\tau_e}}{4\pi t}dt = \frac{1}{2\pi}\ln\frac{L_\phi}{l_e} \quad . \tag{7.90}$$

Par conséquent, la variation de conductance ΔG du cylindre mesurée le long de sa hauteur L_z, soit $\Delta G = \Delta\sigma a L/L_z$, est donnée par

$$\boxed{\Delta G(\phi) = s\frac{e^2}{\pi h}\frac{L}{L_z}\left[\ln\frac{L_\phi}{l_e} + 2\sum_{m=1}^{+\infty} K_0(mL/L_\phi)\cos 4\pi m\varphi\right]} \tag{7.91}$$

Comme pour l'anneau, l'amplitude des oscillations de période $\phi_0/2$ décroît exponentiellement avec le périmètre L du cylindre et devient négligeable lorsque $L \gg L_\phi$.

Ces oscillations de magnétorésistance ont été prédites par Altshuler, Aronov et Spivak [159] et observées par Sharvin et Sharvin [160]. La figure 7.7 montre que l'amplitude des oscillations et la résistance moyenne décroissent lorsque le champ augmente. Cet effet supplémentaire est dû au fait que le champ magnétique appliqué est uniforme et pénètre dans le métal. On n'est donc pas exactement dans les conditions de l'effet Aharonov-Bohm. L'effet du champ dans le métal peut être pris en compte simplement en gardant la relation (7.91), mais en remplaçant la longueur L_ϕ par une longueur de cohérence

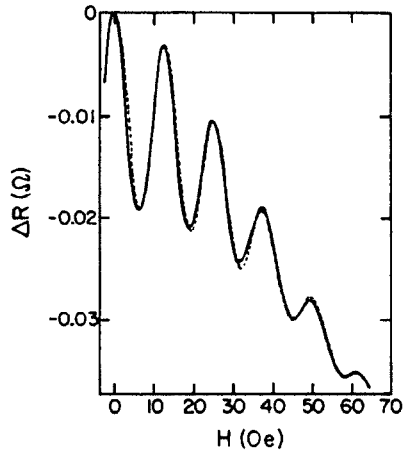


FIG. 7.7 – *Magnétorésistance $\Delta R(B)$ d'un film de lithium évaporé sur un filament cylindrique de quartz de* 1 *cm de longueur et de* 1,31 *μm de diamètre (traits pleins) et comparaison avec la formule (7.91) (pointillés). À la température $T = 1{,}1$ K à laquelle l'expérience est réalisée, la longueur de cohérence de phase, déterminée pour ajuster les résultats de la théorie et de l'expérience, est égale à* 2,2 *μm [159].*

de phase dépendant du champ B, donnée par (7.74) [11]. L'accord entre les résultats expérimentaux et la théorie est alors excellent. Il y a d'autres manières de réaliser une moyenne d'ensemble, par exemple en considérant la magnétoconductance de réseaux de fils unidimensionnels [161–165].

7.6.3 Remarque sur les expériences de Webb et de Sharvin-Sharvin : ϕ_0 *vs.* $\phi_0/2$

Dans l'expérience de R. Webb *et al.* [166] décrite dans l'introduction de cet ouvrage (section 1.2), on a vu que la magnétorésistance d'un anneau unique désordonné traversé par un flux magnétique ϕ présente des oscillations de période ϕ_0. C'est la manifestation de l'effet Aharonov-Bohm. Or, le même type d'expérience réalisé antérieurement par Sharvin et Sharvin sur un long cylindre soumis à un flux le long de son axe [159] présente des oscillations de magnétorésistance de période $\phi_0/2$. Pourquoi l'harmonique de période ϕ_0 disparaît-elle dans la seconde expérience ? Pour répondre à cette question, imaginons plusieurs anneaux ayant des configurations de désordre différentes. La magnétorésistance de chacun de ces anneaux oscille avec la période ϕ_0 mais avec une phase aléatoire qui dépend de la configuration de désordre.

[11] Le résultat de l'exercice 7.3 pour le fil quasi-1d s'applique pour le cylindre, puisque la dimension z ne joue pas de rôle et que le périmètre L est beaucoup plus grand que l'épaisseur a.

En moyenne, la modulation doit donc disparaître [167]. Le même raisonnement s'applique aussi pour le cylindre qui peut être décrit comme un empilement d'anneaux avec des phases aléatoires. L'expérience de Sharvin-Sharvin, en mettant en évidence des oscillations, montre sans ambiguïté qu'il existe un mécanisme d'interférence qui résiste à la moyenne sur le désordre. Ce mécanisme est lié à la cohérence de phase entre séquences de collisions conjuguées par renversement du temps et il correspond à la localisation faible [160]. Il donne lieu à des oscillations de magnétorésistance de période $\phi_0/2$ puisque la phase relative des séquences conjuguées contribuant au cooperon est $4\pi\phi/\phi_0$.

7.6.4 L'effet Aharonov-Bohm dans un plan infini

On considère maintenant le cas d'un champ magnétique très inhomogène et à la limite décrit par une seule ligne de flux magnétique impénétrable aux électrons. Cette limite correspond à l'effet Aharonov-Bohm pour lequel le champ magnétique est concentré en un seul point et est décrit par le potentiel vecteur

$$\boldsymbol{A}(\boldsymbol{r}) = \frac{\phi}{2\pi r}\hat{\boldsymbol{e}}_\theta \tag{7.92}$$

associé au champ magnétique

$$\boldsymbol{B}(\boldsymbol{r}) = \phi\,\delta(\boldsymbol{r})\hat{\boldsymbol{e}}_z \quad . \tag{7.93}$$

Pour évaluer $\Delta\sigma(\phi)$ il faut calculer la fonction de partition associée $Z(t,\phi)$. Celle-ci a été obtenue dans le complément C6.1 :

$$Z(t,\phi) - Z(t,0) = -\varphi(1-2\varphi) \tag{7.94}$$

où $\varphi = \phi/\phi_0$ et $\varphi \in [0,1]$. En utilisant la relation (7.67), on obtient pour la correction de localisation faible à petit flux :

$$\boxed{\Delta\sigma(\phi) - \Delta\sigma(0) = s\frac{e^2 L_\phi^2}{hS}\,\frac{2|\phi|}{\phi_0}} \tag{7.95}$$

où S est la surface de l'échantillon. La magnétoconductance a une *singularité triangulaire* pour $\phi \to 0$ qui contraste avec le comportement quadratique (7.73) obtenu pour un champ uniforme dans la même limite. Le cas d'une ligne de flux Aharonov-Bohm dans un plan infini a un interêt conceptuel certain puisqu'il permet de mettre en évidence en mécanique quantique l'importance du potentiel vecteur. Cette singularité a été observée sur des films métalliques déposés sur un substrat supraconducteur de type II. La limite diluée pour laquelle la densité de vortex est faible correspond à un ensemble de lignes de flux indépendantes et peut être décrite par la relation (7.95). En augmentant la température, donc la densité de vortex, on rejoint la limite

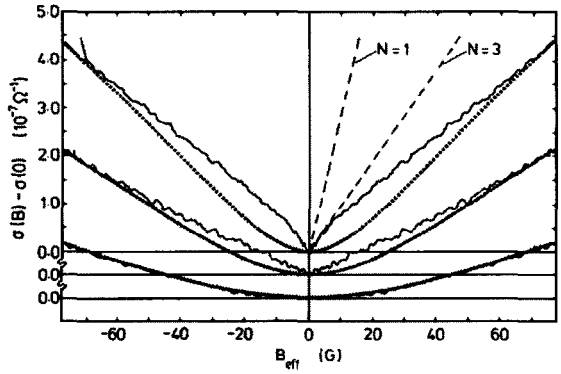


FIG. 7.8 – *Magnétoconductance d'un gaz d'électrons bidimensionnel déposé sur une barrière de Pb supraconducteur. Le champ B_{eff} est crée par les vortex induits dans le supraconducteur de type-II. Les différentes courbes correspondent à différentes températures. L'entier N est le nombre de quanta de flux magnétique. On observe la transition entre un comportement proportionnel à $|B|$ à petit champ et à B^2 à plus fort champ (S.J. Bending et al.,* Phys. Rev. Lett. **65**, *1060 (1990)). Pour plus de détails sur cette géométrie, consulter [168, 169].*

d'un champ magnétique uniforme et un comportement quadratique de la magnétoconductance décrit par la relation (7.73) comme cela apparaît sur la figure 7.8 [168, 169].

Complément C7.1 Formules de Kubo

C7.1.1 Conductivité et dissipation

Afin de décrire la conductivité statique d'un métal désordonné, on se place dans la limite où celui-ci est initialement à l'équilibre et se trouve perturbé par l'application d'une tension extérieure (pour plus de détails, on pourra par exemple consulter [140]). Il en résulte un champ électrique fini $\boldsymbol{E}$ et une densité de courant $\boldsymbol{j}$ qui lui est proportionnelle [12] : $\boldsymbol{j} = \sigma \boldsymbol{E}$; c'est l'approximation de la réponse linéaire. Afin de calculer la conductivité σ, on introduit dans l'hamiltonien électronique (2.1) un terme de perturbation décrivant l'existence du champ électrique. On pourrait, dans un premier temps, considérer l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = \frac{p^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) + e\boldsymbol{E}.\boldsymbol{r} \quad . \tag{7.96}$$

Malheureusement, pour un conducteur pris dans la limite macroscopique, le dernier terme de cet hamiltonien ne peut jamais être considéré comme une perturbation même si le champ électrique est petit. On préfère donc utiliser l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = \frac{[\boldsymbol{p} + e\boldsymbol{A}(t)]^2}{2m} + V(\boldsymbol{r}) \tag{7.97}$$

où le champ électrique dérive du potentiel vecteur $\boldsymbol{A}(t)$, tel que

$$\boldsymbol{E} = -\frac{\partial \boldsymbol{A}}{\partial t} \quad \text{et} \quad \boldsymbol{\nabla} \times \boldsymbol{A} = 0 \quad . \tag{7.98}$$

La densité de courant $\boldsymbol{j}$ est donnée par $\boldsymbol{j} = \mathrm{Tr}(\rho \hat{\boldsymbol{j}})$ où $\hat{\boldsymbol{j}}$ est l'opérateur densité de courant et $\rho(t)$ est la matrice densité à un électron, solution de l'équation

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [\mathcal{H}, \rho] \quad . \tag{7.99}$$

On peut généralement écrire ρ sous la forme $\rho = \rho_0 + \delta\rho$, où ρ_0 est la matrice densité à l'équilibre c'est-à-dire pour $\boldsymbol{A} = 0$. Pour décrire le cas d'un champ électrique stationnaire, on considère un champ monochromatique oscillant à la fréquence ω, c'est-à-dire tel que $\boldsymbol{E}(\omega) = i\omega \boldsymbol{A}(\omega)$, et en prenant la limite $\omega \to 0$. Pour un système macroscopique, l'équation (7.99) donne lieu à un régime transitoire infiniment long, c'est-à-dire sans relaxation, vers un régime stationnaire. Une manière de résoudre ce problème consiste à introduire artificiellement dans (7.99) un terme de relaxation de la forme $-i\gamma\delta\rho(t)$. Ceci a pour conséquence d'introduire une échelle de temps $\hbar/\gamma$ de relaxation exponentielle. On prend finalement la limite $\gamma \to 0$ en supposant que le résultat ne dépend pas de γ.

[12] On considère un milieu isotrope pour lequel le tenseur de conductivité est sphérique.

Une autre manière d'interpréter le taux γ est de considérer un conducteur de taille finie mais couplé à un environnement extérieur (c'est-à-dire aux réservoirs) au moyen de fils de mesure. Les électrons peuvent maintenant aller dans les réservoirs, y changer aléatoirement leur phase avant d'être réinjectés de manière incohérente dans le conducteur. On peut décrire un couplage suffisamment faible entre le conducteur et les réservoirs au moyen d'un élargissement γ des états propres du conducteur isolé. Le temps $\hbar/\gamma$ représente le temps de vie d'un électron dans le conducteur avant qu'il ne s'échappe dans les réservoirs. Au lieu de (7.99), on obtient alors la relation

$$i\hbar\frac{\partial\rho}{\partial t} = [\mathcal{H},\rho] - i\gamma\left(\rho(t) - \rho_{eq}(t)\right) \quad , \tag{7.100}$$

où la matrice densité ρ_{eq} décrit l'équilibre thermodynamique du système total. On pourrait déduire de ce raisonnement qu'il apparaît une irréversibilité intrinsèque due au couplage du conducteur aux réservoirs. Ceci n'est pas correct. Le système (conducteur + réservoirs) est cohérent et c'est la moyenne sur les degrés de liberté du réservoir qui introduit l'irréversibilité.

Remarque : Conductivité et dissipation : la chaîne de Feynman

À travers la loi d'Ohm, la conductivité mesure la dissipation par effet Joule dans une résistance $R = \frac{1}{\sigma}\frac{L}{S}$ d'un fil de section S et de longueur L. Il peut sembler paradoxal que cette quantité décrive un effet irréversible de dissipation puisqu'elle est proportionnelle au temps *élastique* τ_e.
En fait, la solution de ce paradoxe provient de la limite thermodynamique que l'on prend habituellement. Pour s'en convaincre, considérons le cas bien connu [170] de la chaîne de quadrupôles LC (c'est-à-dire formé d'une self L et d'une capacité C) en série fermée sur un générateur placé à une extrémité de la chaîne. Chaque quadrupôle est un élément purement réactif d'impédance imaginaire pure. Mais l'impédance équivalente de la chaîne infinie acquiert (à basse fréquence $\omega < 2/\sqrt{LC}$) une partie réelle et donc dissipative ! Ceci est une conséquence de la limite infinie. En effet, à fréquence finie, l'impédance équivalente vue du générateur est une mesure des pertes liées au fait qu'une partie de l'énergie se propage à l'infini. C'est cette même considération qui s'applique au cas des collisions élastiques des électrons par le potentiel de désordre, à savoir que la dissipation se fait dans les réservoirs considérés comme des systèmes infinis.

L'approximation de la réponse linéaire consiste à ne garder dans les expressions de $\delta\rho(t)$, de $\delta\rho_{eq}(t) = \rho_{eq} - \rho_0$ et de l'hamiltonien (7.97) que les termes linéaires en $\boldsymbol{A}(t)$. Ainsi on prend $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_1(t)$ où $\mathcal{H}_0$ est donné par (2.1) et

$$\mathcal{H}_1(t) = \frac{e}{2m}(\boldsymbol{p}.\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}.\boldsymbol{p}) \quad . \tag{7.101}$$

On peut donc récrire (7.100) sous la forme

$$i\hbar\frac{\partial\delta\rho}{\partial t} = [\mathcal{H}_0,\delta\rho(t)] + [\mathcal{H}_1,\rho_0] - i\gamma\left(\delta\rho(t) - \delta\rho_{eq}(t)\right) \quad . \tag{7.102}$$

La transformée de Fourier de cette équation écrite dans une base $(|\alpha\rangle, \epsilon_\alpha)$ d'états propres de $\mathcal{H}_0$ est donnée par

$$\langle\alpha|\delta\rho(\omega)|\beta\rangle = \frac{[f(\epsilon_\alpha) - f(\epsilon_\beta)]\langle\alpha|\mathcal{H}_1(\omega)|\beta\rangle - i\gamma\langle\alpha|\delta\rho_{eq}(\omega)|\beta\rangle}{(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta) - \hbar\omega - i\gamma} \tag{7.103}$$

où $f(\epsilon_\alpha)$ est le facteur d'occupation statistique de l'état $|\alpha\rangle$ donné par la matrice densité ρ_0. De plus, en supposant que $\delta\rho_{eq}$ est une quantité stationnaire, on obtient

$$\langle\alpha|\delta\rho_{eq}(\omega)|\beta\rangle = \frac{f(\epsilon_\alpha) - f(\epsilon_\beta)}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta}\langle\alpha|\mathcal{H}_1(\omega)|\beta\rangle \quad . \tag{7.104}$$

Par ailleurs, l'opérateur densité de courant $\hat{\boldsymbol{j}}$ peut aussi être écrit comme la somme de deux termes : $\hat{\boldsymbol{j}} = \hat{\boldsymbol{j}}_0 + \hat{\boldsymbol{j}}_1$ où

$$\begin{aligned} \hat{\boldsymbol{j}}_0 &= -\frac{e}{2m}\left(\hat{n}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{p} + \boldsymbol{p}\,\hat{n}(\boldsymbol{r})\right) \\ \hat{\boldsymbol{j}}_1 &= -\frac{e^2}{2m}\left(\hat{n}(\boldsymbol{r})\boldsymbol{A} + \boldsymbol{A}\hat{n}(\boldsymbol{r})\right) \end{aligned} \tag{7.105}$$

de telle sorte que le courant $\boldsymbol{j}$ est donné par :

$$\boldsymbol{j} = \mathrm{Tr}\left(\rho(t)\hat{\boldsymbol{j}}\right) = \mathrm{Tr}\left(\rho_0\hat{\boldsymbol{j}}_1\right) + \mathrm{Tr}\left(\delta\rho(t)\hat{\boldsymbol{j}}_0\right) \quad . \tag{7.106}$$

Le premier terme est le courant diamagnétique $\mathrm{Tr}\left(\rho_0\hat{\boldsymbol{j}}_1\right) = -\frac{e^2}{m}n\boldsymbol{A}$ où n est la densité électronique.

À l'aide de (7.106), de (7.103) et de (7.104), on obtient :

$$\begin{aligned} j_x(\omega) = \\ - A_x(\omega)\left[\frac{ne^2}{m} + \frac{e^2}{m^2\Omega}\sum_{\alpha\beta}\frac{f(\epsilon_\alpha) - f(\epsilon_\beta)}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta}\frac{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta - i\gamma}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta - \hbar\omega - i\gamma}|\langle\alpha|p_x|\beta\rangle|^2\right] \end{aligned} \tag{7.107}$$

pour un champ électrique appliqué le long de Ox. La conductivité s'en déduit et prend la forme

$$\sigma_{xx}(\omega) = \frac{i}{\omega}\left[\frac{ne^2}{m} + \frac{e^2}{m^2\Omega}\sum_{\alpha\beta}\frac{f(\epsilon_\alpha) - f(\epsilon_\beta)}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta}\frac{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta - i\gamma}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta - \hbar\omega - i\gamma}|\langle\alpha|p_x|\beta\rangle|^2\right] . \tag{7.108}$$

Afin de simplifier cette expression, on utilise la règle de somme suivante, dite « *règle de somme f* »

$$\boxed{n + \frac{1}{m\Omega}\sum_{\alpha\beta}\frac{f(\epsilon_\alpha) - f(\epsilon_\beta)}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta}|\langle\alpha|p_x|\beta\rangle|^2 = 0} \tag{7.109}$$

Pour la démontrer, on définit la force d'oscillateur [13]

$$f_{\alpha\beta} = \frac{2}{m}\frac{|\langle\alpha|p_x|\beta\rangle|^2}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta} \tag{7.110}$$

et l'expression du commutateur

$$[x, \mathcal{H}_0] = \frac{i\hbar}{m}p_x \tag{7.111}$$

afin de montrer que $\sum_{\beta\neq\alpha} f_{\alpha\beta} = -1$. Par conséquent,

$$\frac{1}{\Omega}\sum_\alpha f(\epsilon_\alpha)\sum_\beta \frac{|\langle\alpha|p_x|\beta\rangle|^2}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta} = -\frac{nm}{2} \quad . \tag{7.112}$$

L'échange des sommes sur α et β revient à changer le signe du second membre. La soustraction des deux relations ainsi obtenues donne la relation (7.109). On fait apparaître cette relation dans l'expression (7.108) en utilisant l'égalité

$$\frac{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta - i\gamma}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta - \hbar\omega - i\gamma} = 1 + \frac{\hbar\omega}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta - \hbar\omega - i\gamma} \quad . \tag{7.113}$$

On obtient finalement pour la conductivité l'expression

$$\sigma_{xx}(\omega) = i\frac{e^2\hbar}{m^2\Omega}\sum_{\alpha\beta}\frac{f(\epsilon_\alpha) - f(\epsilon_\beta)}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta}\frac{|\langle\alpha|p_x|\beta\rangle|^2}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta - \hbar\omega - i\gamma} \tag{7.114}$$

ou encore, en utilisant l'élément de matrice de l'opérateur courant $j_{\alpha\beta} = -\frac{e}{m}\langle\alpha|p_x|\beta\rangle$ (à ne pas confondre avec l'opérateur densité de courant défini par 7.105) et en rétablissant le spin s,

$$\boxed{\sigma_{xx}(\omega) = is\frac{\hbar}{\Omega}\sum_{\alpha\beta}\frac{f(\epsilon_\alpha) - f(\epsilon_\beta)}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta}\frac{|j_{\alpha\beta}|^2}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta - \hbar\omega - i\gamma}} \tag{7.115}$$

En particulier, la partie réelle s'écrit :

$$\mathrm{Re}\sigma_{xx}(\omega) = -s\frac{\pi\hbar}{\Omega}\sum_{\alpha\beta}\frac{f(\epsilon_\alpha) - f(\epsilon_\beta)}{\hbar\omega}|j_{\alpha\beta}|^2\delta_\gamma(\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta - \hbar\omega) \quad , \tag{7.116}$$

où δ_γ est une fonction δ « élargie » par le couplage aux degrés de libertés extérieurs des réservoirs

$$\delta_\gamma(x) = \frac{\gamma/\pi}{x^2 + \gamma^2} \quad . \tag{7.117}$$

[13] Cette terminologie provient de la physique atomique.

En insérant une intégration sur l'énergie, l'expression (7.116) se récrit :

$$\mathrm{Re}\ \sigma_{xx}(\omega) = \\ -s\frac{\pi\hbar}{\Omega}\sum_{\alpha\beta}\int d\epsilon \frac{f(\epsilon)-f(\epsilon-\hbar\omega)}{\hbar\omega}|j_{\alpha\beta}|^2\delta_{\gamma/2}(\epsilon-\epsilon_\alpha)\delta_{\gamma/2}(\epsilon-\hbar\omega-\epsilon_\beta) \tag{7.118}$$

soit

$$\mathrm{Re}\ \sigma_{xx}(\omega) = \\ -s\frac{\pi\hbar}{\Omega}\int d\epsilon \frac{f(\epsilon)-f(\epsilon-\hbar\omega)}{\hbar\omega}\mathrm{Tr}\left[\hat{j}_x\ \ \delta_{\gamma/2}(\epsilon-\mathcal{H}_0)\ \ \hat{j}_x\ \ \delta_{\gamma/2}(\epsilon-\hbar\omega-\mathcal{H}_0)\right] \tag{7.119}$$

ou encore

$$\mathrm{Re}\ \sigma_{xx}(\omega) = -s\frac{\hbar}{\pi\Omega}\int d\epsilon \frac{f(\epsilon)-f(\epsilon-\hbar\omega)}{\hbar\omega}\mathrm{Tr}\left[\hat{j}_x\ \ \mathrm{Im}\hat{G}^R_\epsilon\ \ \hat{j}_x\ \ \mathrm{Im}\hat{G}^R_{\epsilon-\hbar\omega}\right] \tag{7.120}$$

avec

$$\hat{G}^{R,A}_\epsilon = \frac{1}{\epsilon-\hat{\mathcal{H}}_0 \pm i\gamma/2} \quad . \tag{7.121}$$

Lorsque la température est beaucoup plus petite que la température de Fermi, on peut, à une très bonne approximation, remplacer cette expression par son analogue à température nulle [14] :

$$\boxed{\mathrm{Re}\ \sigma_{xx}(\epsilon_F,\omega) = s\frac{\hbar}{\pi\Omega}\mathrm{Tr}\left[\hat{j}_x\ \ \mathrm{Im}\hat{G}^R_{\epsilon_F}\ \ \hat{j}_x\ \ \mathrm{Im}\hat{G}^R_{\epsilon_F-\hbar\omega}\right]} \tag{7.122}$$

qui est la relation (7.1). Cette expression se généralise à température finie :

$$\sigma_{xx}(T,\omega) = -\int d\epsilon \frac{f(\epsilon)-f(\epsilon-\hbar\omega)}{\hbar\omega}\sigma_{xx}(\epsilon,\omega) \tag{7.123}$$

ou encore, à fréquence nulle :

$$\sigma_{xx}(T) = \int d\epsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial\epsilon}\right)\sigma_{xx}(\epsilon) \quad . \tag{7.124}$$

[14] Il reste une dépendance en température liée au couplage aux autres degrés de libertés décrit par le paramètre $\gamma = \hbar/\tau_\phi(T)$, pour les cas où le temps de cohérence de phase τ_ϕ dépend de la température.

C7.1.2 Fonction de réponse densité-densité

On considère la réponse d'un gaz d'électrons libres à un potentiel scalaire $V(\boldsymbol{q},\omega)$. À l'approximation de la réponse linéaire, ce potentiel induit une variation de densité électronique $\delta n(\boldsymbol{q},\omega)$ de la forme

$$\delta n(\boldsymbol{q},\omega) = -\chi_0(\boldsymbol{q},\omega)V(\boldsymbol{q},\omega) \tag{7.125}$$

où $\chi_0(\boldsymbol{q},\omega)$ est la susceptibilité ou fonction de réponse densité-densité. Dans le cadre de la théorie de la réponse linéaire, on montre que cette fonction de réponse est donnée par la relation

$$\chi_0(\boldsymbol{q},\omega) = -\frac{s}{\Omega}\sum_{\alpha\beta}\frac{f_\alpha - f_\beta}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta - \hbar\omega - i0^+}|\langle\alpha|e^{i\boldsymbol{q}.\boldsymbol{r}}|\beta\rangle|^2 \quad . \tag{7.126}$$

Cette expression peut se récrire à l'aide des fonctions de Green [171]

$$\chi_0(\boldsymbol{q},\omega) = s\int\frac{d\epsilon}{2i\pi}\left[f(\epsilon-\hbar\omega)\Phi_\omega^{RR} - f(\epsilon)\Phi_\omega^{AA} + [f(\epsilon)-f(\epsilon-\hbar\omega)]\,\Phi_\omega^{RA}\right] \tag{7.127}$$

avec

$$\Phi_\omega^{RA}(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{\Omega}\mathrm{Tr}\left[e^{-i\boldsymbol{q}.\hat{\boldsymbol{r}}}\hat{G}_\epsilon^R e^{i\boldsymbol{q}.\hat{\boldsymbol{r}}}\hat{G}_{\epsilon-\hbar\omega}^A\right] \tag{7.128}$$

et

$$\hat{G}_\epsilon^{(R,A)} = \frac{1}{\epsilon - \hat{\mathcal{H}}_0 \pm i0^+} \quad . \tag{7.129}$$

Dans la base des impulsions :

$$\Phi_\omega^{RA}(\boldsymbol{q}) = \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}G_\epsilon^R(\boldsymbol{k}_+,\boldsymbol{k}'_+)G_{\epsilon-\hbar\omega}^A(\boldsymbol{k}_-,\boldsymbol{k}'_-) \tag{7.130}$$

avec $\boldsymbol{k}_\pm = \boldsymbol{k} \pm \boldsymbol{q}/2$. On obtient des expressions identiques pour Φ^{RR} et Φ^{AA}. D'après la relation (4.12), la moyenne sur le désordre $\overline{\Phi}^{RA}$ est reliée à la probabilité de diffusion quantique :

$$\overline{\Phi}_\omega^{RA}(\boldsymbol{q}) = \frac{2\pi\rho_0}{\hbar}P(\boldsymbol{q},\omega) \quad . \tag{7.131}$$

Par ailleurs, dans la limite $\boldsymbol{q} \to 0$,

$$\mathrm{Im}\overline{\Phi}_\omega^{RR}(\boldsymbol{q}) = -\mathrm{Im}\overline{\Phi}_\omega^{AA}(\boldsymbol{q}) = i\pi\frac{\partial}{\partial\epsilon}\rho(\epsilon) \tag{7.132}$$

où $\rho(\epsilon)$ est la densité d'états (3.30) et

$$\mathrm{Re}\overline{\Phi}_\omega^{RR}(\boldsymbol{q}) = \mathrm{Re}\overline{\Phi}_\omega^{AA}(\boldsymbol{q}) \quad . \tag{7.133}$$

On obtient alors pour $\overline{\chi}_0(\boldsymbol{q},\omega)$ à température nulle et dans la limite diffusive [15] :

$$\boxed{\overline{\chi}_0(\boldsymbol{q},\omega) = s\rho_0[1 + i\omega P_d(\boldsymbol{q},\omega)] = s\rho_0 \frac{Dq^2}{-i\omega + Dq^2}} \tag{7.134}$$

Le terme supplémentaire $\frac{s}{2i\pi}\hbar\omega \mathrm{Re}\phi^{RR}$ est d'ordre $\hbar\omega/\epsilon_F$. Il est donc négligeable [171, 172].

[15] C'est-à-dire en négligeant la contribution de P_0 (section C4.1.1).

Complément C7.2 Conductance et transmission

C7.2.1 Introduction - Formule de Landauer

Dans le chapitre 7, le transport électrique est caractérisé par la conductivité σ. Cette formulation exprime la réponse linéaire du conducteur à un champ électrique appliqué. Cette réponse est décrite par une fonction $\sigma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ donnée par l'expression (7.7) qui relie la densité de courant au champ électrique local

$$\boldsymbol{j}(\boldsymbol{r}) = \int d\boldsymbol{r}'\sigma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')\boldsymbol{E}(\boldsymbol{r}') \quad . \tag{7.135}$$

Pour un système invariant par translation et un champ électrique local constant [16], on a $\boldsymbol{j} = \sigma\boldsymbol{E}$ avec :

$$\sigma = \int d\boldsymbol{r}'\sigma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \frac{1}{\Omega}\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\sigma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \tag{7.136}$$

où Ω est le volume de l'échantillon. La conductivité σ apparaît comme une caractéristique intrinsèque du système, définie en volume et qui ne dépend ni de la géométrie du conducteur ni de la localisation des sources de tension appliquées.

En fait une expérience de transport électrique ne mesure pas la conductivité mais la conductance G, c'est-à-dire le courant $I = GV$ induit par une différence de potentiel. Pour un échantillon de longueur L et de section S :

$$I = \int_S \boldsymbol{j}(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{\rho} = \frac{V}{L^2}\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\sigma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = \frac{V}{L^2}\Omega\sigma \tag{7.137}$$

ce qui conduit à la loi d'Ohm [17]

$$G = \sigma\frac{S}{L} \quad . \tag{7.138}$$

Pour un échantillon quelconque, la conductance G dépend de la géométrie du conducteur ainsi que de la position des sources de courant et de tension.

Dans ce complément, on présente une approche due à Landauer [173, 174] qui relie la conductance G aux propriétés de transmission du conducteur désordonné, considéré comme une barrière de potentiel quantique. Plus précisément, pour un fil unidimensionnel de longueur finie relié à deux conducteurs parfaits, on a

$$G = s\frac{e^2}{h}T \tag{7.139}$$

[16] La relation (7.135) est valable pour toute distribution de champ électrique qui satisfait à la condition aux limites fixée par la donnée du potentiel aux bornes de l'échantillon [139].

[17] On se limite ici volontairement à une présentation très simple de la relation entre conductivité et conductance. Pour une description plus détaillée, on pourra consulter [139].

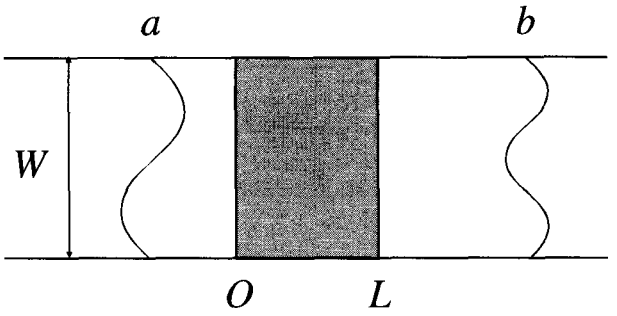


FIG. 7.9 – *Géométrie de guide d'onde utilisée dans le formalisme de Landauer. Le conducteur désordonné de longueur finie L et de section $S = W^{d-1}$ est parfaitement connecté à deux fils. Ceux-ci sont des guides d'onde propageant les ondes planes électroniques incidentes, réfléchies et transmises.*

où T est le coefficient de transmission à travers la barrière [18]. Cette relation est vraie pour chaque réalisation de désordre et pas seulement en moyenne.

La généralisation de la formule (7.139) à des dimensionalités supérieures nécessite de définir plus précisément la géométrie du milieu. On considère dorénavant un conducteur désordonné de longueur L et de section carrée $S = W^{d-1}$. Celui-ci est relié à des conducteurs parfaits (fig. 7.9) qui peuvent être considérés comme des guides d'onde pouvant propager les ondes planes réfléchies et transmises par le conducteur. Dans cette géométrie, les vecteurs d'onde transverses des modes propres du guide d'onde (ou *canaux transverses*) sont quantifiés du fait des conditions aux limites. On peut alors définir le coefficient de transmission T_{ab} d'un canal a entrant vers un canal b sortant. La formule de Landauer (7.139) se généralise en

$$G = s\frac{e^2}{h}\sum_{a,b} T_{ab} \quad . \tag{7.141}$$

Pour connaître le nombre de canaux, on considère que les électrons sont injectés à l'énergie de Fermi, c'est-à-dire que $k_F^2 = k^2 + |\boldsymbol{q}|^2$ où k est la composante longitudinale et $\boldsymbol{q}$ la composante transverse du vecteur d'onde. Les

[18] Il s'agit de la conductance de l'ensemble constitué par la barrière et les deux conducteurs parfaits. Pour avoir la conductance de la barrière elle-même on considère que la conductance totale est la conductance équivalente du terme de contact $s\frac{e^2}{h}$ correspondant à une parfaite adaptation d'impédance et de la contribution de la barrière mises en série. On obtient ainsi

$$G = s\frac{e^2}{h}\frac{T}{1-T} \quad . \tag{7.140}$$

Pour une discussion de ces deux expressions, on pourra consulter les références [174]. Ces deux expressions donnent le même résultat dans le cas d'une barrière large pour laquelle $T \ll 1$.

modes transverses sont quantifiés en unités de $\frac{2\pi}{W}$ et en dimension trois, leur nombre est

$$M = \frac{\pi k_F^2}{4\pi^2/W^2} = \frac{k_F^2 S}{4\pi} \quad . \tag{7.142}$$

La conductance moyenne se déduit de (7.139)

$$\overline{G} = s\frac{e^2}{h}\overline{T} \tag{7.143}$$

où $\overline{T}$ est le coefficient de transmission moyen défini par $\overline{T} = \sum_{ab} \overline{T}_{ab}$.

Il est instructif de récrire la formule de Drude pour la conductivité moyenne σ_0 sous une forme faisant apparaître le nombre de canaux. La conductance moyenne d'une tranche d'épaisseur L et de section carrée $S = W^{d-1}$ suit la loi d'Ohm $\overline{G} = \sigma_0 S/L$ où la conductivité moyenne σ_0 est donnée par la relation (7.14), soit

$$\overline{G} = se^2\rho_0 D\frac{W^{d-1}}{L} \quad . \tag{7.144}$$

À trois dimensions, la densité d'états au niveau de Fermi est donnée par (3.44), soit $\rho_0 = k_F^2/(2\pi^2\hbar v_F)$. On obtient ainsi pour la conductance moyenne correspondante

$$\overline{G}^{3d} = s\frac{e^2}{h}\frac{k_F^2 l_e}{3\pi}\frac{S}{L} = s\frac{e^2}{h}\frac{4M}{3}\frac{l_e}{L} \tag{7.145}$$

écrite en fonction du nombre de canaux transverses $M = k_F^2 S/4\pi$. Cette relation se généralise aux dimensions $d = 1$ et $d = 2$,

$$\overline{G}^{1d} = s\frac{e^2}{h}\frac{2l_e}{L} \qquad \text{et} \qquad \overline{G}^{2d} = s\frac{e^2}{h}\frac{\pi M}{2}\frac{l_e}{L} \tag{7.146}$$

où le nombre de canaux transverses en dimension deux est :

$$M = \frac{2k_F}{2\pi/W} = \frac{k_F W}{\pi} \quad . \tag{7.147}$$

Le formalisme de Landauer est parfaitement adapté pour décrire la propagation des ondes électromagnétiques dans un milieu diffusant. Dans ce cas, il n'existe pas de description locale analogue à la formule de Kubo. En revanche, la description à la Landauer décrit le milieu diffusant à partir des coefficients de transmission et de réflexion de l'onde. L'équivalence entre les formalismes de Landauer et de Kubo, que nous discutons ci-après, permet donc de faire ressortir l'unité qui existe entre les domaines *a priori* très différents de l'électronique et de l'optique des milieux désordonnés. Pour le cas de l'optique, on ne se limitera pas à la géométrie d'un guide d'onde. On considérera surtout la géométrie d'un milieu diffusant placé dans l'espace libre où une onde plane incidente est réfléchie ou transmise sous la forme d'une onde sphérique à grande distance (chaps. 8, 9 et 12).

Le formalisme de Landauer pour le cas d'un guide d'ondes a été généralisé par Büttiker afin de décrire des géométries plus complexes dites « multiterminales » comportant plusieurs contacts [175].

C7.2.2 De Kubo à Landauer

Le but de cette section est de montrer l'équivalence des formalismes de Kubo et de Landauer, en déduisant la relation (7.141) de la formule de Kubo pour la conductivité. Pour cela, on suit la démarche utilisée dans la référence [176]. On considère un conducteur désordonné de longueur L et de section S relié à des guides d'onde infiniment longs de même section, qui modélisent les réservoirs. Une différence de potentiel est appliquée entre les deux réservoirs, ce qui correspond à un champ électrique dans la direction Ox. À partir des relations (7.137) et (7.3), on peut écrire la conductivité à fréquence nulle sous la forme [19]

$$G = -s\frac{e^2\hbar^3}{2\pi m^2 L^2}\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\ \partial_x G^R(\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}',x,x')\partial_{x'}G^A(\boldsymbol{\rho}',\boldsymbol{\rho},x',x) \quad . \tag{7.148}$$

Les fonctions de Green qui décrivent l'ensemble du système (conducteur désordonné + réservoirs) sont prises à l'énergie de Fermi. Les coordonnées spatiales sont de la forme $\boldsymbol{r} = (\boldsymbol{\rho}, x)$. On définit la transformée de Fourier par rapport aux coordonnées transverses [20]

$$G^R_{ab}(x,x') = G^R(\boldsymbol{q}_a,\boldsymbol{q}_b,x,x') = \frac{\hbar}{S}\int d\boldsymbol{\rho}d\boldsymbol{\rho}' G^R(\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}',x,x')e^{i(\boldsymbol{q}_a\cdot\boldsymbol{\rho}-\boldsymbol{q}_b\cdot\boldsymbol{\rho}')} \quad . \tag{7.149}$$

Dans la géométrie d'un guide d'onde, les conditions aux limites dans les directions transverses quantifient les vecteurs d'onde correspondants $\boldsymbol{q}_a$ et $\boldsymbol{q}_b$ et permettent de définir le nombre de canaux (7.142). L'énergie $\epsilon = \frac{\hbar^2}{2m}(k^2+|\boldsymbol{q}|^2)$ est fixée à l'énergie de Fermi et k est la composante longitudinale.

En intégrant sur les coordonnées transverses $\boldsymbol{\rho}$ et $\boldsymbol{\rho}'$ et puisque $\int d\boldsymbol{\rho}\, e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\rho}} = S\delta_{\boldsymbol{q},0}$, on obtient

$$G = -s\frac{e^2\hbar}{2\pi m^2 L^2}\int dxdx' \sum_{\boldsymbol{q}_a,\boldsymbol{q}_b}\partial_x G^R_{ab}(x,x')\partial_{x'}G^A_{ba}(x',x) \quad . \tag{7.150}$$

L'intégrande de cette relation peut s'écrire en fonction de la densité de courant associée à l'équation de Schrödinger projetée sur l'axe Ox. Or, cette composante de la densité de courant est conservée [21], par conséquent l'intégrande

---

[19] Il est inutile de mentionner la partie réelle puisque le produit des fonctions de Green est réel à fréquence nulle.

[20] La transformée de Fourier inverse s'écrit :

$$G^R(\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}',x,x') = \frac{1}{\hbar S}\sum_{\boldsymbol{q}_a,\boldsymbol{q}_b} G^R_{ab}(x,x')e^{i(-\boldsymbol{q}_a\cdot\boldsymbol{\rho}+\boldsymbol{q}_b\cdot\boldsymbol{\rho}')}$$

et correspond au cas où les conditions aux limites dans la direction transverse sont périodiques, ce qu'on supposera ici. Plus généralement, on définit la fonction de Green :

$$G^R(\boldsymbol{\rho},\boldsymbol{\rho}',x,x') = \sum_{\boldsymbol{q}_a,\boldsymbol{q}_b}\phi^*_a(\boldsymbol{\rho})G^R_{ab}(x,x')\phi_b(\boldsymbol{\rho}')$$

où $\phi_a(\boldsymbol{\rho})$ est la fonction d'onde transverse dans le réservoir associée au mode propre a.

[21] On trouvera une discussion détaillée de ce point dans les références [174, 176].

ne dépend pas de x. On peut donc le calculer loin de la région désordonnée, dans les guides d'onde où les fonctions de Green sont des ondes planes dont la dépendance en x est simplement $e^{ik_a x}$. Prendre les dérivées ∂_x et $\partial_{x'}$ revient donc à multiplier par les vecteurs d'onde k_a et k_b. L'intégrale sur x est alors immédiate et

$$G = s\frac{e^2}{h}\sum_{q_a,q_b} v_a v_b |G^R_{ab}(x,x')|^2 \tag{7.151}$$

où $v_a = \hbar k_a/m$ est la vitesse longitudinale et où x et x' sont des coordonnées quelconques prises dans les guides d'onde d'entrée et de sortie. Prenons par exemple $x = 0$ et $x' = L$. En définissant

$$\boxed{T_{ab} = v_a v_b |G^R_{ab}(0,L)|^2} \tag{7.152}$$

on obtient

$$\boxed{G = s\frac{e^2}{h}\sum_{q_a,q_b} T_{ab}} \tag{7.153}$$

Cette expression de la conductance peut aussi s'écrire en introduisant la matrice de transmission t dont les éléments t_{ab} dans la base des modes propres libres s'écrivent

$$t_{ab} = i\sqrt{v_a v_b}\, G^R_{ab}(0,L) \quad . \tag{7.154}$$

Ainsi,

$$\boxed{G = s\frac{e^2}{h}\sum_{q_a,q_b} |t_{ab}|^2 = s\frac{e^2}{h}\mathrm{Tr}\ tt^\dagger} \tag{7.155}$$

La trace étant indépendante de la base utilisée, la conductance peut être calculée dans la base des modes propres de la matrice $tt^\dagger$. Cette approche, complémentaire des méthodes décrites dans cet ouvrage, est basée sur les propriétés statistiques des valeurs propres de la matrice $tt^\dagger$. La référence [177] présente une revue de cette méthode.

Sur la relation (7.152), on voit le rôle que cette description fait jouer au coefficient de transmission T_{ab} comme mesure de la probabilité de traverser le milieu diffusant. Dans la suite de ce complément, on calcule le coefficient de transmission moyen à l'approximation du diffuson.

Si le formalisme de Landauer reproduit bien les résultats de l'approche du transport électronique à la Kubo, il devient indispensable dans les conducteurs de géométrie complexe, comme les réseaux ou en optique, où il est en principe possible de mesurer séparément les contributions des différents canaux de transmission. Finalement, on montre que ce formalisme permet de retrouver la correction de localisation faible (7.63) à la conductance.

C7.2.3 Transmission et conductance moyennes

Comme le montre la figure 7.10, la moyenne du produit des fonctions de Green qui contribue au coefficient de transmission moyen dans (7.152) est le produit de trois termes. Le premier décrit l'entrée dans le milieu diffusant. C'est une contribution du type Drude-Boltzmann, produit de deux fonctions de Green moyennes. Ce terme est exponentiellement petit, d'ordre e^{-L/l_e}. Le deuxième terme qui décrit la diffusion multiple dans le conducteur désordonné est le facteur de structure Γ. Le troisième terme, de même nature que le premier, décrit la sortie du milieu diffusant. Ainsi, de manière analogue à (4.23), on peut écrire

$$\overline{|G^R_{ab}(0,L)|^2} = \frac{1}{S}\int dx_1 dx_2 |\overline{G}^R_a(0,x_1)|^2 \Gamma(x_1,x_2) |\overline{G}^R_b(x_2,L)|^2 \qquad (7.156)$$

où dans la géométrie de la figure 7.9, $\overline{G}^R_a(x,x')$ est la fonction de Green moyenne définie par

$$\overline{G}^R_a(x,x') = \int_S d^2\boldsymbol{\rho}\ \overline{G}^R(\boldsymbol{\rho},x,x') e^{i\boldsymbol{q}_a\cdot\boldsymbol{\rho}} \quad . \qquad (7.157)$$

À partir de (3.42), on montre que

$$\overline{G}^R_a(x,x') = -\frac{i}{v_a} e^{ik_a|x-x'|-|x-x'|/2l_e\mu_a} \qquad (7.158)$$

$$\text{où} \quad k_a = k_F\cos\theta_a \quad \text{et} \quad \mu_a = \cos\theta_a = \frac{v_a}{v_F} \quad . \qquad (7.159)$$

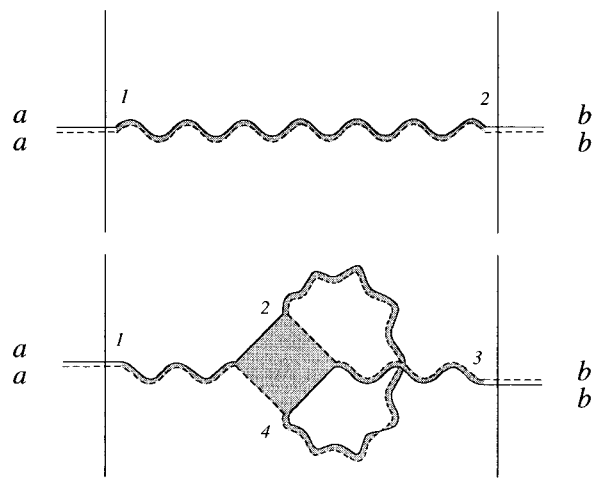


FIG. 7.10 – *Représentations diagrammatiques du coefficient de transmission moyen $\overline{T}_{ab}$ et de la correction de localisation faible, dans le formalisme de Landauer.*

La fonction $\Gamma(x_1, x_2)$ est la transformée de Fourier bidimensionelle $\Gamma(\boldsymbol{q}, x_1, x_2)$ du facteur de structure associé au diffuson $\Gamma(\boldsymbol{\rho}, x_1, x_2)$ prise à $\boldsymbol{q} = 0$. Ainsi, on obtient pour le coefficient de transmission moyen dans les canaux a et b

$$\overline{T}_{ab} = \frac{1}{S v_a v_b} \int dx_1 dx_2 e^{-x_1/l_e\mu_a} e^{-|L-x_2|/l_e\mu_b} \Gamma(x_1, x_2) \quad . \tag{7.160}$$

À l'approximation de diffusion le facteur de structure Γ est proportionnel à la probabilité P_d (relation 4.37). Pour les conditions aux limites de Dirichlet correspondant à un fil connecté à des réservoirs, ces deux quantités varient linéairement au voisinage de l'interface, selon (5.58). On a donc en utilisant (7.159),

$$\boxed{\overline{T}_{ab} = \frac{\tau_e^2}{S} \Gamma(l_e\mu_a, L - l_e\mu_b)} \tag{7.161}$$

ou encore [22],

$$\overline{T}_{ab} = \frac{1}{2\pi\rho_0 S} P_d(l_e\mu_a, L - l_e\mu_b) \quad . \tag{7.162}$$

De la relation (5.58), on déduit [23]

$$\overline{T}_{ab} = \frac{1}{2\pi\rho_0 S} \frac{l_e^2}{DL} \mu_a\mu_b \quad . \tag{7.163}$$

On peut aussi exprimer le coefficient de transmission moyen en fonction du nombre M de canaux transverses donné par (7.142)

$$\overline{T}_{ab} = \frac{3}{4} \frac{l_e}{ML} \mu_a\mu_b \quad . \tag{7.164}$$

La conductance est obtenue en sommant sur les canaux. Puisque $|\boldsymbol{q}_a| = k_F \sin\theta_a$, on déduit

$$\sum_{\boldsymbol{q}_a} f(\boldsymbol{q}_a) = \frac{k_F^2 S}{2\pi} \int_0^{\pi/2} f(\boldsymbol{q}_a) \sin\theta_a \cos\theta_a d\theta_a \quad , \tag{7.165}$$

en particulier,

$$\sum_{\boldsymbol{q}_a} 1 = M \qquad \sum_{\boldsymbol{q}_a} \mu_a = \frac{2}{3} M \quad . \tag{7.166}$$

[22] On note $P_d(x, x') = P_d(q = 0, x, x')$, solution de (5.45) avec $\gamma = k_\perp = 0$. Cette quantité est donnée par (5.58).

[23] Attention les relations (7.163, 7.164, 7.167) ne sont qu'approchées et doivent être corrigées pour tenir compte correctement des conditions aux limites. C'est l'objet de la section suivante.

La conductance moyenne à trois dimensions est donc

$$\overline{G} = s\frac{e^2}{h}\sum_{q_a,q_b}\overline{T}_{ab} = s\frac{e^2}{h}\frac{M}{3}\frac{l_e}{L} \quad . \tag{7.167}$$

Ce résultat est 4 fois plus petit que la conductance de Drude (7.145). Ceci provient du fait que les conditions aux limites de Dirichlet sont incompatibles avec l'approximation de diffusion. Nous discutons ce point dans la section suivante.

Exercice 7.5 : Coefficient de transmission moyen en dimension d

L'expression (7.163) est valable en toute dimension pour une densité d'états ρ_0 qui s'écrit

$$\rho_0 = \frac{dA_d}{(2\pi)^d}\frac{k_F^{d-1}}{\hbar v_F} \tag{7.168}$$

où A_d est le volume de la sphère de rayon unité (15.2).
En dimension d, le nombre de canaux est

$$M = \frac{A_{d-1}}{(2\pi)^{d-1}}(kW)^{d-1} \quad . \tag{7.169}$$

On en déduit la relation entre densité d'états et nombre de canaux transverses :

$$\rho_0 W^{d-1} = \frac{dA_d}{A_{d-1}}\frac{M}{hv_F} \qquad \left(= \frac{2M}{\pi\hbar v_F} \quad \text{pour} \quad d=3\right) \quad . \tag{7.170}$$

À partir de (7.161), on obtient ainsi pour le coefficient de transmission moyen en dimension d

$$\overline{T}_{ab} = \frac{A_{d-1}}{A_d}\frac{l_e}{ML}\mu_a\mu_b \quad . \tag{7.171}$$

Cette expression doit être corrigée afin de prendre en compte correctement les conditions aux limites (voir section suivante). Il faut alors effectuer le remplacement $\mu_i \to \mu_i + z_0/l_e$.

En s'assurant de prendre les bonnes conditions aux limites, on a donc montré que les approches de Landauer et de Kubo permettent de retrouver la conductance de Drude. Pourtant, ces deux approches semblent *a priori* tout à fait différentes. En effet, dans le formalisme de Kubo, la conductivité est obtenue en ne gardant que le terme de Drude négligé dans la présente dérivation, tandis que la contribution du diffuson est identiquement nulle (voir p. 296) pour des collisions isotropes. Inversement, nous venons de montrer à l'aide du formalisme de Landauer que la contribution essentielle à la conductance moyenne provient du diffuson et que le terme de Drude-Boltzmann est négligeable. En fait, ces deux points de vue sont complémentaires et équivalents. En effet, la conductivité est une quantité volumique définie par l'intégrale

$$\sigma = \frac{1}{\Omega}\iint d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\sigma(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \tag{7.172}$$

alors que la conductance est essentiellement une quantité surfacique qui peut s'écrire sous la forme

$$G = \sigma \frac{S}{L} = \iint d\boldsymbol{S} d\boldsymbol{S}' \sigma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') \tag{7.173}$$

où les intégrales sont prises sur les deux interfaces de l'échantillon. Cette expression, non démontrée ici, est équivalente à la relation de Landauer : elle exprime essentiellement la conductance comme un coefficient de transmission entre deux interfaces [139]. L'identité entre les deux relations (7.172) et (7.173) résulte de la conservation du courant qui conduit à l'équation de diffusion reliant les contributions à longue et à courte portée (remarque de la p. 291).

C7.2.4 Conditions aux limites et adaptation d'impédance

Le coefficient de transmission moyen (7.164) résulte d'une expression approximative de P_d obtenue en imposant la condition aux limites de Dirichlet, c'est-à-dire l'annulation de la probabilité à l'extérieur du milieu diffusant. Dans la section C5.2.3, nous avons présenté un autre choix de conditions aux limites mieux adapté à la description du passage d'une onde balistique à une onde diffusive au niveau de l'interface. Cette condition exprime que le flux diffusif entrant doit s'annuler. Dans ce cas, la probabilité ne s'annule pas exactement à l'interface entre les deux milieux mais à une distance z_0 *à l'extérieur du milieu diffusant.* Il faut alors considérer l'expression (5.158) pour $P_d(x, x')$ avec $z_0 = 2l_e/3$ en dimension 3. On en déduit

$$\boxed{\overline{T}_{ab} = \frac{3l_e}{4M(L + 4l_e/3)} \left(\mu_a + \frac{2}{3}\right) \left(\mu_b + \frac{2}{3}\right)} \tag{7.174}$$

Pour un conducteur suffisamment long, $L + 4l_e/3 \simeq L$. En sommant sur les canaux de sortie, on obtient le coefficient de transmission pour un mode incident donné a

$$\overline{T}_a = \sum_{\boldsymbol{q}_b} \overline{T}_{ab} = \frac{l_e}{L} \left(\mu_a + \frac{2}{3}\right) \quad . \tag{7.175}$$

En sommant également sur les canaux d'entrée, on retrouve exactement le résultat de Drude (7.145) pour la conductance

$$\overline{T} = \sum_{\boldsymbol{q}_a, \boldsymbol{q}_b} \overline{T}_{ab} = \frac{4M}{3} \frac{l_e}{L} \quad . \tag{7.176}$$

On peut ainsi interpréter la distance d'extrapolation $z_0 = 2l_e/3$ comme celle qui permet, à l'approximation de diffusion, de décrire correctement l'adaptation d'impédance entre le conducteur désordonné et les contacts.

Le résultat (7.176) permet de concevoir la conductance comme provenant de M canaux dont la contribution moyenne est d'ordre l_e/L.

Exercice 7.6 : Coefficient de transmission moyen en dimension $d = 2$

En utilisant les résultats de la section C5.2.3 pour le choix des conditions aux limites, montrer que pour la géométrie d'un guide d'onde bidimensionnel on a [178]

$$\overline{T}_{ab} = \frac{2}{\pi}\frac{l_e}{ML}\left(\mu_a + \frac{\pi}{4}\right)\left(\mu_b + \frac{\pi}{4}\right) \tag{7.177}$$

où la valeur $\pi/4$ correspond à la distance d'extrapolation z_0 à $d = 2$ (voir la relation 5.117) et où le nombre de canaux transverses est $M = k_F W/\pi$. En utilisant la relation

$$\sum_{\boldsymbol{q}_a} f(\boldsymbol{q}_a) = M\int_0^{\pi/2} f(\boldsymbol{q}_a)\cos\theta_a d\theta_a \tag{7.178}$$

montrer que

$$\sum_{\boldsymbol{q}_a} 1 = M \qquad \sum_{\boldsymbol{q}_a} \mu_a = \frac{\pi}{4}M \tag{7.179}$$

et en déduire que

$$\overline{T}_a = \sum_{\boldsymbol{q}_b}\overline{T}_{ab} = \frac{l_e}{L}\left(\mu_a + \frac{\pi}{4}\right) \qquad \text{et} \qquad \overline{T} = \sum_{\boldsymbol{q}_a}\overline{T}_a = \frac{\pi M}{2}\frac{l_e}{L} \quad . \tag{7.180}$$

On retrouve ainsi en dimension $d = 2$ le résultat de Drude (7.146).

Exercice 7.7 : Coefficient de réflexion

Le coefficient de réflexion R_{ab} d'un mode a vers un mode b peut être défini de façon semblable au coefficient de transmission (7.152)

$$R_{ab} = v_a v_b |G^R_{ab}(0, L)|^2. \tag{7.181}$$

En utilisant une expression analogue à (7.156), montrer que [178]

$$\overline{R}_{ab} = \frac{2}{\pi M}\left(\frac{\pi}{4} + \frac{\mu_a\mu_b}{\mu_a + \mu_b}\right) \qquad \text{et} \qquad \overline{R}_{ab} = \frac{3}{4M}\left(\frac{2}{3} + \frac{\mu_a\mu_b}{\mu_a + \mu_b}\right) \tag{7.182}$$

en dimensions 2 et 3.

Exercice 7.8 : Conservation du courant

La conservation de l'énergie impose que, pour chaque canal entrant, $\overline{R}_a + \overline{T}_a = 1$. Lorsque $l_e \ll L$, le coefficient de transmission moyen est négligeable de sorte que $\overline{R}_a = 1$. Montrer que l'expression (7.182) obtenue pour $\overline{R}_{ab}$ ne satisfait pas cette condition et que, pour le mode incident $\theta_a = 0$, on obtient $\overline{R}_a = \sum_{\boldsymbol{q}_a}\overline{R}_{ab} \simeq 0{,}773$ à $d = 2$ et $\overline{R}_a \simeq 0{,}790$ à $d = 3$.
Ceci est une conséquence de l'approximation de diffusion qui décrit mal le coefficient de réflexion, du fait de la présence des trajectoires courtes au voisinage de l'interface. Il est d'ailleurs intéressant de remarquer que $\overline{R}_a$ est plus proche de 1 en dimension 3, ce qui exprime que le poids des trajectoires courtes est plus faible lorsque la dimensionnalité augmente. On peut d'ailleurs vérifier formellement que $\overline{R}_a \to 1$ si $d \to \infty$. En transmission, l'approximation de diffusion est satisfaisante car toutes les trajectoires de diffusion qui traversent l'échantillon sont longues.

C7.2.5 Correction de localisation faible dans le formalisme de Landauer

Le calcul de la correction de localisation faible à la conductivité présenté dans la section 7.4 utilise le formalisme de Kubo. On en a déduit les expressions (7.63) pour la conductance moyenne.

Dans le cadre du formalisme de Landauer, on peut directement retrouver ces expressions sans passer par la conductivité. La correction de localisation faible ΔT_{ab} au coefficient de transmission moyen $\overline{T}_{ab}$ est donnée par le second diagramme de la figure 7.10, constitué de deux diffusons et d'un cooperon en boucle. La généralisation de l'expression (7.161) permet d'écrire la correction ΔT_{ab} sous la forme

$$\Delta T_{ab} = \frac{\tau_e^2}{S} \int \prod_i dx_i \, H(\{x_i\}) \, \Gamma(l_e\mu_a, x_1) \, \Gamma'(x_2, x_4) \, \Gamma(x_3, L - l_e\mu_b) \quad (7.183)$$

où Γ et Γ' sont les facteurs de structure associés respectivement au diffuson et au cooperon. La contribution de la boîte de Hikami $H(\{x_i\})$ est donnée par la relation (4.152). En utilisant (4.37) et en faisant porter les gradients sur les diffusons, on obtient

$$\Delta T_{ab} = \frac{2D}{(2\pi\rho_0)^2 S} \int_0^L \partial_x P_d(l_e\mu_a, x) \, P_c(x,x) \, \partial_x P_d(x, L - l_e\mu_b) dx \; . \quad (7.184)$$

Compte tenu de l'expression (5.158) de $P_d(x,x')$, les gradients $\partial_x P_d$ sont des constantes et dans la limite $L \gg l_e$,

$$\partial_x P_d(l_e\mu_a, x) = -\frac{l_e\mu_a + z_0}{DL} \qquad \partial_x P_d(x, L - l_e\mu_b) = \frac{l_e\mu_b + z_0}{DL} \quad (7.185)$$

où $z_0 = 2l_e/3$. La correction relative s'obtient à l'aide de (7.174) et de (7.170)

$$\frac{\Delta T_{ab}}{\overline{T}_{ab}} = -\frac{1}{\pi\hbar\rho_0 SL} \int P_c(x,x) dx \quad (7.186)$$

et elle redonne bien la correction de localisation faible (7.51) calculée dans le formalisme de Kubo. On note que la correction relative de localisation faible ne dépend pas du mode ($a \to b$) de propagation. La probabilité de retour est donnée par

$$P_c(x,x) = \frac{x}{D}\left(1 - \frac{x}{L}\right) \quad (7.187)$$

et en sommant sur tous les modes, on obtient la correction à la conductance sans dimension :

$$\Delta g = -\frac{s}{3} \quad (7.188)$$

qui est le résultat de l'exercice 7.2.

C7.2.6 Formalisme de Landauer pour les ondes

• Guide d'ondes

Nous avons présenté le formalisme de Landauer et calculé le coefficient de transmission $\overline{T}_{ab}$ et la conductance moyens d'un conducteur électrique quasi-unidimensionnel, c'est-à-dire pour la géométrie d'un guide d'ondes. On peut aussi adapter cette description à la propagation d'une onde électromagnétique à travers un milieu diffusant. De façon analogue à (7.152), c'est-à-dire pour la géométrie d'un guide d'onde, le coefficient de transmission d'un canal a vers un canal b est donné par

$$\boxed{T_{ab} = k_a k_b |G^R_{ab}(0, L)|^2} \tag{7.189}$$

L'équation (7.156) est inchangée mais la fonction de Green est celle de l'équation de Helmholtz (3.49) :

$$\overline{G}^R_a(x, x') = -\frac{i}{2k_a} e^{ik_a|x-x'|-|x-x'|/2l_e\mu_a} \tag{7.190}$$

de sorte que

$$\overline{T}_{ab} = \frac{1}{4k_a k_b S} \int dx_1 dx_2 e^{-x_1/l_e\mu_a} e^{-|L-x_2|/l_e\mu_b} \Gamma(x_1, x_2) \quad . \tag{7.191}$$

Le calcul se termine de manière similaire au cas électronique, c'est-à-dire que

$$\overline{T}_{ab} = \frac{l_e^2}{4k^2 S} \Gamma(l_e\mu_a, L - l_e\mu_b) \quad . \tag{7.192}$$

En utilisant (4.63), on obtient

$$\overline{T}_{ab} = \frac{\pi c}{k^2 S} P_d(l_e\mu_a, L - l_e\mu_b) \tag{7.193}$$

qui est l'analogue de (7.162).

• Espace libre

Dans le cas des ondes, on considère aussi la géométrie d'un milieu éclairé par une onde plane et qui transmet (ou réfléchit) à grande distance une onde sphérique (chaps. 8, 9 et 12). On ne peut alors plus définir de canaux transverses. Si la physique de la diffusion à travers le milieu désordonné est la même, les conditions aux limites sont sensiblement différentes. On utilise alors le coefficient de transmission $\mathcal{T}_{ab}$ par unité d'angle solide tel que [24]

$$\overline{\mathcal{T}}_{ab} = \frac{1}{(4\pi)^2} \int dx_1 dx_2 e^{-x_1/l_e\mu_a} e^{-|L-x_2|/l_e\mu_b} \Gamma(x_1, x_2) \quad . \tag{7.194}$$

[24] On se reportera à la relation (8.10) pour le coefficient de réflexion et à la section 12.3 pour une dérivation complète.

Les vecteurs d'onde incident et transmis ne sont plus quantifiés comme pour la géométrie d'un guide d'onde. En utilisant la relation (4.63) et la longueur d'extrapolation $z_0 = \frac{2}{3} l_e$, on obtient

$$\overline{\mathcal{T}}_{ab} = \frac{c}{4\pi} \mu_a \mu_b P_d(l_e \mu_a, L - l_e \mu_b) = \frac{3}{4\pi} \frac{l_e}{L} \mu_a \mu_b \left(\mu_a + \frac{2}{3}\right) \left(\mu_b + \frac{2}{3}\right) \cdot \quad (7.195)$$

L'intégration angulaire sur le demi-espace donne

$$\overline{\mathcal{T}}_a = \frac{l_e}{L} \mu_a \left(\mu_a + \frac{2}{3}\right) \quad (7.196)$$

et, pour le coefficient de transmission total, la relation

$$\overline{\mathcal{T}} = \frac{4\pi}{3} \frac{l_e}{L} \quad (7.197)$$

qui est différente de (7.176). La différence avec les expressions (7.174), (7.175) et (7.176) n'est pas surprenante. Elle résulte essentiellement du fait que, pour la géométrie du guide d'onde, il y a M canaux discrets tandis qu'en optique les directions d'incidence et d'émergence sont des variables angulaires continues définies entre 0 et π. Nous reviendrons en détail sur cette description dans les chapitres 8, 9 et 12.

Complément C7.3 Conductivité dans l'espace réel

L'expression (7.47) de la conductivité s'exprime en fonction de la probabilité de diffusion quantique calculée dans l'espace réel. Ceci suggère la possibilité d'établir directement cette relation sans passer par l'espace réciproque. C'est l'objet de ce complément. À partir de la définition (7.3), la conductivité moyenne peut se récrire :

$$\sigma(\omega) = s\frac{e^2\hbar^3}{2\pi m^2\Omega}\int\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \text{ Re } \overline{\partial_x G^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\partial_{x'}G^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})} \tag{7.198}$$

où l'énergie ϵ désigne l'énergie de Fermi. Cette expression fait intervenir un produit de fonction de Green G^RG^A, tout comme l'expression (4.9) de la probabilité quantique. Elle en diffère par la présence des deux dérivées spatiales des fonctions de Green qui traduisent le fait que $\sigma(\omega)$ est une fonction de corrélation courant-courant. Les dérivations ∂_x et $\partial_{x'}$ agissent respectivement sur les fonctions de Green retardée et avancée.

Le développement diagrammatique de la conductivité est tout à fait analogue à celui de la probabilité quantique (voir les relations 4.23 et 4.42 et la figure 7.11).

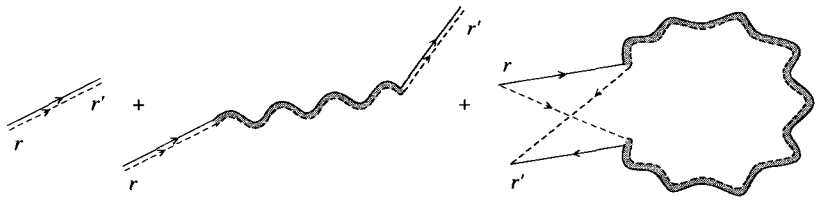


FIG. 7.11 – *Représentation des contributions de Drude-Boltzmann, du diffuson et du cooperon à la conductivité. Les flèches représentent ici les opérateurs courants entrant ∂_x et sortant $\partial_{x'}$. Il apparaît clairement que pour le diffuson ces courants ont des directions décorrélées alors que pour le cooperon le courant j_x est opposé au courant $j_{x'}$ lorsque $\boldsymbol{r} \simeq \boldsymbol{r}'$.*

On obtient ainsi

$$\begin{aligned}\overline{\partial_x G^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\partial_{x'}G^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})} &= \partial_x\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\partial_{x'}\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}) \\ &+ \int \partial_x\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r})\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}')\partial_{x'}\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_1d\boldsymbol{r}_2 \\ &+ \int \partial_x\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)\partial_{x'}\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_1)\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}')\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}_1d\boldsymbol{r}_2 \quad .\end{aligned} \tag{7.199}$$

La dépendance spatiale des fonctions de Green donnée par (3.88) est essentiellement déterminée par le facteur de phase $e^{ik_F|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|}$ et par conséquent, dans

la limite $k_F l_e \gg 1$:

$$\partial_x \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = k_F \frac{x-x'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \quad . \tag{7.200}$$

En introduisant la quantité :

$$u_{x,x'} = \frac{x-x'}{|\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'|} \tag{7.201}$$

l'équation (7.200) devient

$$\begin{aligned}\overline{\partial_x G^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\partial_{x'} G^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})} &= k_F^2 \Big[u^2_{x,x'} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}) \\ &+ \int u_{x,x_1} u_{x_2,x'} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r})\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}')\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_2)d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \\ &+ \int u_{x,x_1} u_{x_1,x'} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_1)\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_1)\Gamma'_\omega(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}')\overline{G}^A_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \Big] .\end{aligned} \tag{7.202}$$

Finalement, en intégrant sur l'espace, le premier terme de (7.202) fait apparaître la valeur moyenne :

$$\langle u^2_{x,x'} \rangle = \frac{1}{d} \quad . \tag{7.203}$$

La contribution du diffuson (second terme) disparaît puisque les courants entrant et sortant sont décorrélés. C'est une conséquence de l'hypothèse des collisions isotropes

$$\langle u_{x,x_1} u_{x_2,x'} \rangle = 0 \quad . \tag{7.204}$$

Enfin, l'intégrale du cooperon ne fait intervenir que les points $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$ voisins et, par conséquent, dans le dernier terme de (7.202) :

$$\langle u_{x,x_1} u_{x_1,x'} \rangle \simeq \langle u_{x,x_1} u_{x_1,x} \rangle = -\frac{1}{d} \quad . \tag{7.205}$$

Il reste donc pour la conductivité :

$$\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m\Omega} \int\int d\boldsymbol{r} d\boldsymbol{r}' \ \mathrm{Re}\ [P_0(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) - P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)] \tag{7.206}$$

où on a fait apparaître la densité électronique $n = \frac{2s}{d}\epsilon\ \rho_0(\epsilon)$. Pour un système invariant par translation, l'une des deux intégrales est immédiate et on retrouve la relation (7.47).

Complément C7.4 Correction de localisation faible et collisions anisotropes

Le calcul de la correction de localisation faible a été effectué pour le cas de collisions isotropes sur les impuretés. Il est remarquable que cette correction, donnée par (7.56), ne dépende pas du coefficient de diffusion. On peut se demander si cela reste vrai pour des collisions anisotropes, c'est-à-dire lorsqu'il existe deux temps caractéristiques τ_e et τ^*. Dans ce cas, la conductivité classique est toujours donnée par la relation d'Einstein où D est remplacé par $D^* = v_F^2\tau^*/d$ (relation 7.36). Qu'en est-il de la correction de localisation faible ?

Afin de bien comprendre la structure de cette correction, il est utile de récrire le diagramme correspondant au cooperon dans la figure 7.1 sous la forme de la figure 7.12.*a*. Une première modification consiste à remplacer le facteur de structure Γ par celui de la relation (4.171), c'est-à-dire $\Gamma^* \propto 1/(-i\omega + D^*q^2)$. Par ailleurs, comme le montre la figure 7.12.*b*, il faut renormaliser les vertex de courant (ce point a été discuté dans la section 7.2.3). Le cooperon fait apparaître une boîte de Hikami. Or celle-ci doit être habillée par des lignes supplémentaires afin de prendre en compte toutes les contributions du même ordre (voir la fig. 4.16). On vérifie aisément que, dans le cas isotrope, celles-ci ne contribuent pas du fait des vertex de courant. Il ne reste que la boîte de Hikami du diagramme 7.12.*a*, égale à

$$\langle s^2\rangle H^{(A)} = H^{(A)} \quad . \tag{7.207}$$

Dans le cas anisotrope, elle doit être remplacée par le diagramme $\tilde{H}^{(A)}$

$$\tilde{H}^{(A)} = H^{(A)}\left(\frac{\tau^*}{\tau_e}\right)^2 \tag{7.208}$$

en vertu de la relation (7.42) pour la renormalisation du vertex de courant. Par ailleurs les diagrammes avec une ligne d'impureté $\tilde{H}^{(B)}$ et $\tilde{H}^{(C)}$ (fig. 7.12.*b*) font apparaître la moyenne angulaire $\langle \hat{\boldsymbol{s}}.\hat{\boldsymbol{s}}' B(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}')\rangle = \gamma_1$, soit

$$\tilde{H}^{(B)} = \tilde{H}^{(C)} = H^{(B)}\left(\frac{\tau^*}{\tau_e}\right)^2 \frac{\langle \hat{\boldsymbol{s}}.\hat{\boldsymbol{s}}' B(\hat{\boldsymbol{s}} - \hat{\boldsymbol{s}}')\rangle}{\gamma_e} \tag{7.209}$$

où $H^{(B)} = -H^{(A)}/2$ est la boîte sans vertex définie et calculée dans la section C4.2.1, de sorte que

$$\tilde{H}^{(B)} = \tilde{H}^{(C)} = -\frac{1}{2}H^{(A)}\frac{\gamma_1}{\gamma_e}\left(\frac{\tau^*}{\tau_e}\right)^2 \quad . \tag{7.210}$$

La boîte $H^{(A)}$ qui intervient dans le calcul de la conductivité pour le cas isotrope est donc maintenant remplacée par $\tilde{H} = \tilde{H}^{(A)} + \tilde{H}^{(B)} + \tilde{H}^{(C)}$, c'est-à-dire :

$$\tilde{H} = H^{(A)} \times \left(\frac{\tau^*}{\tau_e}\right)^2 \left(1 - \frac{\gamma_1}{\gamma_e}\right) = H^{(A)} \times \frac{\tau^*}{\tau_e} \quad . \tag{7.211}$$

Grâce à ce facteur multiplicatif τ^*/τ_e, la correction de localisation faible $\Delta\sigma^*$ est donc encore de la forme (7.45), moyennant la substitution $D \to D^*$.

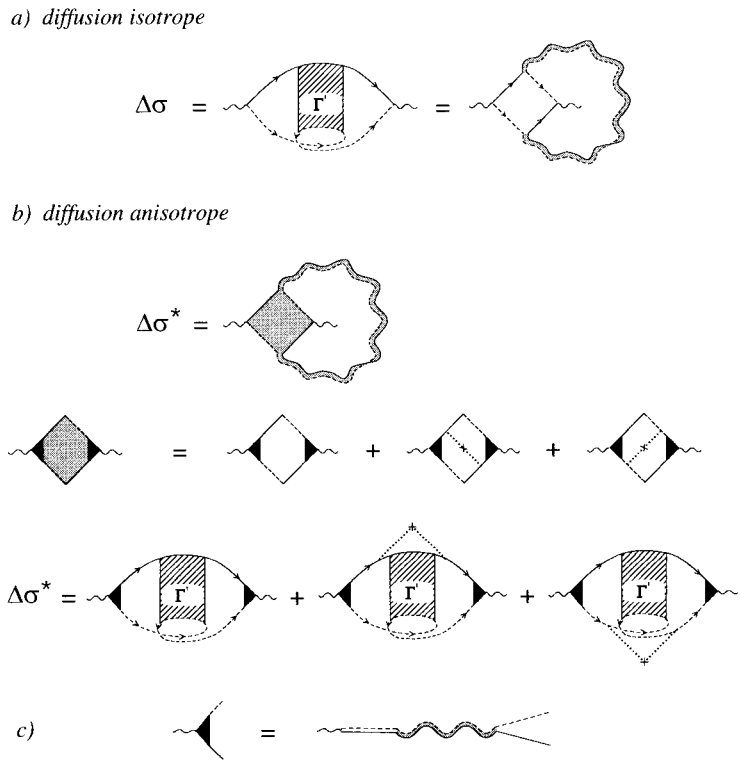


FIG. 7.12 – *Diagrammes pour la correction de localisation faible à la conductivité. a) Collisions isotropes. b) Collisions anisotropes. c) Représentation du vertex de courant habillé par un diffuson.*

Chapitre 8

Rétrodiffusion cohérente de la lumière

8.1 Introduction

La cohérence de phase est à l'origine des effets d'interférence associés à la correction de localisation faible. Cette cohérence a des effets tout aussi importants en optique. Par ailleurs, toujours en optique, il est possible avec un faisceau laser d'analyser la structure angulaire des ondes transmises et réfléchies, ce que ne permet pas simplement l'électronique pour laquelle les électrons sont injectés à partir d'un réservoir sans structure angulaire. On étudie dans ce chapitre l'intensité réfléchie par un milieu diffusant et on montre qu'elle a une structure angulaire qui résulte des effets cohérents décrits par le cooperon. On montre aussi qu'il est possible d'analyser sélectivement la contribution des chemins de diffusion multiple en fonction de leur longueur et d'obtenir, en quelque sorte, une « spectroscopie » du milieu diffusant.

Le problème de la diffusion des ondes dans un milieu désordonné a une longue histoire. Dès le début du XXe siècle, une approche purement classique dérivée de l'équation de Boltzmann a été proposée par Schuster [179] pour décrire le transfert radiatif des ondes électromagnétiques à travers l'atmosphère. Ce problème s'est ensuite étendu aux domaines connexes des milieux turbulents, de la météorologie et des liquides.

Ce n'est que dans les années 1980 qu'il a été suggéré qu'il pouvait subsister des traces de la cohérence de phase en diffusion multiple dans un milieu aléatoire. L'apparition de ces idées est certainement liée à un regain d'interêt pour la diffusion multiple, initié par les progrès obtenus en théorie de la diffusion en mécanique quantique [180–182]. Une description systématique des effets cohérents mettant en évidence la contribution du cooperon à la probabilité a initialement été proposée dans les références [183] et [184]. Cette vision plus moderne s'est développée avec les premiers résultats experimentaux [185–187]. Ceux-ci ont donné lieu à de très nombreux travaux dont il

serait difficile de dresser une liste exhaustive [188]. Nous en citerons un certain nombre dans ce chapitre. Toutefois, nous suivrons la démarche présentée dans les références [189, 190] et [191] [1].

Le domaine d'application de la diffusion multiple des ondes électromagnétiques est très vaste. Aussi, le phénomène de *rétrodiffusion cohérente* que nous allons étudier a de nombreuses applications qui ont été récemment développées. Nous n'allons pas les mentionner toutes mais en présenter une sélection à la fin de ce chapitre.

On considère d'abord le cas d'une onde scalaire, puis celui d'une onde polarisée. On définit et on étudie le coefficient de réflexion (*l'albédo*) d'un milieu semi-infini en fonction du diffuson et du cooperon. Puis, on étend ces résultats au cas d'une absorption finie. Finalement, on présente une revue assez détaillée des résultats expérimentaux qui démontrent de manière spectaculaire le succès des idées de diffusion multiple cohérente et ses nombreuses applications.

8.2 La géométrie de l'albédo

8.2.1 Définition

La situation physique que l'on veut décrire est la suivante : une source lointaine et ponctuelle émet une lumière monochromatique, que l'on assimilera à une onde plane, en direction de l'interface plan séparant le vide du milieu diffusant. La direction de la lumière incidente est repérée par la direction $\hat{\boldsymbol{s}}_i$. L'onde diffuse dans le milieu et ressort par la même interface (donc en réflexion). Elle est analysée par un détecteur situé très loin de l'interface, dans la direction $\hat{\boldsymbol{s}}_e$. On mesure donc la dépendance angulaire du coefficient de réflexion appelé *albédo* (aussi appelé parfois *coefficient bistatique* [192,193]). Il existe plusieurs définitions de ce coefficient, appropriées à différents domaines de la physique : astrophysique, physique atomique, physique nucléaire, etc. Par exemple, en astronomie, on définit l'albédo des planètes comme le rapport entre le flux total réfléchi et le flux lumineux incident provenant du soleil. Ainsi l'albédo de la Terre est de 35 %, celui de la Lune 6 %. Pour plus de détails, on pourra consulter [192, 193].

Le détecteur qui analyse la lumière émergente dans la direction $\hat{\boldsymbol{s}}_e$ mesure l'intensité $I(R\hat{\boldsymbol{s}}_e) \propto E^2$ du champ électromagnétique $E(R\hat{\boldsymbol{s}}_e)$. Pour une onde sphérique détectée à une distance R grande devant la taille du plan diffuseur, le flux d'énergie par unité de temps et d'angle solide s'écrit

$$\frac{dF}{d\Omega} = cR^2 I(R\hat{\boldsymbol{s}}_e) \quad , \tag{8.1}$$

[1] Cette sélection n'est, bien entendu, en rien reliée à un quelconque critère de qualité. Elle n'est que le reflet d'un choix visant à utiliser des références dont les notations sont, à peu près, celles de cet ouvrage.

où F est le flux du vecteur de Poynting. Le flux incident étant donné par [2] :

$$F_0 = cSI_0 \quad , \tag{8.2}$$

on définit l'albédo $\alpha(\hat{\boldsymbol{s}}_e)$ par le rapport adimensionné

$$\boxed{\alpha(\hat{\boldsymbol{s}}_e) = \frac{1}{F_0}\frac{dF}{d\Omega} = \frac{R^2}{S}\frac{I(R\hat{\boldsymbol{s}}_e)}{I_0}} \tag{8.3}$$

L'albédo a donc la structure d'une section efficace différentielle (voir la relation 2.67) à un facteur multiplicatif près lié à la surface du plan diffuseur.

8.2.2 Albédo d'un milieu diffusant

L'albédo permet de caractériser le rayonnement réfléchi par un milieu diffusant. Pour cela, il faut évaluer l'intensité $I(R\hat{\boldsymbol{s}}_e)$ du rayonnement diffusé, définie par la relation (4.54) [3]. Nous commençons par présenter une dérivation heuristique permettant de calculer la contribution du cooperon et de comprendre sa structure (singularité triangulaire, décroissance algébrique, etc.).

On considère un milieu diffusant semi-infini constitué du demi-espace $z \geq 0$. L'autre demi-espace est un milieu libre contenant la source et le détecteur (fig. 8.1). Les faisceaux incident (supposé normal au plan) et émergent sont caractérisés respectivement par les vecteurs d'onde $\boldsymbol{k}_i = k\hat{\boldsymbol{s}}_i$ et $\boldsymbol{k}_e = k\hat{\boldsymbol{s}}_e$ où $\hat{\boldsymbol{s}}_i$ et $\hat{\boldsymbol{s}}_e$ sont des vecteurs unitaires. Les ondes ne subissant que des collisions élastiques, seule la direction $\hat{\boldsymbol{s}}$ des vecteurs d'onde change tandis que leur amplitude $k = \frac{\omega_0}{c}$ reste constante. On suppose que la différence d'indice optique entre les deux milieux est négligeable.

Afin de calculer l'intensité $I(R\hat{\boldsymbol{s}}_e)$, on va tout d'abord considérer le cas d'une onde scalaire solution de l'équation de Helmholtz (2.9). Cette solution correspond à une onde plane incidente et à une onde émergente sphérique détectée en un point $\boldsymbol{R} = R\hat{\boldsymbol{s}}_e$ à l'infini, c'est-à-dire à une distance grande devant la taille du plan diffuseur (fig. 8.1). L'amplitude $\psi_{\omega_0}(\hat{\boldsymbol{s}}_e)$ de l'onde émergente, pour une direction d'incidence $\hat{\boldsymbol{s}}_i$ donnée, a donc la structure

$$\psi_{\omega_0}(\hat{\boldsymbol{s}}_e) \propto \int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' e^{ik(\hat{\boldsymbol{s}}_i.\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{s}}_e.\boldsymbol{r}')} G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega_0) \quad . \tag{8.4}$$

[2] On considère ici le cas d'une incidence normale. Pour une incidence quelconque, le flux incident dépend du cosinus de l'angle entre la direction incidente et la normale à la surface.

[3] Dans la définition (4.54) la source du champ est une fonction δ d'amplitude unité de telle sorte que l'intensité n'a pas les dimensions d'une intensité lumineuse. Cela n'est pas important puisque l'albédo est donné par le rapport de deux intensités.

Cette expression est la transformée de Fourier de la fonction de Green (4.21). Elle est de la forme

$$\psi_{\omega_0}(\hat{\boldsymbol{s}}_e) = \int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' e^{ik(\hat{\boldsymbol{s}}_i.\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{s}}_e.\boldsymbol{r}')} \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\boldsymbol{r}_1,\cdots,\boldsymbol{r}_N} |A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\mathcal{C}_N)| \exp\left(i\frac{2\pi\mathcal{L}_N}{\lambda}\right) \tag{8.5}$$

et l'intensité est donnée par $I(R\hat{\boldsymbol{s}}_e) = \frac{4\pi}{c}|\psi_{\omega_0}(\hat{\boldsymbol{s}}_e)|^2$. Dans cette expression, les points $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$ sont des points quelconques de l'interface tandis que les points $\boldsymbol{r}_i$ correspondent à des évènements de collision. $\mathcal{C}_N = (\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, ..., \boldsymbol{r}_N)$ est une séquence de N collisions et $\mathcal{L}_N/\lambda$ est la longueur de la trajectoire associée, en unités de la longueur d'onde $\lambda = \frac{2\pi}{k}$. Le champ ψ_{ω_0} est donc une somme sur toutes les séquences possibles de collisions multiples dans le demi-espace $z \geq 0$, pondérée par les facteurs de phase décrivant les deux ondes incidente et émergente dans le demi-espace libre $z \leq 0$.

On peut identifier trois contributions distinctes à l'albédo α. La première contient tous les termes pour lesquels les séquences contribuant respectivement à ψ_{ω_0} et $\psi^*_{\omega_0}$ sont différents (comme sur la fig. 4.1). La seconde contribution contient les termes pour lesquels ces séquences sont identiques et parcourues dans le même sens (fig. 8.1). Enfin, la dernière contribution contient aussi les séquences identiques mais parcourues en sens inverse l'une de l'autre (fig. 8.2).

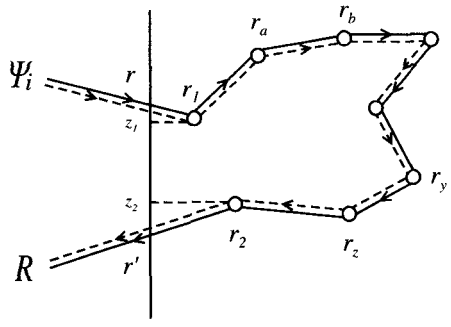


FIG. 8.1 – *Contribution du diffuson à l'albédo moyen. Dans le texte, on suppose que le faisceau incident est normal à l'interface.*

Pour une réalisation donnée de la position des centres diffuseurs, la première classe donne la contribution principale α_s à l'albédo, mais elle disparaît lorsqu'on moyenne sur la position des diffuseurs (fig. 1.4). Elle correspond aux fluctuations ou tavelures (speckle) que nous étudierons au chapitre 12. Les deux autres contributions notées α_d et α_c survivent à la moyenne et correspondent respectivement au diffuson et au cooperon, c'est-à-dire aux contributions incohérente et cohérente de phase.

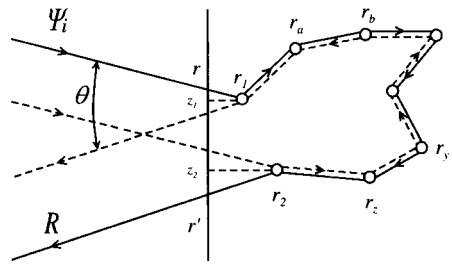


FIG. 8.2 – *Contribution du cooperon à l'albédo moyen. Dans le texte, on suppose le faisceau incident normal à l'interface.*

8.3 Valeur moyenne de l'albédo

8.3.1 Albédo incohérent : contribution du diffuson

En moyenne, ne subsistent que les trajectoires de diffusion multiple pour lesquelles les séquences de collisions $\mathcal{C}_N$ qui contribuent aux amplitudes ψ_{ω_0} et $\psi^*_{\omega_0}$ sont identiques. Pour avoir une expression de l'albédo moyen, il faut évaluer à l'approximation du diffuson l'intensité moyenne réfléchie, $I_d(R\hat{\boldsymbol{s}}_e)$ en un point $\boldsymbol{R} = R\hat{\boldsymbol{s}}_e$ à l'infini.

Dans la description de l'albédo, la source et le détecteur sont placés *à l'extérieur* du milieu diffusant : il faut donc décrire la conversion de l'onde plane incidente en une onde diffusive, puis la conversion de l'onde diffusive en une onde sphérique émergente. Plusieurs approches sont possibles. La plus naturelle est de procéder comme dans le chapitre 4, à savoir, décrire le processus de diffusion multiple par un produit $\overline{G}\,\overline{G}\,\Gamma\,\overline{G}\,\overline{G}$ (voir les relations 4.37 ou 4.60), où $\overline{G}$ est une fonction de Green moyenne et où Γ est le facteur de structure [4] associé au diffuson. On obtient ainsi une expression analogue à (4.60) qui s'écrit

$$I_d(R\hat{\boldsymbol{s}}_e) = \frac{4\pi}{c}\int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 |\overline{\psi}_i(\boldsymbol{r}_1)|^2 |\Gamma(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)| \overline{G}^R(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{R})|^2 \quad . \tag{8.6}$$

Dans cette expression, dont la structure est représentée sur la figure 8.1, $|\overline{\psi}_i(\boldsymbol{r}_1)|^2$ est l'intensité moyenne au point $\boldsymbol{r}_1$ provenant directement de la source et évaluée dans l'approximation à une seule collision. Le terme $|\overline{G}^R(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{R})|^2$ décrit, à cette même approximation, la propagation entre le dernier évènement de collision situé en $\boldsymbol{r}_2$ et un point $\boldsymbol{R}$ quelconque. Finalement, $\Gamma(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ est le facteur de structure associé au diffuson et solution de l'équation (4.24).

[4] Dorénavant on ne précisera plus la fréquence ω_0 des ondes.

Pour la géométrie considérée, on prend comme terme source une onde plane incidente, de telle sorte que

$$\overline{\psi}_i(\boldsymbol{r}_1) = \sqrt{\frac{cI_0}{4\pi}} e^{-|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}|/2l_e} e^{-ik\hat{\boldsymbol{s}}_i.\boldsymbol{r}_1} \quad , \tag{8.7}$$

où $\boldsymbol{r}$ désigne le point d'impact sur l'interface $z = 0$ du rayon incident, tandis que $\boldsymbol{r}_1$ représente le point de la première collision et $k\hat{\boldsymbol{s}}_i$ le vecteur d'onde de l'onde plane incidente (fig. 8.1). L'albédo moyen à l'approximation du diffuson est obtenu à partir de l'intensité donnée par la relation (8.6), soit finalement :

$$\alpha_d = \frac{R^2}{S} \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 e^{-|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}|/l_e} \Gamma(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) |\overline{G}^R(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{R})|^2 \quad . \tag{8.8}$$

Pour $|\boldsymbol{R} - \boldsymbol{r}_2| \to \infty$ (à l'approximation dite de Fraunhoffer), on peut développer la fonction de Green moyenne $\overline{G}^R(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{R})$ donnée par la relation (3.48) sous la forme (voir 2.57)

$$\begin{aligned} \overline{G}^R(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{R}) &= e^{-|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_2|/2l_e} \frac{e^{ik|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_2|}}{4\pi|\boldsymbol{R}-\boldsymbol{r}_2|} \\ &\simeq e^{-|\boldsymbol{r}'-\boldsymbol{r}_2|/2l_e} e^{-ik\hat{\boldsymbol{s}}_e.\boldsymbol{r}_2} \frac{e^{-ikR}}{4\pi R} \quad . \end{aligned} \tag{8.9}$$

En introduisant la projection [5] μ du vecteur $\hat{\boldsymbol{s}}_e$ sur l'axe Oz, on obtient $|\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}'| = z_2/\mu$ et $|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}| = z_1$ de sorte qu'on peut récrire finalement l'albédo incohérent associé au diffuson sous la forme

$$\boxed{\alpha_d = \frac{1}{(4\pi)^2 S} \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 e^{-\frac{z_1}{l_e}} e^{-\frac{z_2}{\mu l_e}} \Gamma(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)} \tag{8.10}$$

Dans l'approximation de variations spatiales lentes, le facteur de structure $\Gamma(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$, solution de l'équation (4.26), est solution de l'équation de diffusion

$$-D\Delta_{\boldsymbol{r}_2}\Gamma(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{4\pi c}{l_e^2}\delta(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) \tag{8.11}$$

et il est relié à la probabilité $P_d(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ par la relation (4.63) :

$$P_d(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) = \frac{l_e^2}{4\pi c}\Gamma(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \quad . \tag{8.12}$$

En insérant cette relation dans (8.10) on obtient

$$\boxed{\alpha_d = \frac{c}{4\pi l_e^2} \int_0^\infty dz_1 dz_2 e^{-\frac{z_1}{l_e}} e^{-\frac{z_2}{\mu l_e}} P_d(z_1, z_2)} \tag{8.13}$$

[5] On suppose que le faisceau incident est perpendiculaire à l'interface.

avec $P_d(z_1, z_2) = \int_S d^2\boldsymbol{\rho}\, P_d(\boldsymbol{\rho}, z_1, z_2)$. Pour la géométrie du milieu semi-infini, la fonction $P_d(\boldsymbol{\rho}, z_1, z_2)$ dépend des coordonnées z_1 et z_2 ainsi que de la projection $\boldsymbol{\rho}$ du vecteur $\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2$ sur le plan $z = 0$.

Le calcul de l'albédo moyen se ramène donc à celui de la probabilité P_d dans un milieu semi-infini. On a montré (section C5.2.3) que, dans cette géométrie, P_d est très bien décrite par la solution d'une équation de diffusion, à condition de prendre la condition aux limites effective où P_d s'annule au point de coordonnée $-z_0$ avec $z_0 = \frac{2}{3} l_e$ [194] [6]. La solution de l'équation de diffusion stationnaire correspondante s'obtient par la méthode des images (section 5.7 et complément C5.3). Les images des points $\boldsymbol{r}_1$ et $\boldsymbol{r}_2$ doivent être prises par rapport à un plan de coordonnée $-z_0$, de sorte que la probabilité $P_d(\boldsymbol{\rho}, z_1, z_2)$ s'écrit

$$P_d(\boldsymbol{\rho}, z_1, z_2) = \frac{1}{4\pi D}\left(\frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_1 - z_2)^2}} - \frac{1}{\sqrt{\rho^2 + (z_1 + z_2 + 2z_0)^2}}\right). \tag{8.14}$$

L'intégration sur $\boldsymbol{\rho}$ fait apparaître la quantité (relation 5.156) :

$$P_d(z_1, z_2) = \frac{1}{2D}\left[(z_1 + z_2 + 2z_0) - |z_1 - z_2|\right] = \frac{z_m + z_0}{D} \tag{8.15}$$

où $z_m = \min(z_1, z_2)$. À partir de (8.13), on obtient finalement pour l'albédo α_d l'expression

$$\boxed{\alpha_d = \frac{3}{4\pi}\mu\left(\frac{z_0}{l_e} + \frac{\mu}{\mu + 1}\right)} \tag{8.16}$$

Cette relation montre qu'à l'approximation du diffuson, l'albédo moyen d'un milieu désordonné optiquement épais dépend peu de l'angle entre la direction d'incidence et la direction $\hat{\boldsymbol{s}}_e$ (voir la figure expérimentale 8.8).

Remarques

- Cette expression de α_d résulte de l'approximation qui consiste à calculer l'intensité $I_d(\boldsymbol{R})$ en un point extérieur au milieu diffusant. La théorie du transfert radiatif (complément C5.2) revient à calculer l'intensité spécifique $I_d(z = 0, \hat{\boldsymbol{s}}_e)$ à l'interface, dans une direction émergente $\hat{\boldsymbol{s}}_e$ donnée (5.131). Elle conduit à une expression différente de l'albédo
$$\alpha_d = \frac{3}{4\pi}\mu\left(\frac{z_0}{l_e} + \mu\right) \tag{8.17}$$
qui, contrairement à (8.16), est normalisée, $2\pi \int_0^{\pi/2} \alpha_d(\theta) \sin\theta d\theta = 1$. On a toutefois choisi de développer ici la présentation la plus simple. Elle permettra d'avoir une idée intuitive de la dépendance angulaire de l'albédo cohérent et du cône de rétrodiffusion.

[6] La solution exacte du problème de Milne (complément C5.3) donne $z_0 = 0{,}710\ l_e$. Cependant cette valeur n'est pas consistante avec l'approximation de diffusion. Nous prendrons la valeur $z_0 = 2/3 l_e$ obtenue dans cette approximation.

- *A priori*, ce calcul de l'albédo moyen ne s'applique que pour des diffuseurs isotropes, c'est-à-dire lorsque le libre parcours moyen de transport l^* est égal à l_e. Pour des collisions anisotropes, il faut prendre en compte la dépendance angulaire du facteur de structure (complément C4.3). L'albédo α_d devient

$$\alpha_d = \frac{1}{(4\pi)^2 S} \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 e^{-\frac{z_1}{l_e}} e^{-\frac{z_2}{\mu l_e}} \Gamma(\hat{\boldsymbol{s}}_i, \hat{\boldsymbol{s}}_e, \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \tag{8.18}$$

où $\Gamma(\hat{\boldsymbol{s}}_i, \hat{\boldsymbol{s}}_e, \boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ est la transformée de Fourier de $\Gamma(\hat{\boldsymbol{s}}_i, \hat{\boldsymbol{s}}_e, \boldsymbol{q})$ définie par (4.157). Nous revenons sur ce point dans la section 8.6.

8.3.2 Albédo cohérent : contribution du cooperon

Considérons maintenant la contribution α_c du cooperon à l'albédo moyen. La situation correspondante est représentée sur la figure 8.2. Comme pour la contribution incohérente, on décrit la conversion de l'onde libre en onde diffusive par des fonctions de Green moyennes variant exponentiellement à l'entrée dans le milieu diffusant. L'intensité $I_c(R\hat{s}_e)$ est donnée par la relation (4.61)

$$I_c(R\hat{\boldsymbol{s}}_e) = \frac{4\pi}{c} \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \overline{\psi}_i(\boldsymbol{r}_1) \overline{\psi}_i^{\,*}(\boldsymbol{r}_2) \Gamma'(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \overline{G}^R(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{R}) \overline{G}^A(\boldsymbol{R}, \boldsymbol{r}_1) \tag{8.19}$$

où $\Gamma'(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ est le facteur de structure correspondant au cooperon (section 4.6). L'invariance par renversement du sens du temps implique que $\Gamma' = \Gamma$. En prenant, comme précédemment, une onde plane incidente (8.7) et en utilisant l'approximation de Fraunhoffer (8.9) pour les fonctions de Green, on obtient

$$\begin{aligned} \alpha_c = \frac{R^2}{S} \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 e^{-z_2/2\mu l_e} \frac{e^{ik\hat{\boldsymbol{s}}_e.\boldsymbol{r}_2}}{4\pi R} e^{-z_1/2\mu l_e} \frac{e^{-ik\hat{\boldsymbol{s}}_e.\boldsymbol{r}_1}}{4\pi R} \Gamma(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \\ \times e^{-z_1/2l_e} e^{-z_2/2l_e} e^{-ik\hat{\boldsymbol{s}}_i.\boldsymbol{r}_1} e^{ik\hat{\boldsymbol{s}}_i.\boldsymbol{r}_2} \end{aligned} \tag{8.20}$$

et finalement

$$\boxed{\alpha_c(\hat{\boldsymbol{s}}_e) = \frac{1}{(4\pi)^2 S} \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 e^{-(\frac{\mu+1}{2\mu})\frac{z_1+z_2}{l_e}} \Gamma(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) e^{ik(\hat{\boldsymbol{s}}_i+\hat{\boldsymbol{s}}_e).(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_1)}} \tag{8.21}$$

La phase qui apparaît dans cette relation donne une dépendance angulaire à la contribution du cooperon à l'albédo. Il est important de noter la dissymétrie entre les facteurs d'atténuation exponentiels qui apparaissent dans les relations (8.10) et (8.21). Dans la *direction de rétrodiffusion* définie par la condition $\hat{\boldsymbol{s}}_i + \hat{\boldsymbol{s}}_e = 0$, le facteur de phase disparaît et, comme $\mu = 1$, on obtient

$$\alpha_c(\theta = 0) = \alpha_d \tag{8.22}$$

où θ est l'angle, représenté sur la figure 8.2, entre les directions $\hat{\boldsymbol{s}}_i$ et $\hat{\boldsymbol{s}}_e$ des ondes incidente et émergente. L'albédo total moyen $\alpha(\theta) = \alpha_d + \alpha_c(\theta)$ vérifie

donc

$$\boxed{\alpha(\theta = 0) = 2\alpha_d} \tag{8.23}$$

Cette relation traduit le *doublement* de la probabilité dû à la contribution du cooperon, effet discuté en détail dans la section 4.6. Le phénomène physique associé à ce résultat est couramment désigné sous le nom de *rétrodiffusion cohérente.*

En utilisant la relation (4.63) entre le facteur de structure Γ et P_d, la relation (8.21) devient

$$\alpha_c = \frac{c}{4\pi l_e^2} \int_0^\infty dz_1 dz_2 \; e^{-\left(\frac{\mu+1}{2\mu}\right)\frac{z_1+z_2}{l_e}} \int_S d^2\boldsymbol{\rho}\, P_d(\boldsymbol{\rho}, z_1, z_2)\; e^{i\boldsymbol{k}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}} \tag{8.24}$$

où $\boldsymbol{k}_\perp = (\boldsymbol{k}_i + \boldsymbol{k}_e)_\perp = k(\hat{\boldsymbol{s}}_i + \hat{\boldsymbol{s}}_e)_\perp$ est la projection sur le plan xOy du vecteur $\boldsymbol{k}_i + \boldsymbol{k}_e$. Pour des valeurs suffisamment faibles de $(\hat{\boldsymbol{s}}_i + \hat{\boldsymbol{s}}_e)$, on peut négliger sa projection le long de l'axe Oz. En utilisant la relation (8.14) et l'intégrale

$$\int_S d^2\boldsymbol{\rho}\, \frac{e^{i\boldsymbol{k}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}}}{\sqrt{\rho^2 + A^2}} = 2\pi \frac{e^{-k_\perp |A|}}{k_\perp} \quad , \tag{8.25}$$

où on a noté $k_\perp = |\boldsymbol{k}_\perp|$, on obtient

$$\boxed{\alpha_c = \frac{c}{4\pi l_e^2} \int_0^\infty dz_1 dz_2 \; e^{-\left(\frac{\mu+1}{2\mu}\right)\frac{z_1+z_2}{l_e}} P_d(k_\perp, z_1, z_2)} \tag{8.26}$$

avec [7]

$$P_d(k_\perp, z_1, z_2) = \frac{1}{2Dk_\perp} \left(e^{-k_\perp |z_1 - z_2|} - e^{-k_\perp (z_1 + z_2 + 2z_0)} \right) \quad . \tag{8.27}$$

Après intégration, l'expression (8.26) devient

$$\boxed{\alpha_c(k_\perp) = \frac{3}{8\pi} \frac{1}{\left(k_\perp l_e + \frac{\mu+1}{2\mu}\right)^2} \left(\frac{1 - e^{-2k_\perp z_0}}{k_\perp l_e} + \frac{2\mu}{\mu+1} \right)} \tag{8.28}$$

Tout comme pour l'albédo incohérent, la dépendance de $\alpha_c(\theta)$ en fonction du cosinus directeur μ est négligeable. On utilisera donc en pratique l'expression précédente pour $\mu = 1$, soit

$$\alpha_c(\theta) = \frac{3}{8\pi} \frac{1}{(1 + k_\perp l_e)^2} \left(1 + \frac{1 - e^{-2k_\perp z_0}}{k_\perp l_e} \right) \quad . \tag{8.29}$$

[7] On peut aussi obtenir (8.27) à partir de la relation (5.157) et de la correspondance (5.47).

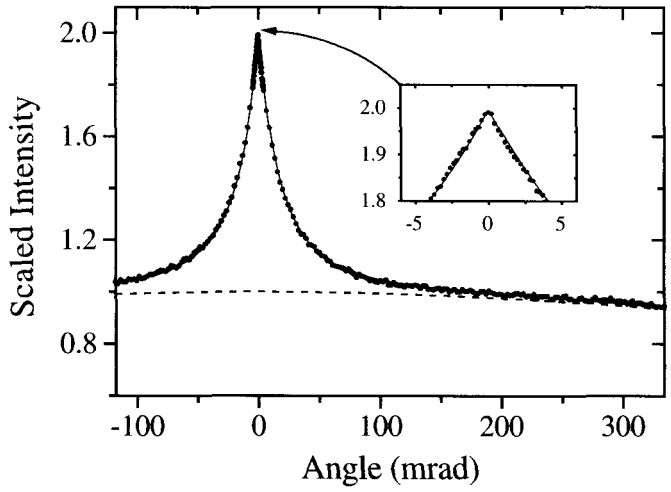


FIG. 8.3 – *Intensité moyenne rétrodiffusée en fonction de l'angle θ, mesurée sur une poudre (solution solide) de ZnO. L'albédo en rétrodiffusion, c'est-à-dire pour $\theta = 0$, est doublé par rapport à sa valeur à grand angle. En médaillon, on voit apparaître la singularité triangulaire. Voir la section 8.8 pour une analyse quantitative de cette courbe [203].*

Aux petits angles, on a $k_\perp \simeq \frac{2\pi}{\lambda}\theta$. La contribution cohérente est non nulle dans un cône d'ouverture angulaire $\frac{\lambda}{2\pi l_e}$ au voisinage de la direction de rétrodiffusion ($k_\perp \to 0$). On peut développer (8.29) ce qui donne

$$\alpha_c(\theta) \simeq \alpha_d \left(1 - 2\frac{(l_e + z_0)^2}{l_e + 2z_0} k_\perp\right) + O\left(k_\perp^2\right) \tag{8.30}$$

$$\simeq \alpha_c(0) - \frac{3}{4\pi}\frac{(l_e + z_0)^2}{l_e} k_\perp + O\left(k_\perp^2\right) \tag{8.31}$$

et $\alpha_c(0) = \alpha_d$. On introduit la notation :

$$\alpha_c(\theta) \simeq \alpha_c(0) - \beta k_\perp l_e \tag{8.32}$$

où le paramètre β est défini par [190]

$$\beta = \frac{3}{4\pi}\left(1 + \frac{z_0}{l_e}\right)^2 = \frac{25}{12\pi} \tag{8.33}$$

pour $z_0 = \frac{2}{3} l_e$. La dépendance angulaire de l'albédo a donc une *singularité triangulaire*. Sa dérivée est discontinue au voisinage de la direction de rétrodiffusion (fig. 8.3). Cette singularité est une conséquence de la nature diffusive de la propagation de l'intensité. Dans la section suivante, on montre qu'elle est reliée à la distribution des longueurs des chemins de diffusion multiple.

Aux grands angles $\alpha_c \to 0$ et il ne reste plus que la contribution classique associée au diffuson.

Les expressions que nous venons d'établir pour l'albédo cohérent ont été obtenues dans l'approximation de diffusion pour le calcul du facteur de structure. On peut se poser la question de la validité de cette approximation pour les petites trajectoires de diffusion multiple. Ce point sera discuté dans la section 8.8. Une solution exacte du problème de l'albédo cohérent pour une onde scalaire et des collisions isotropes a été proposée [195]. Elle est basée sur une adaptation du problème de Milne (complément C5.3). La solution, obtenue pour un milieu semi-infini par la méthode de Wiener-Hopf se prête assez mal au calcul numérique et à la comparaison avec l'expérience. De plus, il n'est pas possible de l'adapter aux cas plus physiques où les collisions sont anisotropes et où la polarisation de l'onde joue un rôle. Elle permet néanmoins d'analyser la contribution de la diffusion simple, un point sur lequel nous revenons dans la section 8.8.2.

Exercice 8.1 : Montrer, à partir de la relation (8.27), que le développement de $P_d(k_\perp, z_1, z_2)$ pour $k_\perp \to 0$ s'écrit :

$$P_d(k_\perp, z_1, z_2) = P_d(0, z_1, z_2) - \frac{k_\perp}{D}(z_1 + z_0)(z_2 + z_0) \quad . \tag{8.34}$$

Exercice 8.2 : Modification de l'albédo pour une tranche de largeur finie

Que devient la singularité triangulaire du pic de rétrodiffusion cohérente lorsque l'épaisseur L du milieu diffusant est finie ? Montrer que dans la relation (8.30), il faut remplacer $k_\perp$ par $k_\perp \coth k_\perp(L + 2z_0)$.

Pour une largeur finie, on garde la relation (8.26) en remplaçant (8.27) par (5.159), avec la correspondance (5.47), soit

$$P_d(k_\perp, z_1, z_2) = \frac{1}{Dk_\perp} \frac{\sinh k_\perp(z_m + z_0) \sinh k_\perp(L + z_0 - z_M)}{\sinh k_\perp(L + 2z_0)} \tag{8.35}$$

où $z_m = \min(z, z')$ et $z_M = \max(z, z')$. On effectue ensuite un développement pour $k_\perp z_m$, $k_\perp z_M$ et $k_\perp z_0$ petits et on obtient le développement (8.34) en remplaçant $k_\perp$ par $k_\perp \coth k_\perp(L + 2z_0)$. L'intégrale (8.26) conduit au résultat.

L'intérêt de cet exercice est de montrer que la singularité triangulaire disparaît pour des valeurs de $k_\perp$ inférieures à $1/L$. La singularité résulte donc de la contribution des très longues trajectoires de diffusion. La coupure de ces trajectoires au-delà d'une longueur L modifie la singularité aux petites valeurs de $k_\perp$, c'est-à-dire aux petits angles. Cette relation entre longues trajectoires et petits angles est analysée dans la section suivante.

Plus généralement, montrer à l'aide de la relation (8.35) et en prenant $z_0 = 0$, que pour une tranche de largeur finie L, l'albédo incohérent $\alpha_d(L)$ et l'albédo cohérent $\alpha_c(k_\perp, L)$ s'écrivent :

$$\alpha_d(L) = \frac{3}{8\pi}\left(1 - e^{-2b}\right)\left(1 - \frac{\tanh b/2}{b/2}\right) \tag{8.36}$$

$$\alpha_c(k_\perp, L) = \frac{3}{8\pi}\frac{1 - e^{-2b}}{(1 - k_\perp l_e)^2}\left[1 + \frac{2k_\perp l_e}{(1 + k_\perp l_e)^2}\frac{1 - \cosh(b\ (k_\perp l_e + 1))}{\sinh b\ \sinh(b\ k_\perp l_e)}\right] \quad ,$$

expressions valables dans la limite diffusive, c'est-à-dire lorsque l'épaisseur optique définie par $b = L/l_e$ reste grande devant 1. Vérifier que dans la direction de rétrodiffusion, on a encore la relation $\alpha_c(0, L) = \alpha_d(L)$, mais que la singularité triangulaire disparaît.

8.4 Dépendance temporelle de l'albédo et analyse de la singularité triangulaire

Il est intéressant d'avoir une autre présentation de l'albédo à partir de la dépendance temporelle de la probabilité de diffusion $P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$. Pour un milieu semi-infini, et en utilisant les relations (5.42) et (5.65), on peut écrire, avec la condition d'annulation en $-z_0$:

$$P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) = \frac{e^{-\rho^2/4Dt}}{(4\pi Dt)^{3/2}} \left[e^{-(z-z')^2/4Dt} - e^{-(z+z'+2z_0)^2/4Dt} \right] \tag{8.37}$$

ou, pour la transformée de Fourier à deux dimensions $P_d(k_\perp, z, z', t)$,

$$P_d(k_\perp, z, z', t) = \frac{e^{-Dk_\perp^2 t}}{(4\pi Dt)^{1/2}} \left[e^{-(z-z')^2/4Dt} - e^{-(z+z'+2z_0)^2/4Dt} \right] \quad . \tag{8.38}$$

On définit formellement un albédo dépendant du temps $\alpha(t) = \alpha_d(t) + \alpha_c(\theta, t)$ par les expressions

$$\alpha_d = \int_0^\infty dt\ \alpha_d(t) \quad , \quad \alpha_c(\theta) = \int_0^\infty dt\ \alpha_c(\theta, t) \quad . \tag{8.39}$$

On considère la limite des petits angles de sorte que $\mu = 1$. On néglige donc toute dépendance angulaire de α_d et on note que $\alpha_c(0, t) = \alpha_d(t)$. À partir de (8.26), $\alpha_d(t)$ et $\alpha_c(\theta, t)$ sont donnés par les relations

$$\alpha_d(t) = \frac{c}{4\pi l_e^2} \int_0^\infty dz dz'\ e^{-z/l_e} e^{-z'/l_e} P_d(z, z', t) \tag{8.40}$$

$$\alpha_c(\theta, t) = \frac{c}{4\pi l_e^2} \int_0^\infty dz dz'\ e^{-z/l_e} e^{-z'/l_e} P_d(k_\perp, z, z', t) \quad . \tag{8.41}$$

Les intégrales sur z et z' n'ont pas de dépendance angulaire et donnent une contribution fonction de l_e et de t. La seule dépendance angulaire provient du facteur $e^{-Dk_\perp^2 t}$ qui apparaît comme *la transformée de Fourier d'une loi de diffusion bidimensionnelle* sur l'interface.

Du fait des facteurs exponentiels, les intégrales sur z et z' sont coupées à des longueurs de l'ordre de l_e. Par conséquent, dans la limite des temps longs

($t \gg \tau_e$), on peut développer les termes gaussiens entre crochets dans (8.38). Après intégration sur z et z', on obtient

$$\alpha_c(\theta, t) = \alpha_d(t) e^{-Dk_\perp^2 t} \tag{8.42}$$

avec

$$\alpha_d(t) \simeq c(z_0 + l_e)^2 \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} \tag{8.43}$$

et $k_\perp \simeq 2\pi\theta/\lambda$. Cette expression permet d'écrire $\alpha_c(\theta, t)$ sous la forme

$$\alpha_c(\theta) \propto \int_0^\infty \frac{1}{t^{3/2}} e^{-\frac{1}{3}\left(\frac{2\pi l_e}{\lambda}\right)^2 \frac{t}{\tau_e}\theta^2} \left(1 - e^{-t/\tau_e}\right) \, dt \tag{8.44}$$

dont l'intégrande représente la contribution des trajectoires de diffusion de longueur développée t. Un facteur $(1 - e^{-t/\tau_e})$ a été introduit afin de couper l'intégrale aux temps courts.

Dans la direction de rétrodiffusion ($k_\perp = 0$), on a $\alpha_c(\theta = 0, t) = \alpha_d(t) \propto (Dt)^{-3/2}$. À un temps t donné, l'écho réfléchi est augmenté d'un facteur $(1 + e^{-Dtk_\perp^2})$ relativement à sa valeur incohérente et cela dans un cône d'ouverture angulaire $\theta(t) = \frac{\lambda}{2\pi\sqrt{Dt}}$ d'autant plus large que la longueur t des chemins de diffusion est petite (fig. 8.4). Donc, dans la direction de rétrodiffusion, *le facteur 2 entre les contributions cohérente et incohérente subsiste pour tous les temps.*

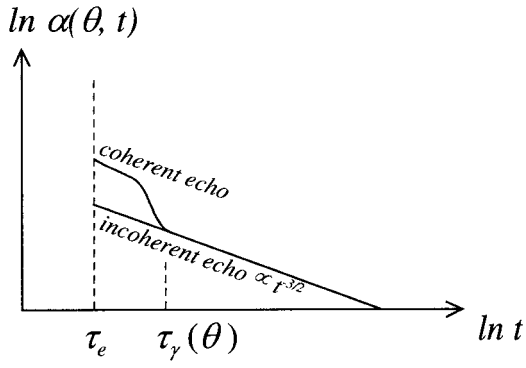


FIG. 8.4 – *Dépendance temporelle de l'albédo $\alpha(\theta, t)$ pour un angle θ fixé, en coordonnées logarithmiques. La contribution cohérente apparaît pour des temps inférieurs à $\tau_\gamma(\theta)$ donné par la relation (8.47).*

Il est intéressant de remarquer que l'albédo $\alpha_d(t)$ représente la probabilité de toucher le plan $z = -z_0$ après un temps t. Cette probabilité, qui varie en $t^{-3/2}$, ne dépend pas de la dimension d'espace. On obtiendrait le même résultat à deux dimensions avec une interface unidimensionnelle et plus généralement en dimension d, pour une interface de dimension $d - 1$.

Notons finalement que l'albédo $\alpha_c(\theta)$ peut aussi s'obtenir comme une transformée de Laplace et s'écrire

$$\alpha_c(\theta) = \int_0^\infty dt\ \alpha_d(t) \left\langle e^{i\boldsymbol{k}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}} \right\rangle \tag{8.45}$$

où la moyenne est effectuée sur une loi gaussienne :

$$\left\langle e^{i\boldsymbol{k}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}} \right\rangle = e^{-Dtk_\perp^2} \quad . \tag{8.46}$$

La comparaison avec la relation (6.3) permet de définir un temps de déphasage $\tau_\gamma(\theta) = 1/Dk_\perp^2$, c'est-à-dire

$$\boxed{\tau_\gamma(\theta) = \frac{3}{4\pi^2} \left(\frac{\lambda}{l_e}\right)^2 \frac{\tau_e}{\theta^2}} \tag{8.47}$$

Le pic triangulaire de rétrodiffusion cohérente s'interprète donc comme la somme d'une série de termes gaussiens pondérés par la probabilité $(Dt)^{-3/2}$. Bien que chaque terme soit parabolique au voisinage de la rétrodiffusion $\theta \simeq 0$, l'intégrale admet une singularité triangulaire autour de cette valeur. L'angle θ apparaît comme une variable conjuguée à la longueur t des chemins de diffusion. Une valeur donnée θ sélectionne tous les chemins de longueur $t/\tau_e \leq 3(\frac{\lambda}{2\pi l_e \theta})^2$ qui contribuent au pic de rétrodiffusion cohérente (fig. 8.4). Autrement dit, *ce sont les trajectoires longues qui contribuent à l'albédo cohérent aux petits angles.* La quantité $L_\gamma = \sqrt{D\tau_\gamma(\theta)} \simeq \lambda/2\pi\theta$ apparaît donc comme la longueur caractéristique au-delà de laquelle les chemins de diffusion ne contribuent plus au cooperon et donc au pic de rétrodiffusion cohérente. En ce sens, L_γ est une longueur de déphasage (chap. 6) associée à un déphasage réversible contrôlé par la valeur de l'angle.

8.5 Effet de l'absorption

On décrit l'effet d'une *longueur d'absorption* finie l_a sur l'albédo au moyen de la relation phénoménologique [8]

$$\alpha(\theta, l_a) = \int_0^\infty dt\ \alpha(\theta, t)\ e^{-t/\tau_a} \tag{8.48}$$

où $\tau_a = l_a/c$ est le temps d'absorption. Ainsi, pour l'albédo cohérent, on obtient l'expression

$$\alpha_c(\theta, l_a) = \int_0^\infty dt\ \alpha_d(t) e^{-Dtk_\perp^2}\ e^{-t/\tau_a} \quad . \tag{8.49}$$

[8] Il faut distinguer la longueur d'absorption l_a définie par $l_a = c\tau_a$ qui est la longueur développée d'une trajectoire de temps τ_a, et la longueur $L_a = \sqrt{D\tau_a}$ qui est la distance typique atteinte pendant le temps τ_a et qui joue le rôle de L_γ. L'usage est plutôt d'introduire l_a.

L'albédo cohérent en présence d'absorption est donc relié à sa valeur en l'absence d'absorption par la relation

$$\boxed{\alpha_c(k_\perp, l_a) = \alpha_c\left(\sqrt{k_\perp^2 + k_a^2}, \infty\right)} \tag{8.50}$$

où $k_a^{-1} = \sqrt{D\tau_a} = \sqrt{\frac{l_e l_a}{3}}$. En particulier, dans la direction de rétrodiffusion on obtient

$$\alpha_c(0, l_a) = \alpha_c(k_a, \infty) \quad . \tag{8.51}$$

L'existence d'une longueur d'absorption finie a pour effet d'éliminer les contributions cohérente et incohérente des trajectoires de diffusion d'extension supérieure à $\sqrt{D\tau_a}$. Compte tenu des résultats de la section précédente et de l'expression (8.44) on s'attend donc, pour l'albédo cohérent, à une dépendance parabolique pour les angles θ tels que $\tau_\gamma > \tau_a$, c'est-à-dire tels que $\theta < \lambda/2\pi\sqrt{l_e l_a}$ qui résulte de l'élimination des trajectoires de longueur supérieure à $\sqrt{D\tau_a}$. Ce comportement est effectivement observé expérimentalement (voir fig. 8.5 et section 8.8.3).

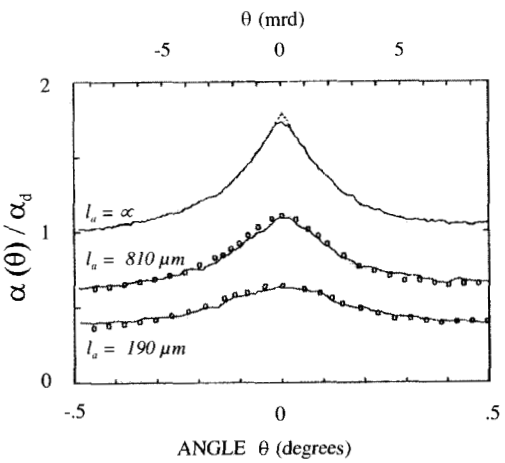


FIG. 8.5 – *Comportement de l'albédo en présence d'absorption, pour plusieurs valeurs de la longueur d'absorption l_a. Voir aussi la figure 8.12 [198].*

Il est intéressant de comparer aussi l'effet d'une longueur d'absorption finie sur l'albédo et celui d'un temps de cohérence de phase τ_ϕ sur le transport cohérent dans les métaux (section 7.4). Dans le cas de l'albédo, une absorption finie affecte dans les mêmes proportions les contributions cohérente et incohérente

et laisse donc inchangé le facteur 2 entre celles-ci. En revanche, pour le cas des électrons, une valeur finie de τ_ϕ affecte la contribution cohérente de localisation faible en supprimant les trajectoires de longueur supérieure à $\sqrt{D\tau_\phi}$, mais la contribution incohérente reste inchangée.

8.6 Cas des collisions anisotropes

L'étude menée jusque-là est limitée au cas où les collisions sur les impuretés sont isotropes. La seule longueur caractéristique décrivant le milieu diffusant est donc le libre parcours moyen élastique l_e. Cependant, les collisions sont en général anisotropes et le libre parcours moyen de transport l^* est différent du libre parcours moyen élastique l_e (complément C4.3). Comment l'albédo est-il modifié ? On s'attend à ce que l'approximation de diffusion décrive correctement les longues trajectoires de diffusion multiple, moyennant le remplacement de D par D^* (c'est-à-dire de l_e par l^*), et donc le comportement de l'albédo cohérent α_c aux petits angles. Il est naturel de penser alors que l'expression (8.31) reste valable, en remplaçant l_e par l^* et z_0 par $\frac{2}{3}l^*$.

Repartons des relations de définition (8.6) et (8.19) de l'albédo. Dans l'expression de α_d, le libre parcours l_e apparaît dans les fonctions de Green moyennes et dans le facteur de structure Γ. Dans le cas où les collisions sont anisotropes, il semble justifié de remplacer dans Γ la constante de diffusion D par D^* (relation 4.171). En revanche, les fonction de Green moyennes décrivent les première et dernière collisions et continuent à ne dépendre que de l_e et non pas de l^*. Effectuer ces changements conduit, après un calcul simple, à des expressions pour l'albédo cohérent (aux petits angles) et incohérent, qui dépendent du rapport l_e/l^* en contradiction avec l'argument présenté ci-dessus et avec les résultats expérimentaux.

En fait, pour des collisions anisotropes, les relations (8.6) et (8.19) doivent être généralisées pour prendre en compte la dépendance angulaire du facteur de structure (relation 8.18). On utilise ici une autre description du transport basée sur l'équation de transfert radiatif détaillée dans le complément C5.2. L'équation (5.93) pour l'intensité spécifique $I_d(\hat{\boldsymbol{s}}, \boldsymbol{r})$ repose sur les mêmes approximations que celles utilisées pour établir l'expression du diffuson P_d. L'avantage du transfert radiatif est de permettre de traiter plus systématiquement les problèmes faisant intervenir la géométrie du milieu diffusant et la nature des sources du rayonnement. Par exemple, les sources apparaissent explicitement dans l'équation (5.93). La prise en compte des bords intervient dans le choix des conditions aux limites. En se plaçant à l'approximation de diffusion utilisée jusqu'à présent pour calculer l'albédo, l'équation de transfert radiatif se ramène à l'équation de diffusion (5.105). Un avantage de cette équation par rapport à (4.66) est qu'elle contient explicitement la contribution des sources du rayonnement. Un autre avantage est qu'elle permet de décrire de manière cohérente la conversion de l'onde plane incidente en une onde

diffusive au moyen de la seule condition aux limites (5.108) qui impose que le flux diffusé entrant dans le milieu soit nul. En l'absence de source, cette condition aux limites est donnée par (5.113) et fait apparaître la longueur d'extrapolation $z_0 = \frac{2}{3}l^*$ que nous avons utilisée précédemment. En présence d'une source, la condition aux limites se met sous la forme (5.129), qui dépend à la fois de l^* et de l_e.

Le calcul de l'albédo à partir de l'équation de transfert radiatif et de cette condition aux limites est plus cohérent mais moins intuitif que celui conduisant aux relations (8.16) et (8.28). Ces deux descriptions reposent sur l'approximation de diffusion et sont donc en principe équivalentes. Mais elles prennent différemment en compte la contribution des trajectoires courtes.

On considère à nouveau la géométrie d'un milieu semi-infini dont l'interface est illuminée par une source ponctuelle d'intensité $I_0\delta(\boldsymbol{\rho})$, où $\boldsymbol{\rho}$ est un vecteur situé dans le plan $z = 0$ de l'interface. On a montré que l'intensité moyenne $I_d(\boldsymbol{r})$ est, à l'approximation de diffusion, solution de l'équation (5.105) avec la condition aux limites (5.129). Pour le cas d'une tranche, la solution de ce problème est donnée par la relation (5.132) :

$$I_d(\boldsymbol{\rho}, z = 0) = \frac{I_0}{4\pi^2}\frac{l^*}{l_e}\int_0^\infty d\lambda\ J_0(\lambda\rho)\ \frac{\lambda}{1+\frac{2}{3}l^*\lambda}\left(\frac{1}{1+\lambda l_e} - \eta\right) \tag{8.52}$$

où $\eta = 1 - l_e/l^*$ et où J_0 est la fonction de Bessel d'indice zéro. Le flux émergent en un point quelconque du plan est donné par (5.131), c'est-à-dire $\frac{5}{2}I_d(\boldsymbol{\rho}, z = 0)$ [189,196]. L'albédo cohérent s'obtient en prenant la transformée de Fourier par rapport à la variable $\boldsymbol{\rho}$ du flux émergent :

$$\alpha_c(\theta) = \frac{5}{2I_0}\int_S d^2\boldsymbol{\rho}\, I_d(\boldsymbol{\rho}, z = 0)\ e^{i\boldsymbol{k}_\perp\cdot\boldsymbol{\rho}} \quad . \tag{8.53}$$

L'intégrale sur $\boldsymbol{\rho}$ s'effectue aisément en utilisant (15.52). Il vient

$$\boxed{\alpha_c(\theta) = \frac{5}{4\pi}\frac{1}{1-\eta}\ \frac{1}{1+\frac{2}{3}k_\perp l^*}\left(\frac{1}{1+k_\perp l_e} - \eta\right)} \tag{8.54}$$

Dans la limite des petits angles, seules les longues trajectoires de diffusion contribuent à α_c qui ne dépend plus que du libre parcours moyen de transport l^*. Dans cette limite, l'expression (8.54) s'écrit :

$$\alpha_c(\theta) \simeq \alpha_d - \beta^* k_\perp l^* + O\left(k_\perp^2\right) \tag{8.55}$$

avec

$$\beta^* = \frac{3}{4\pi}\left(1+\frac{z_0}{l^*}\right)^2 \quad . \tag{8.56}$$

En prenant $z_0 = 2l^*/3$, on note que $\beta^* = 25/12\pi$, c'est-à-dire qu'il est indépendant de la nature des collisions [9] (voir 8.33). L'expression (8.54) de α_c est inapplicable aux grands angles (elle donne un albédo total négatif) puisque son domaine de validité est restreint à l'approximation de diffusion c'est-à-dire aux trajectoires de longueur supérieure à l^*.

8.7 Rôle de la polarisation

Jusqu'à maintenant, on a étudié la contribution du cooperon à l'albédo cohérent en considérant la lumière comme une onde scalaire, c'est-à-dire en ignorant les effets liés à la polarisation. On revient ici sur cette approximation. Nous avons vu dans la section 6.6 que la polarisation introduit un déphasage entre les séquences de collisions multiples appariées. Afin de prendre en compte ces effets, on se place dans l'approximation de Rayleigh [10] (section C2.3.1).

8.7.1 Coefficients de dépolarisation

Dans la section 6.6, on a étudié l'évolution de la polarisation α [11] d'un faisceau lumineux en présence de diffusion multiple. Cette évolution est caractérisée par la relation intégrale (6.150). Un premier effet de la diffusion multiple est de dépolariser la lumière incidente. Afin d'évaluer la dépolarisation, on se place dans la direction de rétrodiffusion, c'est-à-dire que l'on analyse la lumière émergente dans la direction opposée à celle du faisceau incident. L'intensité analysée selon la polarisation incidente est proportionnelle au coefficient $\Gamma_{\alpha\alpha,\alpha\alpha}$, tandis que celle émergeant dans la direction $\beta \neq \alpha$ perpendiculaire est décrite par $\Gamma_{\alpha\alpha,\beta\beta}$. La dépolarisation des photons après un temps t (c'est-à-dire pour des trajectoires de diffusion de longueur ct) peut se décrire à l'aide de deux coefficients de dépolarisation $d_{\parallel}(t)$ et $d_{\perp}(t)$ qui mesurent les fractions de l'intensité analysées dans les canaux de polarisation respectivement parallèle ($l \parallel l$ ou $h \parallel h$) et perpendiculaire ($l \perp l$ ou $h \perp h$) à

[9] Il n'existe pas à notre connaissance de calcul complet et « microscopique » de l'albédo cohérent pour des collisions anisotropes. De plus, il ne serait pas vraiment d'une très grande utilité puisqu'une expression de l'albédo aux grands angles dépend aussi d'autres paramètres que nous avons négligés (polarisation, différence d'indice, etc.). Néanmoins, il faut mentionner le résultat de la référence [197] pour l'albédo cohérent dans le cas anisotrope obtenu par une approche combinant à la fois une description microscopique et l'équation de transfert radiatif. La pente absolue que ces auteurs obtiennent est $-3/4\pi(z_0/l^* + l_e/l^*)^2$. Elle dépend de l_e et elle n'est donc pas universelle.

[10] Les résultats obtenus s'appliquent aussi au cas de la diffusion de Rayleigh-Gans (remarque p. 254).

[11] On considère indifféremment le cas d'une polarisation linéaire que l'on notera l ou circulaire que l'on caractérisera par son hélicité h.

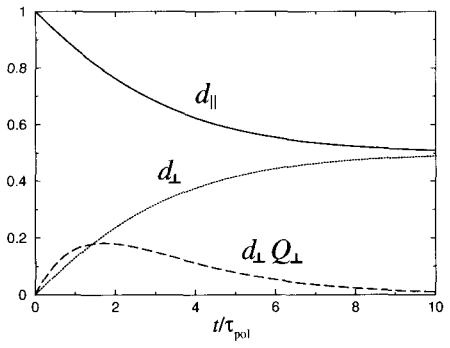


FIG. 8.6 – *Dépendance temporelle des termes de dépolarisation. $d_{\parallel}(t)$ et $d_{\perp}(t)$ sont les coefficients de dépolarisation et le produit $d_{\perp}(t)Q_{\perp}(t)$ décrit l'atténuation du cône de rétrodiffusion cohérente en polarisation perpendiculaire (relation 8.66).*

la polarisation incidente et dans la direction de rétrodiffusion. Ils sont définis par [12] :

$$d_{\parallel}(t) = \frac{\Gamma_{\alpha\alpha,\alpha\alpha}(t)}{\Gamma_{\alpha\alpha,\alpha\alpha}(t) + \Gamma_{\alpha\alpha,\beta\beta}(t)} \qquad d_{\perp}(t) = \frac{\Gamma_{\alpha\alpha,\beta\beta}(t)}{\Gamma_{\alpha\alpha,\alpha\alpha}(t) + \Gamma_{\alpha\alpha,\beta\beta}(t)} \quad . \tag{8.57}$$

Les tenseurs $\Gamma_{\alpha\alpha,\alpha\alpha}$ et $\Gamma_{\alpha\alpha,\beta\beta}$ s'expriment en fonction des modes propres Γ_k (relation 6.161). En rétablissant la dépendance en fréquence et en prenant la transformée de Fourier temporelle, on obtient, à partir de (6.167, 6.168) :

$$\Gamma_{\alpha\alpha,\alpha\alpha}(q,t) = \frac{1}{3}(\Gamma_0 + 2\Gamma_2) = \frac{\gamma_{pol}}{3\tau_{pol}} e^{-Dq^2 t}\left(1 + 2e^{-3t/7\tau_{pol}}\right) \tag{8.58}$$

$$\Gamma_{\alpha\alpha,\beta\beta}(q,t) = \frac{1}{3}(\Gamma_0 - \Gamma_2) = \frac{\gamma_{pol}}{3\tau_{pol}} e^{-Dq^2 t}\left(1 - e^{-3t/7\tau_{pol}}\right) \tag{8.59}$$

et on en déduit (fig. 8.6)

$$d_{\parallel}(t) = \frac{1 + 2e^{-3t/7\tau_{pol}}}{2 + e^{-3t/7\tau_{pol}}} \underset{t\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{2} \qquad d_{\perp}(t) = \frac{1 - e^{-3t/7\tau_{pol}}}{2 + e^{-3t/7\tau_{pol}}} \underset{t\to\infty}{\longrightarrow} \frac{1}{2} \quad . \tag{8.60}$$

La dépolarisation affecte de manière identique les contributions cohérente et incohérente à l'albédo, c'est-à-dire le cooperon et le diffuson. Il faut la prendre en compte afin de décrire les effets de la diffusion multiple sur une onde polarisée. Ainsi l'albédo incohérent est obtenu à partir de la relation (8.39),

[12] On ne considère dans ces définitions que les composantes (α, β) situées dans le plan perpendiculaire à la direction du faisceau émergent.

mais en incluant la dépendance temporelle des facteurs de dépolarisation :

$$\alpha_d^{\parallel} = \int_0^{\infty} dt \alpha_d(t) d_{\parallel}(t) \simeq \frac{1}{2}\alpha_d \tag{8.61}$$

$$\alpha_d^{\perp} = \int_0^{\infty} dt \alpha_d(t) d_{\perp}(t) \simeq \frac{1}{2}\alpha_d \quad . \tag{8.62}$$

La dépolarisation réduit donc de manière sensiblement identique le fond incohérent décrit par $\alpha_d^{\perp}$ et $\alpha_d^{\parallel}$. Une moitié du signal est recueillie dans chacun des canaux de polarisation parallèle et perpendiculaire. L'approximation $d_{\parallel,\perp} \simeq \frac{1}{2}$ est bien justifiée pour les longues trajectoires complètement dépolarisées. Par contre, le poids des petites trajectoires encore partiellement polarisées est ainsi sous-estimé.

8.7.2 Albédo cohérent d'une onde polarisée

En plus de la dépolarisation, il apparaît pour le cooperon un déphasage entre séquences conjuguées par renversement du sens du temps. Ce déphasage modifie donc la rétrodiffusion cohérente.

Considérons un faisceau incident polarisé. L'albédo cohérent peut être analysé soit dans le même canal de polarisation, soit dans le canal perpendiculaire. Dans la section 6.6.4, on a montré que si la lumière est analysée dans le même canal de polarisation, le caractère vectoriel de la lumière ne joue pas de rôle, la dépolarisation mise à part. L'albédo cohérent correspondant $\alpha_c^{\parallel}$, obtenu à partir de la relation (8.44), n'est pas atténué et inclut simplement le facteur de dépolarisation (8.60) de la lumière incidente :

$$\alpha_c^{\parallel}(\theta) = \int_0^{\infty} \alpha_d(t) d_{\parallel}(t) e^{-Dt\left(\frac{2\pi}{\lambda}\theta\right)^2} (1 - e^{-t/\tau_e}) dt \quad . \tag{8.63}$$

Qu'en est-il pour le canal perpendiculaire ? Pour répondre à cette question, on considère le facteur de structure du cooperon $\Gamma_{\alpha\beta,\beta\alpha}$ donné par la relation 6.170 (voir fig. 6.9). Pour une lumière polarisée, l'albédo cohérent dans le canal perpendiculaire est atténué d'un facteur défini par

$$Q_{\perp}(t) = \frac{\Gamma_{\alpha\beta,\beta\alpha}(q,t)}{\Gamma_{\alpha\alpha,\beta\beta}(q,t)} \qquad \beta \neq \alpha \quad . \tag{8.64}$$

Compte tenu de (6.167) et (6.170), on obtient (fig. 8.6) :

$$Q_{\perp}(t) = \frac{3}{2}\frac{\Gamma_2 - \Gamma_1}{\Gamma_0 - \Gamma_2} = \frac{3}{2}\frac{e^{-3t/7\tau_{pol}} - e^{-t/\tau_{pol}}}{1 - e^{-3t/7\tau_{pol}}} \underset{t\to\infty}{\longrightarrow} 0 \tag{8.65}$$

et l'albédo cohérent $\alpha_c^{\perp}(\theta)$ s'écrit

$$\alpha_c^{\perp}(\theta) = \int_0^{\infty} \alpha_d(t) d_{\perp}(t) Q_{\perp}(t) e^{-Dt\left(\frac{2\pi}{\lambda}\theta\right)^2} (1 - e^{-t/\tau_e}) dt \quad . \tag{8.66}$$

Pour un faisceau analysé dans une direction de polarisation parallèle à la polarisation incidente, on vérifie à l'aide des relations (8.61) et (8.63) que $\alpha_c^{\parallel}(\theta = 0) = \alpha_d^{\parallel}$. Ainsi, à cause de la dépolarisation, les contributions cohérente et incohérente sont toutes deux réduites de moitié. Mais leur rapport n'est pas modifié, c'est-à-dire que le facteur 2 du pic de rétrodiffusion cohérente subsiste comme dans le cas de la diffusion d'une onde scalaire.

Par contre, pour un faisceau analysé dans le canal de polarisation perpendiculaire, l'albédo cohérent est réduit par le facteur exponentiel (8.65) qui élimine les longues trajectoires de diffusion. Le rapport entre les contributions cohérente et incohérente en $\theta = 0$ est donné par

$$r = \frac{\int_0^\infty dt \alpha_d(t) d_\perp(t) \langle Q_\perp(t) \rangle}{\int_0^\infty dt \alpha_d(t) d_\perp(t)} \quad . \tag{8.67}$$

L'amplitude du pic de rétrodiffusion cohérente est donc réduite. Ces comportements ont été mis en évidence expérimentalement et sont représentés sur la figure 8.7. Ces résultats ne sont justifiés que pour le cas de la diffusion Rayleigh. En réalité, les diffuseurs sont plus gros et donnent lieu à de la diffusion anisotrope de Mie. La dépolarisation se fait alors sur de plus longues trajectoires de diffusion multiple.

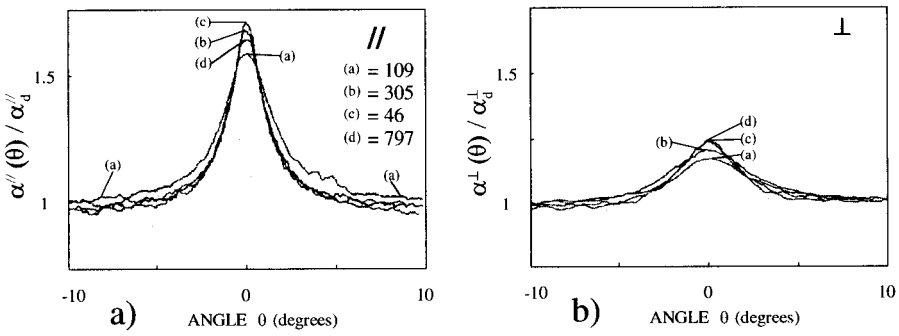


FIG. 8.7 – *Dépendance angulaire du cône de rétrodiffusion cohérente pour une lumière polarisée linéairement et analysée a) le long de la même direction, b) le long de la direction perpendiculaire. Le milieu diffusant est constitué de sphères de polystyrène de diamètres* 0,109 μm, 0,305 μm, 0,460 μm *et* 0,797 μm. *Les dépendances angulaires sont normalisées pour que les courbes aient la même largeur [198].*

8.8 Étude expérimentale

Dans l'introduction de ce chapitre, nous avons donné un bref historique de l'étude de la rétrodiffusion cohérente. Pour la première mesure d'un effet d'interférence au voisinage de la direction de rétrodiffusion [185], le facteur

d'augmentation (la hauteur relative du cône) n'était que de 15 % au lieu de 100 % comme cela est prévu théoriquement. Ceci explique en partie que cet effet n'ait pas été, même fortuitement, observé auparavant. En effet, l'ouverture angulaire du cône de rétrodiffusion est donnée par λ/l^*, c'est-à-dire de l'ordre de quelques *mrad* seulement. Son observation nécessite donc une excellente résolution angulaire qui n'a été obtenue que récemment. Suite à cette première observation et du fait d'un certain nombre de prédictions théoriques, plusieurs groupes ont mis au point des expériences de plus en plus précises. Celles-ci peuvent être classées en deux groupes : celles effectuées sur des solutions liquides de diffuseurs en suspension [185–187, 198] et celles effectuées sur des solutions solides [200–202]. Dans le premier cas, la moyenne s'obtient naturellement pour un temps d'exposition suffisamment long du fait du mouvement brownien des diffuseurs en suspension. Pour la seconde classe d'expériences, la moyenne est effectuée, soit de manière analogique sur plusieurs dizaines de réalisations [201], soit en faisant tourner l'échantillon par rapport au faisceau laser incident, chaque position donnant ainsi lieu à une nouvelle réalisation du désordre. L'équivalence des résultats issus de ces deux modes opératoires peut être vue comme une justification de l'hypothèse ergodique.

La meilleure résolution angulaire obtenue jusqu'à présent est inférieure à 50 μrad [202]. C'est une contrainte expérimentale indispensable pour pouvoir observer les effets prédits théoriquement, à savoir le facteur 2 d'amplification pour l'albédo cohérent et la singularité triangulaire au voisinage de la rétrodiffusion. La confirmation expérimentale de ces prédictions a permis de poursuivre l'étude quantitative des autres effets présentés dans ce chapitre, c'est-à-dire ceux liés à l'absorption, à la taille des diffuseurs, à la polarisation, etc. Les résultats obtenus démontrent qu'au-delà de l'effet proprement dit de rétrodiffusion cohérente, on dispose maintenant d'un outil permettant une caractérisation précise de la diffusion multiple.

8.8.1 Singularité triangulaire

L'analyse présentée pour l'étude de l'albédo cohérent $\alpha_c(\theta)$ est basée sur le fait que l'albédo incohérent α_d n'a pas de structure angulaire. C'est ce qui apparaît sur la figure 8.8 pour la rétrodiffusion par du téflon. Sur la figure 8.9 on observe le facteur 2 et la singularité triangulaire du cône de rétrodiffusion cohérente. L'accord entre les résultats expérimentaux et l'expression (8.28) est excellent, que ce soit pour les milieux solides ou liquides, ainsi que pour différentes valeurs de la longueur d'onde ou du libre parcours moyen [202, 203]. Cet accord pose cependant un certain nombre de questions compte tenu des hypothèses qui sous-tendent la dérivation de l'expression (8.28). En effet, celle-ci a été établie en supposant que l'on a une onde scalaire et en se plaçant à l'approximation de diffusion qui, si elle est justifiée pour les longues trajectoires, c'est-à-dire aux petits angles, ne l'est pas aux grands angles. Cette approximation sous-estime le poids des petites trajectoires relativement à la solution exacte [195].

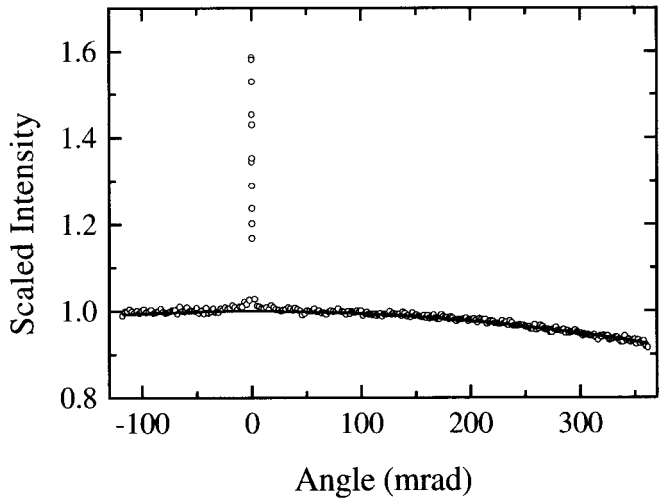


FIG. 8.8 – *Intensité rétrodiffusée par un échantillon de téflon en fonction de l'angle. Le cône extrêmement étroit résulte de la très grande valeur du libre parcours moyen élastique. L'intensité est étalonnée de telle sorte qu'elle soit égale à 1 en rétrodiffusion. La ligne en trait plein correspond à l'expression (8.16) pour* α_d *[203].*

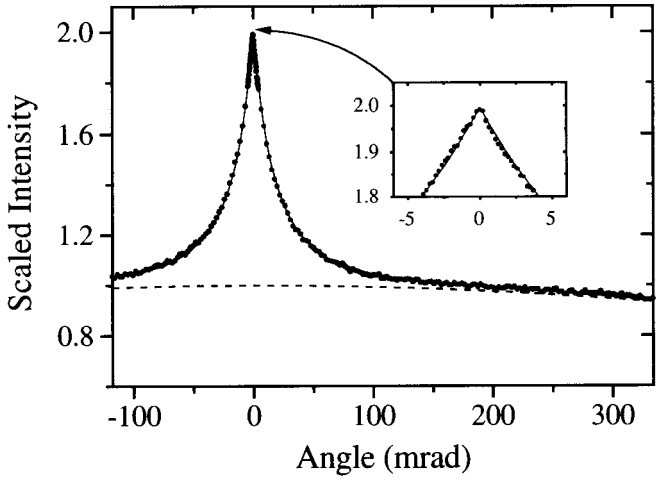


FIG. 8.9 – *Intensité rétrodiffusée en fonction de l'angle* θ *mesurée sur une poudre (solution solide) de ZnO. Le libre parcours moyen de transport correspondant est* $l^* = 1{,}9 \pm 0{,}1$ μm. *L'intensité est étalonnée de telle sorte que la contribution incohérente (tirets) à l'albédo soit égale à 1 à la rétrodiffusion* ($\theta = 0$). *Le facteur d'augmentation est* $\alpha(\theta = 0) = 1{,}994 \pm 0{,}012$. *La courbe en trait plein correspond à l'expression (8.28) obtenue dans l'approximation de diffusion (affectée d'un facteur* 1/2 *afin de prendre en compte l'effet de la dépolarisation). La courbe en médaillon est un agrandissement du voisinage de la rétrodiffusion qui fait apparaître la singularité triangulaire ainsi que la prédiction (8.28) correspondante [203].*

Cet excellent accord peut s'expliquer grâce à l'effet de la polarisation. Nous avons vu en effet que, pour une onde analysée dans le même canal de polarisation, il n'y a pas de déphasage entre les deux trajectoires appariées dans le cooperon, ce qui justifie l'emploi d'une approche scalaire. De plus, contrairement aux longues trajectoires, les trajectoires courtes ne sont pas complètement dépolarisées, comme le montrent les relations (8.60). Elles gardent une polarisation résiduelle et sont partiellement éliminées lors de l'analyse le long du canal de polarisation incident [13]. La contribution de ces trajectoires est donc moins importante que celle prédite par la théorie exacte scalaire.

8.8.2 Réduction de la hauteur du cône

La figure 8.10 montre que la largeur du cône de rétrodiffusion cohérente diminue lorsque l^* augmente, comme le prédit la relation (8.55). De plus, on note que la hauteur du cône dépend aussi du libre parcours moyen. Elle diminue avec l^*, s'éloignant donc de la valeur 2. Une première origine de cette réduction est liée à l'effet de la diffusion simple. En effet, dans l'évaluation des contributions respectives du diffuson et du cooperon, nous avons inclus, pour des raisons de commodité, le terme à une seule collision dans le cooperon (note 14, p. 120). Or, ce terme ne contribue pas à l'albédo cohérent puisqu'il ne dépend pas de l'angle. Par contre, il contribue au terme incohérent α_d. En toute rigueur et afin d'évaluer le facteur d'amplification $\mathcal{A}$, c'est-à-dire l'albédo total pour $\theta = 0$, il faut ôter de α_c la contribution α_0 de la diffusion simple. À l'aide de l'égalité $\alpha_c = \alpha_d$, on obtient alors la relation

$$\mathcal{A} = \frac{(\alpha_c - \alpha_0) + \alpha_d}{\alpha_d} = 2 - \frac{\alpha_0}{\alpha_d} \quad . \tag{8.68}$$

Afin d'étudier la contribution de la diffusion simple au facteur d'amplification $\mathcal{A}$, il faut prendre en compte l'effet de la polarisation. Pour la diffusion Rayleigh par des diffuseurs ponctuels, la diffusion simple est décrite par la section efficace différentielle (2.151) où les vecteurs $\hat{\varepsilon}_i$ et $\hat{\varepsilon}'$ décrivent respectivement la polarisation du champ incident et du champ diffusé. Ces vecteurs définissent quatre situations possibles pour les canaux de polarisation : pour une polarisation incidente linéaire, on a les deux canaux $(l \parallel l)$ et $(l \perp l)$ et pour une polarisation incidente circulaire, on a les deux canaux $(h \parallel h)$ et $(h \perp h)$ où h est l'hélicité définie par rapport à l'axe de propagation.

Pour la diffusion simple $\hat{\varepsilon}_i.\hat{\varepsilon}'^*$ est non nul en rétrodiffusion seulement pour $(l \parallel l)$ et $(h \perp h)$ (voir exercice 2.4). Ce dernier canal correspond à la réflexion par un miroir d'une onde polarisée circulairement. Ainsi, dans les canaux $(l \perp l)$ et $(h \parallel h)$, on élimine la diffusion simple en rétrodiffusion pour la diffusion Rayleigh. Nous avons vu (relation 8.66) que le canal $(l \perp l)$ induit un

[13] C'est d'ailleurs pour cette raison que l'on peut négliger la contribution à α_c de la diffusion simple qui reste complètement polarisée.

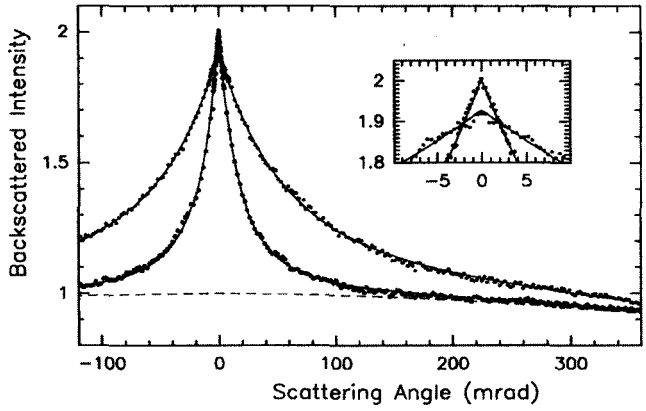


FIG. 8.10 – *Deux mesures du cône de rétrodiffusion cohérente correspondant respectivement à une faible valeur de l^* (cône large) et à une valeur plus grande (cône étroit). Ce dernier correspond à une solution solide ($BaSO_4$) caractérisée par un paramètre $kl^* = 22{,}6 \pm 1{,}0$, tandis que le cône plus large correspond à une suspension liquide de TiO_2 de paramètre $kl^* = 5{,}8 \pm 1{,}0$. Les courbes en trait plein et en pointillé correspondent respectivement aux relations (8.28) et (8.16). Sur le médaillon, on voit clairement apparaître la déviation par rapport au facteur 2 pour la plus petite valeur de l^* [202].*

déphasage en diffusion multiple entre les amplitudes appariées dans le cooperon. Ce n'est pas le cas du canal ($h \parallel h$) pour lequel le facteur d'atténuation $\langle Q_{\alpha\alpha} \rangle = \langle Q_{\parallel} \rangle = 1$ (relation 8.64) [205]. Il est donc possible dans le canal ($h \parallel h$) d'observer le facteur 2 d'amplification maximale : pas de contribution de la diffusion simple et pas de déphasage induit dans le cooperon.

Pour des collisions anisotropes, c'est-à-dire dans le régime de Mie (section C2.3.2), tous les canaux de polarisation contribuent en rétrodiffusion ce qui, en principe, diminue le facteur d'amplification. Mais l'anisotropie de la section efficace permet en général de négliger la diffusion simple en rétrodiffusion et donc de retrouver le facteur 2.

Il existe une autre contribution qui vient aussi diminuer $\mathcal{A}$. Elle est liée aux processus de diffusion multiple pour lesquels l'onde peut être diffusée plusieurs fois par le même diffuseur. Cette contribution ne dépend pas de l'angle θ et vient donc s'ajouter au fond incohérent en réduisant $\mathcal{A}$. Ce terme a été calculé pour le cas à deux collisions [202] et donne une correction à α_0 dans $\mathcal{A}$ proportionnelle à $1/kl^*$. Ce comportement est en accord avec les résultats de la figure 8.11.

8.8.3 Effet de l'absorption

L'influence de l'absorption sur la rétrodiffusion cohérente ne se réduit pas uniquement à une réduction du cône selon la relation (8.50). L'introduction

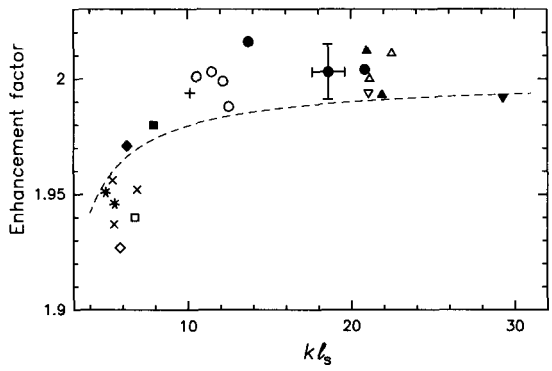


FIG. 8.11 – *Variation du facteur d'amplification $\mathcal{A}$ du cône par rapport à la valeur 2 en fonction du paramètre kl^*. Chaque point décrit une solution solide différente. La courbe en pointillé résulte du calcul de $\mathcal{A}$ pour lequel la diffusion double sur un même diffuseur a été incorporée [202].*

de la nouvelle longueur caractéristique l_a permet d'étudier quantitativement le rôle joué par l^* dans le cas où les collisions sont anisotropes [198].

Les résultats présentés sur la figure 8.12 sont obtenus pour une suspension de billes de polystyrène de diamètre 0,46 μm éclairée par une lumière de longueur d'onde $\lambda = 0{,}389$ μm, c'est-à-dire dans un régime où les collisions sont très anisotropes [14]. La longueur l_a mesurée indépendamment à cette concentration est de l'ordre de 100 μm. D'après la relation (8.48), on s'attend à ce que l'absorption élimine les longues trajectoires. C'est effectivement ce qui est observé dans le canal de polarisation parallèle [198, 204]. À partir de la figure 8.12, on peut aussi faire les observations suivantes relatives à l'absorption :

- La contribution incohérente à l'albédo est réduite de manière identique pour les canaux de polarisation parallèle ou perpendiculaire. On en déduit que la contribution à l'albédo incohérent des longs chemins de diffusion est complètement dépolarisée.

- L'albédo cohérent dans le canal parallèle décroît dans la même proportion que le signal incohérent, tandis que dans le canal perpendiculaire l'albédo cohérent est beaucoup moins affecté. On en déduit qu'en l'absence d'absorption, toutes les trajectoires contribuent à α_c dans le canal parallèle, tandis que seule une fraction d'entre elles contribue à α_c dans le canal perpendiculaire. Ceci est qualitativement en accord avec les conclusions de la section 8.7.

[14] Le calcul de l^* pour la diffusion de Mie par des sphères de ce diamètre donne $l^* = 21{,}5$ μm tandis que $l_e = 4{,}1$ μm (section C2.3.2).

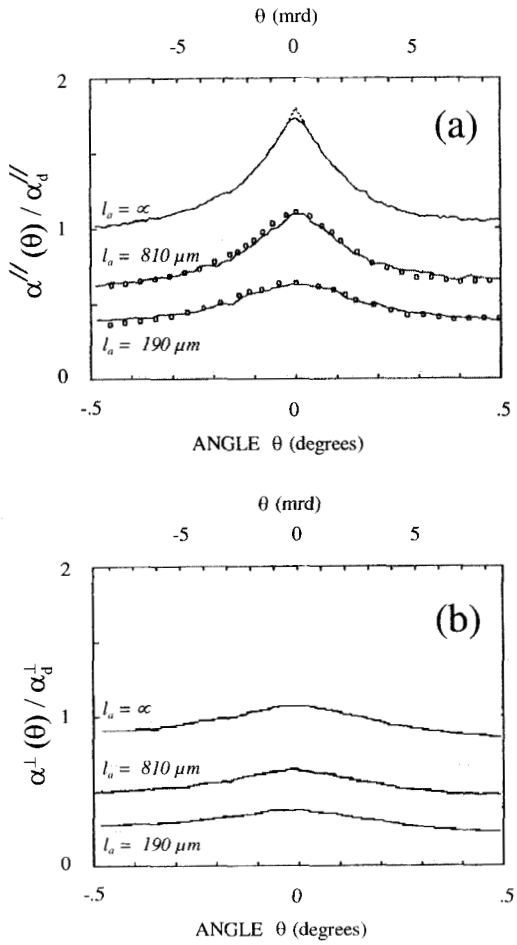


FIG. 8.12 – *Comportement de l'albédo en présence d'absorption dans un milieu constitué de billes de polystyrène immergées dans un colorant. (a) présente l'albédo cohérent dans le canal parallèle à la polarisation incidente. Les points correspondent à la relation d'échelle (8.50) qui relie les albédos cohérents en présence et en l'absence d'absorption. (b)* Idem *que pour (a) mais dans le canal de polarisation perpendiculaire [198].*

Plus quantitativement, les relations (8.50) et (8.51) permettent de relier les courbes d'albédo cohérent en présence et en l'absence d'absorption mais à des angles différents. Ainsi, la relation (8.51)

$$\alpha_c(0, l_a) = \alpha_c(k_a, \infty) \tag{8.69}$$

permet de déterminer pour chaque valeur de l_a un angle $\theta_a = \lambda k_a/2\pi$, c'est-à-dire tel que

$$\theta_a = \frac{\lambda}{2\pi}\sqrt{\frac{3}{l_a l^*}} \quad . \tag{8.70}$$

La figure 8.13 montre cette dépendance de θ_a en fonction de l_a. De cette relation, il est possible de déduire une valeur expérimentale pour le libre parcours moyen de transport, $l^* = 20 \pm 2$ μm assez proche de la valeur calculée (21,5 μm) (note 14, p. 368). La figure 8.12 montre que la relation d'échelle (8.50) est très bien suivie ce qui valide, là encore, l'approximation de diffusion.

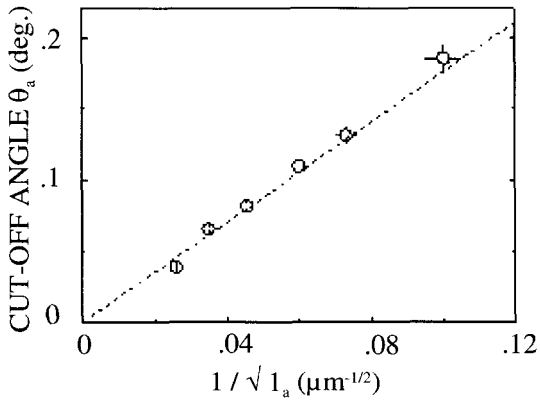


FIG. 8.13 – *Dépendance de l'angle θ_a définie par la relation (8.70) en fonction de la longueur d'absorption. Le trait en pointillé correspond à la relation (8.70) [198].*

De cet accord quantitatif, on peut déduire une valeur du paramètre β^* donné par (8.56). C'est un point important car il nous permet de vérifier quantitativement les prédictions déduites de l'approche du transfert radiatif pour l'albédo cohérent dans la section 8.6. Dans le canal parallèle, les contributions cohérente et incohérente à l'albédo sont également affectées par l'absorption. Dans ce canal, on a donc pour leur variations respectives, la relation

$$\alpha_d(l_a = \infty) - \alpha_d(l_a) = \alpha_c(k_a = 0) - \alpha_c(k_a) \tag{8.71}$$

que l'on peut développer aux petites valeurs de k_a. En utilisant la relation (8.55) pour développer $\alpha_c(k_a)$, on a

$$\alpha_d(l_a) - \alpha_d(\infty) = -\frac{1}{2}\beta^* l^* k_a \tag{8.72}$$

où le facteur 1/2 tient compte de la dépolarisation. Cette expression est bien justifiée puisqu'elle ne décrit que la contribution des longues trajectoires (c'est-à-dire des petits angles). En prenant $z_0/l^* = 2/3$, on déduit de (8.56) la valeur théorique $\beta^*/2 = 4{,}16/4\pi$. De la mesure indépendante de $\alpha_d(\infty)$,

en l'absence d'absorption pour des diffuseurs ponctuels [198], on déduit la valeur expérimentale $\beta^*/2 = 4{,}2/4\pi \pm 20$ % qui est très proche de la valeur théorique. Ce résultat est important : d'une part, il permet de conclure qu'il n'est pas possible de prendre $z_0 = 0$ pour le calcul de l'albédo d'un milieu semi-infini et que l'approximation de diffusion qui donne $z_0 = 2l^*/3$ est bien justifiée. D'autre part, cela justifie les hypothèses de la section 8.6 qui nous ont conduit à supposer que la pente de l'albédo cohérent aux petits angles ne dépend que de l^* et pas de l_e [15].

8.9 La rétrodiffusion cohérente dans d'autres situations

L'effet d'interférence mis en évidence par le cône de rétrodiffusion cohérente est commun à des systèmes physiques très différents et peut être observé pour des ondes de natures très diverses. Son existence, la relative facilité de sa mesure et la bonne compréhension quantitative que nous en avons, tout au moins aux petits angles, en ont fait un instrument assez couramment utilisé afin de mettre en évidence la diffusion multiple cohérente et de mesurer précisément le libre parcours moyen de transport. De plus, c'est un effet relativement robuste. Pour la lumière, on l'observe sur une large gamme de substances comme le montre la figure 8.14.

Le cône de rétrodiffusion cohérente peut aussi s'observer avec de la lumière naturelle donc non cohérente. Il doit alors être convolé par la fonction de corrélation spectrale de la source [206, 207], ce qui pour le cas de la lumière solaire réduit la hauteur du cône (fig. 8.15).

8.9.1 Rétrodiffusion cohérente et « gloire »

Il existe dans la nature d'autres exemples de rétrodiffusion cohérente observables avec de la lumière naturelle. Le plus connu d'entre eux est certainement *la gloire* dont une manifestation courante est le halo entourant l'ombre d'un avion (ou d'une personne en montagne) portée sur un banc de nuages (fig. 8.16) [208]. Contrairement à la rétrodiffusion cohérente, la gloire est un effet d'interférence à un seul diffuseur.

Il résulte de l'interférence entre chemins lumineux de même longueur à l'intérieur d'une goutte d'eau sphérique [16] (fig. 8.17). Le dénombrement des chemins qui contribuent à la gloire est un problème difficile qui nécessite en

[15] Ce résultat est à comparer avec celui obtenu dans la référence [197] qui prédit pour β^* l'expression

$$\beta^* = -3/4\pi(2/3 + l_e/l^*)^2 \quad . \tag{8.73}$$

On obtiendrait ainsi une valeur beaucoup plus petite pour β^* à cause du facteur $l_e/l^* \simeq 5$ pour les billes de diamètre 0,46 μm.

[16] Il faut noter au passage que la gloire est un effet tout à fait différent de l'arc-en-ciel qui, mis à part les arcs surnuméraires, n'est pas un effet d'interférence.

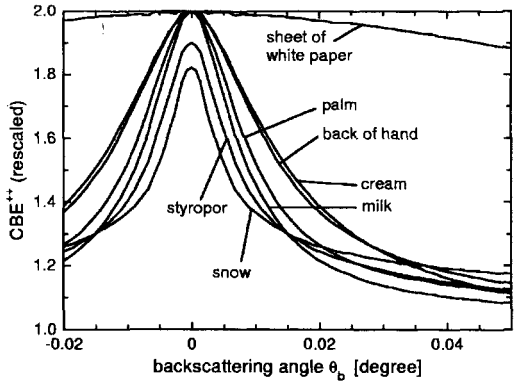


FIG. 8.14 – *Cônes de rétrodiffusion cohérente obtenus pour différents matériaux et analysés en polarisation circulaire pour la longueur d'onde $\lambda = 0{,}514$ μm. Les échelles ont été choisies de manière à obtenir un facteur d'amplification de 2 (mis à part la neige et le styropor pour lesquels la résolution angulaire réelle a été respectée). Les facteurs d'amplification réels sont situés entre 1,6 et 2 [207].*

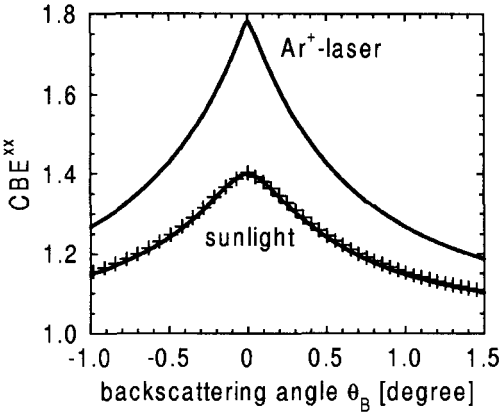


FIG. 8.15 – *Cône de rétrodiffusion cohérente obtenu pour de la lumière solaire et par comparaison pour une lumière monochromatique de longueur d'onde $\lambda = 0{,}514$ μm sur une solution solide de $BaSO_4$ [207].*

principe la théorie de Mie (section C2.3.2) et qui dépend de la longueur d'onde de la lumière, du rayon de la goutte et de son indice optique. L'augmentation d'intensité rétrodiffusée pour la gloire se fait dans un cône d'angle typique λ/a où a est le rayon de la goutte. Dans les nuages, ce rayon est de l'ordre de quelques dizaines de microns, c'est-à-dire très inférieur au libre parcours moyen de transport l^* de la lumière dans ce même milieu. Ceci explique que le halo visible est essentiellement dû à la gloire et non pas à la rétrodiffusion

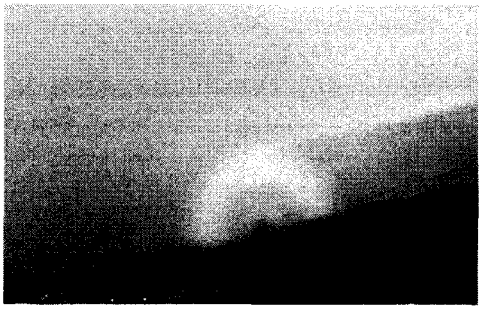


FIG. 8.16 – *Gloire observée le long de l'arête Hörnli du Cervin (photo G. Montambaux).*

cohérente. Pour des diffuseurs suffisamment gros, les deux effets peuvent coexister, c'est-à-dire que l'on peut passer continûment de la diffusion multiple à l'intérieur d'un diffuseur à la diffusion multiple entre diffuseurs [209].

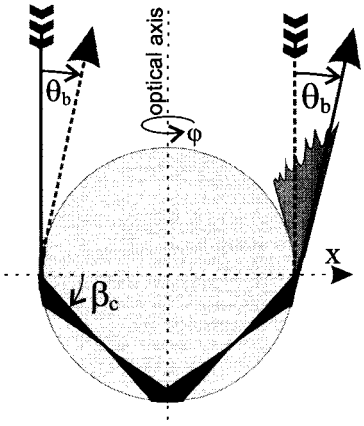


FIG. 8.17 – *Illustration des chemins typiques qui interfèrent pour donner la gloire. θ_b est l'angle de rétrodiffusion et β_c est l'angle de réflexion totale [209].*

8.9.2 Rétrodiffusion cohérente et effet d'opposition en astrophysique

Dès 1887, il a été observé que l'intensité réfléchie par les anneaux de Saturne était plus grande dans la direction de rétrodiffusion [210] [17]. Cette observation a été faite ultérieurement sur presque tous les objets du système

[17] En astronomie, l'angle de rétrodiffusion est aussi appelé angle de phase.

solaire pouvant être observés dans la configuration d'opposition (l'objet observé et le soleil sont de part et d'autre de la Terre) dont la Lune, Mars et de nombreux satellites planétaires. Cette augmentation de l'intensité rétrodiffusée (fig. 8.18) a ainsi reçu le nom d'effet d'opposition. Un certain nombre d'explications ont été proposées afin d'expliquer cette augmentation de l'intensité [211], mais ce n'est que récemment qu'il a été suggéré qu'il pouvait s'agir d'un effet de rétrodiffusion cohérente [212].

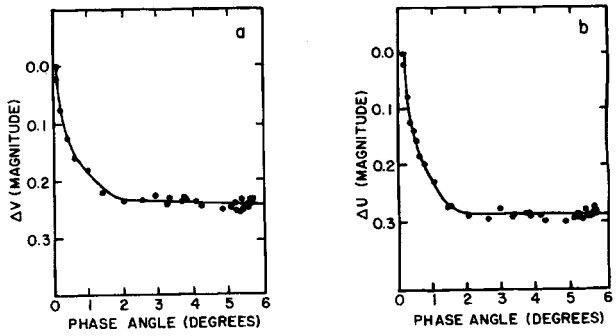


FIG. 8.18 – *Effet d'opposition pour les anneaux de Saturne A et B observé en lumière naturelle (a) et dans le bleu (b) (Franklin et Cook 1965).*

Il a aussi été observé que la différence $d_{\parallel} - d_{\perp}$ des coefficients de dépolarisation définis par (8.60) est nulle dans la direction de rétrodiffusion et devient négative dans un cône d'ouverture angulaire sensiblement égale à celle de l'intensité [18]. Cet effet connu sous le nom « d'effet d'opposition de la polarisation » a été observé par Lyot en 1929 [213]. Il a été repris en détail ces dernières années dans le cadre des effets de polarisation en diffusion multiple. Ces études dépassent très largement le domaine de validité des résultats de la section 8.7. En effet, les diffuseurs sont très grands devant la longueur d'onde (régime de Mie, section C2.3.2) et de forme aléatoire, de sorte que le comportement de la polarisation ne peut en fait être obtenu que numériquement [205, 214]. L'interprétation de l'effet d'opposition en terme de rétrodiffusion cohérente a été fructueuse car elle a permis de déduire des informations sur la nature et la composition des surfaces réfléchissant la lumière. Il reste cependant un certain nombre de questions loin d'être résolues. Par exemple, l'ouverture angulaire du cône semble correspondre, dans certains cas, à de très petits libres parcours moyen de transport l^*, ce qui est peu compatible avec la nature des éléments diffusants.

[18] La définition (8.60) des coefficients de dépolarisation est générale mais leur expression a été obtenue pour la diffusion Rayleigh.

8.9.3 Rétrodiffusion cohérente par un gaz d'atomes froids

La physique des gaz d'atomes froids a connu un très vif regain d'interêt, surtout depuis la première observation expérimentale en 1995 d'une condensation de Bose-Einstein dans des atomes de rubidium. Les densités d'atomes obtenues dans les pièges sont très élevées, en particulier lors de la condensation et leur étude au moyen des méthodes de spectroscopie habituelles se révèle malaisée du fait de la diffusion multiple des photons sur les atomes. Dans ce domaine, la diffusion multiple a d'abord été perçue comme une nuisance et ce n'est que très récemment qu'il a été réalisé que, d'une part, l'acquis obtenu dans le domaine de la diffusion multiple sur des diffuseurs classiques pouvait s'avérer très utile dans l'étude des atomes froids et que, d'autre part, les atomes froids ou les condensats de Bose-Einstein atomiques étaient des candidats privilégiés pour l'observation des effets cohérents en diffusion multiple, voire même dans le régime de la localisation d'Anderson. De plus, un avantage de la diffusion Rayleigh résonnante des photons par les atomes est qu'elle constitue une réalisation physique de la notion de diffuseur ponctuel que nous avons abondamment utilisée (section C2.3.3). Ces différents points ont motivé l'étude expérimentale du cône de rétrodiffusion cohérente sur un nuage d'atomes froids (Rubidium et Strontium) [215]. Le comportement du cône en fonction de la polarisation est qualitativement différent de celui obtenu dans le cas des diffuseurs classiques. Ceci apparaît clairement sur la figure 8.19

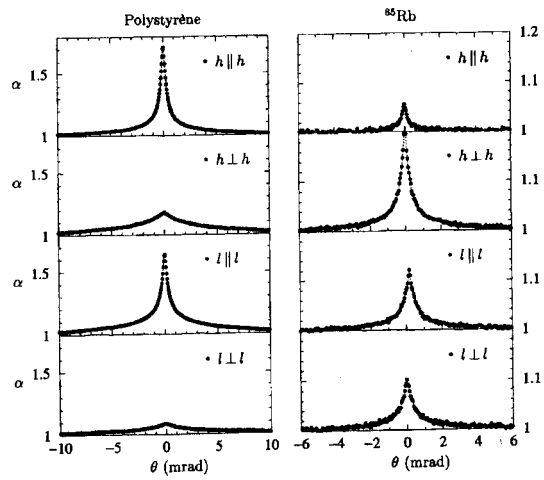


FIG. 8.19 – *Comparaison des cônes de rétrodiffusion cohérente obtenus pour des diffuseurs classiques (polystyrène) et pour des atomes froids de Rubidium. On constate que les facteurs d'amplification sont bien plus petits pour les atomes. Plus surprenant encore est le fait que les comportements en fonction de la polarisation diffèrent qualitativement et quantitativement du cas classique [215].*

où l'albédo cohérent est plus fortement atténué dans le canal de polarisation parallèle que dans celui de polarisation perpendiculaire [216]. Or, dans les sections 6.6.4 et 8.7, nous avons vu qu'une onde diffusée par des diffuseurs Rayleigh classiques (ou dans le régime de Rayleigh-Gans) et analysée dans le canal de polarisation incidente, n'est pas atténuée et se comporte comme une onde scalaire. Elle est par contre très atténuée dans le canal de polarisation perpendiculaire. C'est l'opposé qui est observé dans le cas d'un gaz d'atomes froids de Rubidium. Il faut chercher la raison de ce comportement inattendu dans la forme du vertex élémentaire d'interaction (6.287) associé aux degrés de liberté atomiques internes, c'est-à-dire aux sous-états Zeeman dégénérés. Comme pour la diffusion Rayleigh classique, il apparaît deux effets distincts. Le premier effet est la dépolarisation des photons incidents qui affecte également le diffuson et le cooperon, c'est-à-dire les contributions incohérentes et cohérentes à l'albédo. Le second effet est l'atténuation du cooperon dans les canaux parallèle et perpendiculaire de polarisation. Pour la diffusion Rayleigh par un dipole classique, cette atténuation n'a lieu que dans le canal perpendiculaire. Nous allons voir que pour des atomes en présence de sous-états Zeeman dégénérés, il apparaît également une atténuation dans le canal parallèle.

• Dépolarisation du diffuson

L'intensité classique, et donc l'albédo incohérent, peuvent être mesurés soit dans le même canal de polarisation que les photons incidents, soit dans le canal perpendiculaire. Les facteurs de structure correspondant $\Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\alpha\alpha}$ et $\Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\beta\beta}$ ont été déterminés à partir de la relation (6.291). On peut ainsi définir comme dans la section 8.7, les facteurs de dépolarisation de l'albédo incohérent mesuré dans les différents canaux :

$$d^{(d)}_{\parallel}(t) = \frac{\Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\alpha\alpha}(t)}{\Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\alpha\alpha}(t) + \Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\beta\beta}(t)} \qquad d^{(d)}_{\perp}(t) = \frac{\Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\beta\beta}(t)}{\Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\alpha\alpha}(t) + \Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\beta\beta}(t)} \tag{8.74}$$

avec

$$\Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\alpha\alpha}(q,t) = \frac{1}{3}\left(\Gamma^{(d)}_0 + 2\Gamma^{(d)}_2\right) = \frac{\gamma_{at}}{3\tau_{at}} e^{-Dtq^2}\left(1 + 2e^{-t/\tau^{(d)}_2}\right) \tag{8.75}$$

$$\Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\beta\beta}(q,t) = \frac{1}{3}\left(\Gamma^{(d)}_0 - \Gamma^{(d)}_2\right) = \frac{\gamma_{at}}{3\tau_{at}} e^{-Dtq^2}\left(1 - e^{-t/\tau^{(d)}_2}\right) \quad . \tag{8.76}$$

Les temps caractéristiques de déphasage $\tau^{(d)}_k$, définis par la relation (6.290), et tabulés sur la figure 6.17 décrivent donc la dépolarisation des photons incidents. Dans la limite des grands temps, c'est-à-dire des longues trajectoires de diffusion multiple des photons, on retrouve le même facteur de dépolarisation 1/2 que celui obtenu dans le cas classique (voir la relation 8.60).

• Atténuation de l'albédo cohérent

En plus de la dépolarisation, il apparaît pour le cooperon un déphasage entre séquences conjuguées par renversement du sens du temps. Celui-ci donne lieu à une atténuation de l'albédo cohérent relativement à la contribution incohérente. Cette atténuation est déterminée par les coefficients $\langle Q_{\parallel}\rangle$ et $\langle Q_{\perp}\rangle$ respectivement définis pour les canaux de polarisation parallèle et perpendiculaire, par

$$\langle Q_{\parallel}(t)\rangle = \frac{\Gamma^{(c)}_{\alpha\alpha,\alpha\alpha}(t)}{\Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\alpha\alpha}(t)} = \frac{\Gamma^{(c)}_0 + 2\Gamma^{(c)}_2}{\Gamma^{(d)}_0 + 2\Gamma^{(d)}_2} \tag{8.77}$$

$$\langle Q_{\perp}(t)\rangle = \frac{\Gamma^{(c)}_{\alpha\beta,\beta\alpha}(t)}{\Gamma^{(d)}_{\alpha\alpha,\beta\beta}(t)} = \frac{3}{2}\frac{\Gamma^{(c)}_2 - \Gamma^{(c)}_1}{\Gamma^{(d)}_0 - \Gamma^{(d)}_2} \quad . \tag{8.78}$$

Contrairement au cas de la diffusion Rayleigh classique (section 8.7) pour laquelle le cooperon n'est atténué que dans le canal perpendiculaire, on constate que pour les atomes, il est atténué dans les deux canaux parallèle et perpendiculaire. En fonction de la nature de la transition utilisée, c'est-à-dire des valeurs des moments cinétiques des états fondamental (J) et excité (J_e), on peut éventuellement avoir une situation inversée par rapport au cas classique, c'est-à-dire pour laquelle le cône de rétrodiffusion cohérente est plus atténué dans le canal parallèle que dans le canal perpendiculaire. Pour le cas des atomes de Rubidium, correspondant à une transition ($J = 3, J_e = 4$), on a $\tau^{(c)}_2 > \tau^{(c)}_1 > \tau^{(c)}_0$ (voir fig. 6.17). Donc les décroissances de $\langle Q_{\parallel}\rangle$ et de $\langle Q_{\perp}(t)\rangle$ sont toutes deux pilotées par $\tau^{(c)}_2$ et, pour des temps suffisamment grands, on a

$$\langle Q_{\parallel}(t)\rangle \simeq 2\frac{\Gamma^{(c)}_2(t)}{\Gamma^{(d)}_2} = 2e^{-t/\tau^{(c)}_2} \quad \langle Q_{\perp}(t)\rangle \simeq \frac{3}{2}\frac{\Gamma^{(c)}_2(t)}{\Gamma^{(d)}_2} = \frac{3}{2}e^{-t/\tau^{(c)}_2} \quad . \tag{8.79}$$

Par conséquent, la hauteur du cône de rétrodiffusion cohérente $\alpha^{\parallel}_c$ est comparable à celle de $\alpha^{\perp}_c$ (fig. 8.19). Enfin, pour des gaz d'atomes froids, il est important de prendre en compte la taille finie du système qui donne lieu à un arrondissement du cône (exercice 8.2). De plus, le mode de confinement des atomes par des lasers implique que la densité du gaz n'est pas homogène. Il est donc difficile de trouver les conditions aux limites adéquates pour le facteur de structure et la probabilité P_d.

8.9.4 Rétrodiffusion cohérente en acoustique

Pour finir ce tour d'horizon des différents systèmes dans lesquels on a observé le cône de rétrodiffusion cohérente, signalons les très belles expériences faites en acoustique [217, 218]. La figure 8.20 représente le cône de rétrodiffusion pour des ondes acoustiques ($\lambda = 0{,}43$ mm) se propageant dans un

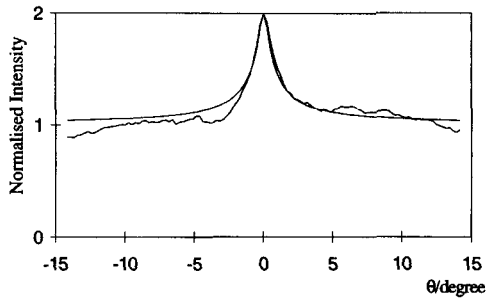


FIG. 8.20 – *Observation du cône de rétrodiffusion cohérente pour des ondes acoustiques (A. Tourin* et al. *[218]).*

milieu aléatoire bidimensionnel de dimensions 160 mm × 80 mm, composé de 2400 bâtonnets d'acier immergés dans un bassin rempli d'eau. Ce milieu peut être caractérisé par un libre parcours moyen de transport $l^* \simeq 4$ mm et une constante de diffusion $D^* \simeq 2{,}5$ mm$^2/\mu$s.

L'intérêt des expériences d'acoustique est que les détecteurs (un maillage de transducers ultrasons) permettent de mesurer la phase du signal reçu, et non pas uniquement l'intensité, comme en optique. Par ailleurs, étant donné la vitesse de propagation des ondes sonores, il est possible d'avoir accès à des informations résolues en temps, comme l'albédo dépendant du temps $\alpha(\theta, t)$ défini par (8.40, 8.41). C'est ce que représente la figure 8.21. Comme le décrit la relation (8.42), la forme du cône est gaussienne et sa largeur varie comme $1/\sqrt{Dt}$. Une expérience similaire en optique nécessite l'utilisation d'impulsions femtoseconde [219].

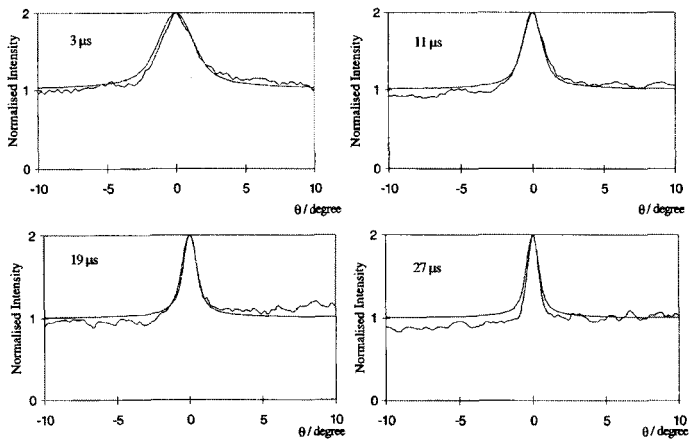


FIG. 8.21 – *Mesure de l'albédo dépendant du temps $\alpha(t)$ pour des impulsions acoustiques. La forme du pic est gaussienne est sa largeur varie comme $1/\sqrt{Dt}$ (A. Tourin* et al. *[218]).*

Chapitre 9

Spectroscopie des ondes diffusées

9.1 Introduction

Dans le chapitre 6, on a mis en évidence un certain nombre de mécanismes de déphasage qui ont pour effet de modifier les contributions du diffuson ou du cooperon en éliminant les longues trajectoires de diffusion. Ceci restreint la contribution cohérente à la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t)$ à des temps inférieurs au temps de déphasage τ_γ. Cette réduction apparaît donc comme une limite à l'observation des effets cohérents.

Lorsque l'origine de ce déphasage est bien diagnostiquée, celui-ci peut se révéler très fécond pour étudier la nature du milieu diffusant au moyen de la diffusion multiple. Ainsi, la caractérisation de suspensions, c'est-à-dire de particules en solution ou d'écoulements hydrodynamiques, nécessite d'avoir accès à la dynamique propre des particules en suspension ou du facteur de structure dynamique de l'écoulement.

La technique usuellement employée pour sonder la dynamique des diffuseurs est la diffusion quasi-élastique (on pourra consulter [220] pour une discussion complète). Cette technique est mise en œuvre dans le régime de diffusion simple, c'est-à-dire pour des suspensions extrêmement diluées. Pour des concentrations plus élevées, c'est l'exploitation de la diffusion multiple qui permet de remonter à la dynamique des diffuseurs. Pour comprendre cela, nous reprenons les résultats obtenus dans la section 6.7 sur le déphasage induit par le mouvement des diffuseurs. La fonction de corrélation temporelle $g_1(T)$ du champ électrique scalaire définie par

$$\boxed{g_1(T) = \frac{\langle E(T)E^*(0)\rangle}{\langle |E(0)|^2\rangle}} \tag{9.1}$$

permet de décrire le déphasage des trajectoires de diffusion multiple et s'avère très utile pour l'étude de la dynamique aux petits temps ou de façon

équivalente à des échelles de longueurs inférieures à la longueur d'onde de la lumière utilisée. En principe, le champ électrique et la fonction de corrélation g_1 dépendent du point d'observation $\boldsymbol{r}$ (section 6.7.1).

Dans ce chapitre, on montre comment on peut avoir accès à la fonction de corrélation $g_1(T)$ du champ dans les deux régimes de diffusion simple et de diffusion multiple. Expérimentalement, au lieu de g_1, on mesure plutôt la fonction de corrélation de l'intensité définie par

$$\boxed{g_2(T) = \frac{\langle I(T)I(0)\rangle}{\langle I(0)\rangle^2} - 1} \tag{9.2}$$

L'intensité $I(T) = |E(T)|^2$ définie dans la section 4.7 est mesurée au point $\boldsymbol{r}$ pour une source située en $\boldsymbol{r}_0$ et pour une configuration donnée des diffuseurs [1]. La notation $\langle ... \rangle$ définie dans la section 6.7 décrit une moyenne prise sur tous les chemins de diffusion ainsi que sur la dynamique des diffuseurs. Nous allons d'abord montrer que les fonctions de corrélation de l'intensité et du champ sont reliées, en diffusion multiple, par la loi simple $g_2(T) = |g_1(T)|^2$. Puis, avant d'aborder le régime de diffusion multiple, nous rappellerons quelques résultats sur la diffusion quasi-élastique. Nous évaluerons ensuite les fonctions de corrélation g_1 et g_2 dans le régime de diffusion multiple pour différentes géométries et pour certains exemples de dynamique des diffuseurs. Pour un milieu semi-infini, l'expression de la fonction de corrélation $g_1(T)$ mesurée en réflexion se déduit de celle de l'albédo cohérent $\alpha_c(\theta)$ étudiée au chapitre 8. Pour une tranche, l'étude des fonctions de corrélations en réflexion et en transmission permet de sonder séparément les longues trajectoires de diffusion multiple.

Les causes des fluctuations d'un rayonnement électromagnétique sont nombreuses. Par exemple, dans une vapeur atomique, chaque atome émet un rayonnement en se désexcitant. Si on suppose que les atomes subissent entre eux des collisions élastiques, le rayonnement émis reste monochromatique mais le champ électrique total émis par l'ensemble des atomes est la superposition de termes du type $E(t) = E_0 \exp(i\omega t + i\varphi(t))$ où $\varphi(t)$ est une phase aléatoire qui décrit le déphasage dû aux collisions. On définit [221] les fonctions de corrélation $g_1(T)$ et $g_2(T)$ qui servent à caractériser le déphasage. Bien que l'origine physique du déphasage soit dans ce cas très différente de celle associée à la dynamique des diffuseurs, un certain nombre de résultats sont identiques comme l'égalité (9.8) [2]. Ceci provient du fait que les propriétés statistiques de la lumière dépendent assez peu de la nature du déphasage, du moins aussi

[1] La normalisation de l'intensité utilisée ici est différente de celle du chapitre 4. Elle a été choisie pour simplifier les notations et elle est sans conséquence puisque les quantités mesurées, g_1 et g_2 sont des rapports d'intensités.

[2] On prendra garde au fait que la fonction $g_2(T)$ utilisée habituellement pour caractériser la source est définie comme (9.2) mais sans le terme -1.

longtemps que celui-ci peut-être décrit à l'approximation gaussienne. Ici, on suppose la source parfaitement cohérente.

9.2 Corrélations dynamiques de l'intensité

On montre ici que la fonction de corrélation g_2 des intensités est simplement reliée à la fonction de corrélation g_1 des amplitudes. Rappelons que l'intensité $I(T) = |E(T)|^2$ est le produit de deux amplitudes [3]. La fonction $g_2(T)$ est donc constituée d'un produit de quatre amplitudes. Pour la calculer, on suit la démarche développée dans la section 4.4. Le champ électrique diffusé à partir d'une source ponctuelle est donné par la fonction de Green (6.175). Il est de la forme

$$E(T) = \sum_{\mathcal{C}} E_{\mathcal{C}} \quad , \tag{9.3}$$

où $\mathcal{C}$ est une notation condensée qui décrit les séquences de collisions multiples ($\sum_{\mathcal{C}} = \sum_{N=1}^{\infty} \sum_{\boldsymbol{r}_1 \cdots \boldsymbol{r}_N}$). Le produit des intensités s'écrit alors

$$I(T)I(0) = \sum_{\mathcal{C}_1,\mathcal{C}_2,\mathcal{C}_3,\mathcal{C}_4} E_{\mathcal{C}_1}(T)E^*_{\mathcal{C}_2}(T)E_{\mathcal{C}_3}(0)E^*_{\mathcal{C}_4}(0) \quad . \tag{9.4}$$

Le même argument que celui développé dans la section 4.4 nous conduit à ne retenir dans la moyenne de la somme précédente que les termes pour lesquels $\mathcal{C}_1 = \mathcal{C}_2$ et $\mathcal{C}_3 = \mathcal{C}_4$ ou bien $\mathcal{C}_1 = \mathcal{C}_4$ et $\mathcal{C}_3 = \mathcal{C}_2$. On en déduit

$$\begin{aligned} \langle I(T)I(0)\rangle = & \sum_{\mathcal{C}_1,\mathcal{C}_2} \left\langle |E_{\mathcal{C}_1}(T)|^2 \right\rangle \left\langle |E_{\mathcal{C}_2}(0)|^2 \right\rangle \\ & + \sum_{\mathcal{C}_1,\mathcal{C}_2} \left\langle E_{\mathcal{C}_1}(T)E^*_{\mathcal{C}_1}(0)\right\rangle \left\langle E^*_{\mathcal{C}_2}(T)E_{\mathcal{C}_2}(0)\right\rangle \quad . \end{aligned} \tag{9.5}$$

Par définition de l'intensité moyenne (4.67) à l'approximation du diffuson, à savoir $I_d = \langle I(0)\rangle = \langle I(T)\rangle = \left\langle \sum_{\mathcal{C}} |E_{\mathcal{C}}|^2 \right\rangle$, on déduit

$$\langle I(T)I(0)\rangle = I_d^2 + \left| \sum_{\mathcal{C}} \langle E_{\mathcal{C}}(T)E^*_{\mathcal{C}}(0)\rangle \right|^2 \quad . \tag{9.6}$$

Lorsque $T = 0$, on obtient la loi de Rayleigh [4] (12.89), qui s'écrit

$$\left\langle I^2 \right\rangle = 2\langle I\rangle^2 = 2I_d^2 \quad . \tag{9.7}$$

[3] On suppose qu'il y a une source ponctuelle située en $\boldsymbol{r}_0$.

[4] Dans le chapitre 12, on revient sur les fluctuations d'intensité en un point et on discute sous quelles conditions elles suivent la loi de Rayleigh (12.89).

On en déduit que $g_2(0) = 1$. Le dernier terme de la relation (9.6) fait apparaître $|g_1(T)|^2$. On obtient donc pour la fonction de corrélation (9.2) l'expression

$$\boxed{g_2(T) = |g_1(T)|^2} \tag{9.8}$$

Cette relation, connue sous le nom de loi de Siegert [222], découle de l'approximation du diffuson. La fonction g_2 est représentée par le diagramme de la figure 9.1 [5]. Ce diagramme se calcule facilement car il se découple et s'écrit comme le produit de deux fonctions de corrélation des champs.

La fonction de corrélation des intensités se déduit donc de celle des champs calculée dans la section 6.7. Afin d'interpréter les mesures de g_2, il suffit de calculer la fonction de corrélation des champs.

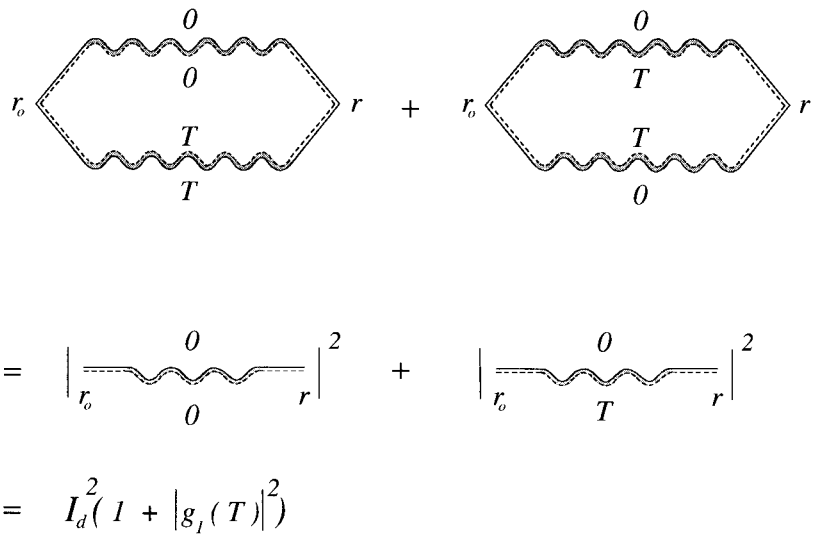


FIG. 9.1 – *Diagrammes contribuant à la fonction de corrélation dynamique* $\langle I(T)I(0)\rangle$ *pour une source ponctuelle située en* $\mathbf{r}_0$. *Noter que pour passer de la première à la seconde ligne, on a utilisé l'hypothèse ergodique sur l'équivalence de l'ensemble des trajectoires de diffusion multiple à des temps différents.*

[5] Il est intéressant de comparer ce diagramme avec ceux décrivant la corrélation des fonctions de Green diagonales (C4.4) ou ceux qui interviendront dans le calcul des fluctuations de conductance (fig. 11.3). Ces derniers sont plus compliqués du fait de la présence des vertex de courant.

9.3 Diffusion simple : QELS

Avant de poursuivre l'étude de la corrélation temporelle en diffusion multiple, commençons par présenter quelques-unes de ses caractéristiques en diffusion simple. La diffusion quasi-élastique (*Quasi-Elastic Light Scattering* (QELS) en anglais) désigne habituellement la diffusion simple, dans une solution suffisamment diluée de $\mathcal{N}$ diffuseurs. Pour une onde plane incidente de vecteur d'onde $\boldsymbol{k}_i$, le champ électromagnétique diffusé dans la direction $\boldsymbol{k}' = \boldsymbol{q} + \boldsymbol{k}_i$ ne dépend que du vecteur d'onde de transfert $\boldsymbol{q}$ et de la loi de mouvement $\boldsymbol{r}_j(T)$ des diffuseurs. Il est donné par

$$E(\boldsymbol{q}, T) \propto \sum_{j=1}^{\mathcal{N}} e^{-i\boldsymbol{q}.\boldsymbol{r}_j(T)} \quad . \tag{9.9}$$

On définit la fonction de corrélation temporelle $g_1(T)$ en moyennant sur toutes les directions d'observation :

$$g_1(T) = \frac{1}{\mathcal{N}} \left\langle \sum_{j=1}^{\mathcal{N}} e^{-i\boldsymbol{q}.[\boldsymbol{r}_j(T)-\boldsymbol{r}_j(0)]} \right\rangle_{\boldsymbol{q},\boldsymbol{r}_j} \tag{9.10}$$

où la moyenne est prise à la fois sur les directions du vecteur de transfert et sur les positions des diffuseurs. En supposant que leur mouvement est décrit par une loi de mouvement brownien donnée par (6.182) et caractérisée par la constante de diffusion D_b, on déduit pour la fonction de corrélation la dépendance exponentielle

$$g_1(T) = \left\langle e^{-D_b q^2 T} \right\rangle_{\boldsymbol{q}} \simeq e^{-T/2\tau_b} \tag{9.11}$$

où $\tau_b = 1/4D_b k^2$ et $k = |\boldsymbol{k}_i| = |\boldsymbol{k}'|$. La fonction de corrélation de l'intensité est donnée par la relation (9.8) valable aussi bien en diffusion simple qu'en diffusion multiple. Elle présente donc aussi une décroissance exponentielle avec le temps de relaxation τ_b. On peut en déduire la constante de diffusion D_b des particules browniennes de la suspension. Cette loi exponentielle décrit très bien les résultats expérimentaux aux faibles concentrations. Par contre, à plus fortes concentrations, on observe des déviations notables qui sont associées à la diffusion multiple.

9.4 Diffusion multiple : spectroscopie des ondes diffusées

Dans la section 6.7.1, on a calculé la fonction de corrélation temporelle $g_1(T)$ en diffusion multiple, pour le cas d'un champ émis par une source ponctuelle. Pour des diffuseurs animés d'un mouvement brownien, elle est donnée

par une exponentielle étirée en temps (6.192) et elle est donc très différente du comportement exponentiel (9.11) obtenu en diffusion simple. Cette différence apparaît clairement sur le comportement à petit temps $T \ll \tau_b$ de la fonction de corrélation mesurée à plus forte concentration [6]. En revanche, à grand temps, on retrouve une loi exponentielle pilotée par le temps τ_b (fig. 9.2).

Afin de comprendre qualitativement cette différence de comportement, reprenons l'expression de la fonction de corrélation des champs (6.193) dans la limite $T \leq \tau_b$

$$\frac{4\pi}{c}\langle E(\boldsymbol{r},T)E^*(\boldsymbol{r},0)\rangle = \int_0^\infty P(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r},t)e^{-t/\tau_\gamma}dt = P_\gamma(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}) \tag{9.12}$$

où $\tau_\gamma = 2\tau_e\tau_b/T$. Cette expression fait apparaître, non pas un seul temps de corrélation τ_b, mais une distribution de temps de corrélation $2\tau_b/N$, chacun étant associé à une longueur de chemin $N = t/\tau_e$. Cette distribution est pondérée par la probabilité de diffusion $P(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r},t)$ à l'approximation du diffuson. Le temps le plus grand correspond au chemin de diffusion le plus court à savoir $N = 1$; on retrouve alors la diffusion simple, c'est-à-dire le régime de diffusion quasi-élastique. Pour les chemins de diffusion plus longs, la cohérence de phase disparaît sur des temps de corrélation beaucoup plus courts. Cette différence de comportement entre les temps T courts et les temps longs est bien visible sur la figure 9.2.

9.5 Effet de la géométrie sur la fonction de corrélation dynamique

L'expression (9.12) de $g_1(T)$ correspond au cas d'un milieu infini avec une source ponctuelle (voir la section 6.7.2). Expérimentalement, on mesure cette fonction de corrélation pour un système ayant la géométrie d'une tranche. En principe, ce détail expérimental ne devrait pas avoir une trop grande importance. Si c'est le cas pour la diffusion simple (diffusion quasi-élastique), c'est-à-dire pour des solutions diluées, cela n'est plus vrai en diffusion multiple. En effet, la géométrie affecte les trajectoires longues et donc la fonction de corrélation g_1 aux temps T courts. Plus précisément, l'expression (9.12) contient le diffuson P_d qui est solution de l'équation de diffusion. Or, le diffuson étant à longue portée, son comportement dépend nécessairement de la géométrie. Dans les sections suivantes, on étudie la fonction de corrélation $g_1(T)$ pour le cas de la réflexion sur un milieu semi-infini ou une tranche, puis pour le cas de la transmission à travers une tranche.

[6] La géométrie du milieu joue un rôle important mais les comportements évoqués restent qualitativement corrects.

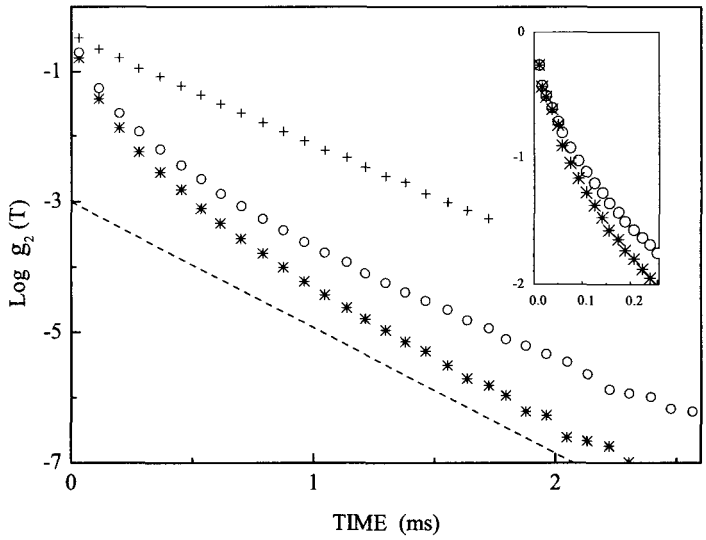


FIG. 9.2 – *Comportement temporel de la fonction de corrélation de l'intensité g_2 de la lumière diffusée par une suspension aqueuse de billes de polystyrène. (+) : Régime de diffusion simple correspondant à une fraction solide de 2.10^{-5}. Le comportement exponentiel est net et correspond à la relation (9.11) représentée en tirets. (o et *) : Régime de diffusion multiple correspondant à une fraction solide de 0,1. Les deux courbes correspondent à différentes directions de polarisation. Le comportement aux très petits temps est représenté en médaillon [223].*

9.5.1 Réflexion par un milieu semi-infini

On considère un milieu semi-infini tel qu'il a été décrit dans la section 8.2 pour l'étude de l'albédo. L'interface est éclairée par une onde plane incidente à l'extérieur du milieu. La lumière émergente est analysée à grande distance $R \to \infty$, le long d'une direction émergente $\hat{\mathbf{s}}_e$ donnée, supposée ici normale à l'interface. La fonction de corrélation temporelle du champ électrique

$$G_1^r(T) = \frac{R^2}{SI_0}\langle E(T)E^*(0)\rangle \tag{9.13}$$

n'est autre, pour $T = 0$, que l'intensité réfléchie, c'est-à-dire l'albédo défini par (8.3) et donné par (8.13) à l'approximation du diffuson.

Lorsque $T \neq 0$, la contribution (9.12) des chemins de diffusion est réduite exponentiellement aux temps longs. En utilisant l'expression (8.39) de l'albédo $\alpha_d(t)$ dépendant du temps, la fonction de corrélation $G_1^r(T)$ s'écrit sous la forme

$$G_1^r(T) = \int_0^\infty \alpha_d(t) e^{-tT/2\tau_e\tau_b} dt \quad , \tag{9.14}$$

c'est-à-dire compte tenu de (8.40) :

$$G_1^r(T) = \frac{c}{4\pi l_e^2} \int\int dz dz' e^{-z/l_e} e^{-z'/l_e} \int dt\ P_d(z, z', t) e^{-\gamma t} dt \tag{9.15}$$

avec $\gamma = T/(2\tau_e \tau_b)$. L'intégrale fait apparaître la transformée de Laplace $P_\gamma(z, z')$ (voir section 5.6) et ainsi

$$\boxed{G_1^r(T) = \frac{c}{4\pi l_e^2} \int\int dz dz' e^{-z/l_e} e^{-z'/l_e} P_\gamma(z, z')} \tag{9.16}$$

Pour des collisions isotropes, $P_\gamma(z, z')$ est donnée par (5.157). Les intégrations sont immédiates et on obtient

$$G_1^r(T) = \frac{3}{8\pi} \frac{1}{(1 + l_e/L_\gamma)^2} \left(\frac{1 - e^{-2z_0/L_\gamma}}{l_e/L_\gamma} + 1 \right) \quad . \tag{9.17}$$

La fonction de corrélation $g_1^r(T)$, définie par (9.1), s'écrit au moyen du rapport sans dimension

$$g_1^r(T) = \frac{G_1^r(T)}{G_1^r(0)} \quad . \tag{9.18}$$

9.5.2 Comparaison de $G_1^r(T)$ et de $\alpha_c(\theta)$

Il est très instructif de comparer l'expression (9.16) pour la fonction de corrélation temporelle $G_1^r(T)$ du champ électrique avec celle (8.26) de l'albédo cohérent $\alpha_c(\theta)$ obtenue dans la même approximation pour $\mu = 1$:

$$\boxed{\alpha_c(\theta) = \frac{c}{4\pi l_e^2} \int\int dz dz' e^{-z/l_e} e^{-z'/l_e} P_d(k_\perp, z, z')} \tag{9.19}$$

Compte tenu de (5.47), on a une relation directe entre ces deux quantités, moyennant la correspondance $\gamma \longleftrightarrow Dk_\perp^2$. On note aussi la correspondance avec l'expression (8.50) de l'albédo cohérent en présence d'absorption, moyennant l'identification

$$Dk_\perp^2 \longleftrightarrow \gamma \quad = \frac{T}{2\tau_e \tau_b} \quad \longleftrightarrow \frac{1}{\tau_a} \tag{9.20}$$

ou encore

$$k_\perp \longleftrightarrow \frac{1}{L_\gamma} = \frac{1}{l_e} \sqrt{\frac{3T}{2\tau_b}} \longleftrightarrow \sqrt{\frac{3}{l_a l_e}} \quad . \tag{9.21}$$

Ces correspondances sont très précieuses car elles permettent de relier entre elles des quantités physiques différentes et dépendant chacune d'un temps ou d'une longueur caractéristique : l_e, τ_b et l_a.

Pour des collisions anisotropes ($l^* \neq l_e$), on obtient les développements :

$$\begin{aligned} \alpha_c(k_\perp) &\simeq \alpha_c(0) - \beta^* k_\perp l^* \\ \alpha_d(l_a) &\simeq \alpha_d(l_a = \infty) - \beta^* \sqrt{\frac{3l^*}{l_a}} \\ G_1^r(T) &\simeq G_1^r(0) - \beta^* \sqrt{\frac{3T}{2\tau_b}} \end{aligned} \tag{9.22}$$

où β^* est donné par (8.56). La quantité $\alpha_c(0) = \alpha_d(l_a = \infty) = G_1^r(0)$ est difficile à obtenir théoriquement. Comme il a été mentionné dans la section 8.6, celle-ci est *a priori* fonction de l^* et de l_e car elle dépend des trajectoires de diffusion de toutes longueurs. Par contre, le coefficient β^* ne devrait pas dépendre du rapport l^*/l_e. C'est ce que montre la figure 9.3 pour la quantité $G_1^r(T)$ mesurée dans une suspension de billes de polystyrène. Le rapport $g_1^r(T) = G_1^r(T)/G_1^r(0)$ est tracé pour différentes tailles de billes et donc différentes valeurs du rapport l^*/l_e. La figure 9.3.*a* montre que la dépendance $g_1^r(T)$ en fonction de $\sqrt{T/\tau_b}$ n'est pas universelle. Par contre la figure 9.3.*b* montre que celle de $g_1^r(T)$ en fonction de $\sqrt{T/\tau_b}/G_1^r(0)$ est indépendante du rapport l^*/l_e. De la relation (9.22), on conclut donc que $G_1^r(0)$ est fonction de l^*/l_e, mais que le coefficient β^* n'en dépend pas.

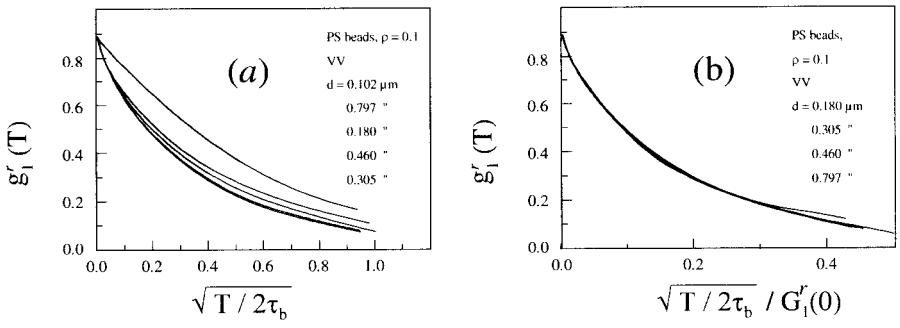


FIG. 9.3 – *Fonction de corrélation $g_1^r(T)$ tracée en fonction du paramètre $\sqrt{T/2\tau_b}$ et du paramètre $\sqrt{T/2\tau_b}/G_1^r(0)$ pour des suspensions de billes de polystyrène de tailles différentes, c'est-à-dire pour des rapports l^*/l_e différents. Ceci montre que la quantité $G_1^r(0) = \alpha_c(0)$ dépend du rapport l^*/l_e, mais que le paramètre β^* n'en dépend pas [224].*

La correspondance (9.21) est illustrée par la figure 9.4 qui présente la mesure des trois quantités physiques $\alpha_d(l_a)$, $\alpha_c(k_\perp)$ et $G_1^r(T)$ en fonction de trois paramètres différents, tous à l'origine d'un processus de déphasage. L'universalité de ces comportements est décrite par une courbe unique, une fois la

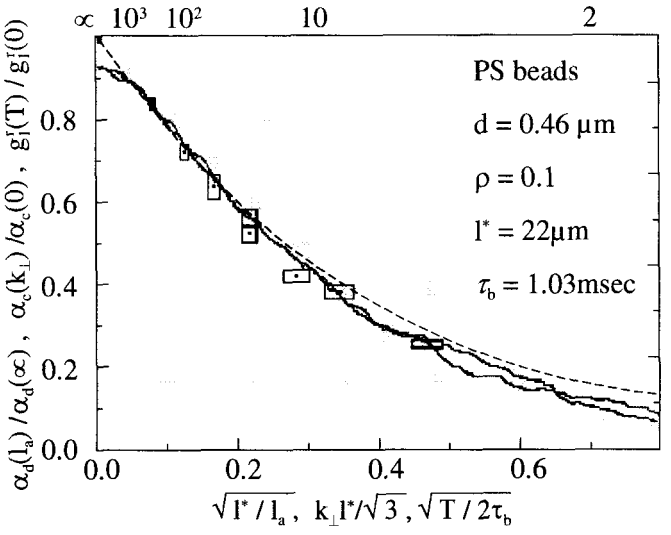


FIG. 9.4 – *Évolution de l'albédo incohérent $\alpha_d(l_a)$ en fonction de la longueur d'absorption (rectangles), de l'albédo cohérent $\alpha_c(k_\perp)$ en fonction de l'angle (lignes continues), et de la fonction de corrélation temporelle $g_1^r(T)$ en fonction du temps T (pointillés). Ce comportement est universel en fonction des quantités respectives $\sqrt{l^*/l_a}$, $k_\perp l^*/\sqrt{3}$ et $\sqrt{T/2\tau_b}$, comme le prédit la correspondance (9.21). La taille typique (en unités de l^*) des trajectoires de diffusion multiple qui contribuent est donnée par l'échelle supérieure des abscisses [224].*

correspondance (9.21) établie. L'analyse de ces différentes quantités permet de remonter aux caractéristiques du milieu diffusant. On peut ainsi en déduire le libre parcours moyen de transport l^* ainsi que le temps caractéristique τ_b, c'est-à-dire le coefficient de diffusion D_b des billes en suspension [224]. La correspondance (9.21) est très utile. Ainsi de la relation (9.22), on déduit immédiatement de la dépendance angulaire de $\alpha_c(\theta)$ que

$$g_1^r(T) \simeq 1 - \frac{z^*}{L_\gamma} \tag{9.23}$$

avec

$$z^* = \frac{\beta^* l^*}{G_1^r(0)} \quad , \tag{9.24}$$

où β^* est donné par la relation (8.56) et ne dépend pas du rapport l^*/l_e. Par ailleurs la longueur caractéristique L_γ est égale à

$$L_\gamma = l^* \sqrt{\frac{2\tau_b}{3T}} \quad , \tag{9.25}$$

de telle sorte qu'aux temps courts on obtient un comportement caractéristique en $\sqrt{T}$:

$$g_1^r(T) \simeq 1 - \frac{z^*}{l^*}\sqrt{\frac{3T}{2\tau_b}} \quad . \tag{9.26}$$

La figure 9.5 présente le comportement de cette fonction de corrélation pour une suspension aqueuse de sphères de polystyrène à température ambiante et à des concentrations volumiques élevées correspondant au régime de diffusion multiple (typiquement de l'ordre de 0,1). On observe le comportement caractéristique en $\sqrt{T}$.

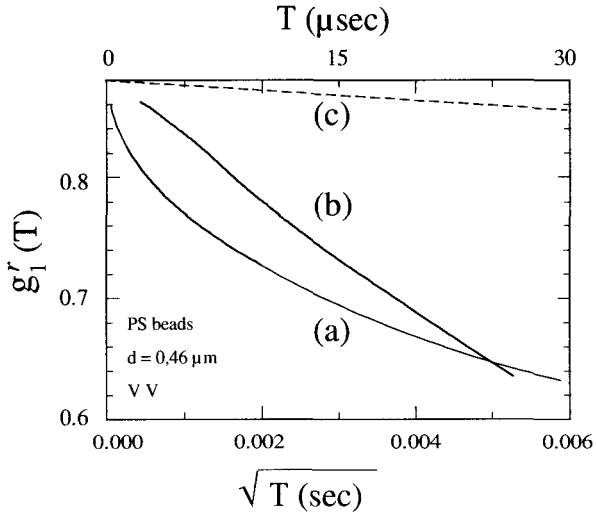


FIG. 9.5 – *Mesure de la fonction de corrélation $g_1^r(T)$ en réflexion pour de la lumière diffusée par une suspension aqueuse de billes de polystyrène. Les courbes (a) et (b) tracées respectivement en fonction de T et de $\sqrt{T}$ décrivent le régime de diffusion multiple (concentration 0,1). La courbe (c) décrit le régime de diffusion simple (concentration 10^{-5}) [224].*

9.5.3 Réflexion par une tranche de largeur finie

On peut généraliser les résultats précédents au cas d'une tranche d'épaisseur finie L. La fonction de corrélation $G_1^r(T)$ s'obtient toujours à partir de la relation (9.16), mais où la fonction $P_\gamma(z, z')$ est celle d'une tranche d'épaisseur finie, donnée par (5.159). De l'exercice 8.2 sur l'albédo d'une tranche finie,

on déduit qu'il faut remplacer le résultat linéaire en $k_\perp$ par $k_\perp \coth k_\perp L$, ce qui, compte tenu de la correspondance (9.21), s'exprime comme

$$\boxed{g_1^r(T) = 1 - \frac{z^*}{L_\gamma} \coth \frac{L}{L_\gamma}} \tag{9.27}$$

ou encore

$$g_1^r(T) = 1 - \frac{z^*}{l^*}\sqrt{\frac{3T}{2\tau_b}} \coth \frac{L}{l^*}\sqrt{\frac{3T}{2\tau_b}} \quad . \tag{9.28}$$

Cette expression fait apparaître un temps caractéristique T_c défini par $L \simeq L_\gamma$, soit $T_c = \frac{2\tau_b}{3}\left(\frac{l^*}{L}\right)^2$. Pour les temps inférieurs à T_c, les effets de taille finie modifient le comportement en $\sqrt{T}$ pour laisser place à un comportement linéaire en T avec une réduction en $T = 0$:

$$g_1^r(T) = 1 - \frac{z^*}{L}\sqrt{\frac{T}{T_c}} \coth \sqrt{\frac{T}{T_c}} \underset{T\to 0}{\longrightarrow} 1 - \frac{z^*}{L}\left(1 + \frac{T}{3T_c}\right) \quad . \tag{9.29}$$

Ceci est très bien observé sur la figure 9.6, où on a varié l'épaisseur de la tranche.

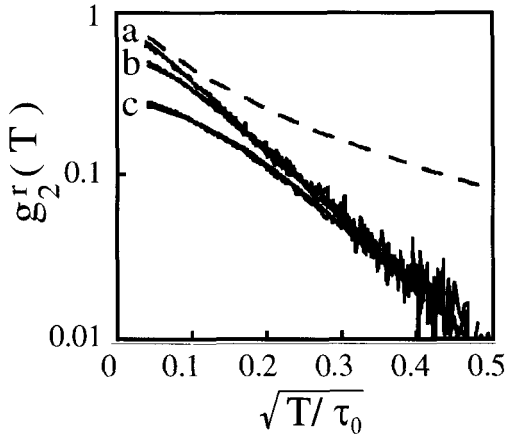


FIG. 9.6 – *Fonction de corrélation temporelle $g_2^r(T)$ mesurée en réflexion pour des tranches de largeur $L = 2$ mm (a), $L = 1$ mm (b) et $L = 0{,}6$ mm (c). Le libre parcours moyen est $l^* \simeq 143$ μm. Ce comportement est très bien décrit par la relation (9.28) avec $g_2^r(T) = |g_1^r(T)|^2$. En réduisant l'épaisseur de la tranche, le comportement en $\sqrt{T}$ disparaît pour laisser place à un comportement linéaire en T, lorsque $T \to 0$. Dans cette figure $\tau_0 = 4\tau_b$ [225].*

9.5.4 Transmission

Dans le cas d'une tranche d'épaisseur finie L, on peut aussi mesurer la fonction de corrélation des champs en transmission. Pour cela, on part à nouveau de la relation (9.13) mais où les champs sont mesurés en transmission. On aboutit ainsi à une relation analogue à (9.16), qui s'écrit

$$\boxed{G_1^t(T) = \frac{c}{4\pi {l_e}^2} \int\int dz dz' e^{-z/l_e} e^{-|L-z'|/l_e} P_\gamma(z,z')} \tag{9.30}$$

avec $\gamma = T/2\tau_e\tau_b$. La probabilité $P_\gamma(z,z')$ est donnée par (5.159). Dans l'intégrale (9.30), les exponentielles confinent les valeurs de z et z' autour de $z \simeq l_e$ et $z' \simeq L - l_e$. Dans cette limite et lorsque $l_e \ll L_\gamma$, l'expression (5.159) de $P_\gamma(z,z')$ devient

$$P_\gamma(z,z') = \frac{1}{DL_\gamma} \frac{(z+z_0)(L+z_0-z')}{\sinh(L+2z_0)/L_\gamma} \quad . \tag{9.31}$$

L'intégration conduit à :

$$G_1^t(T) = \frac{3}{4\pi} \frac{(l_e+z_0)^2}{l_e L_\gamma} \frac{1}{\sinh(L+2z_0)/L_\gamma} \quad , \tag{9.32}$$

et pour la fonction de corrélation $g_1^t = G_1^t(T)/G_1^t(0)$, on obtient (on suppose que $z_0 \ll L$) :

$$\boxed{g_1^t(T) = \frac{L/L_\gamma}{\sinh L/L_\gamma} = \frac{\frac{L}{l_e}\sqrt{\frac{3T}{2\tau_b}}}{\sinh \frac{L}{l_e}\sqrt{\frac{3T}{2\tau_b}}}} \tag{9.33}$$

Cette expression se généralise immédiatement au cas de collisions anisotropes. Il suffit alors de remplacer l_e par l^*.

Suivant le choix de la géométrie, on obtient pour la fonction de corrélation $g_1(T)$ des comportements différents qui traduisent le fait que l'on sonde différemment les trajectoires de diffusion multiple. Pour le cas de la réflexion sur un milieu semi-infini, $g_1^r(T)$ a un comportement en $\sqrt{T}$ aux petits temps. En transmission et dans cette même limite, $g_1^t(T)$ varie linéairement :

$$g_1^t(T) \simeq 1 - \frac{L^2}{6L_\gamma^2} = 1 - \frac{1}{4}\left(\frac{L}{l^*}\right)^2 \frac{T}{\tau_b} \quad . \tag{9.34}$$

Ceci provient du fait qu'en transmission, on sélectionne les longues trajectoires qui traversent le milieu, tandis qu'en réflexion on prend en compte les contributions des trajectoires de toutes longueurs.

Exercice 9.1 : Fonction de corrélation G_1^t pour une source de profil quelconque

Le résultat (9.32) correspond au cas d'un éclairement uniforme $I_{inc}(x,y) = I_{inc}$. On considère maintenant un éclairement quelconque $I_{inc}(x,y)$. Montrer que la solution (9.32) est remplacée par l'expression

$$G_1^t(T,\rho) \propto \int \frac{d^2\boldsymbol{q}}{(2\pi)^2} \frac{\tilde{q}}{\sinh(\tilde{q}L)} e^{i\boldsymbol{q}\cdot\rho} \tilde{I}_{inc}(\boldsymbol{q}) \tag{9.35}$$

avec $\rho = (x,y)$ et $\tilde{q}^2 = q^2 + 1/L_\gamma^2$. La fonction $\tilde{I}_{inc}(\boldsymbol{q})$ est la transformée de Fourier de $I_{inc}(x,y)$.
Dans le cas d'un éclairement ponctuel, $\tilde{I}_{inc}(\boldsymbol{q}) = Cte$, montrer que

$$G_1^t(T,\rho) \propto \int \frac{d^2\boldsymbol{q}}{(2\pi)^2} \frac{\tilde{q}}{\sinh(\tilde{q}L)} e^{i\boldsymbol{q}\cdot\rho} \tag{9.36}$$

et en particulier

$$g_1^t(T,\rho=0) = \frac{1}{7\zeta(3)} \int_0^\infty dx \frac{\sqrt{x+(L/L_\gamma)^2}}{\sinh\sqrt{x+(L/L_\gamma)^2}} \quad , \tag{9.37}$$

à comparer avec le résultat (9.33) pour une source étendue. La figure 9.7 montre effectivement que le comportement de $g_2^t(T) = |g_1^t(T)|^2$ est différent pour les cas de l'onde plane et de la source ponctuelle. Dans les deux cas, le comportement est linéaire aux temps courts, mais décroît plus vite dans le cas d'une onde plane.

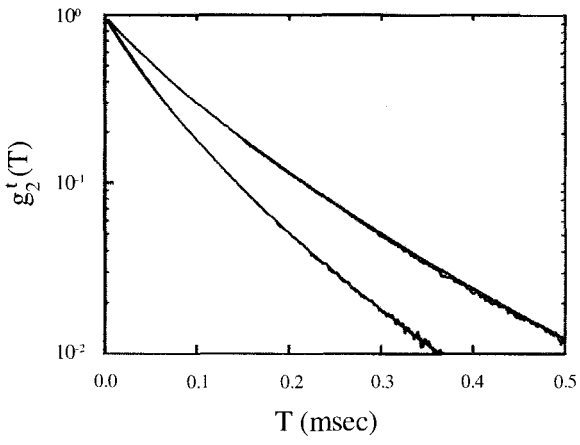


FIG. 9.7 – *Fonction de corrélation de l'intensité $g_2^t(T)$ mesurée en transmission à travers une cellule de largeur $L = 1mm$ et pour un libre parcours moyen de transport $l^* = 166$ μm. La courbe supérieure correspond à une source ponctuelle tandis que la courbe inférieure correspond à une onde plane incidente (D.J. Pine* et al., J. de Physique **51**, *2101, Paris (1990)).*

Complément C9.1 Mouvement collectif des diffuseurs

Dans les chapitres 6 et 9, nous avons étudié les fonctions de corrélation dynamiques du champ et de l'intensité pour des diffuseurs animés d'un mouvement brownien. La spectroscopie des ondes diffusées permet aussi de sonder les diffuseurs en suspension dans un fluide en écoulement et permet ainsi d'obtenir des informations sur l'écoulement à partir de la dynamique des diffuseurs. Ce genre de méthode est utilisé, par exemple, pour l'étude des fluides turbulents pour lesquels on étudie, dans le régime de diffusion simple, la fonction de corrélation des vitesses de diffuseurs en suspension dans le fluide [226].

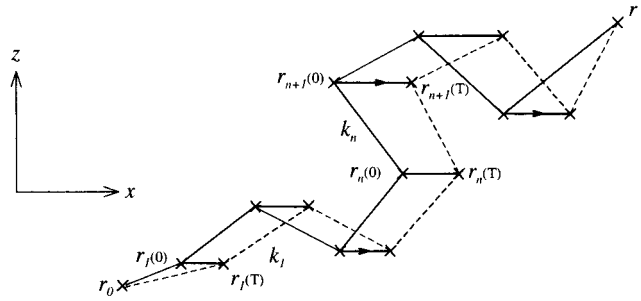


FIG. 9.8 – *Profil de vitesses d'un écoulement laminaire. L'écoulement est dans la direction Ox et la vitesse ne dépend que de la coordonnée z perpendiculaire à l'écoulement.*

On étudie ici le cas simple d'un écoulement laminaire. Le profil des vitesses est représenté schématiquement sur la figure 9.8. Il correspond à une vitesse le long de la direction Ox et qui dépend linéairement de la coordonnée z, soit $\mathbf{v}_x = \Gamma z \hat{\boldsymbol{e}}_x$, où Γ est le gradient de vitesse. Afin de calculer la fonction de corrélation (9.1) du champ électrique, il faut évaluer le déphasage qui apparaît dans le diffuson. Pour cela, on reprend la description de la section 6.7.1. Le déphasage $\Delta\phi_N(T)$ associé à une séquence de $N = t/\tau_e$ collisions est donné par la relation (6.180) qui peut se récrire

$$\Delta\phi_N(T) = k \sum_{n=1}^{N} \hat{\boldsymbol{e}}_n . [\Delta \boldsymbol{r}_{n+1}(T) - \Delta \boldsymbol{r}_n(T)] \tag{9.38}$$

où, pour des collisions élastiques, le module $k = |\boldsymbol{k}|$ est conservé. On a posé $\boldsymbol{k}_n = k\hat{\boldsymbol{e}}_n$ où $\hat{\boldsymbol{e}}_n$ est un vecteur unitaire et on suppose que le mouvement des diffuseurs est suffisamment lent pour qu'après le temps T on puisse négliger le changement de direction des vecteurs d'onde. Pour un écoulement laminaire stationnaire avec le profil de vitesse défini précédemment, on a $\Delta \boldsymbol{r}_n(T) = \Gamma T(\boldsymbol{r}_0.\hat{\boldsymbol{e}}_z)\hat{\boldsymbol{e}}_x$. En définissant $\Lambda_n = |\boldsymbol{r}_{n+1}(0) - \boldsymbol{r}_n(0)|$, on peut

récrire le déphasage associé à une séquence de N collisions sous la forme

$$\Delta\phi_N(T) = \Gamma T k \sum_{n=1}^{N} \Lambda_n (\hat{\boldsymbol{e}}_n.\hat{\boldsymbol{e}}_x)(\hat{\boldsymbol{e}}_n.\hat{\boldsymbol{e}}_z) \quad . \tag{9.39}$$

Afin d'obtenir la fonction de corrélation du champ électrique, il faut calculer la moyenne de $e^{i\Delta\phi_N(T)}$. Contrairement au cas du mouvement brownien, dans le cas d'un écoulement laminaire, la moyenne ne porte que sur les angles. En récrivant (9.39) sous la forme $\Delta\phi_N(T) = \Gamma T k \sum_{n=1}^{N} \Lambda_n \cos\theta_n \sin\theta_n \cos\varphi_n$, puis en calculant la moyenne angulaire $\langle \cos^2\theta \sin^2\theta \cos^2\varphi \rangle = 1/15$, on obtient [7]

$$\langle \Delta\phi_N^2(T) \rangle = 2N \left(\frac{T}{\tau_s}\right)^2 \tag{9.40}$$

où le temps caractéristique τ_s est défini par

$$\frac{1}{\tau_s} = \frac{\Gamma k l_e}{\sqrt{30}} \quad . \tag{9.41}$$

Contrairement au temps τ_b qui caractérise le mouvement des diffuseurs browniens (relation 6.186), ce temps dépend du libre parcours moyen $l_e = \overline{\Lambda}_n$. De la relation (9.39), on déduit que le mouvement des diffuseurs donne lieu à une décroissance exponentielle de la forme (6.1), avec le temps $t = N\tau_e$:

$$\left\langle e^{i\Delta\phi_N(T)} \right\rangle = e^{-\frac{1}{2}\langle \Delta\phi_N(T)^2 \rangle} = e^{-t/\tau_\gamma} \tag{9.42}$$

où le temps de déphasage τ_γ est donné par

$$\boxed{\tau_\gamma = \tau_e \left(\frac{\tau_s}{T}\right)^2} \tag{9.43}$$

Ce temps de déphasage varie comme $1/T^2$ au lieu de $1/T$ pour le cas du mouvement brownien (relation 6.190). Aux petits temps T, la fonction de corrélation $g_1^r(T)$ mesurée en réflexion devient donc linéaire en T. Au lieu de (9.26), on a, pour des collisions anisotropes [227] :

$$g_1^r(T) = 1 - \sqrt{3}\,\frac{z^*}{l^*}\frac{T}{\tau_s} \quad . \tag{9.44}$$

En transmission, la dépendance devient quadratique. Au lieu de (9.34), on a :

$$g_1^t(T) = 1 - \frac{1}{2}\left(\frac{L}{l^*}\right)^2 \left(\frac{T}{\tau_s}\right)^2 = 1 - \frac{\Gamma^2 k^2 L^2}{60} T^2 \quad . \tag{9.45}$$

[7] On vérifie directement que la valeur moyenne de $\Delta\phi_N(T)$ est proportionnelle à la divergence du champ de vitesse et qu'elle s'annule pour un fluide incompressible [227].

Ce résultat en transmission est remarquable car, bien que caractérisant un régime de diffusion multiple, il ne dépend pas du libre parcours moyen.

Ces comportements sont donc qualitativement différents de ceux obtenus pour le cas des diffuseurs browniens (9.22). En réalité, même en présence d'un mouvement laminaire du fluide, les diffuseurs en suspension sont aussi animés d'un mouvement brownien. Si on suppose que les deux effets ne sont pas corrélés, alors on observe deux types de comportements pour la fonction de corrélation temporelle. Par exemple en réflexion, la fonction de corrélation aux temps courts sonde le mouvement brownien des diffuseurs et varie en $\sqrt{T}$. Aux temps plus longs, elle sonde l'écoulement laminaire des diffuseurs et varie linéairement en T. Il existe donc un temps caractéristique d'ordre τ_s^2/τ_b qui sépare ces deux comportements. Afin de sonder le mouvement déterministe des diffuseurs imposé par l'écoulement, il faut donc considérer des temps $T \gg \tau_s^2/\tau_b$. De même en transmission, le temps caractéristique τ_s^2/τ_b sépare un comportement linéaire et une variation quadratique en T. Le passage entre ces deux régimes a été observé expérimentalement en réflexion comme en transmission [228].

Exercice 9.2 : Écoulement de Poiseuille

Un écoulement de Poiseuille dans une boîte de taille finie L est décrit par le profil de vitesse

$$\boldsymbol{v}_x(z) = \frac{\Gamma}{L}(Lz - z^2)\ \hat{\boldsymbol{e}}_x \quad . \tag{9.46}$$

Montrer que le déphasage associé à une séquence de diffusion multiple de longueur N se met sous la forme

$$\Delta\phi_N(T) = \Gamma T k \sum_{n=1}^{N} \Lambda_n (\hat{\boldsymbol{e}}_n.\hat{\boldsymbol{e}}_x)(\hat{\boldsymbol{e}}_n.\hat{\boldsymbol{e}}_z)\left(\frac{z_{n+1}+z_n}{L} - 1\right) \quad . \tag{9.47}$$

Contrairement aux cas du mouvement brownien ou de l'écoulement laminaire, le déphasage dépend maintenant explicitement de la position z_n des diffuseurs. Sans rentrer dans le détail du calcul [227], mais en supposant simplement que $\langle z_n^2 \rangle = n l_e^2$, montrer que la fluctuation $\langle \Delta\phi_N^2(T) \rangle$ du déphasage se met sous la forme

$$\langle \Delta\phi_N^2(T) \rangle = 2\left(\frac{T}{\tau_s}\right)^2 \left[N + N^2\left(\frac{l_e}{L}\right)^2\right] \tag{9.48}$$

où τ_s est le temps caractéristique défini en (9.41). À partir des résultats de la section 9.5.2, déduire que, pour l'écoulement de Poiseuille, on perd la correspondance (9.22) entre la fonction de corrélation temporelle du champ $G_1^r(T)$ et l'albédo cohérent.

Chapitre 10

Propriétés spectrales des métaux désordonnés

On note ν_0, la densité d'états moyenne par direction de spin et $\rho_0 = \nu_0/\Omega$, la densité d'états par unité de volume. L'énergie $\Delta = 1/(\rho_0\Omega) = 1/\nu_0$ est la distance moyenne entre niveaux d'énergie par direction de spin. Dans ce chapitre, on prend $\hbar = 1$.

10.1 Introduction

On a considéré jusque-là des signatures de la cohérence de phase sur la valeur moyenne de propriétés de transport comme la conductivité électrique ou l'albédo. La mise en évidence de ces effets cohérents nécessite de coupler le milieu désordonné au monde extérieur, représenté par les fils de mesure pour la conductivité ou par le milieu de propagation libre pour l'albédo. On peut aussi caractériser un système désordonné sans le coupler à un autre milieu en mesurant ses propriétés spectrales.

Un milieu désordonné est un système complexe pour lequel il n'est pas possible de décrire le spectre des énergies ou des fréquences propres au moyen d'une suite déterminée de nombres. La nature du spectre et de ses corrélations conditionne les différentes propriétés physiques. Par exemple, il est possible de lire directement sur le spectre d'un métal désordonné si celui-ci est un bon ou un mauvais conducteur. La compréhension de ces propriétés est essentielle pour la description des quantités thermodynamiques telles que le magnétisme orbital ou les courants permanents qui expriment la dépendance du spectre par rapport à un champ magnétique ou à un flux Aharonov-Bohm (chap. 14).

Le but de ce chapitre est de décrire les propriétés spectrales d'un métal désordonné par des méthodes statistiques. Certaines de ces propriétés présentent des aspects universels communs à de nombreux systèmes physiques différents (noyaux, atomes ou molécules complexes, métaux, etc.).

Cette universalité est bien décrite par la *théorie des matrices aléatoires*, dont on donne quelques éléments dans la section 10.4. Dans le régime de diffusion multiple, on peut relier certaines de ces propriétés spectrales à la probabilité de diffusion quantique.

Les résultats numériques présentés dans ce chapitre ont été obtenus à partir du modèle d'Anderson en dimension $d = 3$, introduit dans la section 2.2.3. Les paramètres qui le caractérisent sont l'énergie t de saut d'un site à l'autre et la largeur en énergie W de la distribution du désordre sur un site. Dans ce modèle, la limite de faible désordre $k_F l_e \gg 1$ correspond à $W \ll W_c$, où $W_c = 16{,}5t$ est le désordre critique correspondant à la transition métal-isolant. Numériquement, il est facile d'aller dans le régime de fort désordre en augmentant le paramètre W et de sonder ainsi les propriétés spectrales près de la transition métal-isolant, dans une limite où l'approche analytique développée dans cet ouvrage n'est plus adaptée. Pour l'étude de la transition métal-isolant, on pourra consulter [229, 230].

10.1.1 Répulsion de niveaux et intégrabilité

La figure 10.1.*a* présente deux spectres d'énergie. L'un est une réalisation du spectre d'un métal bon conducteur, dans le régime $k_F l_e \gg 1$. L'autre est celui d'une séquence de nombres aléatoires sans corrélation, c'est-à-dire distribués selon une loi de Poisson. Ces deux spectres sont très différents. Celui du métal paraît beaucoup plus « régulier ». Une première façon de caractériser ces différences consiste à étudier la probabilité $P(s)$ pour que deux niveaux d'énergie premiers voisins soient distants de s [1]. La figure 10.1 indique que pour le spectre du métal, la probabilité que deux niveaux soient très proches tend vers 0, ce qui n'est pas le cas pour un spectre sans corrélations. Cette propriété, appelée *répulsion de niveaux*, est la signature de fortes corrélations spectrales. En particulier, pour un métal désordonné, les dégénérescences sont exclues.

Il se trouve que ce comportement est très général. Cette répulsion de niveaux est aussi observée dans les spectres d'énergie (ou de fréquence) d'une large gamme de systèmes physiques [231, 232]. Par exemple, la figure 10.2 montre un histogramme des écarts entre niveaux très excités de noyaux lourds. Remarquablement, cet histogramme est décrit par la même distribution $P(s)$ que celle d'un métal désordonné. Cette distribution est aussi observée dans d'autres systèmes complexes tels que des grosses molécules ou au contraire des systèmes beaucoup plus simples comme l'atome d'hydrogène sous fort champ magnétique [233].

L'apparition de ce type de corrélations spectrales ne nécessite pas que le système physique contienne un grand nombre de degrés de liberté. Ces corrélations apparaissent de façon spectaculaire dans le spectre d'un système

[1] s est une différence d'énergies sans dimension, normalisée par la distance moyenne entre niveaux Δ.

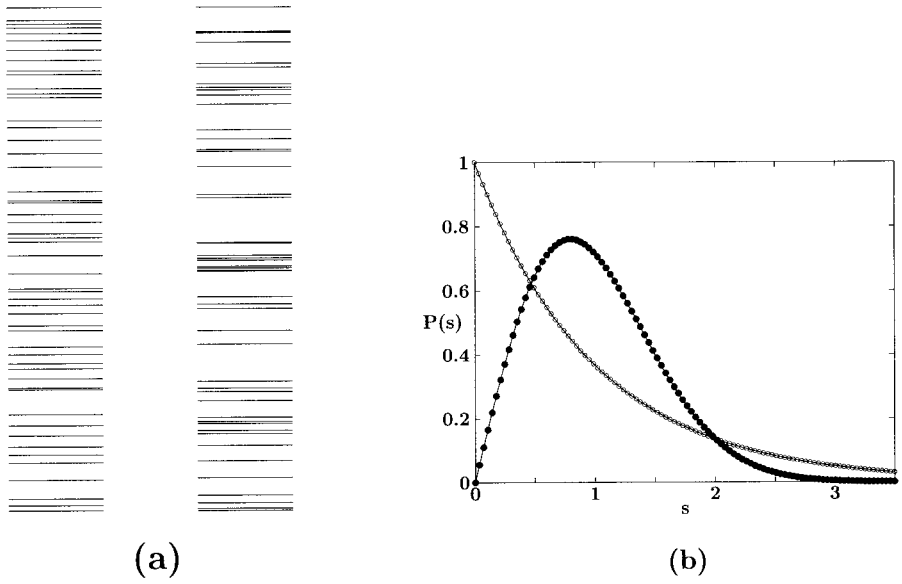


FIG. 10.1 – *a) Comparaison du spectre d'énergie d'un métal bon conducteur dans le régime $k_F l_e \gg 1$ (à gauche) et d'un spectre poissonnien, c'est-à-dire correspondant à une distribution aléatoire de niveaux sans corrélation (à droite). b) Distribution $P(s)$ pour le spectre du métal (points noirs) et le spectre poissonnien (points blancs).*

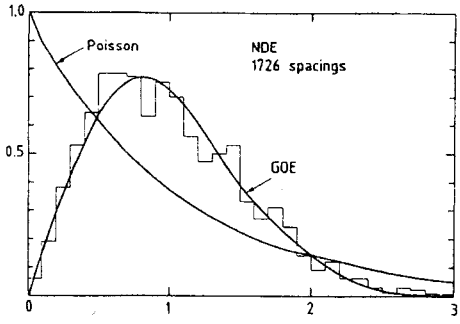


FIG. 10.2 – *Histogramme des écarts entre niveaux de plusieurs noyaux lourds, déterminés par diffusion de neutrons (données prises sur différents isotopes de $Cd, Sm, Gd, Dy, Er, Yb, W, Th, U$) [231].*

aussi simple que celui constitué d'une particule dans une « boîte » (ou dans le spectre des modes de résonance d'une cavité acoustique ou électromagnétique [234]). À deux dimensions, ces boîtes, appelées des billards, correspondent à des systèmes n'ayant que deux degrés de liberté.

Pour un billard rectangulaire, il y a autant d'intégrales du mouvement (l'énergie et une composante de l'impulsion) que de degrés de liberté et le comportement classique est donc parfaitement déterminé. Les énergies propres sont indexées au moyen de deux nombres quantiques m et n correspondant aux deux composantes de l'impulsion et sont de la forme $m^2/a^2 + n^2/b^2$ où a et b sont les dimensions du rectangle. À haute énergie, la répartition de ces valeurs propres correspond à une distribution de Poisson (voir fig. 10.3). Par contre pour un billiard de forme quelconque (par exemple le stade ou le billard de Sinai [231]), seule l'énergie est une constante du mouvement : l'impulsion est toujours conservée lors d'une réflexion sur les bords, mais pas chacune des composantes séparément. Le comportement classique est chaotique, c'est-à-dire que deux trajectoires initialement proches se séparent aux temps longs. Le spectre associé met en évidence le phénomène de répulsion de niveaux, avec la même distribution $P(s)$ que pour le spectre d'un noyau lourd ou d'un métal !

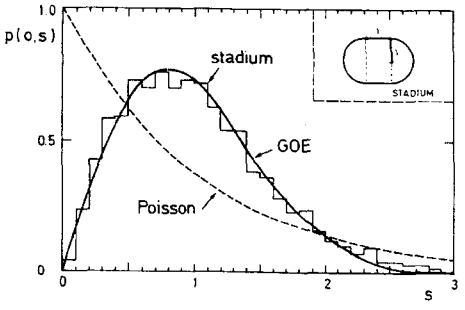


FIG. 10.3 – *Distribution des écarts entre niveaux d'énergie premiers voisins pour un billard rectangulaire (distribution de Poisson) et un billard ayant la forme d'un stade [232].*

De manière générale, s'il est possible de décrire le système par un ensemble de nombres quantiques égal au nombre de degrés de liberté, le spectre peut être classé à l'aide de ces nombres quantiques et les niveaux d'énergie sont décorrélés (en l'absence de symétries particulières). Ça n'est plus le cas pour un billard de forme quelconque. La répulsion de niveaux semble donc être une caractéristique de systèmes classiquement non intégrables [235].

Un noyau lourd, une molécule complexe, un métal désordonné ou un billard chaotique ont donc une caractéristique commune, à savoir une même statistique entre niveaux d'énergie premiers voisins. Pour ces différents systèmes, à un corps ou à N corps, l'ensemble des bons nombres quantiques est inférieur à celui des degrés de liberté. On les appelle des *systèmes complexes*.

Qu'y a-t-il de commun à ces différents systèmes complexes ? Comment caractériser l'universalité de leur propriétés spectrales ? Pour répondre à ces questions, Wigner, Dyson et Mehta [236–238] ont proposé une description

statistique très générale de l'hamiltonien des systèmes complexes qui constitue la *théorie des matrices aléatoires*. Celle-ci a été initialement proposée afin de décrire les niveaux très excités des noyaux lourds. Cette approche consiste à remplacer l'hamiltonien microscopique par une matrice dont les éléments sont des variables aléatoires indépendantes. L'intérêt de cette théorie est sa généralité et le résultat remarquable que la distribution des niveaux d'énergie ainsi obtenue ne dépend que de la symétrie de l'hamiltonien. Cette approche a été appliquée a une large variété de problèmes en physique nucléaire et en physique atomique ou moléculaire. En physique des solides, elle a été utilisée pour la première fois par Gorkov et Eliashberg [239] afin de décrire la polarisabilité de petits agrégats métalliques. Dans ce cas, la complexité ne provient pas des interactions entre particules comme en physique nucléaire, mais des collisions que subissent les électrons sur la surface irrégulière de l'agrégat métallique qui constitue ainsi un exemple de billard dont la surface est aléatoire.

10.1.2 Spectre d'un métal désordonné

Il est cependant évident qu'un métal désordonné, une molécule ou un noyau lourd doivent aussi présenter des propriétés spectrales différentes, spécifiques de leur nature microscopique. Il va donc falloir déterminer ce qui est commun à tous ces systèmes – les propriétés universelles – et ce qui les distingue – les propriétés non-universelles – [240]. Le but de ce chapitre est de systématiser cette distinction. Pour cela, on s'intéresse aux propriétés spectrales d'un métal désordonné bon conducteur dans lequel les électrons sont diffusés élastiquement par des impuretés. On va calculer explicitement certaines fonctions de corrélation spectrales à l'aide des méthodes développées dans le chapitre 4. On pourra ainsi, d'une part, retrouver le comportement universel des matrices aléatoires et, d'autre part, comprendre l'origine des déviations à cette théorie. On sera donc à même de préciser dans quelle mesure la théorie des matrices aléatoires s'applique à la description du spectre d'un métal désordonné.

Nous allons nous limiter à l'approximation du diffuson, c'est-à-dire que nous négligeons les effets cohérents liés au croisement de diffusons (complément C4.2). On se limitera donc à des échelles d'énergie supérieures ou de l'ordre de la distance entre niveaux Δ. L'étude des propriétés spectrales à des échelles inférieures à Δ, c'est-à-dire à des échelles de temps supérieures au *temps de Heisenberg* (écrit en unité de $\hbar$)

$$\tau_H = \frac{2\pi}{\Delta} \quad , \tag{10.1}$$

nécessite de prendre en compte des contributions supplémentaires qui font intervenir des croisements [241]. Cette limite des temps longs a aussi été étudiée à l'aide du modèle σ-non linéaire supersymétrique qui permet d'obtenir des résultats exacts [242–244].

10.2 Caractérisation des corrélations spectrales

Afin de caractériser la distribution des énergies propres ou les corrélations spectrales, on utilisera les quantités suivantes :

- la distribution $P(s)$ des écarts d'énergie (normalisés à l'écart moyen Δ) entre niveaux premiers voisins. Cette quantité décroît exponentiellement pour s grand et ne décrit donc les corrélations spectrales qu'aux petites valeurs de s ;
- la probabilité $P(n, s)$ pour que la distance entre deux niveaux séparés par n autres niveaux soit égale à s. Par définition $P(s) = P(0, s)$;
- la fonction de corrélation à deux points de la densité d'états définie par :

$$\overline{\rho(\epsilon_1)\rho(\epsilon_2)} - \overline{\rho}(\epsilon_1)\,\overline{\rho}(\epsilon_2) \quad , \tag{10.2}$$

où la densité d'états obtenue à partir de (3.24) est égale à

$$\rho(\epsilon) = \frac{1}{\Omega}\sum_{\alpha}\delta(\epsilon - \epsilon_\alpha) \tag{10.3}$$

ϵ_α étant les énergies propres de l'hamiltonien microscopique. La moyenne $\overline{\cdots}$ peut être effectuée soit sur un spectre donné en considérant différentes parties du spectre, soit sur différentes réalisations du désordre. Les simulations numériques indiquent que ces moyennes sont équivalentes (hypothèse ergodique). Pour un noyau ou un billard donné, le spectre est unique. Dans ce cas on ne peut qu'effectuer une moyenne sur l'énergie [231].

Si ϵ_1 et ϵ_2 appartiennent à un intervalle d'énergie où la densité d'états moyenne peut être supposée constante, le spectre moyen est alors invariant par translation de l'énergie. La fonction de corrélation (10.2) ne dépend que de la différence $\omega = \epsilon_1 - \epsilon_2$. On introduit alors la fonction de corrélation $K(\omega)$ définie par :

$$\boxed{K(\omega) = \frac{\overline{\rho(\epsilon)\rho(\epsilon - \omega)}}{\overline{\rho}^2} - 1} \tag{10.4}$$

La densité d'états moyenne par unité de volume $\overline{\rho}$ n'est autre que l'inverse de la distance moyenne entre niveaux Δ divisée par le volume :

$$\boxed{\overline{\rho} = \frac{1}{\Delta\Omega}} \tag{10.5}$$

Remarque

$P(s)$ est la probabilité pour que deux niveaux donnés soient distants de s, *sans aucun autre niveau entre eux*. $P(s)$ s'exprime donc en principe en fonction de toutes les fonctions de corrélations à n points. Il existe une relation simple entre la fonction de corrélation à deux points K et l'ensemble des $P(n,s)$. Puisque $P(n,s)$ est la probabilité que deux niveaux séparés par n autres niveaux soit distants de s, on a par définition,

$$K(\omega) = \delta(\omega) - 1 + \sum_n P(n,s) \tag{10.6}$$

où $s = \omega/\Delta$. La fonction de corrélation $K(\omega = s\Delta)$ est la probabilité que deux niveaux soient distants de s quel que soit le nombre de niveaux entre les deux. En particulier, lorsque $s \to 0$, $P(n+1,s) \ll P(n,s)$ et par conséquent

$$K(\omega) \to \delta(\omega) - 1 + P(s) \quad \text{si } s \to 0 \quad .$$

- Le facteur de forme $\tilde{K}(t)$ défini comme la transformée de Fourier de $K(\omega)$

$$\boxed{\tilde{K}(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} K(\omega)e^{-i\omega t}d\omega} \tag{10.7}$$

Dans le régime diffusif, on montrera que cette quantité est reliée à la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t)$ définie par (5.5).

- La fluctuation du nombre de niveaux $N(E)$ contenus dans un intervalle d'énergie donnée E. Cette fonction $N(E)$ appelée *fonction de comptage* n'est autre que la densité d'états intégrée sur un intervalle de largeur E :

$$N(E) = \Omega\int_0^E \rho(\epsilon)d\epsilon = \sum_\alpha \Theta(E - \epsilon_\alpha) \quad . \tag{10.8}$$

Elle augmente d'une unité pour chaque énergie propre (Θ est la fonction de Heaviside). La fluctuation du nombre de niveaux est donnée par la variance :

$$\Sigma^2(E) = \overline{N(E)^2} - \overline{N}(E)^2 \tag{10.9}$$

qui s'exprime simplement à partir de la fonction de corrélation à deux points. En effet, d'après les définitions (10.8) et (10.4), et en utilisant (10.5),

$$\Sigma^2(E) = \frac{1}{\Delta^2}\int_0^E\int_0^E K(\epsilon_1 - \epsilon_2)d\epsilon_1 d\epsilon_2 \tag{10.10}$$

qui peut se récrire, après un changement de variables et une intégration par parties :

$$\Sigma^2(E) = \frac{2}{\Delta^2}\int_0^E (E-\omega)K(\omega)d\omega \quad . \tag{10.11}$$

Inversement,

$$K(\omega) = \frac{\Delta^2}{2} \frac{\partial^2 \Sigma^2(\omega)}{\partial \omega^2} \quad . \tag{10.12}$$

Enfin, la variance $\Sigma^2(E)$ peut s'écrire directement en fonction du facteur de forme :

$$\boxed{\Sigma^2(E) = \frac{8}{\Delta^2} \int_0^\infty dt \frac{\tilde{K}(t)}{t^2} \sin^2\left(\frac{Et}{2}\right)} \tag{10.13}$$

Remarque : Le dépliage du spectre

On a supposé la densité d'états moyenne $\overline{\rho}$ indépendante de l'énergie. Ça n'est pas le cas en général. Lorsqu'on étudie le spectre d'un système physique dont on cherche à mettre en évidence le caractère universel, il faut d'abord le modifier afin de se ramener à une situation où la densité d'états moyenne est constante. Cette opération s'appelle le *dépliage* [231]. On procède de la façon suivante :

On part de la séquence originale de valeurs propres $\{\epsilon_\alpha\}$ et on approche la fonction de comptage par une fonction continue $\overline{N}(E)$ tout en considérant la nouvelle séquence définie par $\epsilon_i = \overline{N}(\epsilon_\alpha)$. Par définition, la densité d'états de cette nouvelle séquence est constante et la distance moyenne entre niveaux est égale à 1.

10.3 Séquence poissonnienne

Pour une séquence de valeurs propres sans corrélation, la probabilité $P(s)$ s'écrit :

$$\boxed{P(s) = e^{-s}} \tag{10.14}$$

où s est exprimé en unité de la distance moyenne entre niveaux.

Exercice 10.1 : Démontrer l'expression (10.14) de la distribution $P(s)$ pour une séquence poissonnienne.

On considère une séquence de N points dans un intervalle $[0, L]$. La probabilité d'une configuration donnée est constante :

$$P(\epsilon_1, \epsilon_2, \cdots, \epsilon_N) = \left(\frac{1}{L}\right)^N \quad .$$

Considérons deux niveaux proches voisins ϵ_1 et ϵ_2 et s la distance entre ces niveaux normalisée à la distance moyenne $\Delta = L/N$: $s = |\epsilon_1 - \epsilon_2|/\Delta$. La probabilité $P(s)$ est le produit des probabilités p_j pour que chacun des autres niveaux ϵ_j ne soit pas dans l'intervalle $[\epsilon_1, \epsilon_2]$. Chacune de ces probabilités étant égale à $p_j = (1 - |\epsilon_1 - \epsilon_2|/L)$, on en déduit

$$P(s) = \left(1 - \frac{|\epsilon_1 - \epsilon_2|}{L}\right)^{N-2} \simeq \left(1 - \frac{s}{N}\right)^N \underset{N \to \infty}{\longrightarrow} e^{-s} \quad .$$

De la même manière que dans l'exercice précédent, on peut montrer que, pour une séquence poissonnienne, la probabilité que deux niveaux distants de s soient séparés par n niveaux s'écrit :

$$P(n,s) = \frac{s^n}{n!}\, e^{-s} \tag{10.15}$$

et vérifie $\sum_{n=1}^{\infty} P(n,s) = 1$. D'après (10.6), la fonction de corrélation $K(\omega)$ à deux points est donc nulle, sauf pour $\omega = 0$

$$K(\omega) = \delta(\omega) \quad .$$

D'après (10.7), le facteur de forme est constant :

$$\tilde{K}(t) = \frac{1}{2\pi} \quad .$$

10.4 Universalité des corrélations spectrales : la théorie des matrices aléatoires

On expose ici quelques éléments de la théorie des matrices aléatoires. Pour plus de détails, on consultera en particulier les références [231, 238].

10.4.1 Répulsion de niveaux et matrices 2×2

Avant d'aborder la description du spectre de matrices aléatoires en général, considérons, comme l'avait fait Wigner [236], un ensemble de matrices 2×2 aléatoires. C'est l'exemple le plus simple qui présente le phénomène de *répulsion de niveaux*. Pour le mettre en évidence, calculons tout d'abord la distribution $P_o(s)$ pour des matrices réelles symétriques,

$$\mathcal{H} = \begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{12} & h_{22} \end{pmatrix}$$

avec une distribution gaussienne et normalisée des éléments $\{h_{ij}\}$:

$$p(h_{ij}) = \sqrt{\frac{\lambda}{\pi}} e^{-\lambda h_{ij}^2} \quad .$$

Les éléments de matrice étant supposés indépendants, leur distribution est donnée par

$$P(\{h_{ij}\}) = \prod_{ij} p(h_{ij}) = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\lambda(h_{11}^2 + h_{22}^2 + 2h_{12}^2)} \tag{10.16}$$

où $\mathcal{Z}$ est une constante de normalisation. La distance s entre deux valeurs propres est [2] :

$$s = |\epsilon_1 - \epsilon_2| = \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4h_{12}^2} \quad .$$

[2] La distance moyenne entre niveaux est prise égale à 1.

La probabilité que s soit nul, donc que les deux niveaux soient dégénérés, impose que soient réalisées simultanément les deux conditions $(h_{11} - h_{22}) = 0$ et $h_{12} = 0$. La probabilité d'un tel événement est nulle et donc les valeurs propres « se repoussent » nécessairement. La probabilité $P_o(s)$ est donnée par l'intégrale :

$$P_o(s) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int P(\{h_{ij}\}) \delta\left(s - \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4h_{12}^2}\right) dh_{11} dh_{22} dh_{12} \quad . \tag{10.17}$$

L'intégration sur les éléments de matrice conduit à

$$\boxed{P_o(s) = \frac{\pi}{2} s \; e^{-\frac{\pi}{4} s^2}} \tag{10.18}$$

où on a normalisé la probabilité pour que $\overline{s} = 1$. Cette probabilité $P_o(s)$ présente deux caractéristiques très différentes du cas poissonnien : elle s'annule *linéairement* lorsque s tend vers 0 et elle présente une décroissance plus rapide à grande séparation ($s \to \infty$).

Exercice 10.2 : Calculer $P_o(s)$ à partir de l'expression (10.17).

On pose $u = h_{11} - h_{22}$, $v = (h_{11} + h_{22})/2$ et $x = \sqrt{u^2 + 4h_{12}^2}$. L'intégrale devient :

$$P_o(s) = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\frac{\pi}{\lambda}\right)^{3/2} \int e^{-(2\lambda v^2 + \lambda \frac{s^2}{2})} \delta(s - x) \frac{2x}{\sqrt{x^2 - u^2}} du dv dx$$

soit, après intégration :

$$P_o(s) = \lambda s e^{-\lambda \frac{s^2}{2}} \quad . \tag{10.19}$$

La normalisation $\overline{s} = 1$ implique $\lambda = \pi/2$.

Ce résultat se généralise aux matrices complexes hermitiques. Dans ce cas, la séparation entre les deux valeurs propres devient :

$$s = \sqrt{(h_{11} - h_{22})^2 + 4|h_{12}|^2} \quad . \tag{10.20}$$

L'annulation de s impose que $(h_{11} - h_{22})$, $\mathrm{Re}(h_{12})$ et $\mathrm{Im}(h_{12})$ soient nuls simultanément, et requiert donc une condition supplémentaire par rapport au cas des matrices réelles. La probabilité d'avoir deux niveaux proches est donc encore plus faible : « *la répulsion de niveaux est plus forte* ». Un calcul similaire à celui de l'exercice 10.2 conduit à :

$$\boxed{P_u(s) = \frac{32}{\pi^2} s^2 \; e^{-\frac{4}{\pi} s^2}} \tag{10.21}$$

Pour des matrices hermitiques, la répulsion de niveaux pour $s \to 0$ est donc *quadratique* et non plus linéaire comme pour des matrices réelles. C'est une propriété essentielle et absolument générale des spectres de systèmes « complexes » (fig. 10.4).

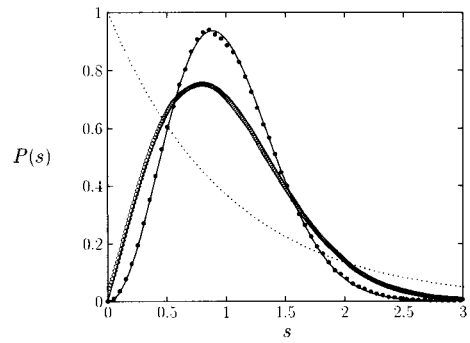


FIG. 10.4 – *Distribution $P(s)$ pour un métal faiblement désordonné obtenue par résolution numérique du modèle d'Anderson, avec (points noirs) ou sans (points blancs) champ magnétique [245]. Ces distributions sont très bien décrites par les lois de Wigner (10.18) et (10.21) pour des matrices aléatoires* 2×2.

Exercice 10.3 : Calculer la distribution $P(\epsilon_1, \epsilon_2)$ des valeurs propres de matrices 2×2.

Comme l'argument de l'exponentielle dans la distribution (10.16) n'est autre que la trace du carré de la matrice, la distribution peut se récrire :

$$P(\{h_{ij}\}) = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\lambda \mathrm{Tr}\mathcal{H}^2} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\lambda(\epsilon_1^2+\epsilon_2^2)} \quad . \tag{10.22}$$

La matrice peut être diagonalisée par une transformation orthogonale (rotation d'angle θ)

$$\begin{pmatrix} h_{11} & h_{12} \\ h_{12} & h_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\theta & \sin\theta \\ -\sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 & 0 \\ 0 & \epsilon_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos\theta & -\sin\theta \\ \sin\theta & \cos\theta \end{pmatrix} \quad .$$

La distribution des valeurs propres ϵ_1 et ϵ_2 est telle que

$$P(\{h_{ij}\}) dh_{11} dh_{22} dh_{12} = P(\epsilon_1, \epsilon_2, \theta) \mathcal{J} d\epsilon_1 d\epsilon_2 d\theta \tag{10.23}$$

où $\mathcal{J}$ est le jacobien de la transformation. On vérifie que $\mathcal{J} = |\epsilon_1 - \epsilon_2|$. Par ailleurs, $P(\{h_{ij}\})$ a été récrite en fonction de ϵ_1 et ϵ_2. La distribution des valeurs propres est donc donnée par

$$P(\epsilon_1, \epsilon_2) = \int P(\epsilon_1, \epsilon_2, \theta) d\theta$$

c'est-à-dire

$$P(\epsilon_1, \epsilon_2) \propto |\epsilon_1 - \epsilon_2| e^{-\lambda(\epsilon_1^2+\epsilon_2^2)} \quad . \tag{10.24}$$

On voit que la probabilité pour que la distance entre niveaux soit petite tend vers 0. Ceci est dû à la structure du jacobien de la transformation. Avec le changement de variable, $s = |\epsilon_1 - \epsilon_2|$, $\epsilon = \frac{\epsilon_1+\epsilon_2}{2}$, et en intégrant sur ϵ, on en déduit la probabilité

$$P(s) \propto s e^{-\lambda s^2/2} \quad .$$

Après normalisation, on retrouve l'expression (10.18).

10.4.2 Distribution des valeurs propres de matrices $N \times N$

On veut généraliser les résultats précédents obtenus pour des matrices 2×2 et déterminer la distribution $P(\epsilon_1, \epsilon_2, \cdots, \epsilon_N)$ des valeurs propres de matrices $N \times N$.

Considérons d'abord un ensemble de matrices aléatoires $N\times N$ symétriques réelles $\mathcal{H}$, dont la distribution des $N(N+1)/2$ éléments h_{ij} est donnée par [3] :

$$P(\{h_{ij}\}) = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\lambda(\sum_i h_{ii}^2 + \sum_{j\neq i} h_{ij}^2)} \quad . \tag{10.25}$$

L'argument de l'exponentielle n'est autre que la trace de la matrice $\mathcal{H}^2$. Il est donc indépendant de la base choisie et se récrit comme la somme des carrés des valeurs propres ϵ_i :

$$P(\{h_{ij}\}) = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\lambda \mathrm{Tr}\mathcal{H}^2} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\lambda \sum_i \epsilon_i^2} \quad . \tag{10.26}$$

On cherche maintenant à déterminer la distribution des valeurs propres de $\mathcal{H}$ en généralisant la méthode exposée dans la section précédente. Une transformation orthogonale $\mathcal{O}$ diagonalise cette matrice :

$$\mathcal{H} = \mathcal{O}^T \mathcal{D} \mathcal{O}$$

où $\mathcal{D}$ est la matrice diagonale dont les éléments sont les énergies propres, $\mathcal{D}_{ij} = \epsilon_i \delta_{ij}$. Ainsi,

$$h_{ij} = \sum_k \epsilon_k \mathcal{O}_{ik} \mathcal{O}_{jk} \quad . \tag{10.27}$$

La probabilité étant conservée, on a :

$$P(\mathcal{D}) d\mathcal{D} = P(\mathcal{H}) d\mathcal{H} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\lambda \mathrm{Tr}\mathcal{H}^2} d\mathcal{H} = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\lambda \sum_i \epsilon_i^2} d\mathcal{H} \tag{10.28}$$

avec

$$d\mathcal{H} = dh_{11} dh_{22} \cdots dh_{NN} dh_{12} dh_{13} \cdots \tag{10.29}$$

et

$$d\mathcal{D} = d\epsilon_1 d\epsilon_2 \cdots \epsilon_N d\theta_1 d\theta_2 \cdots d\theta_{N(N-1)/2} \quad . \tag{10.30}$$

Par conséquent,

$$P(\mathcal{D}) = P(\epsilon_1, \epsilon_2, \cdots, \epsilon_N, \theta_1, \theta_2, \cdots, \theta_{N(N-1)/2}) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \mathcal{J} e^{-\lambda \sum_i \epsilon_i^2}$$

[3] On vérifie que $\overline{h_{ij}^2} = 1/(4\lambda)$ pour $i \neq j$ et que $\overline{h_{ii}^2} = 1/(2\lambda)$.

où le jacobien $\mathcal{J}(\{\epsilon_i\},\{\theta_i\})$ de la transformation orthogonale est le déterminant d'ordre $N(N+1)/2$:

$$\mathcal{J} = \begin{vmatrix} \frac{\partial h_{11}}{\partial \epsilon_1} & \frac{\partial h_{11}}{\partial \epsilon_2} & \cdots & \frac{\partial h_{11}}{\partial \epsilon_N} & \frac{\partial h_{11}}{\partial \theta_1} & \frac{\partial h_{11}}{\partial \theta_2} & \cdots & \frac{\partial h_{11}}{\partial \theta_{\frac{N(N-1)}{2}}} \\ \frac{\partial h_{12}}{\partial \epsilon_1} & \frac{\partial h_{12}}{\partial \epsilon_2} & \cdots & \frac{\partial h_{12}}{\partial \epsilon_N} & \frac{\partial h_{12}}{\partial \theta_1} & \frac{\partial h_{12}}{\partial \theta_2} & \cdots & \frac{\partial h_{12}}{\partial \theta_{\frac{N(N-1)}{2}}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial h_{ij}}{\partial \epsilon_1} & \frac{\partial h_{ij}}{\partial \epsilon_2} & \cdots & \frac{\partial h_{ij}}{\partial \epsilon_N} & \frac{\partial h_{ij}}{\partial \theta_1} & \frac{\partial h_{ij}}{\partial \theta_2} & \cdots & \frac{\partial h_{ij}}{\partial \theta_{\frac{N(N-1)}{2}}} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \frac{\partial h_{NN}}{\partial \epsilon_1} & \frac{\partial h_{NN}}{\partial \epsilon_2} & \cdots & \frac{\partial h_{NN}}{\partial \epsilon_N} & \frac{\partial h_{NN}}{\partial \theta_1} & \frac{\partial h_{NN}}{\partial \theta_2} & \cdots & \frac{\partial h_{NN}}{\partial \theta_{\frac{N(N-1)}{2}}} \end{vmatrix} \quad . \tag{10.31}$$

Puisque la transformation (10.27) est linéaire, les éléments des N premières colonnes de ce déterminant ne dépendent pas des énergies ϵ_i. Pour la même raison, les éléments des $N(N-1)/2$ colonnes suivantes dépendent linéairement des énergies. Le jacobien $\mathcal{J}(\{\epsilon_i\},\{\theta_i\})$ est donc un polynôme homogène de degré $N(N-1)/2$ de ces énergies ϵ_i. Par ailleurs, il s'annule si deux énergies ϵ_i et ϵ_j sont égales. Il est donc de la forme :

$$\mathcal{J}(\{\epsilon_i\},\{\theta_i\}) = \prod_{i<j}^{N} |\epsilon_i - \epsilon_j| f(\{\theta_i\}) \quad . \tag{10.32}$$

En intégrant sur les variables θ_i, on déduit

$$P(\epsilon_1, \epsilon_2, \cdots, \epsilon_N) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \prod_{i<j}^{N} |\epsilon_i - \epsilon_j| e^{-\lambda \sum_i \epsilon_i^2} \quad . \tag{10.33}$$

Dans le cas d'un ensemble de matrices complexes hermitiques, on utilise une transformation unitaire pour diagonaliser la matrice et le nombre d'éléments indépendants non diagonaux est $N(N-1)$ (une partie réelle et une partie imaginaire pour chaque élément). Le jacobien est donc un polynôme de degré $N(N-1)$ qui s'annule si deux valeurs propres sont égales. La dépendance en $|\epsilon_i - \epsilon_j|$ est alors quadratique.

Pour résumer, la distribution des valeurs propres de matrices aléatoires gaussiennes est [4] :

$$\boxed{P(\epsilon_1, \epsilon_2, \cdots, \epsilon_N) \propto \prod_{i<j}^{N} |\epsilon_i - \epsilon_j|^{\beta} e^{-\lambda\beta \sum_i \epsilon_i^2}} \tag{10.34}$$

[4] Avec le facteur β dans l'exponentielle, la densité d'états moyenne est indépendante de β (voir note 5).

Les matrices réelles symétriques correspondent à des systèmes invariants par renversement du sens du temps. L'ensemble statistique de ces matrices est invariant par toute transformation orthogonale et il est appelé « Ensemble Orthogonal Gaussien » (GOE en anglais). Dans ce cas, la répulsion de niveaux est linéaire et $\beta = 1$. Si le système n'est pas invariant par renversement du sens du temps, par exemple en présence d'un champ magnétique, les matrices sont hermitiques et l'ensemble de ces matrices est invariant par toute transformation unitaire. Il est appelé « Ensemble Unitaire Gaussien » (GUE) et correspond à $\beta = 2$. Enfin, notons qu'il existe une dernière classe de matrices dont les éléments sont des quaternions et qui correspondent à $\beta = 4$. L'ensemble de ces matrices s'appelle « Ensemble Symplectique Gaussien » (GSE). Pour plus de détails, consulter [231, 238].

10.4.3 Propriétés spectrales des matrices aléatoires

• Fonction de corrélation à deux points

La distribution (10.34) décrit la répartition des valeurs propres des matrices aléatoires gaussiennes [5]. Pour calculer la fonction de corrélation à deux points de la densité d'états, il faut intégrer la distribution (10.34) sur toutes les variables ϵ_j sauf deux. Ce calcul est difficile et le lecteur intéressé pourra se reporter à l'ouvrage de M.L. Mehta [238].

Dans la limite $N \to \infty$, cette fonction est présentée sur la figure 10.5, pour les cas GOE et GUE. À énergie nulle, elle présente un pic δ qui décrit l'autocorrélation d'un niveau d'énergie. Lorsque $\omega \to 0$, elle tend vers -1 puisque la probabilité que deux niveaux soient proches tend vers 0 et donc $\overline{\rho(\epsilon)\rho(\epsilon-\omega)} \to 0$. Enfin, à grande séparation, les niveaux deviennent décorrélés et $K(\omega)$ tend vers 0. Dans le cas GUE, elle s'écrit :

$$K(\omega) = \delta(s) - \left(\frac{\sin(\pi s)}{\pi s}\right)^2 \tag{10.36}$$

avec $s = \omega/\Delta$. Pour le cas GOE,

$$K(\omega) = \delta(s) - \left(\frac{\sin(\pi s)}{\pi s}\right)^2 - \left[\int_s^\infty \left(\frac{\sin(\pi u)}{\pi u}\right) du\right] \left[\frac{d}{ds}\left(\frac{\sin(\pi s)}{\pi s}\right)\right] \cdot \tag{10.37}$$

De ces expressions, on retiendra en particulier le comportement à grande distance $\omega \gg \Delta$,

$$K(\omega) = -\frac{\Delta^2}{\beta\pi^2\omega^2} \quad \cdot \tag{10.38}$$

[5] Pour ces matrices, la densité d'états moyenne est un demi-cercle :

$$\overline{\rho}(\epsilon) = \frac{2\lambda}{\pi}\left(\frac{N}{\lambda} - \epsilon^2\right)^{1/2} \tag{10.35}$$

pour $|\epsilon| < \sqrt{N/\lambda}$ et elle est nulle sinon. La distance entre niveaux varie comme l'inverse de $\overline{\rho}(\epsilon)$ et n'est donc pas constante. Par exemple, au milieu du spectre, elle varie comme $N^{-1/2}$.

Pour une distribution de Poisson, rappelons que $K(\omega) = \delta(\omega)$. La fonction de corrélation est nulle sauf à l'origine où le pic δ exprime l'autocorrélation des niveaux. Pour les matrices aléatoires, les corrélations à courte portée sont décrites par un « trou de corrélation » qui est plus important dans le cas GUE que dans le cas GOE, ce qui traduit une plus forte rigidité spectrale.

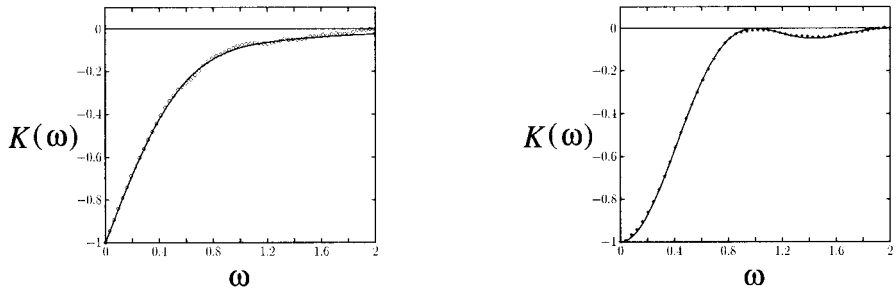


FIG. 10.5 – *Fonction de corrélation à deux points $K(\omega)$ pour le modèle d'Anderson en dimension 3, correspondant à un métal faiblement désordonné ($W/t = 4$), sans (à gauche) ou avec (à droite) champ magnétique. La ligne continue est le résultat pour des matrices aléatoires GOE (à gauche) ou GUE (à droite). La fonction δ à l'origine n'est pas représentée (D. Braun et G. Montambaux,* Phys. Rev. B **52**, *13903 (1995)).*

• Facteur de forme

La figure 10.6 donne le comportement du facteur de forme $\tilde{K}(t)$. Aux temps $t \ll \tau_H$ où $\tau_H = 2\pi/\Delta$ est le temps de Heisenberg, le facteur de forme varie linéairement :

$$\tilde{K}(t) \to \Delta^2 t/(2\pi^2\beta) \quad \text{si} \quad t \ll \tau_H \tag{10.39}$$

et il sature à la valeur constante $\Delta/2\pi$ pour $t \to \infty$. Cette constante est simplement la transformée de Fourier du pic $\delta(\omega)$ qui décrit l'autocorrélation des niveaux. En notant $y = \Delta t/(2\pi)$ et $b(y) = 2\pi\tilde{K}(t)/\Delta$, le facteur de forme s'écrit, pour $\beta = 2$,

$$\begin{cases} b(y) = y & \text{si } y < 1 \\ = 1 & \text{si } y \geq 1 \end{cases} \tag{10.40}$$

tandis que pour $\beta = 1$,

$$\begin{cases} b(y) = 2y - y\ln(1+2y) & \text{si } y < 1 \\ = 2 - y\ln(\frac{2y+1}{2y-1}) & \text{si } y \geq 1 \end{cases} . \tag{10.41}$$

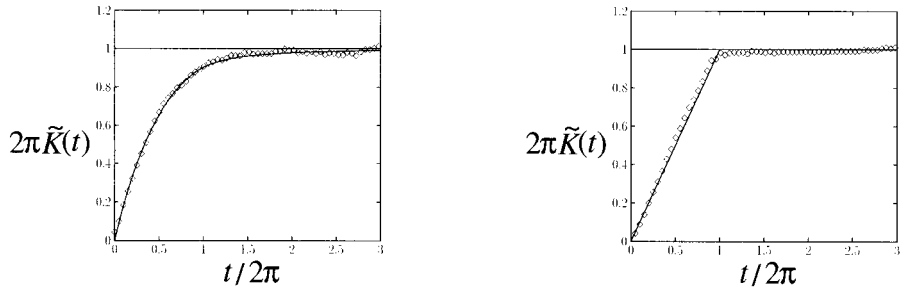


FIG. 10.6 – *Facteur de forme $\tilde{K}(t)$ pour un métal faiblement désordonné ($W/t = 4$), sans (à gauche) ou avec (à droite) champ magnétique, obtenu à partir du modèle d'Anderson. La ligne continue est le résultat des matrices aléatoires. Pour une distribution de Poisson, $\tilde{K}(t) = 1/2\pi$ (D. Braun et G. Montambaux,* Phys. Rev. B **52**, *13903 (1995)).*

• Rigidité spectrale

Le spectre des matrices aléatoires est rigide, c'est-à-dire que la fluctuation (10.9) du nombre de niveaux dans un intervalle d'énergie donné E est petite. Elle se calcule à partir des expressions (10.11), (10.36) et (10.37). L'expression exacte de la variance est compliquée. Pour $E \to 0$, elle tend asymptotiquement vers un comportement poissonnien $\Sigma^2(E) \to E/\Delta$. Elle se simplifie dans la limite de grande énergie $E \gg \Delta$, c'est-à-dire des petits temps $t \ll t_H$. Dans ce cas, la fonction de corrélation à deux points varie comme $-1/\omega^2$. La variance, qui est une intégrale double de cette fonction, varie donc logarithmiquement (fig. 10.7). Plus précisément,

$$\Sigma^2(E) = \frac{2}{\beta\pi^2}\left[\ln\left(2\pi\frac{E}{\Delta}\right) + c_\beta\right] + \mathcal{O}(\Delta/E) \tag{10.42}$$

avec

$$\begin{aligned} c_{\beta=1} &= 1 + e^\gamma - \frac{\pi^2}{8} \\ c_{\beta=2} &= 1 + e^\gamma \\ c_{\beta=4} &= 1 + e^\gamma + \frac{\pi^2}{8} \end{aligned} \tag{10.43}$$

où $\gamma \simeq 0{,}577$ est la constante d'Euler. Ce résultat est une caractérisation spectaculaire de la rigidité du spectre des matrices aléatoires. Si on considère le spectre de plusieurs matrices aléatoires, la fluctuation du nombre de ces niveaux dans un intervalle d'énergie fixé contenant 10^6 niveaux n'est que de 3 ou 4 !

Par ailleurs, on notera ce résultat important que la fluctuation du nombre de niveaux varie en gros comme $1/\beta$ pour $E \gg \Delta$. Ainsi, lorsque l'invariance

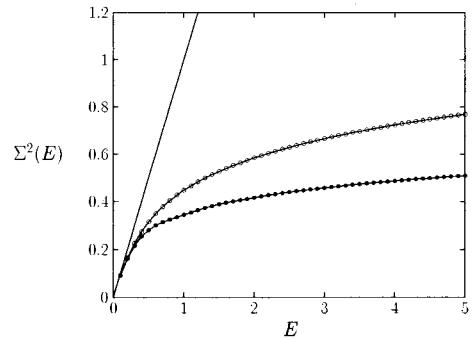


FIG. 10.7 – $\Sigma^2(E)$ *pour un métal faiblement désordonné, avec (points noirs) ou sans (points blancs) champ magnétique, obtenu à partir du modèle d'Anderson* ($W/t = 4$). *Ces résultats sont très bien décrits par la théorie des matrices aléatoires (courbes continues pour* $\beta = 1$ *et* 2*). La ligne droite représente le cas de la distribution de Poisson [245].*

par renversement du sens du temps est brisée, la variance est réduite d'un facteur 2.

• Distribution des écarts entre niveaux

La distribution $P(s)$ des écarts entre niveaux premiers voisins est beaucoup plus difficile à obtenir. Dans la limite $N \to \infty$, il se trouve que l'expression (10.18) obtenue pour des matrices 2×2 est une excellente approximation pour les matrices $N \times N$ (fig. 10.8). Par exemple, la pente à petit s est $\pi/2$ pour les matrices 2×2, elle est égale à $\pi^2/6$ pour $N \to \infty$. La qualité de cette approximation est remarquable. Elle tient au fait que la fonction $P(s)$ mesure des corrélations à courte portée. La séparation entre niveaux premiers voisins est peu sensible à la présence des autres niveaux.

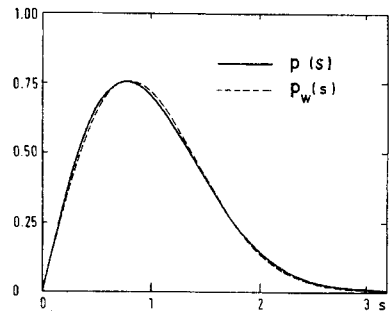


FIG. 10.8 – *Comparaison entre les distributions* $P(s)$ *pour des matrices aléatoires* 2×2 *et* $N \times N$ *dans la limite* $N \to \infty$ *(M. Gaudin,* Nucl. Phys. **25**, *447 (1961)).*

10.5 Corrélations spectrales en régime diffusif

La théorie des matrices aléatoires décrit des propriétés universelles, communes à des systèmes physiques très différents. Elle ne contient aucune information sur les échelles d'énergie caractéristiques de chaque système. La dimensionnalité d'espace n'y joue aucun rôle, alors que nous avons vu au chapitre 7 que dans un métal elle conditionne de façon essentielle les propriétés de transport.

Cherchons donc comment décrire les corrélations spectrales d'un système électronique désordonné. Pour cela, une description microscopique s'avère nécessaire. En effet, l'hamiltonien d'Anderson (2.44) a une structure très différente de celle d'une matrice aléatoire. Il a beaucoup d'éléments de matrice nuls. Seuls les termes diagonaux sont aléatoires, les termes non-diagonaux étant constants. Par ailleurs, nous avons vu qu'à l'approximation de diffusion, il existe une autre échelle d'énergie, l'énergie de Thouless (5.35) qui n'apparaît pas pour les matrices aléatoires. On peut donc s'attendre à ce que les corrélations spectrales présentent des déviations au comportement universel décrit par les matrices aléatoires.

Voyons d'abord qualitativement quelle peut être l'origine de ces déviations. Un hamiltonien aléatoire est ergodique au sens où les fonctions d'onde correspondantes couvrent uniformément l'espace des phases et n'ont pas de structure interne. Ça n'est certainement pas le cas pour un métal, si on considère l'évolution d'un paquet d'onde électronique aux petits temps (c'est-à-dire aux grandes énergies). Dans cette limite, un électron qui diffuse n'a pas eu le temps d'explorer tout l'espace (fig. 10.9). Plus précisément, pour des temps t petits devant le temps caractéristique $\tau_D = L^2/D$, les corrélations spatiales ne peuvent s'étendre sur tout l'échantillon mais seulement sur une taille de l'ordre de $\sqrt{Dt}$. Cela correspond à des énergies E grandes devant l'énergie de Thouless, $E \gg E_c$. Les corrélations spatiales s'étendent sur une échelle $L_E = \sqrt{\hbar D/E} \ll L$. À cette échelle d'énergie, le système de dimensionnalité

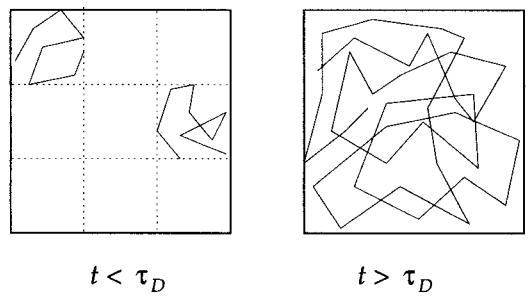


FIG. 10.9 – *Description schématique de la diffusion aux petits temps (régime diffusif) et aux grands temps (régime ergodique). Aux petits temps $t \ll \tau_D$, le système peut être scindé en parties indépendantes non corrélées.*

d peut être vu comme un ensemble de $(L/L_E)^d$ sous systèmes décorrélés et donc indépendants (fig. 10.9). Par conséquent, la variance $\Sigma^2(E)$ est la somme des contributions de ces parties indépendantes. On en déduit ainsi que

$$\Sigma^2(E) \sim (L/L_E)^d \sim (E/E_c)^{d/2} \quad . \tag{10.44}$$

Cet argument heuristique semble indiquer que les corrélations spectrales dans un métal désordonné sont une signature de la diffusion électronique [246]. La description du spectre par la théorie des matrices aléatoires serait donc limitée aux énergies inférieures à l'énergie de Thouless. C'est ce que montre la figure 10.10 où on constate effectivement qu'au-delà d'une certaine énergie, la variance présente des déviations au comportement logarithmique (10.42) des matrices aléatoires.

Nous allons calculer explicitement cette variance dans un métal désordonné, à partir de la fonction de corrélation à deux points de la densité d'états.

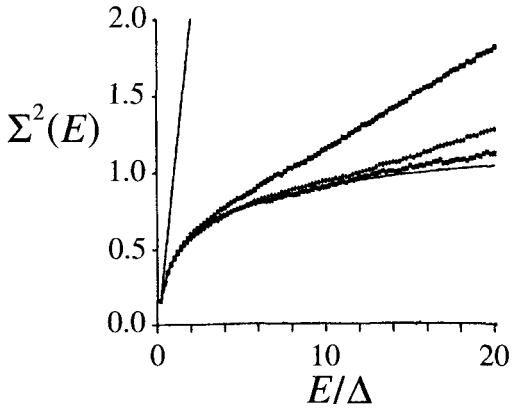


FIG. 10.10 – *Variance de la fluctuation du nombre de niveaux dans un intervalle de largeur E pour le modèle d'Anderson et pour différentes valeurs du paramètre de désordre W. Lorsque W augmente, la déviation au comportement « matrices aléatoires » (courbe inférieure en trait continu) apparaît pour des énergies de plus en plus petites. Ce résultat permet de mettre en évidence qualitativement l'énergie de Thouless E_c et de montrer qu'elle décroît lorsque W augmente.*

10.5.1 Fonction de corrélation à deux points

D'après la relation (3.30), la densité d'états s'écrit

$$\rho(\epsilon) = \frac{i}{2\pi\Omega} \int d\boldsymbol{r} [G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, \epsilon) - G^A(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, \epsilon)] \quad . \tag{10.45}$$

Ainsi la fonction de corrélation (10.4) de la densité d'états s'exprime en fonction du corrélateur $K(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ des fonctions de Green défini par (4.181) [6]

$$K(\omega) = \frac{\Delta^2}{2\pi^2}\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\mathrm{Re}K(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) \quad . \tag{10.46}$$

La fonction $K(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ est à longue portée [7]. Elle est la somme de deux termes, l'un (4.190) est lié au diffuson et l'autre (4.192) est lié au cooperon (fig. 4.27.*d*). On obtient

$$\boxed{K(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) = P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'\omega)P_d(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r},\omega) + P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'\omega)P_c(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r},\omega)} \tag{10.47}$$

Rappelons que $P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ et $P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ sont de la forme (5.3). En utilisant le fait que les fonctions propres $\psi_n(\boldsymbol{r})$ sont normées, l'intégrale de $K(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ sur $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$ donne deux contributions [246] de la forme

$$\frac{\Delta^2}{2\pi^2}\mathrm{Re}\sum_n \frac{1}{(-i\omega + E_n^{(d,c)})^2} \quad , \tag{10.48}$$

où les énergies $E_n^{(d,c)}$ sont les valeurs propres respectives du diffuson et du cooperon. Il est intéressant de comparer cette expression à celle de la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t)$ qui contient deux contributions Z_d et Z_c associées au diffuson et au cooperon et données par (5.5). Leur transformée de Fourier [8] $Z(\omega) = \int_0^\infty Z(t)e^{i\omega t}dt$ s'écrit

$$Z_{d,c}(\omega) = \sum_n \frac{1}{-i\omega + E_n^{(d,c)}} \tag{10.49}$$

ce qui permet d'exprimer $K(\omega)$ en fonction de $Z(\omega) = Z_d(\omega) + Z_c(\omega)$

$$K(\omega) = \frac{\Delta^2}{2\pi^2}\mathrm{Im}\frac{\partial}{\partial\omega}Z(\omega) \quad . \tag{10.50}$$

On en déduit, par transformée de Fourier, le facteur de forme [247]

$$\boxed{\tilde{K}(t) = \frac{\Delta^2}{4\pi^2}|\,t\,|Z(\,|t|\,)} \tag{10.51}$$

[6] La contribution des termes G^RG^R et G^AG^A est négligeable. Voir pour cela la section C4.5.1 et la relation (4.206). Par définition (4.181) de la fonction de corrélation $K(\omega)$, P_0 ne contribue pas.

[7] Il existe une autre contribution à la fonction de corrélation $K(\omega)$ qui provient de la fonction $K^{(1)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)$ calculée dans le complément C4.4. Celle-ci est à courte portée et elle donne une contribution négligeable à $K(\omega)$ (exercice 10.5).

[8] On rappelle que $Z(t)$ est nulle pour $t < 0$.

et pour la variance $\Sigma^2(E)$ déduite de (10.13)

$$\Sigma^2(E) = \frac{2}{\pi^2}\int_0^\infty dt \frac{Z(t)}{t}\sin^2\left(\frac{Et}{2}\right) \tag{10.52}$$

avec $Z(t) = \int_\Omega P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{r}$ et $P = P_d + P_c$. Le facteur de forme $\tilde{K}(t)$ est simplement proportionnel à la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(|t|)$. Le facteur multiplicatif $|t|$ peut se comprendre qualitativement de la façon suivante. Les deux trajectoires de la figure 4.27.*d* dont le produit contribue au facteur de forme, ont des points de départ différents mais suivent la même séquence d'évènements de collisions. Pour cette séquence, qui est parcourue pendant un temps t, les deux points d'origine peuvent être choisis arbitrairement l'un par rapport à l'autre. L'intégration sur $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$ produit donc un élément de volume proportionnel à la longueur $v_F|t|$ de la séquence, d'où le facteur $|t|$ dans la relation (10.51). Cette relation permet ainsi de relier les propriétés spectrales d'un système désordonné aux propriétés de la diffusion classique. On l'a établie dans le cas de l'équation de Schrödinger mais elle se généralise à l'équation d'onde scalaire de Helmholtz. Une relation de ce type a également été établie dans le contexte du comportement quantique des systèmes classiquement chaotiques [248].

Si la cohérence de phase n'est pas préservée [246], il faut introduire un temps de coupure $\tau_\gamma = 1/\gamma$ et remplacer $Z(t)$ par $Z(t)e^{-\gamma t}$ (voir chap. 6) de sorte que la fonction de corrélation $K(\omega)$ est alors donnée par la somme des deux termes :

$$\frac{\Delta^2}{2\pi^2}\mathrm{Re}\sum_n \frac{1}{(-i\omega+\gamma+E_n^{(d,c)})^2} \quad . \tag{10.53}$$

Le calcul diagrammatique est limité aux échelles d'énergie ω grandes devant la distance Δ entre niveaux [249]. La relation (10.53) n'a donc de sens que si $\omega \gg \Delta$ ou $\gamma \gg \Delta$.

Exercice 10.4 : Calcul de la fonction de corrélation en représentation d'impulsion

Dans cette représentation, la fonction de corrélation a la structure presentée sur la figure 10.11 : en négligeant la dépendance en $\boldsymbol{q}$ dans les fonctions de Green, les deux boîtes sont identiques et la fonction de corrélation s'écrit :

$$K(\omega) = \frac{\Delta^2}{2\pi^2\gamma_e^2}|f^{2,1}|^2\mathrm{Re}\sum_{\boldsymbol{q}}\Gamma_\omega^2(\boldsymbol{q})$$

où $f^{2,1}$ décrit la contribution des trois fonctions de Green moyennes à chaque extrémité et est donnée par les relations (3.106, 3.107). En remplaçant $f^{2,1}$ par son expression (table 3.7) et le facteur de structure par la probabilité P_d (relation 4.37), on obtient :

$$K(\omega) = \frac{\Delta^2}{2\pi^2}\mathrm{Re}\sum_{\boldsymbol{q}} P_d^2(\boldsymbol{q},\omega) \quad ,$$

expression à laquelle il faut rajouter la contribution des cooperons. On retrouve ainsi (10.48) dans le cas particulier où les valeurs propres sont indexées par le vecteur d'onde $\boldsymbol{q}$.

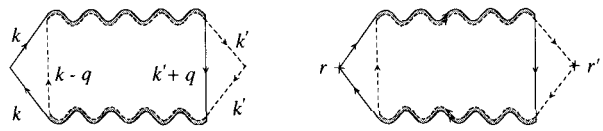


FIG. 10.11 – *Représentation diagrammatique de la fonction de corrélation K dans l'espace des impulsions et dans l'espace réel.*

Exercice 10.5 : Montrer que, dans le régime diffusif, le diagramme de la figure 10.12 est négligeable.

Ce diagramme décrit la contribution à un diffuson (diagramme $K^{(1)}$ de la fig. 4.27.c) à la fonction de corrélation (4.193). On a, d'après les relations (10.46) et (4.193),

$$\begin{aligned} K^{(1)}(\omega) &= \frac{\Delta^2}{2\pi^2}\int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'\mathrm{Re}\ K^{(1)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) \\ &= \frac{\Delta^2}{\pi}\rho_0\Omega\int d\boldsymbol{R}\ g^2(\boldsymbol{R})\ \mathrm{Re}\ [P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)+P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)] \end{aligned} \tag{10.54}$$

avec $\boldsymbol{R}=\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}'$. Puisque $\int d\boldsymbol{R}g^2(\boldsymbol{R})=\tau_e/(\pi\rho_0)$, on obtient

$$\begin{aligned} K^{(1)}(\omega) &= \frac{\Delta^2}{\pi^2}\tau_e\Omega\mathrm{Re}\,[P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)+P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)] \\ &= \frac{\Delta^2}{\pi^2}\tau_e\mathrm{Re}Z(\omega) \end{aligned} \tag{10.55}$$

en posant $Z(\omega)=Z_d(\omega)+Z_c(\omega)$. Finalement, en rajoutant la contribution principale (10.50), on obtient :

$$K(\omega)=\frac{\Delta^2}{\pi^2}\left[\frac{1}{2}\mathrm{Im}\frac{\partial Z(\omega)}{\partial\omega}+\tau_e\mathrm{Re}Z(\omega)\right] \quad . \tag{10.56}$$

Le second terme est plus petit que le premier dans un rapport $\omega\tau_e \ll 1$. Il est donc négligeable dans la limite diffusive.

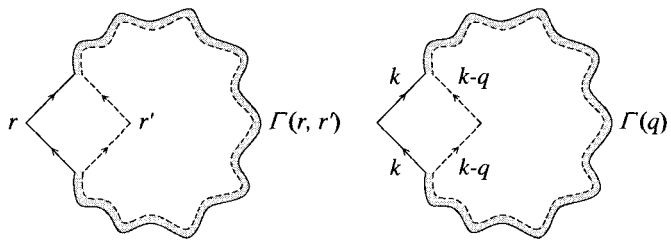


FIG. 10.12 – *Contribution $K^{(1)}(\omega)$ du diagramme à un diffuson à la fonction de corrélation $K(\omega)$, dans l'espace réel et dans l'espace réciproque.*

10.5.2 La limite ergodique

Pour un conducteur de volume L^d isolé et dans la limite où la diffusion est uniforme, c'est-à-dire pour des temps supérieurs au temps de diffusion $\tau_D = L^2/D$, l'exploration de l'espace est uniforme, c'est-à-dire que la probabilité de retour ne dépend plus du temps ni de la position du point de départ (section 5.5.3). Dans cette limite, appelée aussi *régime ergodique*, seul le mode zéro contribue à la probabilité de retour qui est donc indépendante du temps. En présence d'un champ magnétique suffisamment fort le cooperon est nul et seul le diffuson contribue de telle sorte que $Z(t) = Z_d(t) = 1$. Par contre, en l'absence de champ la probabilité est doublée à cause de la contribution du mode zéro du cooperon et $Z(t) = 2$. La probabilité $Z(t)$ peut donc s'écrire généralement sous la forme :

$$Z(t) = \frac{2}{\beta} \tag{10.57}$$

où $\beta = 1$ s'il y a invariance par renversement du sens du temps (cas GOE) et $\beta = 2$ si cette invariance est mise en défaut (cas GUE). Par conséquent, d'après (10.51), le facteur de forme dans la limite ergodique s'écrit :

$$\tilde{K}(t) = \frac{\Delta^2}{2\pi^2\beta}\,|t| \quad . \tag{10.58}$$

On retrouve ainsi, dans la limite $\tau_D \ll t \ll \tau_H$ où $\tau_H = 2\pi/\Delta$ est le temps de Heisenberg, le comportement du facteur de forme des matrices aléatoires. La réduction d'un facteur 2 entre les cas GOE et GUE résulte de la disparition du cooperon lorsque l'invariance par renversement du sens du temps est brisée. Comme on l'a rappelé dans la section précédente, le calcul perturbatif ne décrit pas les échelles d'énergie $\omega \lesssim \Delta$ c'est-à-dire les temps $t \gtrsim t_H$. Ce calcul n'a donc de sens que s'il existe une coupure $\tau_\gamma = 1/\gamma$, liée à des processus de déphasage. On remplacera alors $Z(t)$ par $Z(t)e^{-\gamma t}$ et (10.53) par

$$K(\omega) = \frac{\Delta^2}{\beta\pi^2}\mathrm{Re}\frac{1}{(-i\omega+\gamma)^2} \quad . \tag{10.59}$$

La variance $\Sigma^2(E)$ se déduit de (10.13). On obtient :

$$\Sigma^2(E) = \frac{1}{\beta\pi^2}\ln\left(1+\frac{E^2}{\gamma^2}\right) \quad . \tag{10.60}$$

En l'absence de déphasage, la seule énergie de coupure est la distance Δ entre niveaux. La relation (10.60) reproduit bien le résultat (10.42) des matrices aléatoires, à condition de choisir $\gamma \propto \Delta$.

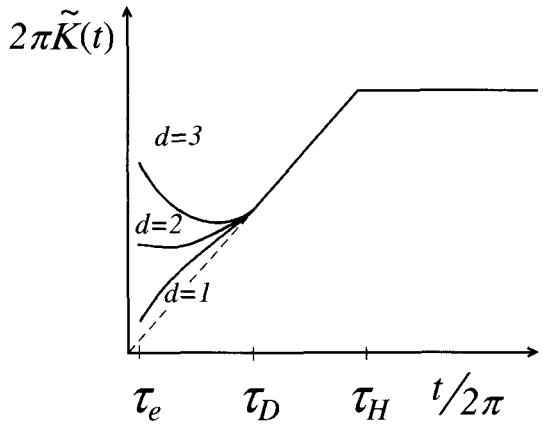


FIG. 10.13 – *Comportement du facteur de forme $\tilde{K}(t)$. On distingue quatre régimes. Pour $t \gg \tau_H$, le facteur de forme sature à une valeur proche de 1 (voir fig. 10.6). Pour $\tau_D < t < \tau_H$, on observe un comportement universel correspondant ici au cas GUE. Pour $\tau_e < t < \tau_D$, le comportement est non universel et correspond au régime diffusif [246]. Dans cette limite, $\tilde{K}(t)$ varie comme $t^{1-d/2}$. La région $t < \tau_e$, non représentée ici, est celle du régime balistique.*

10.5.3 La limite de diffusion libre

Pour des énergies supérieures à E_c, c'est-à-dire pour les temps inférieurs à τ_D, la diffusion est libre, c'est-à-dire que les bords ne jouent pas de rôle [9]. La probabilité de retour pour la diffusion libre (5.22) dépend de la dimensionnalité d et $Z(t) = Z_d + Z_c = \frac{2}{\beta} Z_d$ est donnée par la relation (5.23)

$$Z(t) = \frac{2}{\beta} \frac{\Omega}{(4\pi D t)^{d/2}} \quad . \tag{10.61}$$

De (10.51), on déduit le facteur de forme

$$\tilde{K}(t) = \frac{\Delta^2}{2\pi^2\beta} |t| \frac{\Omega}{(4\pi D|t|)^{d/2}} \propto |t|^{1-d/2} \tag{10.62}$$

représenté sur la figure 10.13 pour les différents régimes de temps. De l'expression (10.13) et en utilisant (15.75), on déduit la variance $\Sigma^2(E)$

$$\Sigma^2(E) = \frac{c_d}{\beta} \left(\frac{E}{E_c} \right)^{d/2} \tag{10.63}$$

avec $c_d^{-1} = d\, 2^{d-1} \pi^{1+d/2} \Gamma(d/2) \sin \pi d/4$ et en particulier, $c_1 = \sqrt{2}/\pi^2$, $c_2 = 1/4\pi^2$ et $c_3 = \sqrt{2}/6\pi^3$. Par dérivation de cette expression et à l'aide de (10.12),

[9] On suppose toujours que $t \gg \tau_e$ afin de rester dans le régime diffusif. Pour la description du régime balistique $t < \tau_e$, consulter la référence [250].

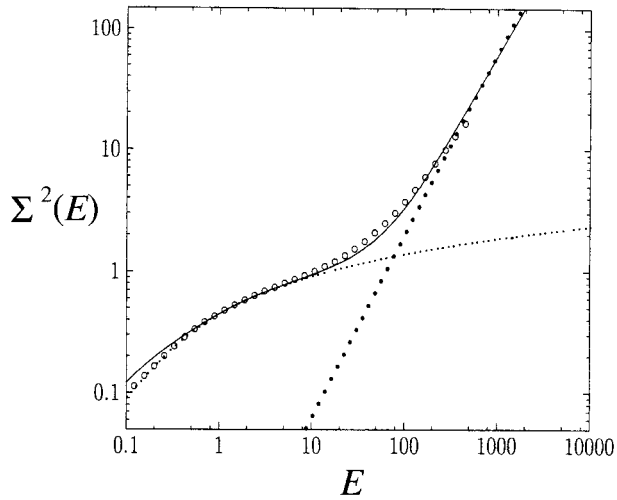


FIG. 10.14 – *Variance $\Sigma^2(E)$ pour un conducteur faiblement désordonné décrit par le modèle d'Anderson et comportant $20 \times 20 \times 20$ sites avec $E_c \simeq 2{,}5\Delta$. Cette figure montre le passage entre le régime ergodique universel décrit par les matrices aléatoires (ligne pointillée) et le régime diffusif en $E^{3/2}$ (cercles pleins). Les déviations au régime universel apparaissent pour $E \simeq E_c$. Le changement de régime est bien décrit par la somme discrète (10.48) sur les modes de diffusion (ligne pleine).*

ou à partir des relations (10.50) et (5.25), on obtient pour la fonction de corrélation $K(\omega)$:

$$K(\omega) = \frac{d}{4}\left(\frac{d}{2} - 1\right)\frac{\Delta^2}{\beta} c_d \frac{1}{\omega^2}\left(\frac{\omega}{E_c}\right)^{d/2} \tag{10.64}$$

dont on déduit que $K(\omega)$ change de signe et s'annule pour $d = 2$. De plus, on voit que dans le régime diffusif la variance est beaucoup plus grande que dans le régime ergodique qui est celui des matrices aléatoires. Cette perte de rigidité, au-delà de l'énergie de Thouless, confirme l'argument simple et la relation (10.44) donnés dans l'introduction de la section 10.5.

Pour la variance $\Sigma^2(E)$, la transition entre le régime ergodique universel (10.60) et le régime diffusif (10.63) est décrite au moyen de la somme discrète sur les modes de diffusion. À partir de (10.53) et (10.11), on obtient

$$\Sigma^2(E) = \frac{1}{\beta\pi^2}\sum_{\boldsymbol{q}} \ln\left[1 + \frac{E^2}{(\gamma + Dq^2)^2}\right] \quad . \tag{10.65}$$

Dans cette relation, la prise en compte des modes de vecteur d'onde $q_i = 2\pi n_i/L$ (obtenus pour des conditions aux limites périodiques) fait apparaître naturellement l'énergie $E_c = D/L^2$. La figure 10.14 montre le passage du régime ergodique au régime diffusif.

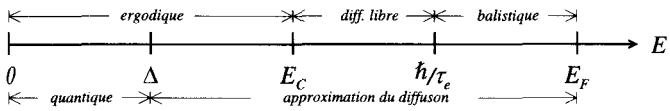


FIG. 10.15 – *Échelles d'énergie caractéristiques correspondant aux différents comportements des corrélations spectrales.*

En conclusion, on voit que les corrélations spectrales sont une signature directe de la dynamique classique des électrons (fig. 10.15). L'intervalle de temps $\tau_e \lesssim t \lesssim \tau_D$ correspond au régime diffusif libre où la probabilité de retour dépend de la dimensionnalité d'espace d. Ce comportement est reflété par la dépendance en loi de puissance de la rigidité spectrale pour l'intervalle d'énergie correspondant $E_c \lesssim E \lesssim 1/\tau_e$. Les temps $t \gtrsim \tau_D$, c'est-à-dire les énergies $E \lesssim E_c$, correspondent au régime universel pour lequel l'exploration de l'espace est ergodique. C'est le régime universel décrit par la théorie des matrices aléatoires. L'approximation du diffuson, pour laquelle les corrections quantiques peuvent être négligées (voir p. 142) reste toutefois limitée aux temps inférieurs au temps de Heisenberg. Elle ne décrit pas les corrélations spectrales pour des énergies inférieures à Δ, ce que permet la théorie des matrices aléatoires ou la méthode supersymétrique décrite dans les références [242–244]. Enfin, pour les temps $t \lesssim \tau_e$, l'approximation du diffuson est valide mais elle correspond au régime balistique et ne peut donc être décrite au moyen de l'équation de diffusion [250]. Dans ce régime la probabilité de retour devient très petite et les fluctuations spectrales pour $E \gtrsim 1/\tau_e$ deviennent très grandes.

Complément C10.1 La transition GOE-GUE

Nous avons étudié les deux cas limites correspondant respectivement à la symétrie GOE ($\beta = 1$) et GUE ($\beta = 2$). Dans le cadre de la théorie des matrices aléatoires, on peut aussi décrire la transition entre ces deux symétries. Pour cela, on reprend l'analyse de la référence [251] et on définit un ensemble de matrices de la forme

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}(S) + i\alpha\mathcal{H}(A) \tag{10.66}$$

où $\mathcal{H}(S)$ et $\mathcal{H}(A)$ sont des matrices aléatoires symétriques et antisymétriques de dimension N et dont les éléments ont une distribution gaussienne de variance v^2 ($\overline{h_{ij}^2} = v^2$ pour $i \neq j$ et $\overline{h_{ii}^2} = 2v^2$) [10]. La valeur $\alpha = 0$ correspond au cas orthogonal, tandis que $\alpha = 1$ décrit le cas unitaire. En augmentant α, les corrélations passent progressivement du cas GOE au cas GUE. Ce passage est piloté par le seul paramètre $\Lambda = \frac{v^2\alpha^2}{\Delta^2}$ où Δ est la distance moyenne entre niveaux. Pour des matrices aléatoires gaussiennes, Δ dépend de la position dans le spectre puisque la densité d'états est un demi-cercle (voir note 5, page 410). Par exemple au milieu du spectre, $\Delta = \pi v/\sqrt{N}$, de sorte que le paramètre Λ qui pilote la transition est $\Lambda = N\alpha^2/\pi$. Donc plus les matrices sont grandes, plus la transition est rapide. On ne donne pas ici l'expression complète du facteur de forme [251] mais dans la limite $t \ll \tau_H$, il est égal à

$$\tilde{K}(t) = \frac{\Delta^2}{4\pi^2}[1 + e^{-4\pi\Lambda\Delta t}] \tag{10.67}$$

qui interpole entre les ensembles GOE et GUE.

Une réalisation physique de cette transition est celle d'un anneau métallique traversé par un flux Aharonov-Bohm. On a montré dans la section 6.4.1 que la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t)$ est donnée, lorsque $\tau_D \ll t \ll \tau_H$ et à petit flux, par (6.61)

$$Z(t, \phi) = 1 + e^{-16\pi^2 E_c \varphi^2 t} \quad . \tag{10.68}$$

De la relation (10.51), on déduit pour le facteur de forme

$$\tilde{K}(t) = \frac{\Delta^2}{4\pi^2}[1 + e^{-16\pi^2 E_c \varphi^2 t}] \quad . \tag{10.69}$$

Ainsi, l'effet d'un flux magnétique sur un conducteur dans le régime ergodique est correctement décrit par la transition GOE-GUE des matrices aléatoires, moyennant la correspondance

$$\frac{N\alpha^2}{\pi} \to 4\pi\frac{E_c\varphi^2}{\Delta} \quad . \tag{10.70}$$

[10] La variance v^2 est reliée au paramètre λ défini dans la section 10.4.2 par $v^2 = 1/(4\lambda)$.

Cette correspondance montre que l'énergie de Thouless qui mesure la corrélation des niveaux d'énergie est reliée à la taille N des matrices aléatoires et que le flux Aharonov-Bohm joue le rôle du paramètre α de brisure de symétrie par renversement du sens du temps. Les fonctions de corrélation spectrales sont des fonctions universelles du paramètre sans dimension $\frac{E_c}{\Delta}\varphi^2$ [245, 252].

Chapitre 11

Fluctuations universelles de conductance

Dans ce chapitre, on rétablit $\hbar$ et on dénote par la lettre s la dégénérescence de spin. On prendra pour la constante de Boltzmann $k_B = 1$.

11.1 Introduction

Dans le régime de diffusion multiple, les effets cohérents liés au cooperon modifient la valeur moyenne de la conductivité électrique (chap. 7) et celle de l'albédo d'un milieu diffusant la lumière (chap. 8). De même, certaines fonctions de corrélation (de la densité d'états et de l'intensité) sont affectées par ces effets cohérents. On voudrait maintenant s'intéresser aux moments d'ordres supérieurs de ces quantités physiques en commençant ici par l'étude des fluctuations de la conductance électrique d'un métal.

Dans le régime de diffusion multiple élastique, la cohérence de phase est maintenue pour chaque réalisation du désordre et donne lieu, en optique, à des figures de tavelures (speckle). L'analyse de ces figures met en évidence l'existence de fluctuations liées à la cohérence de phase qui présentent des comportements nouveaux et inattendus. Leur étude sera l'objet du chapitre 12. De même, dans un système électronique, la conductance dépend de la configuration de désordre et en représente une signature unique, une « *empreinte digitale* ». D'un échantillon à l'autre, ou simplement en faisant varier un paramètre comme le champ magnétique, la conductance présente des fluctuations caractéristiques de cette cohérence de phase et dont l'étude est l'objet ce chapitre.

Afin de situer le problème, considérons un ensemble statistique de conducteurs de taille $L \gg l_e$ et de conductance G. On note $\overline{G}$ la conductance moyenne et on définit la variance $\overline{\delta G^2}$ par $\overline{\delta G^2} = \overline{G^2} - \overline{G}^2$. En supposant que la conductance est déterminée par la configuration des impuretés à l'échelle du libre

parcours moyen élastique l_e, chaque conducteur peut être considéré comme la juxtaposition de $N = (L/l_e)^d$ sous-systèmes indépendants. Par conséquent, on pourrait s'attendre à ce que les fluctuations relatives de conductance $\sqrt{\overline{\delta G^2}}/\overline{G}$ soient de l'ordre de $1/\sqrt{N}$ et varient donc comme

$$\frac{\sqrt{\overline{\delta G^2}}}{\overline{G}} \propto \left(\frac{l_e}{L}\right)^{d/2} \quad . \tag{11.1}$$

La conductance moyenne $\overline{G}$ étant donnée par la loi d'Ohm $\overline{G} = \sigma_0 L^{d-2}$ (voir 7.138), on en déduit pour la variance

$$\overline{\delta G^2} \propto L^{d-4} \quad . \tag{11.2}$$

Ces fluctuations devraient donc en principe dépendre de l'amplitude du désordre, c'est-à-dire de l_e et, pour $d \leq 3$, disparaître dans la limite macroscopique $L \to \infty$.

Or, c'est un tout autre comportement qui est observé expérimentalement. Pour un conducteur où la cohérence de phase est préservée, c'est-à-dire dans le *régime mésoscopique* pour lequel $L < L_\phi$, les fluctuations autour de la valeur moyenne présentent la caractéristique remarquable de ne pas dépendre du libre parcours moyen l_e, c'est-à-dire de l'amplitude du désordre, mais seulement des caractéristiques géométriques du conducteur : on dit que *les fluctuations de conductance sont universelles* [253–258].

Ce comportement apparaît sur la figure 11.1 qui présente des mesures de la conductance G en fonction d'un champ magnétique appliqué pour trois échantillons de natures très différentes et dont les conductances moyennes diffèrent de plusieurs ordres de grandeur. L'amplitude des fluctuations observées reste comparable, elle est indépendante du désordre et de l'ordre de :

$$\overline{\delta G^2} = \overline{G^2} - \overline{G}^2 \sim \left(\frac{e^2}{h}\right)^2 \quad . \tag{11.3}$$

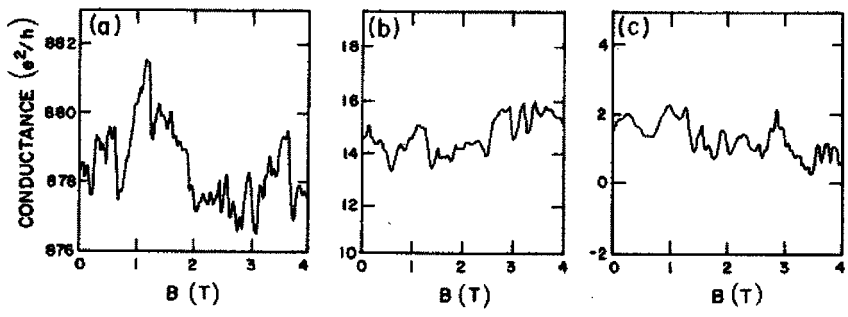


FIG. 11.1 – *Variations apériodiques de la magnétoconductance de trois systèmes différents. a) anneau d'or, b) échantillon de Si-MOSFET, et c) résultat de simulations numériques sur le modèle d'Anderson. La conductance varie de plusieurs ordres de grandeur d'un système à l'autre mais les fluctuations restent de l'ordre de e^2/h [258].*

Les variations apériodiques mesurées en fonction du champ magnétique sur la figure 11.1 sont *reproductibles*. Elles sont la signature de la modification par le champ magnétique des interférences entre trajectoires de diffusion multiple. D'autres paramètres, comme l'énergie de Fermi, peuvent aussi modifier la figure d'interférence (section 11.4).

Afin de décrire ces résultats, il faut caractériser la conductance, non pas uniquement par sa moyenne mais aussi par sa distribution, et plus particulièrement par sa variance $\overline{\delta G^2}$, où la moyenne est effectuée sur les configurations de désordre. On vérifie l'hypothèse ergodique (fig. 11.2) selon laquelle la moyenne de configuration est la même que celle obtenue en faisant varier un paramètre physique comme l'énergie de Fermi ou le champ magnétique.

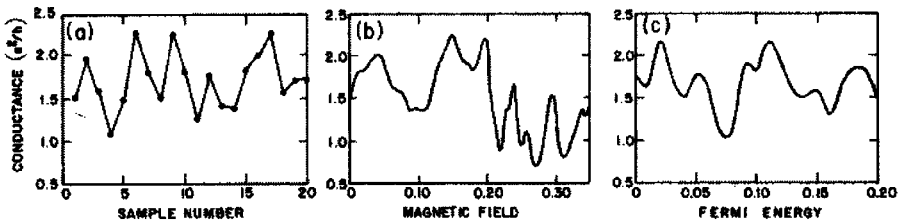


FIG. 11.2 – *Dépendance des fluctuations de conductance en fonction de différents paramètres : a) configurations de désordre, b) champ magnétique appliqué, c) énergie de Fermi. Ces différentes dépendances justifient l'hypothèse ergodique selon laquelle une variation du champ magnétique ou de l'énergie de Fermi équivaut à un changement de réalisation du potentiel de désordre [258].*

Le but de ce chapitre est de comprendre l'origine de l'universalité de ces fluctuations. Une façon heuristique de la concevoir consiste à exprimer la conductance moyenne adimensionnée $g = \overline{G}/(e^2/h)$ d'un système fini comme le rapport de l'énergie de Thouless E_c et de l'espacement moyen Δ entre niveaux d'énergie (relation 7.25), c'est-à-dire comme le nombre de niveaux dans une tranche d'énergie E_c :

$$g \simeq \frac{E_c}{\Delta} = \langle N(E_c) \rangle \tag{11.4}$$

où la moyenne $\langle \cdots \rangle$ sur le spectre des niveaux d'énergie a été définie dans la section 10.2. Cette expression n'a été en principe établie que pour la conductance moyenne. Supposons néanmoins qu'elle puisse être généralisée à la conductance considérée comme variable aléatoire, alors sa fluctuation $\overline{\delta g^2}$ est directement reliée à la fluctuation $\Sigma^2(E_c)$ du nombre de niveaux d'énergie dans une tranche de largeur E_c donnée par (10.9). Or, nous avons vu que le phénomène de rigidité spectrale se traduit par une fluctuation (10.42) extrêmement faible du nombre de niveaux dans une tranche d'énergie donnée, et donc

$$\overline{\delta g^2} \propto \Sigma^2(E_c) \propto \ln(\frac{E_c}{\Delta}) \simeq 1 \quad , \tag{11.5}$$

c'est-à-dire une variance de la conductance de l'ordre de l'unité. Cet argument est très qualitatif et doit être considéré avec précaution. En effet, les fluctuations ne sont universelles que si l'échantillon est parfaitement connecté aux réservoirs de mesure, alors que la fluctuation $\Sigma^2(E)$ du nombre de niveaux est définie pour un système isolé.

Afin d'obtenir les fluctuations de la conductance à partir de la formule de Kubo (7.2) pour la conductivité, il faudra évaluer des termes de la forme :

$$\overline{G^R(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')G^A(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})G^R(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}''')G^A(\boldsymbol{r}''',\boldsymbol{r}'')} \tag{11.6}$$

avec des opérateurs gradient que l'on n'explicite pas pour l'instant. Comme pour le calcul de la probabilité (section 4.4), la moyenne sur le désordre conduit à ne garder dans ce produit que les processus pour lesquels les trajectoires de diffusion multiple sont appariées deux à deux. En effet, des trajectoires non appariées ont des longueurs qui diffèrent de plus de l_e et, dans la limite $kl_e \gg 1$ de faible désordre, le déphasage entre les amplitudes correspondantes est grand de telle sorte que leur contribution se moyenne à zéro.

Mais contrairement à la probabilité où il n'y a que deux trajectoires à apparier, on cherche maintenant les appariements de quatre trajectoires. Ces appariements permettent de construire deux diffusons (ou deux cooperons) reliés aux points $\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}'''$ par l'intermédiaire de fonctions de Green moyennes. On voit ainsi apparaître des diagrammes constitués de fonctions à longue portée, les diffusons ou les cooperons, reliés aux différents points $\boldsymbol{r}$ par des fonctions à courte portée [1], de l'ordre de l_e. Deux contractions sont alors possibles (fig. 11.3) :

- $\boldsymbol{r} \simeq \boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'' \simeq \boldsymbol{r}'''$, (diagramme 11.3.*a*). Ce diagramme a la même structure que celui décrivant les fluctuations de densité d'états (fig. 10.11).
- $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}'', \boldsymbol{r}' = \boldsymbol{r}'''$, (diagramme 11.3.*b*).

On montrera que c'est le comportement à longue portée des diffusons (ou des cooperons) qui est à l'origine du comportement inhabituel des fluctuations.

11.2 Fluctuations de conductivité

Le calcul de la variance de la conductivité à partir de la formule de Kubo s'effectue selon la même méthode que celui de la correction de localisation

[1] Ce raisonnement n'a de sens que pour des collisions isotropes. Comme pour la conductivité moyenne, ce sont les vertex de courant qui imposent l'absence de diffusons directement attachés aux points $\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}'''$. Pour des collisions anisotropes, il faut suivre une procédure similaire à celle employée pour le calcul de la conductivité moyenne (voir les compléments C7.4 et C11.1 ainsi que la section 7.2.3), à savoir « habiller » les vertex de courant par des diffusons. On voit alors apparaître des diagrammes plus complexes avec des diffusons reliés directement aux points $\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}'''$, comme celui présenté sur la figure 11.3.*c*. C'est la présence des vertex de courant qui fait que ces diagrammes ne contribuent pas pour des collisions isotropes.

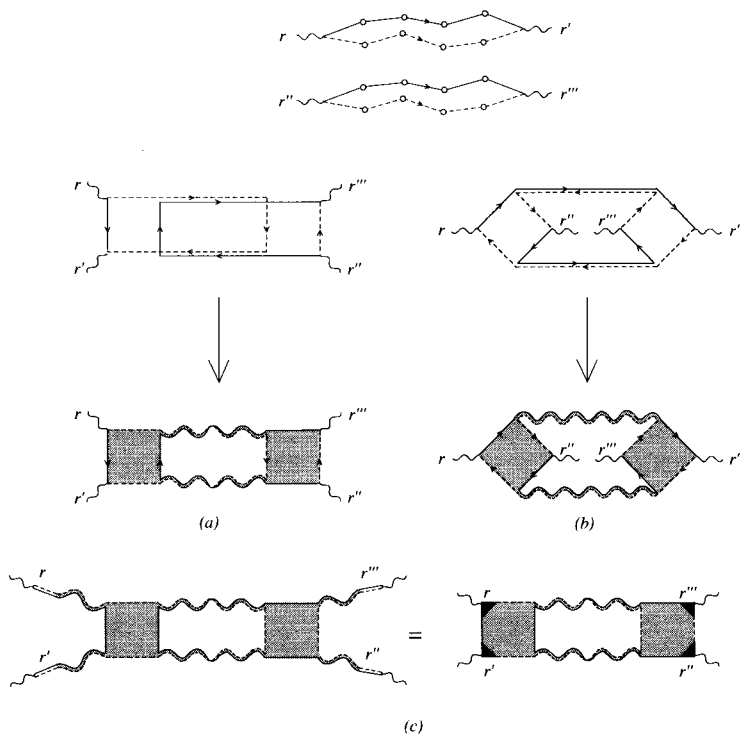


FIG. 11.3 – *Appariements possibles de deux conductivités au moyen de diffusons. On fait apparaître deux contributions de natures différentes. Chacune est constituée de deux diffusons (ou cooperons) reliés par des « boîtes » constituées de fonctions à courte portée, de l'ordre de l_e. Ces boîtes devront être éventuellement habillées par des lignes d'impureté supplémentaires. Les symboles $\sim$ indiquent les vertex de courant associés à la conductivité. Le diagramme (c) pour lequel des diffusons sont directement reliés aux vertex de courant s'annule pour le cas de collisions isotropes.*

faible ou des fluctuations spectrales (chaps. 7 et 10). On considère le cas le plus général des fluctuations des composantes $\sigma_{\alpha\beta}$, non nécessairement diagonales, de la conductivité. On se restreindra cependant au cas où les collisions sur les impuretés sont isotropes, c'est-à-dire que les libres parcours moyen élastique et de transport sont égaux. Le cas des collisions anisotropes est discuté dans le complément C11.1. On note $\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)$ la partie réelle et statique ($\omega = 0$) de la conductivité à l'énergie de Fermi notée ϵ. On s'intéresse à la fonction de corrélation $\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)\delta\sigma_{\gamma\delta}(\epsilon')}$ où les deux conductivités correspondent à des énergies de Fermi différentes ϵ et ϵ' [2].

[2]Insistons sur le fait que l'argument de la conductivité n'est pas la fréquence de mesure, comme dans la définition (7.1), mais l'énergie de Fermi.

• Utilisation de la relation d'Einstein

La relation d'Einstein (7.14) relie la conductivité σ_0 à la constante de diffusion D. Supposons qu'il soit possible de généraliser cette relation à la variable aléatoire $\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)$, c'est-à-dire d'écrire

$$\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon) = se^2\rho(\epsilon)D_{\alpha\beta} \quad . \tag{11.7}$$

Alors le produit $\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)\delta\sigma_{\gamma\delta}(\epsilon')}$, où $\delta\sigma = \sigma - \overline{\sigma}$, contient *a priori* deux contributions liées, d'une part, aux fluctuations de la densité d'états ρ et, d'autre part, aux fluctuations du coefficient de diffusion $D_{\alpha\beta}$ soit

$$\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}\delta\sigma_{\gamma\delta}} = s^2e^4\Big(\ \overline{D}_{\alpha\beta}\ \overline{D}_{\gamma\delta}\ \overline{\delta\rho(\epsilon)\delta\rho(\epsilon')} + \ \overline{\delta D_{\alpha\beta}(\epsilon)\delta D_{\gamma\delta}(\epsilon')}\ \rho_0^2\Big) \tag{11.8}$$

avec $\overline{D}_{\alpha\beta} = D\delta_{\alpha\beta}$ où D est la constante de diffusion moyenne supposée isotrope définie par la relation (4.35) et où $\rho_0 = \overline{\rho}$ est la densité d'états moyenne. On a donc [3]

$$\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}\delta\sigma_{\gamma\delta}} = \sigma_0^2\left(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}\ \frac{\overline{\delta\rho(\epsilon)\delta\rho(\epsilon')}}{\rho_0^2} + \frac{\overline{\delta D_{\alpha\beta}(\epsilon)\delta D_{\gamma\delta}(\epsilon')}}{D^2}\right) \quad . \tag{11.9}$$

On peut ainsi interpréter les fluctuations de conductivité comme provenant, d'une part, des fluctuations de la densité d'états et, d'autre part, des fluctuations de la constante de diffusion. La première contribution ne subsiste que pour les composantes diagonales de la conductivité ($\alpha = \beta$, $\gamma = \delta$). Cette séparation des fluctuations de conductivité en deux contributions d'origines différentes va apparaître dans leur calcul explicite.

• Calcul à partir de la formule de Kubo

La conductivité (7.4) prise à fréquence nulle et avant de moyenner s'écrit, en explicitant la partie réelle du produit G^RG^A,

$$\begin{aligned}\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon) &= \frac{se^2\hbar^3}{4\pi m^2\Omega}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'} k_\alpha k'_\beta\Big[G^R_\epsilon(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')G^A_\epsilon(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}) + G^A_\epsilon(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})G^R_\epsilon(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')\Big] \\ &= \frac{se^2\hbar^3}{4\pi m^2\Omega}\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'}(k_\alpha k'_\beta + k_\beta k'_\alpha)G^R_\epsilon(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')G^A_\epsilon(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}) \quad .\end{aligned} \tag{11.10}$$

On en déduit la fonction de corrélation $\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}\delta\sigma_{\gamma\delta}} = \overline{\sigma_{\alpha\beta}\sigma_{\gamma\delta}} - \overline{\sigma}_{\alpha\beta}\ \overline{\sigma}_{\gamma\delta}$:

$$\begin{aligned}\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)\delta\sigma_{\gamma\delta}(\epsilon')} = &\left(\frac{se^2\hbar^3}{4\pi m^2\Omega}\right)^2\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k}'',\boldsymbol{k}'''}(k_\alpha k'_\beta + k_\beta k'_\alpha)(k''_\gamma k'''_\delta + k''_\delta k'''_\gamma) \\ &\times\overline{G^R_\epsilon(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')G^A_\epsilon(\boldsymbol{k}',\boldsymbol{k})G^R_{\epsilon'}(\boldsymbol{k}'',\boldsymbol{k}''')G^A_{\epsilon'}(\boldsymbol{k}''',\boldsymbol{k}'')}^{\,c}\end{aligned} \tag{11.11}$$

[3] Cette écriture suppose que les fluctuations du coefficient de diffusion et celles de la densité d'états ne sont pas corrélées. Ceci est démontré dans l'exercice 11.3.

où la valeur moyenne $\overline{\cdots}^c$ ne fait intervenir que des diagrammes non factorisables (c'est-à-dire sans le produit des valeurs moyennes). Ces diagrammes sont représentés sur la figure 11.4 et correspondent aux constructions de la figure 11.3, mais dans l'espace réciproque.

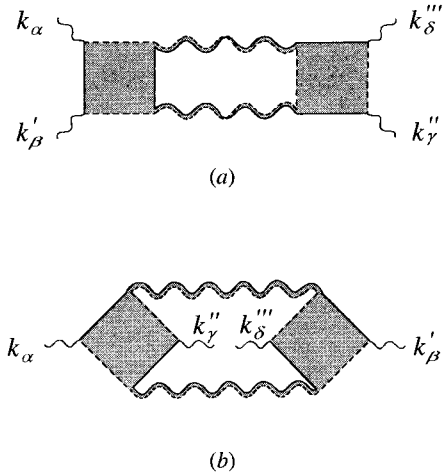


FIG. 11.4 – *Contributions à la fluctuation de conductivité* $\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}\delta\sigma_{\gamma\delta}}$. *Dans cette représentation, les symboles* $\sim$ *représentent les vertex de courant portant une impulsion* $\boldsymbol{k}_i$. *Il existe un diagramme équivalent au diagramme (a) dans lequel on permute les fonctions de Green* $\overline{G}^R$ *(traits pleins) et* $\overline{G}^A$ *(tirets). Les diagrammes représentés font intervenir deux diffusons. En permutant* k'' *et* k''', *on construit des diagrammes similaires avec deux cooperons.*

Les deux diagrammes de la figure 11.4 sont de nature différente. 11.4.*a* décrit les fluctuations de densité d'états tandis que 11.4.*b* décrit celles du coefficient de diffusion [257].

11.2.1 Fluctuations reliées à la densité d'états

Considérons d'abord le diagramme 11.4.*a*. Dans les deux boîtes, il apparaît des fonctions de Green moyennes de la forme $\overline{G_\epsilon(\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}')} = \overline{G}_\epsilon(\boldsymbol{k})\delta_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}$. Par conséquent, en omettant pour l'instant les vertex de courant, il reste dans (11.11) un terme de la forme

$$\sum_{\boldsymbol{k},\boldsymbol{k}'',\boldsymbol{q}} \overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^R_{\epsilon'}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q})\overline{G}^{A^2}_\epsilon(\boldsymbol{k})\Gamma^2_{\epsilon-\epsilon'}(\boldsymbol{q})\overline{G}^{R^2}_{\epsilon'}(\boldsymbol{k}'')\overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{k}''+\boldsymbol{q})\overline{G}^A_{\epsilon'}(\boldsymbol{k}'') \quad (11.12)$$

qui correspond à la figure 11.5 sur laquelle sont représentées l'énergie et l'impulsion associées à chaque fonction de Green. $\Gamma_{\epsilon-\epsilon'}$ est le facteur de structure associé au diffuson. À l'approximation de diffusion (section 4.5), on néglige

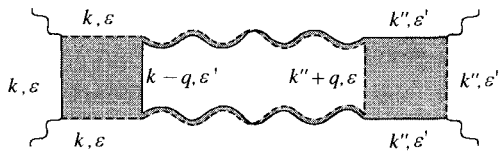


FIG. 11.5 – *Diagrammme de fluctuation de conductance où sont représentées l'impulsion et l'énergie associées à chaque fonction de Green.*

dans les fonctions de Green moyennes la dépendance en $\boldsymbol{q}$, ainsi que la différence d'énergie $\epsilon - \epsilon'$.

L'expression (11.12) se factorise alors comme le produit d'une contribution de longue portée liée aux deux diffusons et de deux contributions identiques de courte portée décrites par les boîtes. On obtient ainsi :

$$\sum_{\boldsymbol{q}} \Gamma^2_{\epsilon-\epsilon'}(\boldsymbol{q}) \left(\sum_{\boldsymbol{k}} \left[\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k}) \overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{k}) \right]^2 \right)^2 \quad . \tag{11.13}$$

Cette factorisation n'a de sens que dans le régime diffusif, pour lequel les variations spatiales rapides des fonctions de Green moyennes sont découplées des variations lentes des diffusons. Par ailleurs, en habillant chaque boîte par une ligne d'impureté supplémentaire, on engendre des contributions du même ordre (section C4.2.1). Il existe ainsi *a priori* deux autres contributions représentées sur la figure 11.6.

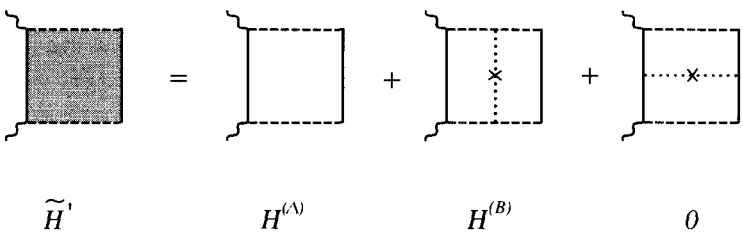


FIG. 11.6 – *Les boîtes du diagramme (a) de la figure 11.4 peuvent* a priori *être habillées par une ou plusieurs lignes d'impuretés supplémentaires. Le troisième diagramme est nul car la ligne d'impureté coupe deux vextex de courant (exercice 11.1).*

Il reste à dénombrer les diagrammes de la forme 11.4.a. Rappelons d'abord que l'intégration angulaire sur les vecteurs d'onde conduit à remplacer les termes de la forme $k_\alpha k_\beta$ par la moyenne $\frac{k_F^2}{d}\delta_{\alpha\beta}$ (voir chap. 7). Ainsi les termes non nuls sont ceux pour lesquels $\alpha = \beta$ et $\gamma = \delta$. Dans l'expression (11.11), le produit des vecteurs d'onde est alors égal à $4(k_F^2/d)^2\,\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}$. De plus, la somme du diagramme 11.4.a et de son complexe conjugué revient à prendre deux fois sa partie réelle. La contribution à la fluctuation de conductivité

s'écrit donc :

$$\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)\delta\sigma_{\gamma\delta}(\epsilon')}^{(a)} = 8\ \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}\left(\frac{se^2\hbar v_F^2}{4\pi d\Omega}\right)^2 \tilde{H}'^2 \sum_{\boldsymbol{q}} \mathrm{Re}\left[\Gamma^2_{\epsilon-\epsilon'}(\boldsymbol{q})\ \right] \quad . \tag{11.14}$$

La quantité $\tilde{H}'$ est la somme des termes de la figure 11.6, à laquelle ne contribuent que $H^{(A)}$ et $H^{(B)}$ donnés par les tables (3.7) et (3.8) [4] :

$$H^{(A)} = \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}}\left[\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^A_\epsilon(\boldsymbol{k})\right]^2 = \frac{1}{\gamma_e}f^{2,2} = \frac{4\pi\rho_0\tau_e^3}{\hbar^3} \tag{11.15}$$

et

$$\begin{aligned} H^{(B)} &= \frac{\gamma_e}{\Omega^2}\sum_{\boldsymbol{k}}\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^{A^2}_\epsilon(\boldsymbol{k})\sum_{\boldsymbol{k}'}\overline{G}^{A^2}_\epsilon(\boldsymbol{k}')\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k}') \\ &= \frac{1}{\gamma_e}\left(f^{1,2}\right)^2 = -\frac{2\pi\rho_0\tau_e^3}{\hbar^3} = -\frac{H^{(A)}}{2} \quad . \end{aligned} \tag{11.16}$$

Ainsi :

$$\tilde{H}' = H^{(A)} + H^{(B)} = \frac{H^{(A)}}{2} = \frac{2\pi\rho_0\tau_e^3}{\hbar^3} \quad . \tag{11.17}$$

Finalement, en insérant (11.17) dans (11.14), on obtient :

$$\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}\delta\sigma_{\gamma\delta}}^{(a)} = 8\left(\frac{se^2v_F^2\rho_0\tau_e^3}{2d\hbar^2\Omega}\right)^2 \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}\sum_{\boldsymbol{q}}\mathrm{Re}\left[\Gamma^2_{\epsilon-\epsilon'}(\boldsymbol{q})\ \right] \quad . \tag{11.18}$$

De la relation (4.88) entre $\Gamma_\omega(\boldsymbol{q})$ et $P_d(\boldsymbol{q},\omega)$,

$$\Gamma_\omega(\boldsymbol{q}) = \frac{\hbar}{2\pi\rho_0\tau_e^2}P_d(\boldsymbol{q},\omega) \quad , \tag{11.19}$$

on déduit :

$$\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)\delta\sigma_{\gamma\delta}(\epsilon')}^{(a)} = 2\ \delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}\left(\frac{se^2D}{\hbar\Omega}\right)^2\sum_{\boldsymbol{q}}\mathrm{Re}[P_d^2(\boldsymbol{q},\omega)] \tag{11.20}$$

où $\omega = \epsilon - \epsilon'$ est la différence des énergies de Fermi (et non pas la fréquence de mesure de la conductivité, qui ici est nulle puisqu'il s'agit de la conductivité statique). Cette relation peut s'exprimer simplement à partir de la fonction de corrélation (10.48) de la densité d'états. En utilisant la formule d'Einstein (7.14), $\sigma_0 = se^2D\rho_0$, ainsi que la relation (10.5) $\Delta\rho_0\Omega = 1$, on obtient

$$\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)\delta\sigma_{\gamma\delta}(\epsilon')}^{(a)} = \sigma_0^2\,\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}\ K(\epsilon-\epsilon') \quad . \tag{11.21}$$

[4] Dans le calcul de ces diagrammes, les dépendances en ϵ et ϵ' peuvent être négligées dans la limite $|\epsilon-\epsilon'|\tau_e \ll 1$. On utilise les expressions données dans la table 3.7 en rétablissant $\hbar$.

Ce résultat correspond au premier terme de la relation (11.9) et la justifie *a posteriori*.

Le diagramme 11.4.*a* est constitué de deux diffusons. En permutant les variables $\boldsymbol{k}''$ et $\boldsymbol{k}'''$, on construit des diagrammes identiques mais où les diffusons sont remplacés par des cooperons, avec le facteur de structure Γ' (relation 4.43). En substituant les probabilités P_d et P_c correspondantes [5], on obtient finalement :

$$\boxed{\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)\delta\sigma_{\gamma\delta}(\epsilon')}^{(a)} = 2\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}\left(\frac{se^2D}{\hbar\Omega}\right)^2\sum_{\boldsymbol{q}}\mathrm{Re}\Big[P_d^2(\boldsymbol{q},\omega)+P_c^2(\boldsymbol{q},\omega)\Big]} \tag{11.22}$$

avec $\omega = \epsilon - \epsilon'$.

Exercice 11.1 : Montrer que le troisième diagramme de la figure 11.6 est nul.

Ce diagramme est égal à

$$\frac{1}{2\pi\rho_0\tau_e\Omega^2}\sum_{\boldsymbol{k}\boldsymbol{k}'}k_\alpha k'_\alpha\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^{A\,2}_\epsilon(\boldsymbol{k})\overline{G}^{A\,2}_\epsilon(\boldsymbol{k}')\overline{G}^R_\epsilon(\boldsymbol{k}') \quad . \tag{11.23}$$

En sommant sur les vecteurs d'onde, on fait apparaître la moyenne angulaire du produit $k_\alpha k'_\alpha$ qui est nulle.

11.2.2 Fluctuations reliées au coefficient de diffusion

Considérons maintenant la contribution du diagramme 11.4.*b*. Comme pour le diagramme *(a)*, l'intégration angulaire revient à remplacer les termes de la forme $k_\alpha k_\gamma$ par $\frac{k_F^2}{d}\delta_{\alpha\gamma}$. Ainsi on obtient une contribution finie lorsque $\alpha = \gamma$, $\beta = \delta$ ou $\alpha = \delta$, $\beta = \gamma$. Le produit des vecteurs d'onde est égal à $2(k_F^2/d)^2(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}+\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma})$, ce qui permet d'écrire la contribution des diffusons correspondant à 11.4.*b* :

$$\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)\delta\sigma_{\gamma\delta}(\epsilon')}^{(b)} = 2\left(\frac{se^2\hbar v_F^2}{4\pi d\Omega}\right)^2(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}+\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma})\tilde{H}^2\sum_{\boldsymbol{q}}|\Gamma_\omega(\boldsymbol{q})|^2 \quad . \tag{11.24}$$

La boîte $\tilde{H}$ est représentée sur la figure 11.7. Les contributions dues à des lignes d'impuretés supplémentaires sont nulles à cause des vertex de courant, donc $\tilde{H} = H^{(A)}$ (exercice 11.1).

---

[5] Voir remarque p. 131 à propos de la nécessité d'introduire $P_c = \frac{2\pi\rho_0\tau_e^2}{\hbar}\Gamma'_\omega(\boldsymbol{q})$.

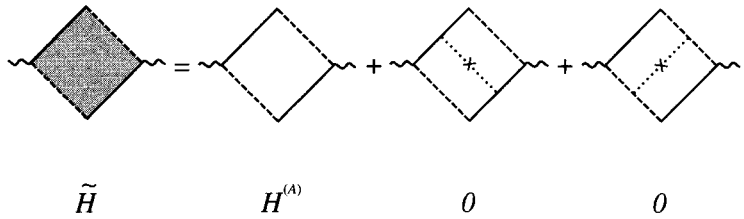


FIG. 11.7 – *Des trois diagrammes définissant la boîte de Hikami du diagramme 11.4.b, les deux ayant une ligne d'impureté supplémentaire sont nuls du fait de la position des vertex de courant : à cause de la ligne d'impureté, les deux impulsions entrantes sont décorrélées et leur valeur moyenne est nulle (voir exercice 11.1).*

On vérifie que contrairement au diagramme 11.4.a, les deux diffusons sont pris à des fréquences opposées $\epsilon-\epsilon'$ et $\epsilon'-\epsilon$. Ils sont donc complexes conjugués, ce qui explique le module $|\Gamma_\omega(\boldsymbol{q})|^2$ dans la relation (11.24). Ainsi, contrairement à (11.20), cette contribution ne peut pas s'écrire à partir de la fonction de corrélation de la densité d'états. En rajoutant la contribution des cooperons, on obtient finalement :

$$\boxed{\begin{aligned}\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)\delta\sigma_{\gamma\delta}(\epsilon')}^{(b)} &= 2(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}+\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma})\left(\frac{se^2D}{h\Omega}\right)^2 \\ &\quad\times\sum_{\boldsymbol{q}}\left(|P_d(\boldsymbol{q},\omega)|^2+|P_c(\boldsymbol{q},\omega)|^2\right)\end{aligned}} \tag{11.25}$$

11.3 Fluctuations universelles de conductance

La fluctuation totale de conductivité est donnée par la somme des contributions (11.22) et (11.25) :

$$\begin{aligned}\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)\delta\sigma_{\gamma\delta}(\epsilon')} = 2\left(\frac{se^2D}{h\Omega}\right)^2\sum_{\boldsymbol{q}}\Big(&\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}\mathrm{Re}[P_d^2(\boldsymbol{q},\omega)+P_c^2(\boldsymbol{q},\omega)] \\ &+(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}+\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma})(|P_d(\boldsymbol{q},\omega)|^2+|P_c(\boldsymbol{q},\omega)|^2)\Big)\end{aligned} \tag{11.26}$$

que l'on peut récrire sous la forme

$$\boxed{\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}(\epsilon)\delta\sigma_{\gamma\delta}(\epsilon')} = \sigma_0^2\left[\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta}K_\rho(\epsilon-\epsilon')+(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta}+\delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma})K_D(\epsilon-\epsilon')\right]} \tag{11.27}$$

où K_ρ et K_D sont respectivement les fluctuations relatives de la densité d'états (notée K dans le chapitre 10) et du coefficient de diffusion :

$$K_\rho(\omega) = \frac{\overline{\delta\rho(\epsilon)\delta\rho(\epsilon')}}{\rho_0^2} = \frac{\Delta^2}{2\pi^2}\sum_{\boldsymbol{q}} \mathrm{Re}\left[P_d(\boldsymbol{q},\omega)^2 + P_c(\boldsymbol{q},\omega)^2\right]$$

$$K_D(\omega) = \frac{\overline{\delta D(\epsilon)\delta D(\epsilon')}}{D^2} = \frac{\Delta^2}{2\pi^2}\sum_{\boldsymbol{q}} \left(|P_d(\boldsymbol{q},\omega)|^2 + |P_c(\boldsymbol{q},\omega)|^2\right) \quad (11.28)$$

avec $\omega = \epsilon - \epsilon'$.

Afin d'obtenir la conductance d'un conducteur cubique de taille L en dimension d, on utilise la loi d'Ohm (7.138), $G = \sigma L^{d-2}$ qui relie la conductance G à la conductivité σ. De plus, on considère maintenant les deux cas suivants : celui où le système est invariant par renversement du sens du temps (le diffuson et le cooperon doivent alors être tous deux pris en compte) et celui où cette invariance est brisée (par exemple en présence d'un champ magnétique) auquel cas le cooperon disparaît (voir section 6.3). On peut regrouper ces deux cas en écrivant pour la variance de la conductance l'expression :

$$\boxed{\overline{\delta G_{\alpha\beta}\delta G_{\gamma\delta}} = G_\rho^2\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + G_D^2(\delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma})} \quad (11.29)$$

avec

$$G_\rho^2 = \frac{4}{\beta}\left(\frac{se^2D}{hL^2}\right)^2 \sum_{\boldsymbol{q}} \mathrm{Re}P_d^2(\boldsymbol{q})$$

$$G_D^2 = \frac{4}{\beta}\left(\frac{se^2D}{hL^2}\right)^2 \sum_{\boldsymbol{q}} |P_d(\boldsymbol{q})|^2 \quad (11.30)$$

où $\beta = 1$ si le système est invariant par renversement du sens du temps et $\beta = 2$ dans le cas contraire. À température nulle, les deux conductances sont mesurées à la même énergie de Fermi, soit $\epsilon = \epsilon' = \epsilon_F$ c'est-à-dire $\omega = 0$ dans les expressions de P_d et de P_c. On obtient, pour $\alpha = \beta = \gamma = \delta$:

$$\overline{\delta G^2} = \frac{12s^2}{\beta}\left(\frac{e^2}{h}\right)^2 \sum_{\boldsymbol{q}} \left(\frac{1}{q^2L^2}\right)^2 \quad . \quad (11.31)$$

Cette relation montre que $\overline{\delta G^2}$ ne dépend plus de l_e, c'est-à-dire du désordre : on dit que les fluctuations de conductance sont *universelles*, en ce sens qu'elles ne dépendent que de la géométrie de l'échantillon. Il est intéressant de revenir sur l'origine de cette universalité. Elle est due à la simplification des constantes

de diffusion provenant du produit des conductivités au numérateur et celles qui apparaissent au dénominateur du fait de la présence des deux diffusons [6].

Supposons maintenant le conducteur connecté à des fils de mesure dans la direction Ox et isolé dans les autres directions. Les fils jouent le rôle de réservoir et les conditions aux limites sont celles de bords absorbants (section 5.5.2), c'est-à-dire que la probabilité $P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ s'annule sur les bords. Les modes de diffusion dans cette direction sont donc quantifiés sous la forme $q_i = n_i\pi/L$ où $n_i = 1, 2, 3$, etc. Dans les autres directions, les conditions aux limites sont celles de bords durs et le mode $n = 0$ est inclus (voir section 5.5.3). Ainsi,

$$\overline{\delta G^2} = \frac{12s^2}{\beta\pi^4}\left(\frac{e^2}{h}\right)^2 \sum_{n_x\neq 0, n_y, n_z} \frac{1}{(n_x^2 + n_y^2 + n_z^2)^2} \quad . \tag{11.32}$$

Pour un échantillon quasi-unidimensionnel (c'est-à-dire unidimensionnel au sens de la diffusion) il ne subsiste dans l'expression (11.32) qu'une seule somme égale à $\pi^4/90$, soit

$$\boxed{\overline{\delta G^2} = \frac{2}{15}\frac{s^2}{\beta}\left(\frac{e^2}{h}\right)^2} \tag{11.33}$$

Plus généralement, pour la géométrie d'un cube de côté L, on obtient en dimension d

$$\overline{\delta G_{\alpha\beta}\delta G_{\gamma\delta}} = \frac{s^2}{\beta}\left(\frac{e^2}{h}\right)^2 \frac{4}{\pi^4} b_d\Big(\delta_{\alpha\beta}\delta_{\gamma\delta} + \delta_{\alpha\gamma}\delta_{\beta\delta} + \delta_{\alpha\delta}\delta_{\beta\gamma}\Big) \tag{11.34}$$

où $b_1 = \pi^4/90$, $b_2 \simeq 1{,}51$ et $b_3 \simeq 2{,}52$.

On peut se poser la question de la généralisation de ce résultat au cas où les collisions sur les impuretés sont anisotropes. Dans le déroulement du calcul précédent, on constate qu'il faut remplacer, dans l'expression de la probabilité P_d, la constante de diffusion D par D^* (voir complément C4.3), les autres termes restant inchangés puisqu'ils proviennent des boîtes donnant les contributions à courte portée. On devrait donc obtenir pour $\overline{\delta G^2}$ une expression qui dépendrait du rapport D/D^* et qui ne serait donc plus universelle. Or, ce n'est pas le cas. Pour s'en convaincre, il suffit de revenir à la relation (11.9) où seul le coefficient D^* doit apparaître, ce qui implique l'universalité. Afin de retrouver cette universalité dans le calcul diagrammatique, il faut considérer des diagrammes supplémentaires, dont un exemple est présenté sur la

[6] La correction de localisation faible à la conductance est aussi le rapport de la conductance par un pôle de diffusion. La constante de diffusion doit donc disparaître et la correction de localisation faible présente *a priori* un caractère universel si $L \ll L_\phi$. Mais du fait de la divergence du pôle de diffusion, pour $d \leq 2$, on est amené à introduire une coupure qui dépend de l_e (voir les relations 7.56 et l'exercice 11.8).

figure 11.3.c, qui sont nuls dans le cas isotrope. Ce point est repris dans le complément C11.1.

Notons finalement que, dans ce chapitre, on ne considère que la variance de la distribution des fluctuations de conductance. Dans la section 12.7, on discute pourquoi cette distribution est gaussienne dans la limite $g \gg 1$.

Exercice 11.2 : Montrer qu'à l'approximation de diffusion, les fluctuations de densité d'états ne sont pas corrélées aux fluctuations du coefficient de diffusion [257], c'est-à-dire

$$\overline{\delta D_{\alpha\beta}\delta\rho} = 0 \quad .$$

Pour cela, on montrera d'abord que

$$\overline{\delta\sigma_{\alpha\beta}\delta\rho} = \frac{\overline{\sigma}_{\alpha\beta}}{\rho_0}\,\overline{\delta\rho^2} \quad .$$

On justifie ainsi la relation (11.9).

Exercice 11.3 : Montrer que les transformées de Fourier des fonctions de corrélation $K_\rho(\omega)$ et $K_D(\omega)$ introduites dans la relation (11.28) s'écrivent :

$$\tilde{K}_D(t) = \frac{\Delta^2}{2\beta\pi^2}\int_{|t|}^{\infty} Z(t')dt'$$

et

$$\tilde{K}_\rho(t) = \frac{\Delta^2}{2\beta\pi^2}\,|t|Z(|t|)$$

où $Z(t) = \int P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},t)d\boldsymbol{r}$ est la probabilité intégrée de retour à l'origine (5.5). On remarque pour cela que $\frac{\partial}{\partial\omega}P(\omega) = iP^2(\omega)$ (voir aussi la relation 10.51).

En déduire que la fluctuation de conductivité (11.27) avec $\alpha = \beta = \delta = \gamma$ se met sous la forme

$$\overline{\delta\sigma^2}(\omega) = \sigma_0^2\int_{-\infty}^{\infty}[\tilde{K}_\rho(t) + 2\tilde{K}_D(t)]e^{i\omega t}dt \tag{11.35}$$

avec $\omega = \epsilon - \epsilon'$. Montrer que :

$$\overline{\delta\sigma^2}(\omega) = \frac{\sigma_0^2\Delta^2}{\beta\pi^2\hbar^2}\int_0^{\infty} tZ(t)\left(\cos\omega t + 2\frac{\sin\omega t}{\omega t}\right)dt \quad . \tag{11.36}$$

Dans le cas $\epsilon = \epsilon'$:

$$\overline{\delta\sigma^2} = \frac{3}{\beta}\frac{\sigma_0^2\Delta^2}{\pi^2\hbar^2}\int_0^{\infty} tZ(t)dt \quad . \tag{11.37}$$

11.4 Effet d'un paramètre extérieur

Pour une réalisation donnée du désordre, la mesure de la conductance est une signature de la phase relative des trajectoires de diffusion multiple. Cette phase peut être modifiée par la variation d'un paramètre extérieur X, comme l'énergie de Fermi ou le champ magnétique, qui permettent de mettre en évidence ces fluctuations. Dans les sections qui suivent, on étudie la fonction de corrélation $\overline{\delta G(X)\delta G(X')}$.

11.4.1 Dépendance en énergie

La phase relative de deux amplitudes associées à des trajectoires identiques de collisions multiples, mais prises à des énergies différentes, ϵ et ϵ' dépend de la différence $\omega = \epsilon - \epsilon'$. Ainsi deux trajectoires ayant évolué pendant un temps t sont déphasées d'une quantité $\delta\varphi = \omega t$. Le temps caractéristique associé aux trajectoires diffusives est le temps de Thouless $\tau_D = L^2/D$, de sorte que la différence de phase typique associée à deux trajectoires qui ont traversé l'échantillon est de l'ordre de $\delta\varphi \simeq \omega/E_c$. On s'attend à ce que les corrélations disparaissent lorsque la phase $\delta\varphi$ devient plus grande que l'unité, c'est-à-dire pour $\omega \simeq E_c$.

La dépendance en énergie de la fonction de corrélation de la conductivité $\overline{\delta\sigma(\epsilon)\delta\sigma(\epsilon-\omega)}$ est donnée par l'expression (11.27). La variance de la conductance $\overline{\delta G^2}(\omega) = \overline{\delta G(\epsilon)\delta G(\epsilon-\omega)}$ s'obtient donc à partir de (11.29, 11.30) en introduisant le pôle de diffusion à fréquence finie $Dq^2 \longrightarrow -i\omega + Dq^2$. On obtient ainsi :

$$\overline{\delta G^2}(\omega) = \frac{4s^2}{\beta}\left(\frac{e^2}{h}\right)^2 \sum_{\boldsymbol{q}} \left[\mathrm{Re}\frac{1}{(q^2L^2 - i\frac{\omega}{E_c})^2} + \frac{2}{|q^2L^2 - i\frac{\omega}{E_c}|^2}\right] \quad . \tag{11.38}$$

On vérifie ainsi que les corrélations de conductance mesurées à des énergies différentes décroissent sur une échelle donnée par l'énergie de Thouless E_c. À grande énergie ω, la somme (11.38) peut être remplacée par une intégrale, ce qui conduit à la décroissance algébrique :

$$\overline{\delta G^2}(\omega) \propto \left(\frac{E_c}{\omega}\right)^{(4-d)/2} \quad . \tag{11.39}$$

Dans les structures bidimensionnelles de type MOSFET, il est possible de modifier l'énergie de Fermi en appliquant une tension de grille. Si on applique une tension de l'ordre de l'énergie de Thouless E_c, on décorrèle les « empreintes digitales » que constituent les mesures de conductance à une énergie de Fermi donnée.

11.4.2 Dépendance en température

La sensibilité des fluctuations de conductance à une variation de l'énergie de Fermi doit se traduire par un comportement de même nature en fonction de la température. La dépendance en température de la conductance se déduit de celle en énergie (relation 7.124) :

$$G(T) = -\int \frac{\partial f}{\partial \epsilon} G(\epsilon) d\epsilon \quad . \tag{11.40}$$

La conductance moyenne ne dépend pas de l'énergie et ne dépend donc pas explicitement de la température [7]. Par contre la variance $\overline{\delta G^2}(T)$ s'obtient à partir de la fonction corrélation $\overline{\delta G(\epsilon)\delta G(\epsilon')}$. Elle se met sous la forme

$$\overline{\delta G^2}(T) = \int\int \frac{\partial f}{\partial \epsilon}\frac{\partial f}{\partial \epsilon'}\,\overline{\delta G^2}(\epsilon-\epsilon')d\epsilon d\epsilon' \quad .$$

De la relation (15.102), on déduit

$$\overline{\delta G^2}(T) = \int_{-\infty}^{\infty} d\left(\frac{\omega}{2T}\right) F\left(\frac{\omega}{2T}\right)\overline{\delta G^2}(\omega) \quad ,$$

où $F(x) = (x\coth x - 1)/\sinh^2 x$. Ainsi les deux contributions aux fluctuations de conductance ont des comportements en température différents :

$$G_\rho^2(T) = \frac{4s^2}{\beta}\left(\frac{e^2E_c}{h}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2T}F\left(\frac{\omega}{2T}\right)\sum_{\boldsymbol{q}}\mathrm{Re}P_d^2(\boldsymbol{q},\omega)$$

$$G_D^2(T) = \frac{4s^2}{\beta}\left(\frac{e^2E_c}{h}\right)^2 \int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2T}F\left(\frac{\omega}{2T}\right)\sum_{\boldsymbol{q}}|P_d(\boldsymbol{q},\omega)|^2 \quad . \tag{11.41}$$

De (11.38), on déduit que l'échelle caractéristique de température est aussi donnée par l'énergie de Thouless E_c. Dans la limite de haute température $T \gg E_c$, on obtient une décroissance algébrique, qui découle directement de la dépendance en énergie (11.39) obtenue lorsque $\omega \gg E_c$. Il convient toutefois d'être prudent. La fonction thermique $F(\omega/2T)$ introduit une coupure supérieure à des énergies de l'ordre de T et les relations (11.41) impliquent que

$$\overline{\delta G^2}(T) \propto \int_{E_c}^{T}\frac{d\omega}{T}\left(\frac{E_c}{\omega}\right)^{\frac{4-d}{2}} \quad . \tag{11.42}$$

Ainsi, pour $d \leq 3$,

$$\overline{\delta G^2}(T) \propto \left(\frac{E_c}{T}\right)^{\frac{4-d}{2}} \tag{11.43}$$

avec une correction logarithmique pour $d = 2$. Par contre, pour $d = 1$, l'intégrale dépend de sa coupure inférieure de sorte que

$$\overline{\delta G^2}(T) \propto \frac{E_c}{T} \quad . \tag{11.44}$$

La dépendance en température des fluctuations de conductance dépend de la dimension d'espace, ce qui est une conséquence de la nature diffusive du transport électronique.

[7] La conductivité moyenne peut dépendre de la température par l'intermédiaire du temps de cohérence de phase $\tau_\phi(T)$. Ainsi, la dépendance en température de la correction de localisation faible à travers $\tau_\phi(T)$ (voir section 7.4.3), n'est pas due à l'élargissement thermique des niveaux d'énergie.

Exercice 11.4 : Montrer que la fluctuation de conductivité peut s'écrire comme une intégrale sur le temps

$$\overline{\delta\sigma^2}(T) = \frac{2}{\beta}\sigma_0^2 \int_0^\infty R^2(t)[\tilde{K}_\rho(t) + 2\tilde{K}_D(t)]dt \tag{11.45}$$

où $R(t) = \pi T t/\sinh(\pi T t)$. On utilisera pour cela la relation (15.102).

11.4.3 Cohérence de phase et régime mésoscopique

Les fluctuations universelles de conductance résultent de la cohérence de phase et elles diminuent lorsque celle-ci est réduite. En effet, les trajectoires de diffusion multiple (diffuson et cooperon) qui contribuent à $\overline{\delta G^2}$ sont affectées par l'existence d'un temps de cohérence fini τ_ϕ, tout comme pour la correction de localisation faible (section 7.4). L'effet de la cohérence de phase sur la contribution du cooperon n'est pas surprenant du fait du déphasage relatif des deux trajectoires conjuguées par renversement du sens du temps. Il peut paraître moins évident que le diffuson soit aussi affecté. En effet, nous avons vu au chapitre 4 que le diffuson, construit à partir de trajectoires ayant des phases identiques, est un objet classique indépendant de tout déphasage. Par ailleurs, le diffuson est le mode de Goldstone associé à la conservation du nombre de particules (on peut l'obtenir à l'aide de la loi de Fick et de l'équation de conservation du nombre de particules). Un déphasage ne doit en principe pas l'affecter. Par contre, le diffuson qui intervient dans les corrélations de la conductivité est de nature différente : il est construit en appariant des séquences de collisions multiples correspondant à des réalisations *différentes* du potentiel de désordre ou à des paramètres extérieurs différents (voir les sections 6.1.1 et 6.5.6) et il peut donc être affecté par des processus de déphasage. Pour les électrons, une source de déphasage provient de l'interaction coulombienne qui peut être vue comme l'interaction d'un électron avec un champ électromagnétique fluctuant (section 13.7). Les phases des deux amplitudes appariées peuvent donc être différentes. Par conséquent, l'interaction coulombienne donne lieu à un temps de cohérence de phase fini et donc à une réduction des fluctuations de conductance, aussi bien pour la contribution des diffusons que pour celle des cooperons [8].

[8] Plus techniquement, il est possible de montrer qu'en présence d'interaction, le diagramme de la figure 4.4.*d* qui décrit le diffuson P_d doit être corrigé par l'insertion de lignes d'interaction. Ces lignes connectent, soit les deux fonctions de Green G^R et G^A, soit chaque fonction de Green à elle-même (correction de self-énergie, voir la section 13.4). La conservation du nombre de particules se traduit alors mathématiquement par une identité qui précise que les deux types de corrections se compensent exactement.

Pour les diffusons qui interviennent dans les diagrammes de fluctuations il n'est pas possible de connecter les propagateurs G^R et G^A par des lignes d'interaction *puisqu'ils correspondent à des échantillons différents*. Par conséquent, la compensation précédente n'existe plus. Cela se traduit par l'existence d'un temps de coupure τ_ϕ [258, 259].

En présence d'un temps de cohérence τ_ϕ fini, cooperon *et* diffuson ont maintenant la forme :

$$P_d(\boldsymbol{q},\omega) = P_c(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{-i\omega + \gamma + Dq^2} \tag{11.46}$$

avec $\gamma = 1/\tau_\phi$, ce qui fait apparaître les deux échelles d'énergie caractéristiques, l'énergie de Thouless et le taux de cohérence de phase $\hbar/\tau_\phi$. On est donc amené à comparer la taille L du système et la longueur de cohérence de phase $L_\phi = \sqrt{D\tau_\phi}$. Les fluctuations restent universelles si $\hbar/\tau_\phi \ll E_c$, c'est-à-dire si $L_\phi \gg L$. C'est le régime dit *mésoscopique* où la longueur de cohérence de phase est grande devant la taille du système. Dans la limite inverse ($L \gg L_\phi$), on déduit de (11.39) que les fluctuations diminuent et décroissent comme

$$\overline{\delta G^2}(L, L_\phi) \propto \left(\frac{E_c}{\gamma}\right)^{(4-d)/2} \propto \left(\frac{L_\phi}{L}\right)^{4-d} \quad . \tag{11.47}$$

Dans cette limite, on retrouve bien le comportement en L^{d-4} obtenu pour des conducteurs classiques (relation 11.2).

Remarque

On peut reprendre l'argument ci-dessus pour retrouver simplement les décroissances en fonction de l'énergie ω ou de la température T (sauf pour $d = 1$, voir exercice 11.5). On introduit pour cela les longueurs caractéristiques L_T et L_ω définies par

$$\begin{aligned} L_T^2 &= \frac{\hbar D}{T} \\ L_\omega^2 &= \frac{\hbar D}{\omega} \quad . \end{aligned} \tag{11.48}$$

Les relations (11.39, 11.43, 11.47) se mettent sous la forme commune

$$\overline{\delta G^2}(L, L_c) \propto \left(\frac{L_c}{L}\right)^{4-d} \tag{11.49}$$

pour $L \gg L_c$, où $L_c = L_\phi, L_\omega$ ou L_T. La situation se complique un peu lorsque plusieurs longueurs de coupure interviennent simultanément. C'est inévitablement le cas à température finie. Celle-ci a deux effets, d'une part, produire un élargissement thermique des niveaux d'énergie décrit par l'introduction des facteurs de Fermi et l'apparition de la longueur thermique L_T, d'autre part, induire une réduction de la cohérence de phase décrite par la longueur $L_\phi(T)$. Il faut alors comparer les longueurs L_T et $L_\phi(T)$. Différentes situations sont décrites dans la référence [258].

Remarque : Système faiblement couplé

Il est important de noter que l'universalité des fluctuations dans la limite mésoscopique $L \ll L_\phi$ correspond à la situation physique où l'échantillon est parfaitement connecté aux réservoirs que constituent les contacts de mesure. Les conditions aux limites correspondantes (Dirichlet) excluent le mode zéro (pour lequel tous les n_i sont nuls, voir la section 5.5.3) dans la contribution des modes de diffusion à la somme (11.31).
Dans le cas d'un échantillon faiblement couplé (le contact avec les réservoirs étant réalisé au moyen de barrières tunnel), les conditions aux limites sont celles de Neumann

(section 5.5.3). Dans la somme (11.32), il faut alors ajouter la contribution non universelle du mode zéro, c'est-à-dire un terme proportionnel à $(E_c/\gamma)^2 = (L_\phi/L)^4$ où E_c est l'énergie de Thouless. Dans ce cas, la variance $\overline{\delta G^2}$ n'est plus universelle [260].

Exercice 11.5 : Fluctuations de conductance dans un fil quasi-1*d*

Le résultat (11.44) montre que, pour $L_T \ll L \ll L_\phi$, la dépendance en température de la variance $\overline{\delta G^2}$ est de la forme [258] :

$$\overline{\delta G^2} \propto \left(\frac{L_T}{L}\right)^2 \quad . \tag{11.50}$$

De même, le résultat (11.47) montre que si $L_\phi \ll L \ll L_T$, $\overline{\delta G^2}$ varie comme

$$\overline{\delta G^2} \propto \left(\frac{L_\phi}{L}\right)^3 \quad . \tag{11.51}$$

À partir de (11.38) et (11.42), montrer que lorsque $L_T \ll L_\phi \ll L$:

$$\overline{\delta G^2} \propto \frac{L_\phi L_T^2}{L^3} \quad . \tag{11.52}$$

Exercice 11.6 : Variation $\overline{\delta g^2}(L_\phi, L_T)$ pour un fil diffusif

• Montrer que pour un fil quasi-unidimensionnel avec L_ϕ fini, la variance de la conductance adimensionnée (11.32) s'écrit, à basse température ($L_T \gg L$) :

$$\overline{\delta g^2}(L_\phi) = \frac{12 s^2}{\pi^4 \beta} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{\left[n^2 + (L/\pi L_\phi)^2\right]^2} \quad . \tag{11.53}$$

Cette somme est égale à

$$\overline{\delta g^2}(L_\phi) = \frac{s^2}{\beta} F_3(L/L_\phi) \tag{11.54}$$

où la fonction $F_3(x)$ est égale à $3(2 + 2x^2 - 2\cosh 2x + x \sinh 2x)/(2x^4 \sinh^2 x)$. En développant cette fonction, vérifier les comportements limites :

$$\overline{\delta g^2}(L_\phi) \to \frac{2s^2}{15\beta} \quad , \qquad \text{si } L \ll L_\phi \ll L_T$$

$$\overline{\delta g^2}(L_\phi) \to \frac{3s^2}{\beta} \frac{L_\phi^3}{L^3} \quad , \qquad \text{si } L_\phi \ll L \ll L_T \quad .$$

Le lecteur cherchera à comprendre la relation entre ce résultat et la dépendance temporelle (12.65) de la fonction de corrélation $C^{(3)}(t)$ des fluctuations de speckle.

• Montrer que, pour ce même fil, mais dans la limite haute température ($L_T \ll L$), la variance $\overline{\delta g^2}$ dépend à la fois de L_T et de L_ϕ, et qu'elle s'écrit :

$$\overline{\delta g^2}(L_\phi, L_T) = \frac{4s^2}{3\beta\pi} \frac{L_T^2}{L^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2 + (L/\pi L_\phi)^2} = \frac{2\pi s^2}{3\beta} \frac{L_T^2}{L^2} \left(\frac{1}{x} \coth x - \frac{1}{x^2}\right) \quad , \tag{11.55}$$

avec $x = L/L_\phi$. Partir pour cela des relations (11.41), montrer que la fonction thermique $F(\omega/2T)$ tend vers $1/3$ lorsque $T \to \infty$, et intégrer sur toutes les fréquences.

Montrer que la contribution liée aux fluctuations de la densité d'états devient négligeable. Vérifier les comportements limites (11.50, 11.52) :

$$\overline{\delta g^2}(L_\phi, L_T) \to \frac{2\pi s^2}{9\beta}\frac{L_T^2}{L^2} \quad , \qquad \text{si } L_T \ll L \ll L_\phi$$

$$\overline{\delta g^2}(L_\phi, L_T) \to \frac{2\pi s^2}{3\beta}\frac{L_T^2 L_\phi}{L^3} \quad , \qquad \text{si } L_T \ll L_\phi \ll L \quad .$$

Exercice 11.7 : Fluctuation de conductance et localisation faible

• À partir de (11.53) et de l'expression (7.60) de la correction de localisation faible, montrer la relation [261] :

$$\overline{\delta g^2}(L_\phi) = \frac{6s}{\beta}\frac{\partial}{\partial(x^2)}\Delta g(x) \quad , \qquad \text{si} \qquad L \ll L_T \tag{11.56}$$

où $\Delta g = \Delta\sigma L^{d-2}/(e^2/h)$ est la correction de localisation faible à la conductance sans dimension et où $x = L/L_\phi$. On peut ainsi comparer les relations (7.61) et (11.54).

• Dans la limite haute température, montrer la relation entre fluctuations de conductance et correction de localisation faible [259] :

$$\overline{\delta g^2}(L_\phi, L_T) = -\frac{2\pi s}{3\beta}\frac{L_T^2}{L^2}\Delta g(L_\phi) \quad , \qquad \text{si} \qquad L_T \ll L \quad . \tag{11.57}$$

Exercice 11.8 : Pourquoi les fluctuations de conductance sont universelles et la localisation faible ne l'est pas ?

Pour un échantillon de volume L^d, écrire la correction de localisation faible Δg et la variance $\overline{\delta g^2}$ sous la forme :

$$\begin{aligned} \Delta g &= -2s\int_0^{\tau_D} Z(t)\frac{dt}{\tau_D} \\ \overline{\delta g^2} &= 12\frac{s^2}{\beta}\int_0^{\tau_D} Z(t)\frac{tdt}{\tau_D^2} \quad . \end{aligned} \tag{11.58}$$

Dans la limite $L \ll L_\phi$, la coupure aux temps longs est donnée par le temps passé dans l'échantillon, c'est-à-dire le temps de Thouless τ_D. Pour les temps inférieurs à τ_D, la probabilité intégrée de retour à l'origine varie comme :

$$Z(t) = \left(\frac{\tau_D}{4\pi t}\right)^{d/2} \quad . \tag{11.59}$$

En déduire que les fluctuations de conductance sont universelles pour $d < 4$ et que la correction de localisation faible est universelle pour $d < 2$.

11.4.4 Dépendance en champ magnétique

En présence d'un champ magnétique, on observe des variations reproductibles de la conductance $G(B)$ comme celles de la figure 11.1.*b*, appelées « *empreintes digitales magnétiques* ». Une telle empreinte représente une signature unique associée à une configuration donnée de désordre. La figure 11.8.*a*

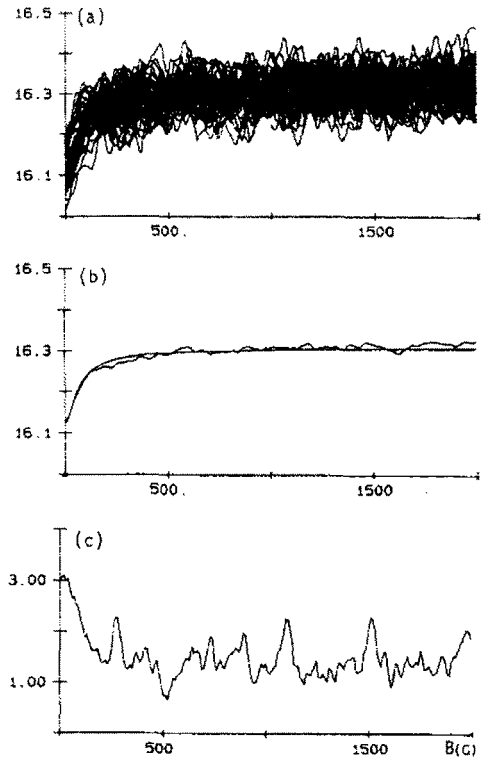


FIG. 11.8 – *Fluctuations reproductibles de la magnétoconductance en unités de e^2/h, à $T = 45$ mK pour un échantillon de GaAs dopé au Si, pour 46 expériences après recuit. La figure (a) montre les 46 dépendances en fonction du champ, chacune étant associée à une configuration de désordre (« empreinte digitale magnétique »). La figure (b) présente la conductance moyenne en fonction du champ. La contribution de localisation faible disparaît au-delà d'un champ caractéristique. Pour ce même champ, la variance des fluctuations de conductance est divisée par un facteur 2, ce qui correspond à la disparition de la contribution du cooperon (D. Mailly et M. Sanquer,* J. de Physique I, **2**, *357, Paris (1992)).*

présente les empreintes associées à 46 configurations de désordre différentes. Afin de décrire ces variations de la conductance, on considère la fonction de corrélation $\overline{\delta G(B)\delta G(B')}$ [9].

[9] Il convient d'éviter certaines confusions possibles dans l'écriture des fonctions de corrélation. La fonction $\overline{\delta G(\epsilon)\delta G(\epsilon-\omega)}$ ne dépend pas de l'énergie ϵ et elle a été notée $\overline{\delta G^2}(\omega)$ où ω est la différence des arguments. La fonction de corrélation $\overline{\delta G(B)\delta G(B')}$ dépend des champs B et B' et pas uniquement de leur différence. On réservera la notation $\overline{\delta G^2}(B)$ pour la fonction de corrélation $\overline{\delta G(B)\delta G(B)}$.

Pour commencer, on cherche à déterminer la dépendance en champ de la variance $\overline{\delta G^2}(B) = \overline{\delta G(B)\delta G(B)}$. On a déjà vu que l'effet d'un champ magnétique appliqué était de réduire la contribution du cooperon (section 6.2). Pour un champ B suffisamment grand, on s'attend donc à une réduction de moitié de la variance, puisque le diffuson n'est pas modifié :

$$\overline{\delta G^2}(B) = \frac{1}{2}\overline{\delta G^2}(B=0) \quad . \tag{11.60}$$

Plus précisément, la variation $\overline{\delta G^2}(B)$ s'obtient à partir de (11.29, 11.30), et en remplaçant les valeurs propres Dq^2 par celles, $E_n(B)$, de l'équation de diffusion associée au cooperon en présence d'un champ magnétique (section 6.2). Ainsi les sommes $\sum_{\boldsymbol{q}}$ deviennent

$$\sum_{\boldsymbol{q}} \frac{1}{(\gamma + Dq^2)^2} \longrightarrow \sum_n g_n(B) \frac{1}{[\gamma + E_n(B)]^2} \tag{11.61}$$

où $g_n(B)$ est la dégénérescence de la valeur propre $E_n(B)$. Par exemple, à deux dimensions, pour un plan infini, les valeurs propres sont données par la relation (6.39)

$$E_n = (n + 1/2)4eDB/\hbar \tag{11.62}$$

et ont une dégénérescence $g_n(B) = 2eB/h$. En effectuant la somme sur n, on obtient

$$\overline{\delta G^2}(B) = \frac{1}{2}\overline{\delta G^2}(0)\left[1 + \frac{B_\phi}{B}\Psi'(\frac{1}{2} + \frac{B_\phi}{B})\right] \tag{11.63}$$

où la fonction digamma Ψ est définie par (15.36). Le champ caractéristique $B_\phi = \hbar/(4eD\tau_\phi)$ correspond à un quantum de flux à travers une surface d'aire $8\pi L_\phi^2$. La variance des fluctuations de conductance est effectivement divisée par un facteur 2 au-delà d'un champ de l'ordre de B_ϕ. Ce même champ caractéristique défini par (7.79) est aussi celui pour lequel la correction de localisation faible disparaît. Ceci est bien visible sur les figures 11.8.*b,c* qui montrent, d'une part, la disparition de la correction de localisation faible et, d'autre part, la réduction de la variance par un facteur 2 pour un champ magnétique du même ordre [10]. Pour un système fini mésoscopique, c'est-à-dire pour lequel $L < L_\phi$, le cooperon disparaît pour un champ qui correspond à un quantum de flux à travers le système.

[10] En fait, il s'agit là d'expériences effectuées sur des fils quasi-unidimensionnels, pour lesquelles les formules (7.71) et (11.63) ne s'appliquent pas. Pour cette géométrie, voir l'exercice 11.10.

Exercice 11.9 : À partir de la relation (11.56) entre correction de localisation faible et fluctuation de conductance, retrouver l'expression (11.63) à partir de la relation (7.71) pour la magnétoconductivité.

Exercice 11.10 : Montrer que, pour un fil quasi-1d dans un champ magnétique B perpendiculaire, la dépendance en champ de la variance $\overline{\delta g^2}(B)$ est donnée par

$$\overline{\delta g^2}(B) = \frac{s^2}{2}\left(F_3\left[\frac{L}{L_\phi(0)}\right] + F_3\left[\frac{L}{L_\phi(B)}\right]\right) \tag{11.64}$$

où la fonction F_3 est définie dans l'exercice 11.6, et où la longueur $L_\phi(B)$ est donnée par (7.74).

Le champ magnétique modifie la phase relative des trajectoires de diffusion multiple. Cette modification est décrite par la fonction de corrélation de la conductance mesurée à des valeurs *différentes* B et B' du champ. Le diffuson et le cooperon, solutions de l'équation (6.38), sont donc tous les deux affectés et pour obtenir leur comportement dans un champ uniforme, on effectue la substitution

$$\frac{1}{\gamma + Dq^2} \longrightarrow \frac{1}{\gamma + (n+\frac{1}{2})\frac{2eD}{\hbar}(B \pm B')} \quad . \tag{11.65}$$

Ainsi, la fonction de corrélation $\overline{\delta G(B)\delta G(B')}$ apparaît comme la somme de deux termes

$$\overline{\delta G(B)\delta G(B')} = f\left(\frac{B-B'}{2B_\phi}\right) + f\left(\frac{B'+B}{2B_\phi}\right) \tag{11.66}$$

associés respectivement au diffuson et au cooperon, et où on a défini

$$f(x) = \overline{\delta G^2}(0)\frac{1}{2x}\Psi'\left(\frac{1}{2}+\frac{1}{x}\right) \quad . \tag{11.67}$$

La fonction de corrélation précédente dépend donc de B et de la différence $\Delta B = B' - B$:

$$\overline{\delta G(B)\delta G(B')} = f\left(\frac{B}{B_\phi} + \frac{\Delta B}{2B_\phi}\right) + f\left(\frac{\Delta B}{2B_\phi}\right) \quad . \tag{11.68}$$

Au-delà du champ caractéristique B_ϕ et dans la limite $B \gg B_\phi$, la fonction de corrélation ne dépend plus que de la différence $B - B'$ et devient

$$\overline{\delta G(B)\delta G(B')} = f\left(\frac{B-B'}{2B_\phi}\right) \quad . \tag{11.69}$$

Le champ associé à la décroissance de cette fonction de corrélation est donc le double du champ caractéristique B_ϕ associé à la disparition du cooperon.

11.4.5 Couplage spin-orbite et impuretés magnétiques

Le couplage spin-orbite et la diffusion sur les impuretés magnétiques donnent également lieu à un déphasage. Celui-ci modifie la contribution du cooperon à la conductivité moyenne, c'est-à-dire la correction de localisation faible (section 7.5.2). Dans la limite de fort couplage spin-orbite, la contribution triplet du cooperon disparaît dans la relation (6.128) pour ne laisser que celle du singulet (fig. 6.8).

Dans le cas des fluctuations de conductance, on est amené à apparier quatre séquences de collisions multiples (fig. 11.3) en faisant ainsi apparaître des diffusons ou des cooperons. Contrairement à la conductivité moyenne où seul le cooperon est affecté par le spin-orbite et les impuretés magnétiques, ici les diffusons sont également modifiés. Ceci résulte du fait qu'en présence d'un degré de liberté supplémentaire (le spin de l'électron), il est possible de construire un diffuson en appariant des séquences correspondant à des rotations non corrélées des deux spins (section 6.5.3). Les facteurs de structure respectivement associés au diffuson et au cooperon sont donc modifiés [262, 263] et leur expression est donnée par (6.114) et (6.120).

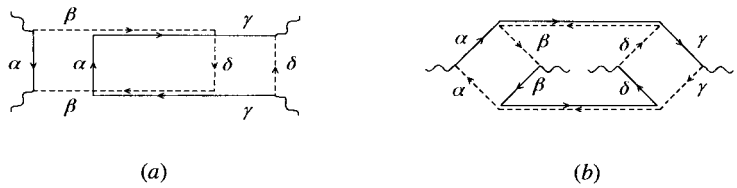


FIG. 11.9 – *Exemples de diagrammes qui décrivent les fluctuations de conductance. On a indiqué les degrés de liberté de spin. a) Contribution du diffuson aux fluctuations de densité d'états. b) Contribution du cooperon aux fluctuations du coefficient de diffusion. Ces diagrammes font intervenir le produit de deux diffusons ou de deux cooperons, de la forme* $\sum_{\alpha\beta,\gamma\delta}\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}\Gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta}$.

La figure 11.9 montre comment modifier les diagrammes de fluctuation de conductivité afin de tenir compte des degrés de liberté de spin. Ainsi chaque diagramme devient proportionnel à $\sum_{\alpha\beta\gamma\delta}\Gamma^2_{\alpha\beta,\gamma\delta}$. En l'absence de couplage spin-orbite ou d'impuretés magnétiques, le facteur de structure Γ ne dépend pas du spin (impuretés scalaires) et cette somme est simplement égale à $4\Gamma^2$, le facteur 4 étant le carré de la dégénérescence de spin s (relation 11.26). En présence de ces couplages, on montre à l'aide des relations (6.114) et (6.120) que cette somme devient :

$$\sum_{\alpha\beta,\gamma\delta}\Gamma_{\alpha\beta,\gamma\delta}\Gamma_{\gamma\delta,\alpha\beta} = 3\Gamma_T^2 + \Gamma_S^2 \tag{11.70}$$

aussi bien pour le cooperon que pour le diffuson. On fait ainsi apparaître les contributions aux fluctuations de conductance associées à chaque sous-espace, singulet (Γ_S) ou triplet (Γ_T).

En remplaçant ces modes propres Γ_J définis par (6.113) et (6.123), on obtient pour les fluctuations de conductivité une expression analogue à (11.26), moyennant la substitution

$$P^2_{d,c}(\boldsymbol{q}) \longrightarrow \frac{3}{4}\frac{1}{\left(Dq^2 + \frac{4}{3\tau_{so}} + \frac{1}{\tau_m}\right)^2} + \frac{1}{4}\frac{1}{\left(Dq^2 + \frac{1}{\tau_m}\right)^2} \cdot \tag{11.71}$$

On rappelle que les temps caractéristiques qui interviennent dans ces expressions sont différents de ceux obtenus pour les diffusons et cooperons qui interviennent dans des valeurs moyennes de quantités physiques. Ceci provient du fait qu'en présence d'impuretés magnétiques, il n'y a pas de corrélation entre les spins appartenant à des configurations différentes de désordre. On ne peut donc pas relier par des lignes d'impuretés magnétiques des trajectoires de diffusion multiple associées à des réalisations différentes du désordre (section 6.5.3). Par ailleurs, on note que le couplage spin-orbite modifie de façon différente les contributions du diffuson et du cooperon aux fluctuations de conductance. On note en particulier qu'il n'affecte pas la contribution singulet du cooperon. Ainsi, en fonction des valeurs relatives des différents paramètres qui caractérisent l'amplitude de ces couplages – on peut aussi considérer le champ magnétique qui, en brisant l'invariance par renversement du sens du temps, supprime la contribution du cooperon –, la variance de la distribution de conductance est modifiée dans des rapports simples. Par exemple, un fort champ magnétique réduit la variance d'un facteur 2. En l'absence d'impuretés magnétiques, le couplage spin-orbite [11] réduit la variance d'un facteur 4.

	$B, B_m \ll B_c$	$B_m \ll B_c \ll B$	$B_c \ll B_m, B$
$B_{so} \ll B_c$	1 1 **1**	1 0 **1/2**	0 0 **0**
$B_{so} \gg B_c$	1/4 1/4 **1/4**	1/4 0 **1/8**	0 0 **0**

FIG. 11.10 – *Amplitude des fluctuations de conductance en fonction de l'importance des couplages spin-orbite et aux impuretés magnétiques. Pour chaque cas, les deux chiffres de la première ligne indiquent les amplitudes respectives du diffuson et du cooperon – en prenant comme unité le cas scalaire (GOE) –. La seconde ligne indique la réduction de δG^2 – en prenant comme unité le cas scalaire (GOE) –. Pour un échantillon mésoscopique, le champ extérieur B et les champs caractéristiques associés au couplage spin-orbite – B_{so} défini par (7.79) – et aux impuretés magnétiques – B_m défini par (7.82) – doivent être comparés au champ B_c correspondant à un quantum de flux à travers l'échantillon.*

[11] Pour la même raison, les fluctuations spectrales (voir par exemple la relation 10.53) sont aussi divisées par un facteur 4. Dans le cadre de la théorie des matrices aléatoires, cela correspond à l'ensemble symplectique (GSE) décrit par le paramètre $\beta = 4$.

La table 11.10 résume les différentes situations possibles. Pour une discussion plus générale de ces résultats, et en particulier de leur interprétation en termes de classes de symétries associées à la théorie des matrices aléatoires, on pourra consulter la table I de la référence [257].

Exercice 11.11 : Fluctuations de conductance et effet Zeeman

En présence d'un champ magnétique, non seulement la contribution du cooperon est supprimée, mais l'effet Zeeman lève la dégénérescence des états triplet. Il conduit, en champ fort, à la disparition des contributions de deux des trois modes triplet. Calculer dans ce cas l'amplitude des fluctuations de conductance [257].

Complément C11.1 Fluctuations universelles de conductance et collisions anisotropes

Nous avons discuté de l'universalité des fluctuations de conductance pour le cas des collisions anisotropes (p. 437). On reprend ici ce point en détail afin de montrer comment l'universalité subsiste dans ce cas (on peut aussi revenir au complément C7.4 où est calculée la correction de localisation faible pour des collisions anisotropes).

On note tout d'abord que, pour des collisions anisotropes, il faut utiliser le facteur de structure Γ^* donné par (4.171) plutôt que Γ dans les diagrammes de la figure 11.4, c'est-à-dire effectuer la substitution :

$$\Gamma \propto \frac{1}{-i\omega + Dq^2} \longrightarrow \Gamma^* \propto \frac{1}{-i\omega + D^* q^2} \quad . \tag{11.72}$$

Un autre dépendance en fonction de D provient des boîtes constitutives de ces diagrammes (figs. 11.6 et 11.7). Que devient cette dépendance dans le cas de collisions anisotropes ?

Pour les fluctuations reliées à la constante de diffusion, la contribution de chaque boîte (fig. 11.7) devient $\tilde{H} = \tilde{H}^{(A)} + \tilde{H}^{(B)} + \tilde{H}^{(C)}$ avec (fig. 11.11.a)

$$\begin{aligned} \tilde{H}^{(A)} &= \left(\frac{\tau^*}{\tau_e}\right)^2 H^{(A)} \\ \tilde{H}^{(B)} = \tilde{H}^{(C)} &= -\frac{1}{2}\frac{\gamma_1}{\gamma_e}\left(\frac{\tau^*}{\tau_e}\right)^2 H^{(A)} \end{aligned} \tag{11.73}$$

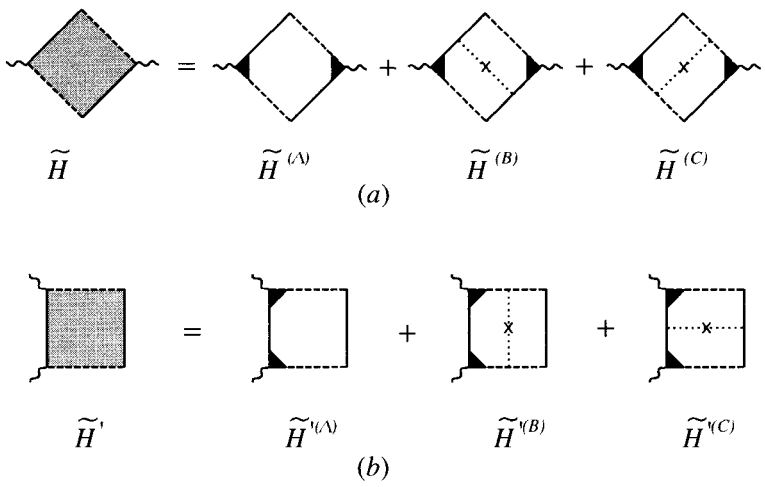


FIG. 11.11 – *Boîtes de Hikami apparaissant dans le calcul des fluctuations de conductance, pour des collisions anisotropes. a) Fluctuations de la constante de diffusion. b) Fluctuations de la densité d'états.*

où γ_1 est donné par (4.159) et (4.169). Ces termes ont été calculés dans le complément C7.4 et leur somme vaut :

$$\tilde{H} = \frac{\tau^*}{\tau_e} H^{(A)} \tag{11.74}$$

au lieu de $H^{(A)}$ pour le cas isotrope. Le temps de transport τ^* apparaît donc aussi dans la contribution des boîtes de Hikami à courte portée.

Pour les fluctuations de la densité d'états, la contribution de chaque boîte (fig. 11.6) devient $\tilde{H}' = \tilde{H}'^{(A)} + \tilde{H}'^{(B)} + \tilde{H}'^{(C)}$ avec (fig. 11.11.*b*) :

$$\begin{aligned}
\tilde{H}'^{(A)} &= \left(\frac{\tau^*}{\tau_e}\right)^2 H^{(A)} \\
\tilde{H}'(B) &= -\frac{1}{2}\left(\frac{\tau^*}{\tau_e}\right)^2 H^{(A)} \\
\tilde{H}'^{(C)} &= -\frac{1}{2}\frac{\gamma_1}{\gamma_e}\left(\frac{\tau^*}{\tau_e}\right)^2 H^{(A)} \quad .
\end{aligned} \tag{11.75}$$

La somme de ces termes s'écrit :

$$\tilde{H}' = \frac{\tau^*}{\tau_e}\frac{H^{(A)}}{2} \tag{11.76}$$

au lieu de $H^{(A)}/2$ pour le cas isotrope.

On en conclut que la contribution de chaque boîte est multipliée par $\tau^*/\tau_e = D^*/D$, de sorte que la variance $\delta\sigma^2$ de la conductivité devient

$$\delta\sigma^2 \propto D^{*2} \sum_q \frac{1}{(D^* q^2)^2} \quad . \tag{11.77}$$

Les fluctuations restent donc universelles, c'est-à-dire indépendantes du désordre.

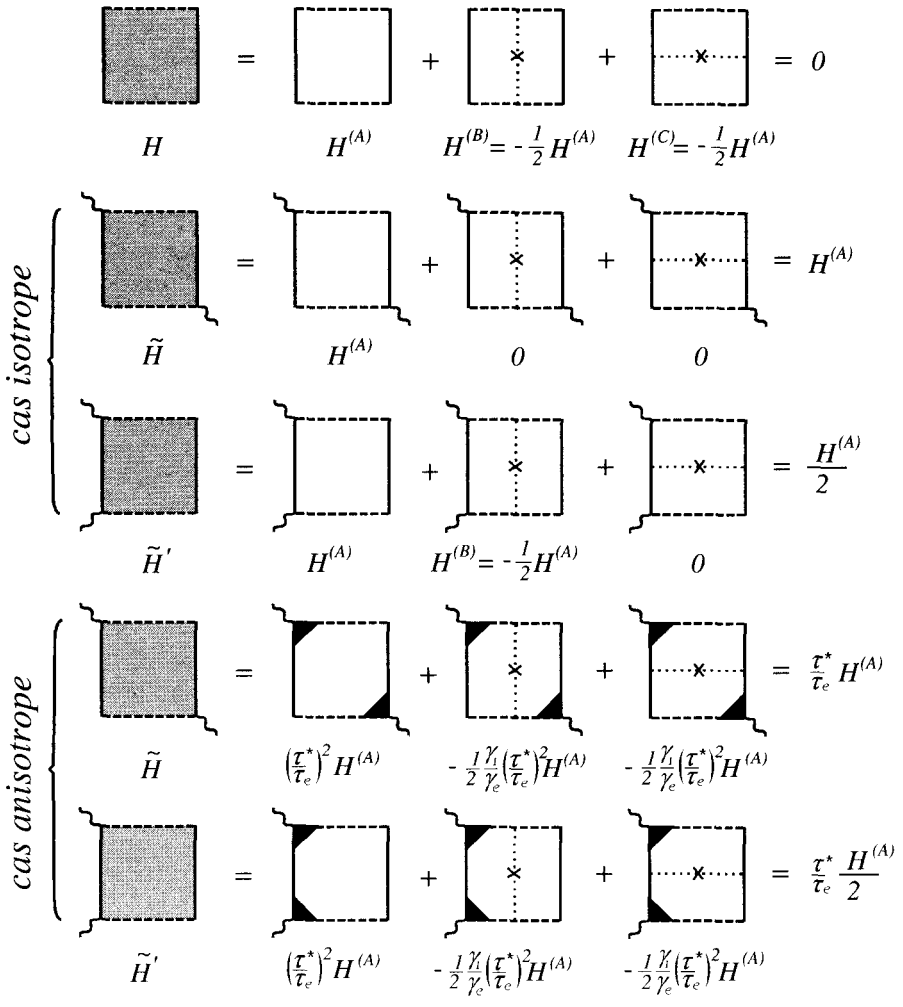


FIG. 11.12 – *Cette figure récapitule les différentes combinaisons de boîtes de Hikami calculées dans ce chapitre ainsi que dans le chapitre 7.*

Complément C11.2 Fluctuations de conductance dans le formalisme de Landauer

Il est possible d'obtenir la correction de localisation faible à partir de l'approche de Landauer au lieu du formalisme de Kubo. De même, pour un fil quasi-unidimensionnel, on peut retrouver directement les fluctuations universelles de conductance (11.33) au moyen de cette approche. Outre le fait que la dérivation est simple pour cette géométrie, l'utilisation de cette description devient indispensable pour des géométries plus complexes.

Cette approche est reprise et largement détaillée dans le chapitre 12 pour l'étude des fluctuations de speckle. L'optique présente en effet l'avantage de permettre une mesure directe des corrélations entre différents modes de propagation transverses. Dans ce complément, on ne fait qu'esquisser l'approche de Landauer pour le calcul des fluctuations de conductance.

La formule de Landauer (7.153) permet de relier la variance de la conductance aux fonctions de corrélation des coefficients de transmission :

$$\overline{\delta G^2} = s^2 \frac{e^4}{\hbar^2} \sum_{aa'bb'} \overline{\delta T_{ab} \delta T_{a'b'}} \quad . \tag{11.78}$$

Chaque terme $\overline{\delta T_{ab}\delta T_{a'b'}}$ implique la corrélation, c'est-à-dire le croisement de deux diffusons. Un développement systématique de $\overline{\delta T_{ab}\delta T_{a'b'}}$ en fonction du nombre de croisements basé sur les principes de la section C4.2.3 est présenté dans le chapitre 12. Nous n'entrons pas ici dans les détails du calcul et nous mentionnons simplement que le terme à un croisement disparaît après sommation sur les modes (section 12.4.2) pour ne laisser que la contribution à deux croisements représentée sur la figure 11.13. Ce terme a la même structure que le diagramme 11.4.*b*, utilisé pour calculer la fluctuation de conductivité dans le formalisme de Kubo.

La même construction que celle conduisant à l'expression (7.183) pour la correction au coefficient de transmission moyen $\overline{T}_{ab}$, permet d'écrire le diagramme 11.13 sous la forme :

$$\begin{aligned}\overline{\delta T_{ab}\delta T_{a'b'}} = 4\frac{\tau_e^4}{S^4} h_4^2 \int & \partial_x \Gamma(l_e\mu_a, x)\, \partial_x \Gamma(l_e\mu_{a'}, x)\, \Gamma(x, x')^2 \\ & \times \partial_{x'} \Gamma(x', L - l_e\mu_b)\, \partial_{x'} \Gamma(x', L - l_e\mu_{b'}) dx dx' \quad . \end{aligned} \tag{11.79}$$

où h_4 est donné par (4.129). Dans la géométrie d'un conducteur quasi-1d, le facteur de structure $\Gamma(\boldsymbol{\rho}, x, x')$ dépend de la différence $\boldsymbol{\rho}$ des coordonnées transverses et de x, x' pris le long du conducteur. On note $\Gamma(x, x')$ la transformée de Fourier $\Gamma(\boldsymbol{q}, x, x')$ prise en $\boldsymbol{q} = 0$. Les cosinus directeurs μ_i sont définis par (7.159). Compte tenu de la relation (4.37) qui relie Γ et la probabilité P_d :

$$\begin{aligned}\overline{\delta T_{ab}\delta T_{a'b'}} = \frac{4D^2}{(2\pi\rho_0 S)^4} \int & \partial_x P_d(l_e\mu_a, x) \partial_x P_d(l_e\mu_{a'}, x) P_d(x, x')^2 \\ & \times \partial_x P_d(x', L - l_e\mu_b) \partial_x P_d(x', L - l_e\mu_{b'}) dx dx' \quad . \end{aligned} \tag{11.80}$$

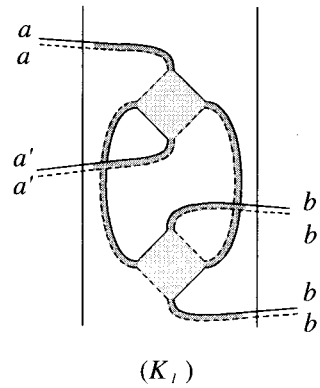


FIG. 11.13 – *La fonction de corrélation du coefficient de transmission* $\overline{\delta T_{ab}\delta T_{a'b'}}^{(3)}$ *implique la corrélation de deux diffusons à travers leur croisement. On montre dans le chapitre 12 que les diagrammes avec un seul croisement donnent une contribution négligeable lorsque l'on somme sur tous les modes transverses.*

Les dérivées sont des termes constants explicités en (7.185). On en déduit

$$\overline{\delta T_{ab}\delta T_{a'b'}} = \frac{4l_e^4}{(2\pi\rho_0 S)^4 D^2 L^4}\prod_i(\mu_i + \frac{2}{3})\int P_d(x,x')^2 dxdx' \quad . \tag{11.81}$$

En sommant sur tous les canaux et en utilisant (7.166, 7.170), on obtient

$$\sum_{q_a,q_b}(\mu_a + \frac{2}{3})(\mu_a + \frac{2}{3}) = \frac{1}{9}(2\pi\rho_0 v_F S)^2 \tag{11.82}$$

et

$$\overline{\delta T^2} = 4\frac{D^2}{L^4}\int P_d(x,x')^2 dxdx' \tag{11.83}$$

de sorte que, d'après (5.58) :

$$\overline{\delta T^2} = \frac{4}{L^4}\int_0^L x_m^2(1 - \frac{x_M}{L})^2 dxdx' = \frac{2}{45} \tag{11.84}$$

où $x_m = \min(x,x')$ et $x_M = \max(x,x')$. En ajoutant les autres contributions représentées sur la figure 12.11, on obtient $\overline{\delta T^2} = 2/15$, c'est-à-dire le résultat (11.33) obtenu dans le formalisme de Kubo.

Chapitre 12

Corrélation des figures de speckle

12.1 Qu'est-ce qu'une figure de speckle ?

Dans les chapitres 8 et 9, nous avons étudié l'albédo et la fonction de corrélation temporelle de l'intensité réfléchie ou transmise par un milieu diffusant. Nous nous sommes alors principalement limités à l'étude de la valeur moyenne de l'intensité, cette moyenne étant en pratique réalisée par le mouvement des diffuseurs. Par contre, si on envoie un paquet d'onde localisé dans le temps ou si les diffuseurs sont immobiles, on obtient une image instantanée du milieu dite figure de *speckle* ou de *tavelures* (fig. 12.1) [264]. La caractéristique prin-

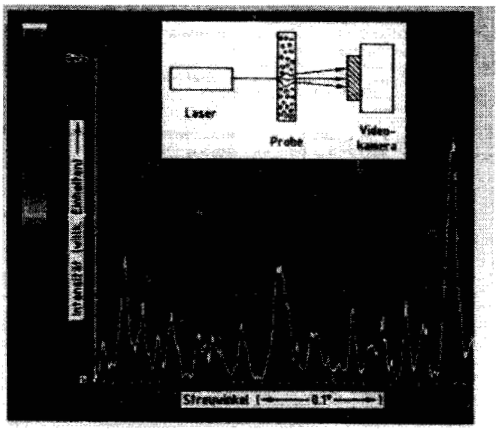


FIG. 12.1 – *Figure de* speckle. *La courbe représente la variation de l'intensité en fonction de l'angle. Les fluctuations relatives sont de l'ordre de l'unité (figure courtoisement fournie par G. Maret).*

cipale de cette image est sa « granulosité », c'est-à-dire une distribution de taches sombres et brillantes. L'existence de taches quasiment noires signifie que les fluctuations relatives de l'intensité sont de l'ordre de l'unité. Cette observation constitue la *loi de Rayleigh* qui exprime que les fluctuations d'intensité sont du même ordre que l'intensité moyenne.

Le cas des ondes est plus riche que celui des électrons (chap. 11) car il permet d'avoir accès expérimentalement à la fonction de corrélation angulaire du coefficient de transmission (ou de réflexion) entre deux directions différentes de l'onde transmise (ou réfléchie). Par contre, la conductance électronique mesure la transmission totale à travers un milieu conducteur (voir le complément C7.2), c'est-à-dire la somme sur tous les modes de transmission (relation 7.153). La conductance ne permet donc pas d'analyser les corrélations angulaires entre différents canaux de transmission.

Si elles ne sont pas apparentes de façon évidente sur une figure de speckle, nous allons voir cependant qu'il existe en optique l'équivalent des fluctuations universelles de conductance obtenu en prenant la moyenne angulaire sur toutes les directions incidentes et émergentes. Cela représente une petite correction relativement aux très grandes fluctuations d'intensité lumineuse. Le lien entre les fluctuations de speckle et celles de conductance est discuté dans la section 12.4.4.

12.2 Comment analyser une figure de speckle ?

Afin d'étudier les effets cohérents qui apparaissent dans les figures de speckle, nous allons introduire et calculer les fonctions de corrélations du coefficient de transmission (ou de l'albédo si on s'intéresse à la réflexion) pour la géométrie d'une tranche.

Considérons la géométrie de la figure 12.2. Une source lumineuse située à l'infini à l'extérieur du milieu émet une onde plane dont l'incidence sur le plan $z = 0$ est caractérisée par la direction $\hat{\boldsymbol{s}}_a$. Après propagation à travers la tranche, on obtient en réflexion, ou en transmission, une onde émergente sphérique analysée par un détecteur placé à l'infini dans une direction $\hat{\boldsymbol{s}}_b$, c'est-à-dire en pratique à une distance très grande devant toutes les distances caractéristiques de la tranche. Dans les deux cas (réflexion ou transmission) on mesure le flux d'énergie émergent par unité de temps et d'angle solide. Ainsi, le coefficient de réflexion n'est autre que l'albédo défini par la relation (8.3) et il est proportionnel à l'intensité réfléchie dans la direction $\hat{\boldsymbol{s}}_b$. De même, on définit un coefficient de transmission, noté $\mathcal{T}_{ab}$, correspondant à l'intensité transmise selon $\hat{\boldsymbol{s}}_b$ pour une onde incidente selon $\hat{\boldsymbol{s}}_a$. Il est défini de la même

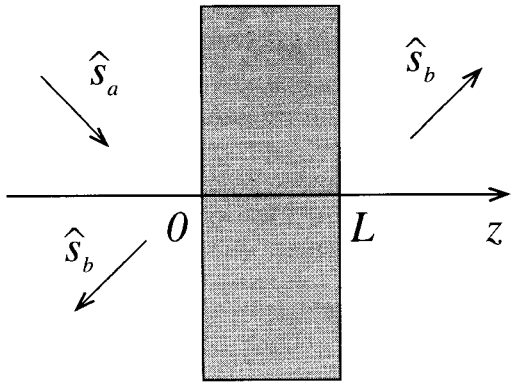


FIG. 12.2 – *Géométrie utilisée pour la définition des coefficients de réflexion et de transmission à travers une tranche d'épaisseur L.*

manière que l'albédo [1] :

$$\boxed{\mathcal{T}_{ab} = \frac{R^2}{S}\frac{I(R\hat{\boldsymbol{s}}_b, \hat{\boldsymbol{s}}_a)}{I_0}} \tag{12.1}$$

L'intensité émergente est égale à

$$I(R\hat{\boldsymbol{s}}_b, \hat{\boldsymbol{s}}_a) = \frac{4\pi}{c}|\psi_{ab}|^2 \tag{12.2}$$

où l'amplitude ψ_{ab} de l'onde émergente est de la forme (8.4) [2] :

$$\psi_{ab} \propto \int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' e^{ik(\hat{\boldsymbol{s}}_a.\boldsymbol{r}-\hat{\boldsymbol{s}}_b.\boldsymbol{r}')}G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \quad , \tag{12.3}$$

la fonction de Green $G(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ décrit la propagation de l'onde dans le milieu diffusant.

Le but de ce chapitre est de décrire les fluctuations du coefficient de transmission autour de sa valeur moyenne $\overline{\mathcal{T}}_{ab}$. On montre d'abord dans la section 12.3 comment calculer cette valeur moyenne à l'aide des méthodes déjà utilisées dans les chapitres 8 et 9. On caractérise les fluctuations de $\mathcal{T}_{ab}$ par la fonction de corrélation angulaire $\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}$ ou encore par le rapport

$$C_{aba'b'} = \frac{\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}}{\overline{\mathcal{T}}_{ab}\overline{\mathcal{T}}_{a'b'}} \tag{12.4}$$

[1] Il est important de noter que ce n'est pas la définition habituelle proposée par exemple dans le complément C7.2. Voir à ce sujet la discussion de ce même complément.

[2] La fréquence ω_0 de l'onde n'est pas mentionnée explicitement.

où $\delta\mathcal{T}_{ab} = \mathcal{T}_{ab} - \overline{\mathcal{T}_{ab}}$. En particulier, on considèrera la fonction $C_{abab'}$ décrivant les corrélations observées dans une image de speckle formée par un faiceau incident dans une direction $\hat{\boldsymbol{s}}_a$. La fonction (12.4) contient des informations supplémentaires sur la déformation de cette image lorsqu'on change la direction d'incidence ($a \to a'$).

On définit aussi le coefficient de transmission obtenu en intégrant sur toutes les directions b émergentes ainsi que celui obtenu en intégrant également sur les directions a incidentes [3]

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_a &= \int \mathcal{T}_{ab}\, db \\ \mathcal{T} &= \int \mathcal{T}_a da = \int \mathcal{T}_{ab}\, da\, db \quad . \end{aligned} \tag{12.5}$$

Ces quantités sont représentées schématiquement sur la figure 12.3. On verra que c'est la quantité intégrée $\mathcal{T}$ qui joue un rôle analogue à celui de la conductance. C'est ce qu'exprime la formule de Landauer (7.141).

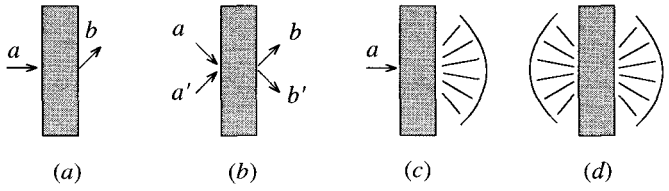


FIG. 12.3 – *Représentation des différentes configurations de mesure des corrélations du coefficient de transmission : (a) coefficient de transmission $\mathcal{T}_{ab}$; (b) fonction de corrélation $C_{aba'b'}$; (c) coefficient de transmission $\mathcal{T}_a$ intégré sur toutes les directions émergentes et correspondant à une onde plane incidente selon $\hat{\boldsymbol{s}}_a$; (d) coefficient de transmission $\mathcal{T}$ correspondant à une intégration sur les directions incidentes et émergentes.*

Comme les fluctuations de conductance, la fonction de corrélation $\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}$ fait intervenir la moyenne sur le désordre d'un produit de quatre amplitudes associées à quatre trajectoires. Afin de faire apparaître les différentes contributions à cette fonction de corrélation, on reprend la stratégie de la section 9.2. L'amplitude complexe de diffusion (12.3) est de la forme

$$\psi_{ab} \propto \int d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' e^{ik(\hat{\boldsymbol{s}}_a.\boldsymbol{r} - \hat{\boldsymbol{s}}_b.\boldsymbol{r}')} \sum_{\mathcal{C}} E_{\mathcal{C}} \tag{12.6}$$

[3] On peut aussi définir les coefficients de transmission à l'aide de sommes discrètes. a et b désignent alors des « modes » de propagation quantifiés par les dimensions transverses du milieu diffusant. Dans la description adoptée ici, a et b désignent des directions angulaires et donc des variables continues.

où l'amplitude $E_{\mathcal{C}}$ correspond à une trajectoire particulière $\mathcal{C}$ de diffusion multiple [4]. On fait ainsi apparaître pour la fonction de corrélation la moyenne

$$\sum_{\mathcal{C}_1,\mathcal{C}_2,\mathcal{C}_3,\mathcal{C}_4} \overline{E_{\mathcal{C}_1}^{a,b} E_{\mathcal{C}_2}^{*a,b} E_{\mathcal{C}_3}^{a',b'} E_{\mathcal{C}_4}^{*a',b'}} \tag{12.7}$$

avec des notations évidentes représentées sur la figure 12.4. Les contributions non nulles à cette valeur moyenne de quatre amplitudes font intervenir deux diffusons. On ne retient alors dans la somme (12.7) que les termes tels que

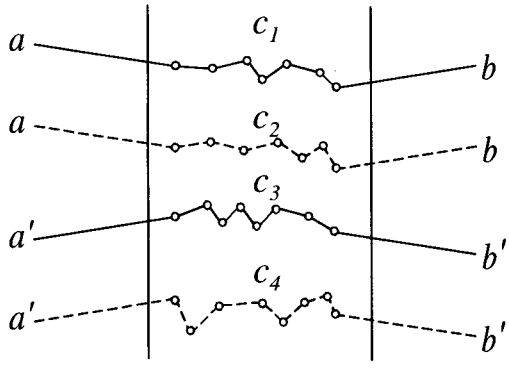


FIG. 12.4 – *Représentation du produit de quatre amplitudes ψ correspondant à quatre ondes incidentes selon $\hat{\mathbf{s}}_a$ et $\hat{\mathbf{s}}_{a'}$ et émergentes selon $\hat{\mathbf{s}}_b$ et $\hat{\mathbf{s}}_{b'}$. Pour avoir une contribution non nulle, il faut apparier les amplitudes deux à deux afin de faire apparaître des diffusons, pouvant éventuellement se croiser.*

$\mathcal{C}_1 = \mathcal{C}_2$ et $\mathcal{C}_3 = \mathcal{C}_4$ ou bien $\mathcal{C}_1 = \mathcal{C}_4$ et $\mathcal{C}_3 = \mathcal{C}_2$. Ces deux contributions sont schématisées sur la figure 12.5. La première n'est autre que le produit des valeurs moyennes du coefficient de transmission. La seconde contribution conduit à

$$\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}^{(1)} = \left(\frac{4\pi R^2}{cSI_0}\right)^2 \left|\overline{\psi_{ab}\psi_{a'b'}^*}\right|^2 \tag{12.8}$$

et la contribution correspondante à la fonction de corrélation $C_{aba'b'}$ est notée $C_{aba'b'}^{(1)}$. Dans le cas particulier où $a = a'$ et $b = b'$, c'est-à-dire pour une figure de speckle engendrée par un faisceau dont l'incidence et l'émergence sont fixées, on obtient :

$$\boxed{\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}^2} = \overline{\mathcal{T}}_{ab}^2} \tag{12.9}$$

[4] Cette amplitude est notée $E_{\mathcal{C}}$ dans la section 9.2.

ou encore $\overline{T_{ab}^2} = 2\,\overline{T}_{ab}^2$ qui constitue la loi de Rayleigh [5] et qui rend compte de l'aspect granulaire caractéristique d'une figure de speckle : les fluctuations relatives sont de l'ordre de l'unité.

La contribution de la figure 12.5.b à la fonction de corrélation rend compte de cette caractéristique. Il existe néanmoins d'autres contributions beaucoup moins facilement discernables.

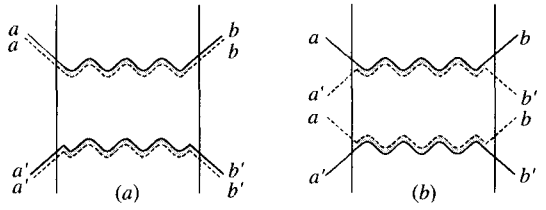


FIG. 12.5 – *Deux contributions au produit $\overline{T_{ab}T_{a'b'}}$, correspondant respectivement aux contractions $C_1 = C_2, C_3 = C_4$ et $C_1 = C_4, C_2 = C_3$. La première (a) correspond au produit $\overline{T}_{ab}\overline{T}_{a'b'}$. La seconde (b) donne la contribution notée $C^{(1)}_{aba'b'}$ à la fonction de corrélation.*

En diffusion multiple, les corrélations à longue portée induites par le diffuson, peuvent, en effet, donner des comportements nouveaux et inattendus. En cherchant dans (12.7) tous les appariements possibles de deux trajectoires prises parmi quatre, il n'est pas exclu que deux diffusons puissent se croiser. Un croisement est décrit par une boîte de Hikami (figure 4.22), c'est-à-dire par le réappariement des quatre amplitudes définissant les deux diffusons incidents et émergents de la boîte. Afin d'obtenir la contribution des termes comportant des croisements, il faut évaluer la probabilité de leur occurence. Pour cela, nous reprenons l'argument simple développé dans la section C4.2.3.

Pour une tranche d'épaisseur L et de section S, le temps mis par une trajectoire diffusive pour traverser l'échantillon est le temps de Thouless $\tau_D = L^2/D$. La *longueur développée* de cette trajectoire est $\mathcal{L} = c\tau_D = 3L^2/l_e$. Le volume associé au croisement de deux trajectoires diffusives, c'est-à-dire le volume d'une boîte de Hikami est $\lambda^2 l_e$ (fig. 4.11). On peut donc considérer qu'un diffuson est un objet de longueur $\mathcal{L}$, de section λ^2, c'est-à-dire de volume $\mathcal{L}\lambda^2$. La probabilité de croisement de deux diffusons est alors proportionnelle au rapport entre le volume d'un diffuson et le volume $\Omega = SL$ du milieu, c'est-à-dire à $\frac{\lambda^2\mathcal{L}}{\Omega} = \frac{\lambda^2 L}{l_e S} \propto \frac{1}{g}$ où l'on a défini le nombre sans dimension

$$\boxed{g = \frac{k^2 l_e S}{3\pi L}} \tag{12.10}$$

[5] On en a déjà vu une formulation voisine dans la section 9.2. Voir aussi la section 12.7.1.

avec $k = 2\pi/\lambda$. Ce nombre se trouve être la conductance moyenne sans dimension (au spin près) d'un fil de longueur L et de section S (relation 7.23). Il est très grand dans la limite $kl_e \gg 1$ de faible désordre. Il est typiquement de l'ordre de 10^2 pour les suspensions habituellement étudiées [265]. On peut supposer que les croisements ne sont pas corrélés, et la probabilité que deux diffusons se croisent n fois est simplement proportionnelle à $1/g^n$. Ceci nous permet de classer formellement toutes les contributions à la fonction de corrélation de l'intensité à partir du nombre de croisements. On obtient ainsi les contributions schématisées sur la figure 12.6, la première étant celle de la figure 12.5.*b*. Dans les sections suivantes, on évalue ces différentes contributions.

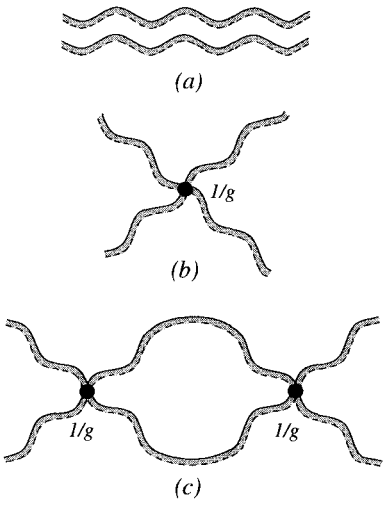


FIG. 12.6 – *Classification schématique des contributions à la fonction de corrélation $C_{aba'b'}$ en fonction du nombre d'intersections des deux diffusons. À chaque croisement la contribution correspondante doit être multipliée par le facteur $1/g \ll 1$. Ces trois contributions sont notées $C^{(1)}$, $C^{(2)}$ et $C^{(3)}$.*

12.3 Coefficient de transmission moyen

Afin de calculer la valeur moyenne des coefficients de transmission et de réflexion, on se place à l'approximation du diffuson qui consiste à évaluer le produit des amplitudes suggéré par la figure 12.7. En réflexion, l'intensité émergente moyenne est donnée par la relation (8.6), et le coefficient de réflexion est, pour la géométrie de la tranche, donné par l'albédo (8.13). Pour le coefficient de transmission moyen, on obtient une expression analogue [6]

$$\boxed{\overline{T}_{ab} = \frac{4\pi R^2}{cI_0 S} \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 |\overline{\psi}_a(\boldsymbol{r}_1)|^2 \Gamma(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) |\overline{G}^R(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{R})|^2} \tag{12.11}$$

[6] On suppose que la différence d'indice optique entre les milieux est négligeable.

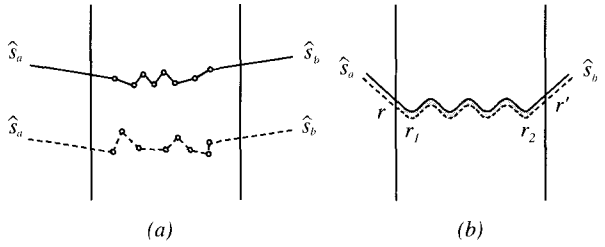


FIG. 12.7 – *Représentation (a) du produit de deux amplitudes ψ correspondant à deux ondes planes incidentes selon $\hat{\mathbf{s}}_a$ et émergentes selon $\hat{\mathbf{s}}_b$ et (b) du diffuson qui en résulte et qui représente la contribution principale au coefficient de transmission moyen $\overline{\mathcal{T}}_{ab}$. Les points $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$ sont situés sur l'interface et $(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ décrivent les extrêmités de la séquence de diffusion multiple.*

où $\Gamma(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ est le facteur de structure pris à fréquence nulle et où $\overline{\psi}_a(\boldsymbol{r}_1)$ décrit une onde plane incidente qui est amortie en entrant dans le milieu diffusant (relation 8.7)

$$\overline{\psi}_a(\boldsymbol{r}_1) = \sqrt{\frac{cI_0}{4\pi}} e^{-|\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}|/2l_e} e^{-ik\hat{\mathbf{s}}_a.\boldsymbol{r}_1} \quad . \tag{12.12}$$

$\boldsymbol{r}$ est un point de l'interface (fig. 12.7.*b*). La fonction de Green moyenne $\overline{G}^R(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{R})$ décrit la propagation depuis la dernière impureté jusqu'à un point $\boldsymbol{R}$ situé à grande distance hors du milieu. Dans cette limite, dite de Fraunhoffer (relation 8.9), on a

$$\overline{G}^R(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{R}) = e^{-|\boldsymbol{r}' - \boldsymbol{r}_2|/2l_e} e^{-ik\hat{\mathbf{s}}_b.\boldsymbol{r}_2} \frac{e^{-ikR}}{4\pi R} \tag{12.13}$$

où $\boldsymbol{r}'$ est un point de l'interface. On en déduit que

$$\overline{\mathcal{T}}_{ab} = \frac{1}{(4\pi)^2 S} \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 e^{-z_1/\mu_a l_e} e^{-|L - z_2|/\mu_b l_e} \Gamma(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2) \tag{12.14}$$

où μ_a (μ_b) est la projection du vecteur $\hat{\boldsymbol{s}}_a$ ($\hat{\boldsymbol{s}}_b$) sur l'axe Oz. Cette expression est à comparer à (7.160). Pour la géométrie de la tranche, le facteur de structure $\Gamma(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2)$ est fonction des variables z_1, z_2 et $\boldsymbol{\rho} = (\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1)_\perp$. En effectuant les intégrales sur z_1 et z_2 et en utilisant (4.63), on obtient [7]

$$\overline{\mathcal{T}}_{ab} = \frac{c}{4\pi} \mu_a \mu_b \int_S d^2\boldsymbol{\rho}\, P_d(\boldsymbol{\rho}, l_e\mu_a, L - l_e\mu_b) = \frac{c}{4\pi} \mu_a \mu_b P_d(0, l_e\mu_a, L - l_e\mu_b) \tag{12.15}$$

[7] Toutes les intégrales sur les exponentielles qui apparaissent en transmission sont telles que

$$\int_0^\infty dz e^{-z/l_e} f(z) = l_e f(l_e)$$

car $f(z)$ est une fonction qui varie linéairement au voisinage de l'interface.

où la fonction $P_d(k_\perp, z, z')$ est la transformée de Fourier bidimensionnelle

$$P_d(\boldsymbol{k}_\perp, z, z') = \int d^2\boldsymbol{\rho} P_d(\boldsymbol{\rho}, z, z') e^{-i\boldsymbol{k}_\perp \cdot \boldsymbol{\rho}} \quad . \tag{12.16}$$

Pour $k_\perp = 0$, cette fonction est donnée, avec les bonnes conditions aux limites, par la relation (5.158) :

$$P_d(z, z') = \frac{z_m + z_0}{D} \frac{L + z_0 - z_M}{L + 2z_0} \tag{12.17}$$

avec $z_m = \min(z, z')$, $z_M = \max(z, z')$ et $z_0 = 2l_e/3$. On en déduit le coefficient de transmission moyen

$$\overline{T}_{ab} = \frac{3}{4\pi} \frac{l_e}{L} \mu_a \mu_b \left(\mu_a + \frac{z_0}{l_e}\right) \left(\mu_b + \frac{z_0}{l_e}\right) \quad . \tag{12.18}$$

Celui-ci a une faible dépendance angulaire tout comme le coefficient de réflexion (voir aussi la figure 8.8 pour l'albédo moyen) qui provient des cosinus directeurs dans les termes d'atténuation exponentielle. Aux petits angles, cette dépendance est négligeable et nous n'en tiendrons plus compte. Ainsi, en prenant $\mu_a = \mu_b = 1$ [8] :

$$\boxed{\overline{T}_{ab} = \frac{3}{4\pi} \frac{(l_e + z_0)^2}{l_e L} = \frac{25}{12\pi} \frac{l_e}{L}} \tag{12.19}$$

La physique décrite dans ce chapitre n'est pas liée de façon essentielle à la nature précise de la conversion d'une onde balistique en onde diffusive. Toutes les fonctions de corrélation sont normalisées par le coefficient de transmission et ne dépendent donc pas de la longueur z_0. Dans la suite, afin d'alléger les formules, nous posons $z_0 = 0$. Il est facile de modifier les résultats obtenus afin de tenir compte d'un z_0 fini.

12.4 Corrélations angulaires en transmission

Nous allons maintenant étudier chacune des contributions à $C_{aba'b'}$ qui correspondent aux trajectoires de diffusion schématisées par la figure 12.6.

12.4.1 Corrélation $C^{(1)}$ à courte portée

Il s'agit d'évaluer le terme correspondant à la figure 12.5.*b*. Son calcul est très similaire à celui du coefficient de transmission moyen $\overline{T}_{ab}$, mais les

[8] Ce résultat est de la forme $\beta l_e/L$, où le coefficient β est précisément celui qui décrit la dépendance angulaire du cône de rétrodiffusion (équation 8.33). Le lecteur cherchera à comprendre pourquoi.

directions a et a' ainsi que b et b' étant différentes, il apparaît des facteurs de phase supplémentaires. De manière analogue à (12.14) on obtient

$$\overline{\psi_{ab}\psi^*_{a'b'}} = \frac{cI_0}{(4\pi)^3 R^2}\int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 e^{ik[\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a.\boldsymbol{r}_1-\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b.\boldsymbol{r}_2]}e^{-z_1/l_e}e^{-|L-z_2|/l_e}\Gamma(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2) \tag{12.20}$$

en posant $\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a = \hat{\boldsymbol{s}}_a - \hat{\boldsymbol{s}}_{a'}$ et $\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b = \hat{\boldsymbol{s}}_b - \hat{\boldsymbol{s}}_{b'}$. On considère des différences $\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a$ et $\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b$ suffisamment petites pour pouvoir négliger leur projection le long de l'axe Oz. En utilisant (12.1) et (12.2), il vient

$$\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}} = \left(\frac{1}{(4\pi)^2 S}\int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 e^{ik[\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a.\boldsymbol{r}_1-\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b.\boldsymbol{r}_2]}e^{-z_1/l_e}e^{-|L-z_2|/l_e}\Gamma(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\right)^2 . \tag{12.21}$$

Pour la géométrie de la tranche, le facteur de structure $\Gamma(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$ est fonction des variables z_1, z_2 et $\boldsymbol{\rho} = (\boldsymbol{r}_2 - \boldsymbol{r}_1)_\perp$. En effectuant les intégrales sur z_1 et z_2 (voir note 7) et en utilisant (4.63), on obtient

$$\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}} = \left(\frac{c}{4\pi}\delta_{\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a,\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b}\int_S d^2\boldsymbol{\rho} e^{ik\boldsymbol{\rho}.\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a}P_d(\boldsymbol{\rho}, l_e, L-l_e)\right)^2 \tag{12.22}$$

soit

$$\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}} = \left(\frac{c}{4\pi}\delta_{\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a,\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b}P_d(q_a, l_e, L-l_e)\right)^2 \tag{12.23}$$

avec $q_a = k|\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a|$. La transformée de Fourier $P(q_a, l_e, L-l_e)$ est donnée par la relation (5.55)

$$P_d(q_a, z, z') = \frac{1}{D}\frac{\sinh q_a z_m \sinh q_a(L-z_M)}{q_a \sinh q_a L} \tag{12.24}$$

et donc

$$P_d(q_a, l_e, L-l_e) = \frac{1}{D}\frac{\sinh^2 q_a l_e}{q_a \sinh q_a L} \simeq \frac{3}{c}\frac{q_a l_e}{\sinh q_a L} \tag{12.25}$$

dans la limite où $q_a l_e \ll 1$. Il vient finalement,

$$\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}} = \overline{\mathcal{T}}_{ab}\,\overline{\mathcal{T}}_{a'b'}\delta_{\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a,\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b}F_1(q_a L) \tag{12.26}$$

avec

$$F_1(x) = \left(\frac{x}{\sinh x}\right)^2 . \tag{12.27}$$

La fonction de corrélation $C^{(1)}_{aba'b'}$ est donc donnée par [266]

$$\boxed{C^{(1)}_{aba'b'} = \delta_{\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a,\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b}F_1(q_a L) = \delta_{\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a,\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b}\left(\frac{q_a L}{\sinh q_a L}\right)^2} \tag{12.28}$$

avec $q_a = k|\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a|$. Ce résultat permet de décrire un grand nombre de caractéristiques d'une figure de speckle, dont certaines sont *a priori* inattendues. Tout d'abord, lorsque $a' = a$, $b' = b$, on obtient l'expression de l'amplitude des fluctuations de speckle c'est-à-dire $\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}^2} = \overline{\mathcal{T}_{ab}}^2$. On retrouve la loi de Rayleigh (12.9) à savoir que l'intensité relative des fluctuations est de l'ordre de l'unité. Cette granulosité est la caractéristique principale d'une figure de speckle ainsi que le montre la figure 12.1.

Remarque : Taches de speckle et canaux de transmission

Le résultat (12.26) décrit le cas d'une surface infinie éclairée par une onde plane étendue. Pour un faisceau incident de section finie S, le symbole de Kronecker $\delta_{\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a,\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b}$ doit être remplacé par une fonction $f(\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a - \Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b)$ reliée à la transformée de Fourier du faisceau incident, ce qui est obtenu facilement en revenant à l'expression (12.21)

$$f(\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a - \Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b) = \left(\frac{1}{S}\int_S d^2\boldsymbol{\rho}\; e^{ik\boldsymbol{\rho}.(\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a - \Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b)}\right)^2 \quad . \tag{12.29}$$

Par exemple, pour un faisceau cylindrique de largeur W,

$$f(\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a - \Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b) = \left(\frac{J_1(q_{ab}W)}{q_{ab}W/2}\right)^2 \tag{12.30}$$

avec $q_{ab} = k|\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a - \Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b|$. Pour un faisceau gaussien $e^{-\rho^2/W^2}$ (dans ce cas, la section effective est $S = \pi W^2$), on obtient

$$f(\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a - \Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b) = e^{-q_{ab}^2 W^2/4} \quad . \tag{12.31}$$

Pour un faisceau incident donné, la variation de l'intensité observée sur l'écran, c'est-à-dire la dépendence angulaire du signal reçu, est décrite par la fonction de corrélation obtenue en prenant $a = a'$

$$\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{ab'}} = \overline{\mathcal{T}_{ab}}^2 f(\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b) \tag{12.32}$$

où la fonction f est de portée angulaire $1/kW$. La largeur angulaire des taches de speckle est donc de l'ordre de $1/kW$. Par conséquent, pour un écran placé à distance R, la largeur des taches est de l'ordre de $\lambda R/W$ et chacune peut être associée à un *mode* ou *canal transverse* de propagation du faisceau incident. Le nombre de modes est donc de l'ordre de k^2W^2. Ces modes sont analogues aux modes de propagation dans un guide d'onde. Ils jouent aussi un rôle important dans la théorie de Landauer du transport électrique (complément C7.2).

La fonction de corrélation (12.28) contient une autre information intéressante et inattendue. La forme (12.29) de la fonction f implique qu'un déplacement $\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a$ du faisceau incident se traduit par un déplacement identique $\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b \simeq \Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a$ du faisceau émergent. Ainsi, en changeant l'orientation du faisceau incident, on observe un déplacement en bloc de la figure de speckle. Cette observation, appelée *effet mémoire* [267,268], est remarquable car elle montre qu'au terme du processus de diffusion multiple, il reste une information sur la nature du faisceau incident [267]. Cet effet disparaît pour $\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a \simeq 1/kL$, c'est-à-dire quand la fonction F_1 tend vers zéro (figs. 12.8.*b*,*c*).

Il existe d'autres contributions, plus petites, à la fonction de corrélation $C_{aba'b'}$ qui ont des structures angulaires différentes. La contribution $C^{(1)}$

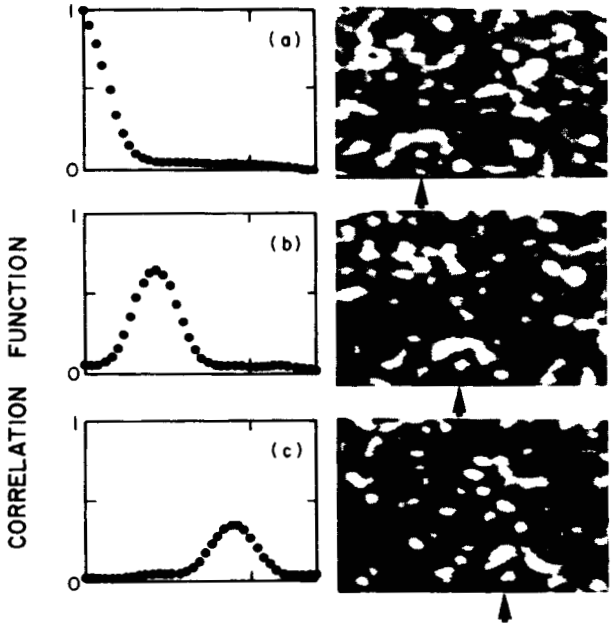


FIG. 12.8 – *Les figures de droite montrent des images d'une figure de* speckle *en transmission, obtenues en faisant varier l'angle d'incidence. La flèche permet de suivre un détail particulier. La première figure correspond à une direction donnée du faisceau incident et sert de référence. En inclinant légèrement le faisceau incident (*10 *mdeg, puis* 20 *mdeg), on constate que la figure de* speckle *se déplace, gardant la « mémoire » de la figure initiale. Pour un angle trop important, la figure finit par se déformer. Les courbes montrent la fonction de corrélation* $C_{aba'b'}$ *en fonction de l'angle* $\Delta\hat{\mathbf{s}}_b$. *La première est obtenue en prenant l'autocorrélation (donc* $a = a'$*) de la première figure de* speckle. *La largeur du pic est d'ordre* $1/kW$. *Les deux autres corrèlent deux figures correspondant à des angles d'incidence différents (*10 *mdeg, puis* 20 *mdeg). Elle est maximale lorsque* $\Delta\hat{\mathbf{s}}_b = \Delta\hat{\mathbf{s}}_a$, *et le maximum est donné par la fonction* $F_1(kL|\Delta\hat{\mathbf{s}}_a|)$. *La corrélation disparaît lorsque* $|\Delta\hat{\mathbf{s}}_a| \simeq 1/kL$ *[267].*

contient des amplitudes appariées correspondant à des angles différents à l'entrée et à la sortie. Ainsi, on note symboliquement les appariements de la figure 12.5.*b* :

$$\boxed{C^{(1)} : \quad (aa')(aa') \longrightarrow (bb')(bb')} \tag{12.33}$$

Exercice 12.1 : Corrélation d'une figure de speckle en réflexion

On note $\mathcal{R}_{ab}$ le coefficient de réflexion (c'est-à-dire l'albédo dans les notations du chap. 8).

• Montrer, en modifiant l'expression (12.21), que la fonction de corrélation de $\mathcal{R}_{ab}$ s'écrit :

$$\overline{\delta\mathcal{R}_{ab}\delta\mathcal{R}_{a'b'}} = \left(\frac{1}{(4\pi)^2 S}\int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 e^{ik[\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a.\boldsymbol{r}_1-\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b.\boldsymbol{r}_2]}e^{-z_1/l_e}e^{-z_2/l_e}\Gamma(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\right)^2 \tag{12.34}$$

soit encore

$$\overline{\delta\mathcal{R}_{ab}\delta\mathcal{R}_{a'b'}} = \delta_{\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a,\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b}\left(\frac{c}{4\pi l_e^2}\int_0^\infty dz_1 dz_2 e^{-z_1/l_e}e^{-z_2/l_e}P_d(q_a,z_1,z_2)\right)^2 \tag{12.35}$$

avec $q_a = k|\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a|$.

• Montrer que cette expression fait apparaître le carré de l'albédo cohérent $\alpha_c(q_a)$ donné par la relation (8.26)

$$\frac{\overline{\delta\mathcal{R}_{ab}\delta\mathcal{R}_{a'b'}}}{\overline{\mathcal{R}}_{ab}\overline{\mathcal{R}}_{a'b'}} = \delta_{\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a,\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b}\left(\frac{\alpha_c(q_a)}{\alpha_c(0)}\right)^2 . \tag{12.36}$$

En déduire que, en réflexion, les figures de speckle sont constituées de taches de largeur angulaire $1/kW$ et présentent un effet mémoire comme en transmission. En revanche, cet effet mémoire existe dans un domaine angulaire beaucoup plus grand, de l'ordre de $1/kl_e$ au lieu de $1/kL$ en transmission.
Comme on l'a vu dans la section 8.8 pour l'albédo moyen, la description des corrélations en réflexion est plus difficile qu'en transmission car il faut tenir compte de la contribution des trajectoires courtes, qui dépend de la nature des diffuseurs et des propriétés de l'interface. Néanmoins cette description doit être correcte pour les petits angles ($q_a l_e < 1$) qui correspondent aux trajectoires longues.
Si on mesure les corrélations de speckle autour de la direction de rétrodiffusion, la cohérence associée au cooperon conduit à des effets supplémentaires décrits dans la référence [269].

12.4.2 Corrélation $C^{(2)}$ à longue portée

Il existe d'autres contributions à la fonction de corrélation, faisant intervenir des croisements de diffusons, lors de l'appariement des trajectoires de diffusion multiple (fig. 12.4). Ces contributions sont plus petites mais nous allons voir qu'elles ont une portée angulaire plus grande.

On commence par la contribution à un seul croisement. Celui-ci est décrit par une boîte de Hikami et la figure 12.9 indique quelles sont les deux seules combinaisons possibles. On constate en particulier que deux diffusons incidents sont nécessairement sur une même diagonale de la boîte, ce qui explique la structure des représentations *(a)* et *(b)*. Du fait du croisement des diffusons, on s'attend à une contribution plus petite, d'ordre $1/g$, et qui ne présente pas d'effet mémoire. En effet, la structure angulaire est différente

de celle (12.33) de $C^{(1)}$ puisque le croisement des deux diffusons échange les canaux a et a' et correspond à

$$\boxed{C^{(2)} : \quad \begin{array}{l} (aa)(a'a') \longrightarrow (bb')(bb') \\ \text{et} \\ (aa')(aa') \longrightarrow (bb)(b'b') \end{array}} \tag{12.37}$$

La fonction de corrélation correspondante est

$$\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}^{(2)} = \frac{1}{(4\pi)^4 S^2}\int\prod_{i=1}^{4} d\boldsymbol{r}_i[e^{ik\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b\cdot(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_4)} + e^{ik\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a\cdot(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_3)}]E(z_i)$$
$$\times\int\prod_{i=1}^{4} d\mathbf{R}_i H(\mathbf{R}_i)\Gamma(\boldsymbol{r}_1,\mathbf{R}_1)\Gamma(\boldsymbol{r}_3,\mathbf{R}_3)\Gamma(\mathbf{R}_2,\boldsymbol{r}_2)\Gamma(\mathbf{R}_4,\boldsymbol{r}_4) \tag{12.38}$$

où on a défini

$$E(z_i) = e^{-(z_1+z_3)/l_e}e^{-|L-z_2|/l_e}e^{-|L-z_4|/l_e} \quad . \tag{12.39}$$

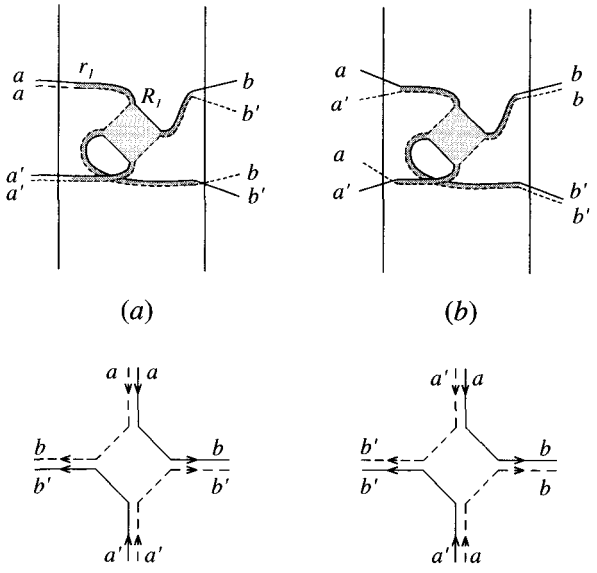


FIG. 12.9 – *Contribution à $\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}$ contenant un seul croisement des deux diffusons. Les différents cas correspondent à des configurations des ondes planes incidentes selon $\hat{\boldsymbol{s}}_a$ et $\hat{\boldsymbol{s}}_{a'}$ et émergentes selon $\hat{\boldsymbol{s}}_b$ et $\hat{\boldsymbol{s}}_{b'}$. (a) dépend de $\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b$ mais pas de $\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a$ et c'est le contraire pour (b).*

Considérons le premier terme de l'expression (12.38), associé à la figure 12.9.a. On choisit l'expression (4.152) de la boîte de Hikami pour laquelle

l'application des gradients porte sur les diffusons entrant. À l'aide de (4.63), on déduit

$$\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}^{(2)} = \frac{2h_4}{(4\pi)^4 S^2}\left(\frac{4\pi c}{l_e^2}\right)^4 \int \prod_{i=1}^{4} d\boldsymbol{r}_i e^{ik\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b.(\boldsymbol{r}_2-\boldsymbol{r}_4)} E(z_i)$$
$$\times \int d\boldsymbol{r}\left[\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} P_d(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}).\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{r}} P_d(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r})\right] P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_2) P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_4) \quad (12.40)$$

avec $h_4 = l_e^5/(48\pi k^2)$. Effectuer les intégrales sur z_i revient à prendre $z_1 = z_3 = l_e$ et $z_2 = z_4 = L - l_e$ [7]. En utilisant la transformée de Fourier (12.16), on obtient

$$\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}^{(2)} = \frac{l_e c^4}{24\pi k^2 S}\int_0^L dz\left[\partial_z P_d(0,l_e,z)\right]^2 P_d(q_b,z,L-l_e)^2 \quad (12.41)$$

où $q_b = k|\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b|$. Par ailleurs, pour $q_b l_e \ll 1$,

$$\partial_z P_d(0,l_e,z) = -\frac{l_e}{DL} \quad , \quad P_d(q_b,z,L-l_e) = \frac{l_e}{D}\frac{\sinh q_b z}{\sinh q_b L} \quad (12.42)$$

de sorte que [9]

$$\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}^{(2)} = \frac{81}{48\pi}\frac{l_e}{k^2 LS}F_2(q_b L) \quad . \quad (12.43)$$

On a introduit la fonction

$$F_2(x) = \frac{1}{\sinh^2 x}\left(\frac{\sinh 2x}{2x} - 1\right) \quad (12.44)$$

avec les comportements limites

$$\begin{array}{ll} x \to 0 & F_2(x) \to 2/3 \\ x \to \infty & F_2(x) \to 1/x \quad . \end{array}$$

En utilisant l'expression (12.19) du coefficient de transmission moyen $\overline{\mathcal{T}}_{ab}$, et en rajoutant la contribution du diagramme 12.9.*b* qui se calcule de manière identique, la fonction de corrélation se met sous la forme [268, 270, 271]

$$\boxed{C^{(2)}_{aba'b'} = \frac{\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}^{(2)}}{\overline{\mathcal{T}}_{ab}^2} = \frac{1}{g}\left[F_2(q_a L) + F_2(q_b L)\right]} \quad (12.45)$$

où $q_a = k|\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_a|$ et $q_b = k|\Delta\hat{\boldsymbol{s}}_b|$. On a fait apparaître la « conductance » g sans dimension donnée par la relation (12.10). Du fait du croisement des deux

[9] On vérifie que le résultat exact prenant en compte la longueur z_0 consiste à remplacer l_e par $(l_e + z_0)^4/l_e^3$. Cette dépendance disparaît lorsqu'on divise par $\overline{\mathcal{T}}_{ab}^2$ pour obtenir la fonction de corrélation $C^{(2)}$.

diffusons, la contribution $C^{(2)}$ est plus faible que $C^{(1)}$ dans un rapport $1/g$. C'est ce facteur $1/g$ qui apparaît dans la correction de localisation faible à la conductivité (sections 7.4 et C7.2.5).

Au lieu de présenter une décroissance exponentielle comme la fonction $C^{(1)}_{aba'b'}$, cette contribution à la fonction de corrélation décroît algébriquement et ne disparaît que si *à la fois* $\Delta\hat{s}_a$ *et* $\Delta\hat{s}_b$ sont grands. Ainsi, pour la figure de speckle associée à un faisceau incident $a = a'$, il reste des corrélations à longue portée angulaire mais de faible amplitude

$$C^{(2)}_{abab'} = \frac{1}{g}\left(\frac{2}{3} + F_2(q_b L)\right) \xrightarrow{b\neq b'} \frac{2}{3g} \quad . \tag{12.46}$$

Comme cette contribution, qui se rajoute à $C^{(1)}$, a une longue portée, il est possible de la mettre en évidence expérimentalement. On montre dans les sections 12.5 et 12.6 comment la mesure des corrélations en temps ou à fréquence finie permet de séparer les deux contributions.

12.4.3 Corrélation $C^{(3)}$ associée à deux croisements de diffusons

Considérons maintenant le terme suivant $C^{(3)}_{aba'b'}$ associé à deux croisements de diffusons, c'est-à-dire faisant intervenir deux boîtes de Hikami. La figure 12.10 montre les différentes structures possibles d'une boîte reliée à un diffuson entrant et à un diffuson sortant. Il est facile de montrer que les seuls appariements possibles des trajectoires de diffusion multiple sont ceux de la figure 12.11 (voir le détail des trajectoires sur la figure 12.12). Dans le diagramme K_1^d, les deux boîtes sont de la forme donnée par la figure 12.10.*a* et sont donc nécessairement reliées par deux diffusons. Dans le diagramme K_2^c, elles sont de la forme 12.10.*b* et sont donc reliées par deux cooperons. Enfin, il existe deux diagrammes K_3 pour lesquels les deux boîtes sont de la forme 12.10.*a* ou 12.10.*c*. Elles peuvent donc être reliées soit par deux diffusons, soit par deux cooperons.

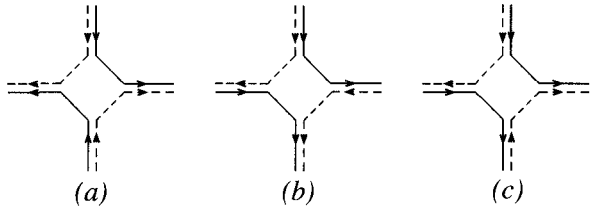


FIG. 12.10 – *Les possibilités de boîtes de Hikami avec un diffuson entrant et un diffuson sortant.*

Afin d'évaluer ces quatre diagrammes, on applique la même méthode que pour le calcul de $C^{(2)}$. Notons d'abord que les diagrammes de la figure 12.11

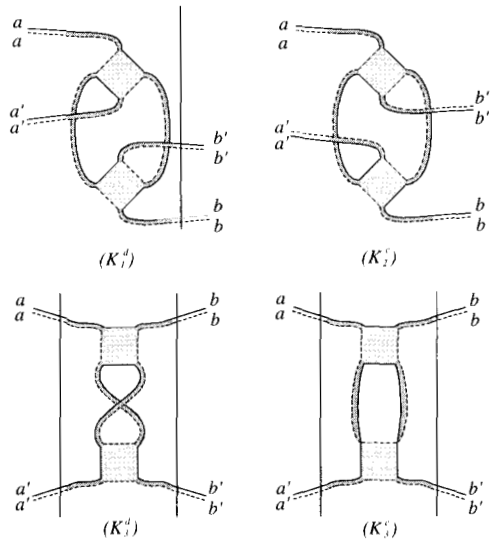


FIG. 12.11 – *Représentation des contributions à* $\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}^{(3)}$ *contenant deux croisements de diffusons. Les règles de la figure 12.10 montrent que le diagramme* K_1^d *contient nécessairement deux diffusons et le diagramme* K_2^c *contient deux cooperons. Pour s'en convaincre, il suffit d'orienter les trajectoires comme sur la figure 12.12. Il existe deux diagrammes* K_3*, l'un avec deux diffusons* K_3^d*, l'autre avec deux cooperons* K_3^c*. Les diagrammes* K_3^d *et* K_1^d *ont la même structure que les diagrammes de fluctuation de conductance des figures 11.3.a et 11.3.b. Les diagrammes* K_3^c *et* K_2^c *sont leurs analogues pour les cooperons.*

n'ont pas de structure angulaire puisqu'ils correspondent à la combinaison

$$\boxed{C^{(3)}: \quad (aa)(a'a') \longrightarrow (bb)(b'b')} \tag{12.47}$$

Commençons par évaluer le diagramme K_1^d en suivant la même démarche que pour le calcul de $C^{(2)}$. Il y a maintenant deux boîtes de Hikami pour lesquelles on choisit d'appliquer les gradients sur les diffusons extérieurs. On obtient ainsi

$$\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}^{(3)}|_{K_1} = (2h_4)^2 \frac{l_e^4}{(4\pi)^4 S^2}\left(\frac{4\pi c}{l_e^2}\right)^4$$
$$\times \int_0^L \int_0^L dz dz' [\partial_z P_d(0,l_e,z)]^2\, P_d(0,z,z')^2\, [\partial_{z'} P_d(0,z',L-l_e)]^2 \quad . \tag{12.48}$$

La probabilité $P_d(z, z')$ donnée par (5.58) est une fonction linéaire de z et de z' de sorte que les gradients sont des termes constants et

$$C^{(3)}_{aba'b'}|_{K_1} = \frac{4}{g^2}\frac{D^2}{L^4}\int_0^L\int_0^L dzdz' P_d(z,z')^2 \quad . \tag{12.49}$$

En intégrant, on trouve ce terme égal à $2/45g^2$. Le calcul du diagramme K_2^c est identique à celui de K_1^d mais les trajectoires de diffusion internes sont des cooperons. Le calcul de K_3 est un peu plus délicat. En effet, le produit des dérivées associé aux boîtes de Hikami opère à la fois sur un diffuson interne et un diffuson externe. Toutefois, après une intégration par parties, on trouve que la contribution des diagrammes K_3^d et K_3^c est la moitié de celle de K_1^d et K_2^c. On obtient finalement [268, 269, 272, 273]

$$\boxed{C^{(3)}_{aba'b'} = \frac{\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}^{(3)}}{\overline{\mathcal{T}_{ab}}^2} = \frac{2}{15}\frac{1}{g^2}} \tag{12.50}$$

ou, en utilisant l'expression (12.19),

$$\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}^{(3)} = \frac{27}{40k^4S^2}\left(\frac{l_e+z_0}{l_e}\right)^4 = \frac{125}{24k^4S^2} \quad . \tag{12.51}$$

Cette contribution aux fluctuations est *universelle*, en ce sens qu'elle ne dépend pas de l_e, donc de l'amplitude du désordre. Elle est de même nature que les fluctuations universelles de conductance. On note d'ailleurs que les diagrammes de la figure 12.11 ont une structure identique à ceux de la figure 11.4. Ils n'ont pas de dépendance angulaire puisqu'ils correspondent à la combinaison (12.47).

Il est aisé de vérifier qu'il existe d'autres diagrammes à deux croisements qui ont la dépendance angulaire de $C^{(1)}$ ou de $C^{(2)}$ [10]. Pour obtenir des diagrammes ayant celle de $C^{(1)}$ (combinaison 12.33) , il suffit de considérer ceux de la figure 12.11 et d'apparier les amplitudes a et a' au lieu de a et a à l'entrée et de constater qu'en sortie les directions b et b' se trouvent appariées. Le lecteur vérifiera que pour obtenir un diagramme ayant la structure $C^{(2)}$ (combinaison 12.37), il faut que les deux croisements soient différents, l'un étant un « carré » et l'autre un « losange ». On ne considérera pas ces diagrammes plus en détail, car ils représentent des corrections petites (d'ordre $1/g^2$) par rapport aux contributions $C^{(1)}$ et $C^{(2)}$ déjà calculées [272].

[10] Il est d'ailleurs d'usage [269–271, 274] de classer les contributions $C^{(1)}$, $C^{(2)}$ et $C^{(3)}$ selon leur dépendance angulaire et non pas selon le nombre de croisements des diffusons. Si on se limite, pour chaque contribution, au terme dominant (d'ordre 1 pour $C^{(1)}$, d'ordre $1/g$ pour $C^{(2)}$ et d'ordre $1/g^2$ pour $C^{(3)}$), ces deux classifications sont identiques.

12.4.4 Lien avec les fluctuations universelles de conductance

Récapitulons les résultats obtenus pour la fonction de corrélation du coefficient de transmission. Trois contributions ont été calculées, qui ont des dépendances angulaires et des amplitudes différentes :

$$\boxed{C_{aba'b'} = \delta_{\Delta\hat{\mathbf{s}}_a,\Delta\hat{\mathbf{s}}_b} F_1(q_a L) + \frac{1}{g}\big[F_2(q_a L) + F_2(q_b L)\big] + \frac{2}{15}\frac{1}{g^2}} \tag{12.52}$$

avec $q_a = k|\Delta\hat{\mathbf{s}}_a|$ et $q_b = k|\Delta\hat{\mathbf{s}}_b|$. Une expérience résolue en angle permet d'accéder essentiellement au premier terme, puisque les suivants sont beaucoup plus petits. En intégrant sur l'angle d'émergence, la contribution du premier terme devient négligeable et on obtient pour les fluctuations du coefficient $\mathcal{T}_a$

$$\frac{\overline{\delta\mathcal{T}_a \delta\mathcal{T}_{a'}}}{\overline{\mathcal{T}_a}\,\overline{\mathcal{T}_{a'}}} = \frac{1}{g} F_2(kL\Delta\hat{\mathbf{s}}_a) + \frac{2}{15}\frac{1}{g^2} \quad . \tag{12.53}$$

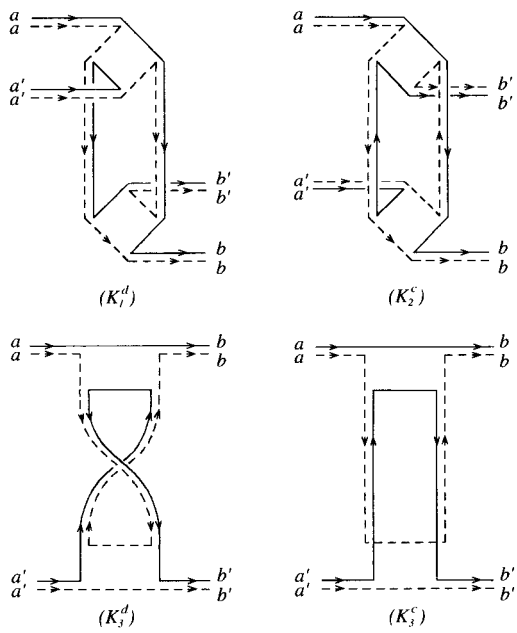


FIG. 12.12 – *Diagrammes de la figure 12.11 sur lesquels on a représenté les appariements entre les différentes trajectoires. Ces diagrammes n'ont pas de structure angulaire. En appariant a et a', on ferait apparaître des diagrammes qui ont la structure angulaire de $C^{(1)}$, mais qui ne sont pas considérés ici.*

Enfin, pour le coefficient $\mathcal{T}$ obtenu en intégrant également sur les angles d'incidence, la contribution intégrée de F_2 est négligeable et il reste :

$$\boxed{\frac{\overline{\delta\mathcal{T}^2}}{\overline{\mathcal{T}}^2} = \frac{2}{15}\frac{1}{g^2}} \tag{12.54}$$

Rappelons que le coefficient de transmission dépend de la géométrie. Pour le guide d'onde, géométrie appropriée à la description des fluctuations de conductance, sa moyenne et sa variance sont données par (section C7.2.5 et complément C11.2)

$$\overline{T} = g \quad , \quad \overline{\delta T^2} = \frac{2}{15} \quad . \tag{12.55}$$

Pour la géométrie d'un tranche dans l'espace libre que nous considérons pour décrire les fluctuations de speckle, on obtient

$$\overline{T} = \frac{4\pi}{3}\frac{l_e}{L} = \frac{\pi g}{M} \quad , \quad \overline{\delta T^2} = \frac{32\pi^4}{15k^4S^2} = \frac{2}{15}\frac{\pi^2}{M^2} \quad . \tag{12.56}$$

Dans les deux cas, le rapport $\overline{\delta T^2}/\overline{T}^2$ ou $\overline{\delta\mathcal{T}^2}/\overline{\mathcal{T}}^2$ est donné par (12.54).

12.5 Corrélation temporelle des figures de speckle

Expérimentalement, il est difficile de séparer les différents termes qui apparaissent dans la fonction de corrélation angulaire (12.52) du coefficient de transmission. Cette fonction est dominée par le premier terme (effet mémoire). Les deux autres termes sont très petits, leur amplitude étant respectivement proportionnelle à $1/g$ et $1/g^2$ avec généralement $g \simeq 10^2$ [265]. De plus, le terme $C^{(3)}$ est constant, c'est-à-dire qu'il affecte uniformément toutes les taches de speckle. Autrement dit, si l'une d'entre elles est plus brillante, toutes les autres le sont dans la même proportion. Afin de mesurer séparément les trois contributions $C^{(i)}$, il faut chercher si chacune d'elles peut dépendre de façon différente d'un paramètre extérieur. Celui-ci peut, par exemple, être le temps introduit par le mouvement des diffuseurs. On est alors amené à mesurer la fonction de corrélation temporelle de l'intensité. Ceci constitue la spectroscopie des ondes diffusées présentée dans les chapitres 6 et 9. Nous allons donc nous intéresser à la fonction de corrélation [11]

$$C_{aba'b'}(t) = \frac{\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}(0)\delta\mathcal{T}_{a'b'}(t)}}{\overline{\mathcal{T}}_{ab}^2} \tag{12.57}$$

[11] Celle-ci n'est autre que la fonction de corrélation de l'intensité $g_2(T)$ définie par la relation (9.2). Dans la définition suivante de la fonction de corrélation, on a changé de notation et on utilise t au lieu de T pour décrire le temps associé au mouvement des diffuseurs.

et montrer que les trois contributions $C^{(1)}$, $C^{(2)}$ et $C^{(3)}$ ont des dépendances temporelles différentes, liées à des appariements distincts des trajectoires correspondant aux temps 0 et t. Le terme principal $C^{(1)}$ décroît exponentiellement avec t tandis que les deux autres contributions décroissent algébriquement, ce qui permet de les séparer expérimentalement les unes des autres.

12.5.1 Corrélations temporelles $C^{(1)}(t)$ et $C^{(2)}(t)$

On reprend la dérivation de $C^{(1)}_{aba'b'}$ mais pour des amplitudes correspondant à des temps différents (fig. 12.13.a). On va supposer que les diffuseurs ont un mouvement brownien et qu'il faut donc remplacer la probabilité $P_d(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ par $P_\gamma(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$. Le paramètre γ est tel que $\gamma = t/(2\tau_e\tau_b)$ où τ_b est le temps associé au mouvement brownien des diffuseurs (section 9.5).

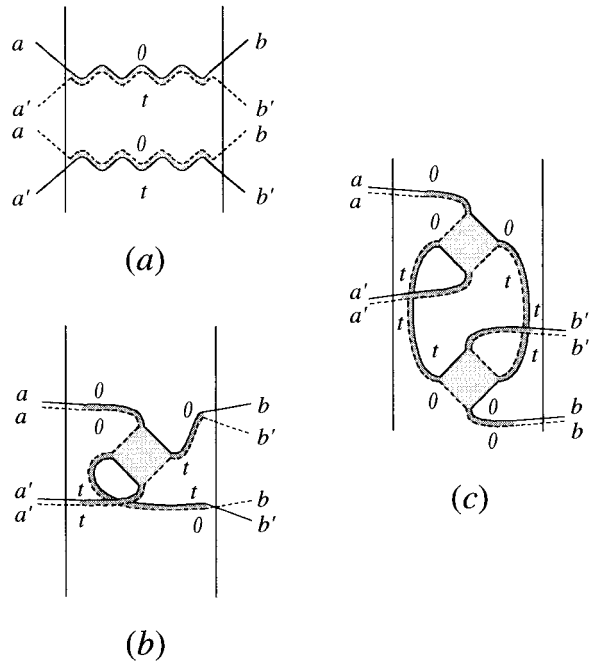


FIG. 12.13 – *Dépendances temporelles de $C^{(1)}(t)$, $C^{(2)}(t)$ et $C^{(3)}(t)$. Pour $C^{(1)}(t)$, le temps t induit un déphasage pour les deux diffusons. Pour la contribution (b) à $C^{(2)}(t)$, seuls les diffusons situés après le croisement sont modifiés car les amplitudes associées aux trajectoires qui les constituent ne sont déphasées qu'après le croisement. Pour $C^{(3)}(t)$, seuls les diffusons qui forment la boucle fermée située entre les deux croisements sont affectés par le déphasage.*

• Ainsi, pour déterminer $C^{(1)}_{aba'b'}(t)$, il suffit de remplacer, dans la dérivation qui conduit à la relation (12.28), la probabilité $P_d(q_a, z, z')$ par $P_\gamma(q_a, z, z')$.

D'après la correspondance (5.48), ceci revient à garder les expressions obtenues pour $t = 0$, mais à remplacer q_a par $\sqrt{q_a^2 + 1/L_\gamma^2}$ où $L_\gamma = \sqrt{D/\gamma} \propto 1/\sqrt{t}$. Au lieu de (12.28), on obtient donc

$$C^{(1)}_{aba'b'}(t) = \delta_{\Delta\hat{s}_a,\Delta\hat{s}_b} F_1(L/\mathcal{L}_a) \tag{12.58}$$

où la longueur $\mathcal{L}_a$ est donnée par

$$\frac{1}{\mathcal{L}_a} = \sqrt{q_a^2 + \frac{1}{L_\gamma^2}} \quad . \tag{12.59}$$

En particulier, pour des directions fixées d'incidence et d'émergence, la fonction de corrélation temporelle s'écrit :

$$\boxed{C^{(1)}(t) = C^{(1)}_{abab}(t) = F_1(L/L_\gamma) = \left(\frac{L/L_\gamma}{\sinh L/L_\gamma}\right)^2} \tag{12.60}$$

On retrouve le résultat (9.33), en se souvenant que $g_2(t) = |g_1(t)|^2$. Aux grands temps, cette fonction décroît exponentiellement comme cela est observé expérimentalement sur la figure 12.14.

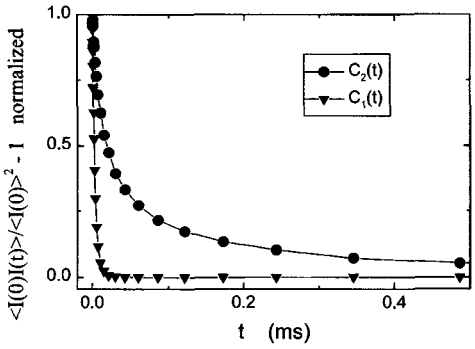


FIG. 12.14 – *Dépendance temporelle des fonctions $C^{(1)}(t)$ et $C^{(2)}(t)$. On remarque que la première décroît exponentiellement aux grands temps tandis que la seconde n'a qu'une décroissance en loi de puissance [265].*

• La dépendance temporelle de la fonction de corrélation $C^{(2)}_{aba'b'}(t)$ s'obtient de manière tout à fait analogue. Pour le diagramme 12.13.*b*, seuls les deux diffusons situés *après* le croisement sont affectés par le déphasage. Il existe un autre diagramme, analogue à 12.9.*b*, où ce sont les diffusons situés *avant* le croisement qui sont affectés par le déphasage. On voit ainsi le rôle joué par le croisement dans l'échange des appariements de trajectoires. Pour

tenir compte du déphasage, il suffit de remplacer dans (12.45), la probabilité $P_d(q_b, z, L - l_e)$ par $P_\gamma(q_b, z, L - l_e)$ donnée par la relation (5.55) et la correspondance (5.46), mais il ne faut pas modifier $P_d(0, l_e, z)$. Dans le cas particulier $a = a'$, $b = b'$, on obtient ainsi

$$\boxed{C^{(2)}(t) = C^{(2)}_{abab}(t) = \frac{2}{g} F_2(L/L_\gamma)} \tag{12.61}$$

où $F_2(x)$ est définie par (12.44) [12]. On note que contrairement à $C^{(1)}(t)$, la corrélation $C^{(2)}(t)$ décroît aux grands temps comme L_γ/L, c'est-à-dire comme $1/\sqrt{t}$ et donc beaucoup plus lentement que $C^{(1)}(t)$, comme le montre la figure 12.14.

La mesure de $C^{(1)}(t)$ est identique à celle que nous avons présentée dans le chapitre 9 à savoir que pour une direction incidente a, on mesure le signal obtenu dans une direction b. Afin de mesurer $C^{(2)}(t)$, on élimine la contribution de $C^{(1)}$ en intégrant angulairement le signal de sortie, c'est-à-dire en moyennant sur un grand nombre de taches de speckle. Par contre, la direction incidente a reste fixée [265].

Exercice 12.2 : Fonction de corrélation $C^{(2)}(t)$ en présence d'absorption

• Montrer qu'en présence d'une absorption finie décrite par la longueur l_a, mais sans mouvement des diffuseurs, il convient de remplacer dans l'expression (12.41) la fonction $P_d(q_b, z, z')$ par $P_\gamma(q_b, z, z')$ et la fonction $P_d(0, z, z')$ par $P_\gamma(0, z, z')$ avec $\gamma = c/l_a$.
En effet, en présence d'une absorption finie, on ne peut plus utiliser pour le calcul de $C^{(2)}$ la correspondance (9.21) établie au chapitre 9 pour la spectroscopie des ondes diffusées, puisque l'absorption affecte *tous* les diffusons. Cette correspondance n'est correcte que pour la corrélation $C^{(1)}$, c'est-à-dire en l'absence de croisement de diffusons (voir fig. 9.1).

• Montrer qu'en présence d'une absorption finie et d'un mouvement des diffuseurs, il faut introduire les deux quantités

$$\gamma_1 = \frac{c}{l_a} \tag{12.62}$$

et

$$\gamma_2 = \frac{c}{l_a} + \frac{D}{L_\gamma^2} \tag{12.63}$$

afin de décrire les diffusons avant et après le croisement.

---

[12] En incluant les dépendances angulaires, on aurait :

$$C^{(2)}_{aba'b'}(t) = \frac{1}{g}\left[F_2(L/\mathcal{L}_a) + F_2(L/\mathcal{L}_b)\right]$$

avec

$$\frac{1}{\mathcal{L}_a} = \sqrt{q_a^2 + \frac{1}{L_\gamma^2}} \qquad \frac{1}{\mathcal{L}_b} = \sqrt{q_b^2 + \frac{1}{L_\gamma^2}} \quad .$$

12.5.2 Corrélation temporelle $C^{(3)}(t)$

Le calcul de $C^{(3)}_{aba'b'}(t)$ est plus délicat : pour le cas stationnaire ($t = 0$) nous avions un terme sans dépendance angulaire (12.50), et on ne peut donc pas simplement remplacer le vecteur d'onde q_a par l'inverse de la longueur $\mathcal{L}_a$ comme pour le calcul de $C^{(1)}(t)$ et de $C^{(2)}(t)$.

La figure 12.13.c montre que seule la boucle comprise entre les deux croisements est affectée par le mouvement des diffuseurs. Pour avoir la fonction $C^{(3)}(t)$, il suffit donc de remplacer $P_d(q = 0, z, z')$ par $P_\gamma(q = 0, z, z')$ dans l'expression (12.49). On obtient ainsi [13]

$$C^{(3)}(t) = \frac{12}{g^2}\frac{D^2}{L^4}\int_0^L \int_0^L dzdz' P_\gamma^2(q = 0, z, z') \tag{12.64}$$

où $P_\gamma(q = 0, z, z')$ est donnée par (5.55). L'intégrale conduit à

$$\boxed{C^{(3)}(t) = \frac{1}{g^2}F_3(L/L_\gamma)} \tag{12.65}$$

où la fonction $F_3(x)$ est égale à

$$F_3(x) = \frac{3}{2}\frac{2 + 2x^2 - 2\cosh 2x + x\sinh 2x}{x^4 \sinh^2 x} \tag{12.66}$$

et a les comportements asymptotiques

$$\begin{array}{ll} x \to 0 & F_3(x) \to 2/15 \\ x \to \infty & F_3(x) \to 3/x^3 \end{array} .$$

On retrouve l'expression (12.50) de $C^{(3)}(0)$ en prenant la limite $L_\gamma \to \infty$.

La décroissance temporelle de $C^{(3)}(t)$ est plus lente que celle de $C^{(2)}(t)$. Son amplitude proportionnelle à $1/g^2$ rend son observation expérimentale difficile. Cette fonction de corrélation a néanmoins été mesurée [275] et elle est représentée sur la figure 12.15. Sa mesure nécessite d'éliminer $C^{(1)}(t)$ et $C^{(2)}(t)$. La contribution $C^{(1)}$ disparaît en intégrant sur les directions de sortie. Afin de séparer les deux autres contributions $C^{(2)}$ et $C^{(3)}$, on augmente la probabilité $1/g \propto L/W^2$ de croisement au moyen d'une ouverture de largeur W comme cela est représenté sur la figure 12.16. Ainsi la contribution à $C^{(3)}(t)$ qui provient principalement des boucles fermées dans la région de longueur L est amplifiée. De plus, en diminuant l'épaisseur L_1 de la première région, on diminue la contribution de $C^{(2)}(t)$ qui provient principalement des chemins situés dans cette région.

[13] Un facteur 3 prend en compte les autres contributions de la figure 12.12.

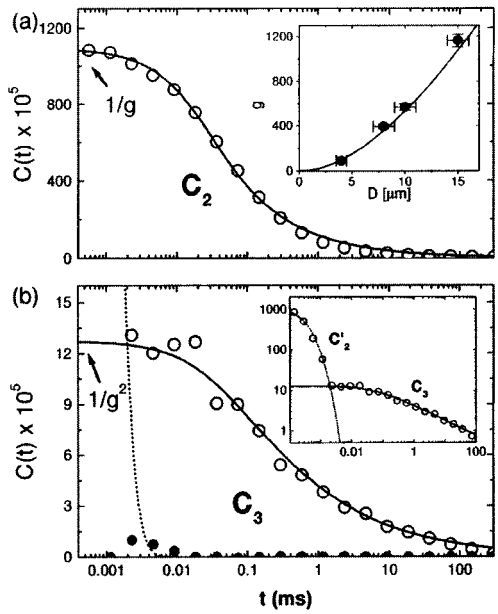


FIG. 12.15 – *Dépendance temporelle des fonctions $C^{(2)}(t)$ et $C^{(3)}(t)$ obtenues par diffusion multiple de lumière sur une suspension colloidale de billes de TiO_2 dans l'eau. On note que ces deux fonctions décroissent aux grands temps comme des lois de puissance [275]. Cependant l'expression (12.65) donne une décroissance plus rapide que celle observée expérimentalement.*

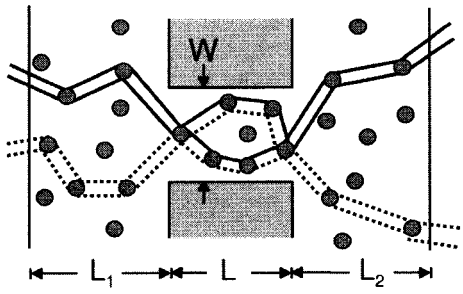


FIG. 12.16 – *Schéma du dispositif de mesure de $C^{(3)}(t)$ par amplification de la probabilité d'avoir des boucles fermées dans la région de longueur L [275].*

Il faut finalement remarquer que l'effet d'une absorption finie sur le comportement de $C^{(3)}(t)$ ne peut pas se déduire de sa dépendance temporelle au moyen du simple remplacement de $P_d(z, z')$ par $P_\gamma(z, z')$, c'est-à-dire de la correspondance (9.21), car seule une partie des diffusons est active pour la dépendance temporelle (fig. 12.13) tandis que tous contribuent pour l'absorption.

12.6 Corrélation spectrale des figures de speckle

Afin de compléter le panorama des différentes dépendances paramétriques du coefficient de transmission, il reste à établir le comportement en fréquence des fonctions de corrélation $C^{(1)}$ et $C^{(2)}$. Celui-ci est obtenu en corrélant deux figures de speckle correspondant à deux ondes de fréquences ω_0 et $\omega_0 + \Delta\omega$. Ces deux fréquences jouent le rôle de paramètres extérieurs, tout comme les temps 0 et t pour la corrélation temporelle (voir fig. 12.13). Pour le calcul de $C^{(1)}(\Delta\omega)$, il suffit donc de partir des résultats obtenus en fonction du temps, d'utiliser la correspondance (5.46) et de remplacer la longueur $\mathcal{L}_a$ dans (12.58) par

$$\frac{1}{\mathcal{L}_a(\Delta\omega)} = \sqrt{q_a^2 + \frac{1}{L_\gamma^2} - i\frac{\Delta\omega}{D}} \quad . \tag{12.67}$$

On en déduit [14] pour $q_a = 0$,

$$C^{(1)}(\Delta\omega) = \frac{\left(L/\sqrt{2}L_\omega\right)^2}{\cosh\left(L/\sqrt{2}L_\omega\right) - \cos\left(L/\sqrt{2}L_\omega\right)} \tag{12.68}$$

où $L_\omega = \sqrt{D/\Delta\omega}$. La mesure de cette fonction [276] est représentée sur la figure 12.17. Pour $\Delta\omega \gg E_c$, elle décroît exponentiellement comme $e^{-\sqrt{\Delta\omega/E_c}}$.

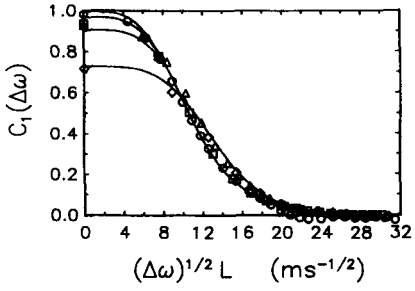


FIG. 12.17 – *Dépendance en fréquence de la fonction de corrélation $C^{(1)}(\Delta\omega)$. Les différentes courbes correspondent à des valeurs différentes de l'épaisseur L de la tranche prises entre 13 μm et 45 μm. La constante de diffusion mesurée est égale à $D = 12\ m^2/s$. L'écart observé à basse fréquence au comportement d'échelle en $L/L_\omega \propto L\sqrt{\Delta\omega}$ s'explique par la largeur spectrale du laser. Ceci explique aussi pourquoi cet écart diminue en augmentant la fréquence. À haute fréquence, c'est-à-dire pour $\Delta\omega \gg E_c$ où $E_c = D/L^2$ est la fréquence de Thouless, on a $C^{(1)}(\Delta\omega) \propto e^{-\sqrt{\Delta\omega/E_c}}$ [276].*

[14] $\mathcal{L}_a$ est une fonction complexe. On prendra garde à remplacer la fonction F_1 par $|x/\sinh x|^2$.

Pour le calcul de $C^{(2)}(\Delta\omega)$, on procède comme pour $C^{(2)}(t)$. Dans la relation (12.41), il suffit de remplacer $P_d(q_b, z, z')$ par $P_{\gamma=-i\Delta\omega}(z, z')$. Cette quantité est complexe. Plus précisément, le diagramme 12.13.*b* fait intervenir deux diffusons, l'un à la fréquence $\Delta\omega$, l'autre à la fréquence $-\Delta\omega$. Lorsque $q_a = q_b = 0$, on obtient l'expression

$$C^{(2)}(\Delta\omega) = \frac{4}{g}\left(\frac{L_\omega}{\sqrt{2}L}\right)\frac{\sinh(\sqrt{2}L/L_\omega) - \sin(\sqrt{2}L/L_\omega)}{\cosh(\sqrt{2}L/L_\omega) - \cos(\sqrt{2}L/L_\omega)} \quad . \tag{12.69}$$

Cette fonction est représentée sur la figure 12.18, elle décroît algébriquement comme $1/\sqrt{\Delta\omega}$. Ces résultats expérimentaux correspondent à un faisceau gaussien de largeur W et non pas à une onde plane. Dans nos notations, la fonction mesurée correspond au produit $gC^{(2)}(\Delta\omega)$. En vertu de (12.69), elle doit donc être une fonction universelle de L/L_ω, ce qui n'apparaît pas sur la figure 12.18. Cela est dû aux mêmes effets de convolution évoqués pour $C^{(1)}(\Delta\omega)$. De plus, expérimentalement, la moyenne n'est pas effectuée sur le potentiel aléatoire mais sur la fréquence dans un intervalle fini. Ceci pénalise la contribution à la fonction de corrélation aux basses fréquences qui sont précisément de l'ordre de la largeur de cet intervalle fini. Cet effet est moins prononcé pour $C^{(1)}(\Delta\omega)$ que pour $C^{(2)}(\Delta\omega)$ [15].

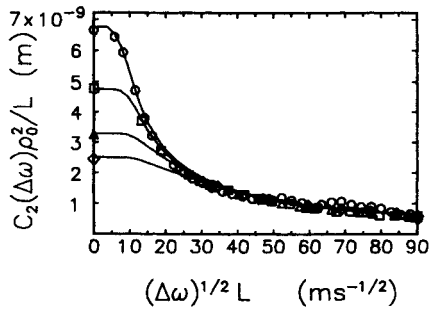


FIG. 12.18 – *Dépendance en fréquence de la fonction de corrélation $C^{(2)}$. Les différentes courbes correspondent à des valeurs différentes de l'épaisseur L de la tranche variant entre 13 μm et 78 μm pour un faisceau gaussien incident de diamètre $W = 26$ μm (noté ici ρ_0). L'écart au comportement universel à basse fréquence est discuté dans le texte. La dépendance en loi de puissance $\propto 1/\sqrt{\Delta\omega}$ est apparente à haute fréquence, c'est-à-dire pour $\Delta\omega \gg E_c$ où E_c est l'énergie de Thouless (5.35) [276].*

[15] Pour plus de détails sur la procédure expérimentale, le lecteur pourra se référer à la section 5 de la référence [276].

12.7 Distribution des coefficients de transmission

On a caractérisé les fluctuations de conductance ou de speckle uniquement par leur second moment. On voudrait maintenant obtenir la distribution complète, c'est-à-dire évaluer les moments d'ordre plus élevé. On se limite à des considérations qualitatives pour le cas où le paramètre $g \gg 1$. Pour plus de détails, on se reportera aux références [273, 277].

12.7.1 Loi de Rayleigh

Considérons d'abord la distribution du coefficient de transmission $\mathcal{T}_{ab}$. Les considérations de la section 12.2 ont conduit à la relation

$$\overline{\mathcal{T}_{ab}^2} = 2\,\overline{\mathcal{T}}_{ab}^2 \quad . \tag{12.70}$$

La généralisation de ce résultat au calcul de $\overline{\mathcal{T}_{ab}^n}$ est immédiate. Ce moment est un produit de n amplitudes ψ_{ab} et n amplitudes conjuguées ψ_{ab}^* de la forme $\overline{\psi_{ab}^*\psi_{ab}\cdots\psi_{ab}^*\psi_{ab}}$. À l'ordre le plus bas en $1/g$, on néglige la contribution des diagrammes faisant intervenir le croisement de diffusons. On remplace ainsi la valeur moyenne par n produits de valeurs moyennes $\overline{\psi_{ab}^*\psi_{ab}}$. Il y a $n!$ façons d'apparier les ψ_{ab}^* avec les ψ_{ab}. On obtient donc

$$\overline{\mathcal{T}_{ab}^n} = n!\,\overline{\mathcal{T}}_{ab}^n \quad . \tag{12.71}$$

À partir de ces moments, il est immédiat de reconstruire la distribution du coefficient de transmission :

$$\boxed{P(\mathcal{T}_{ab}) = \frac{1}{\overline{\mathcal{T}}_{ab}} e^{-\mathcal{T}_{ab}/\overline{\mathcal{T}}_{ab}}} \tag{12.72}$$

connue sous le nom de loi de Rayleigh. C'est aussi la distribution $P(\mathcal{R}_{ab})$ des coefficients de réflexion. Elle est bien observée expérimentalement, que ce soit en diffusion simple ou en diffusion multiple (fig. 12.19). Elle correspond à la limite $g \to \infty$.

Remarque : Loi de Rayleigh et théorème de la limite centrale

La loi de Rayleigh traduit le fait qu'une figure de speckle résulte de la superposition cohérente d'amplitudes aléatoires sans corrélation $A = \sum_j A_j$. Si ces amplitudes complexes sont indépendantes, les modules et les phases sont des variables aléatoires non corrélées. L'amplitude A est alors la somme d'un grand nombre de variables aléatoires indépendantes dont la distribution limite pour N grand est gaussienne. Les parties réelle A_r et imaginaire A_i de A ont également une distribution gaussienne de moyenne nulle et de même variance σ^2. La loi jointe $P(A_r, A_i)$ est donc donnée par

$$P(A_r, A_i) = \frac{1}{\pi\sigma^2} e^{-\frac{A_r^2 + A_i^2}{\sigma^2}} \quad . \tag{12.73}$$

On en déduit que la distribution de l'intensité $I = |A|^2$ est donnée par la loi (12.72). En diffusion simple, la loi de Rayleigh s'obtient en supposant que les diffuseurs sont distribués aléatoirement sur des échelles de longueur comparables à la longueur d'onde de la lumière, de façon à ce que les amplitudes soient aléatoires. En diffusion multiple elle s'obtient en ne supposant aucune corrélation entre les ondes émergentes.
Les corrections d'ordre supérieur en $1/g$ qui décrivent les croisements de diffusons donnent lieu à des corrélations entre les amplitudes sortantes et conduisent à des déviations à la loi de Rayleigh.

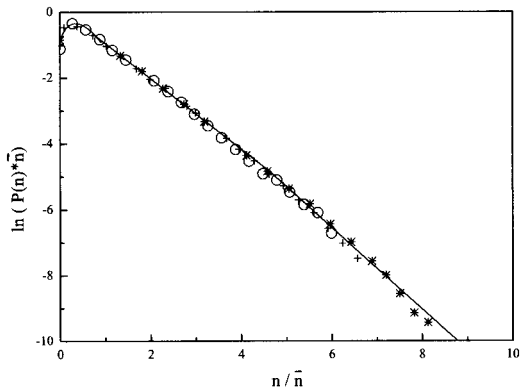


FIG. 12.19 – *Distribution de probabilité de l'intensité réfléchie, dans le régime de diffusion multiple, par un échantillon solide tournant de $BaSO_4$ en polarisation parallèle. L'intensité mesurée est proportionnelle au nombre n de photons et correspond donc au coefficient de réflexion $\mathcal{R}_{ab}$. La distribution $P(\mathcal{R}_{ab})$ suit parfaitement la loi de Rayleigh (12.72) [278].*

12.7.2 Distribution gaussienne du coefficient de transmission $\mathcal{T}_a$

La distribution de probabilité du coefficient $\mathcal{T}_a$ peut être obtenue à partir de ses cumulants $\overline{\mathcal{T}_a^n}^c$. Le cumulant d'ordre deux a déjà été calculé. À partir de (12.46), on obtient

$$\overline{\mathcal{T}_a^2}^c = \overline{\delta\mathcal{T}_a^2} = \frac{2}{3g}\overline{\mathcal{T}_a^2} \quad . \tag{12.74}$$

Les cumulants d'ordre n correspondent à n diffusons tous connectés entre eux. Le nombre minimal de croisements est $n-1$ (fig. 12.20) et puisque chacun donne une réduction $1/g$, on obtient :

$$\overline{\mathcal{T}_a^n}^c \propto \frac{\overline{\mathcal{T}_a^n}}{g^{n-1}} \quad . \tag{12.75}$$

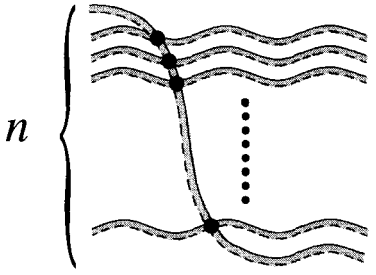


FIG. 12.20 – *Le nombre minimal de croisements des n diffusons à l'ordre le plus bas en* $1/g$ *est* $n-1$.

Dans la limite $g \to \infty$, ces cumulants d'ordre supérieurs sont négligeables et en ne gardant que le cumulant d'ordre deux, on obtient une distribution gaussienne

$$P(\mathcal{T}_a) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\overline{\delta\mathcal{T}_a^2}}} e^{-(\mathcal{T}_a-\overline{\mathcal{T}_a})^2/2\overline{\delta\mathcal{T}_a^2}} \quad . \tag{12.76}$$

Cette distribution a été mesurée et est représentée sur la figure 12.21.

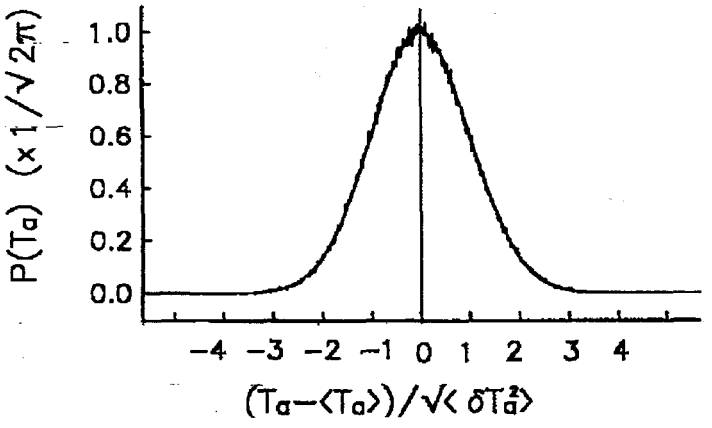


FIG. 12.21 – *Mesure de la distribution de probabilité du coefficient de transmission* $\mathcal{T}_a$ *pour des particules de* TiO_2 *dans l'air avec* $l_e \simeq 0{,}8\ \mu m$ *et* $g \geq 10^3$. *La distribution gaussienne (12.76) est très bien observée [279].*

Les déviations à la distribution gaussienne sont obtenues en incluant systématiquement les corrections aux cumulants associées aux croisements successifs des diffusons [273,279,280,282,283]. Ces déviations ont été mesurées pour des valeurs de g comprises entre 1 et 10 et sont représentées sur la figure 12.22.

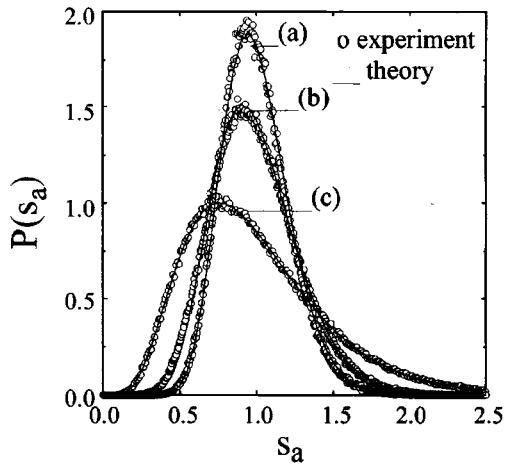


FIG. 12.22 – *Mesure de la distribution de probabilité du coefficient de transmission $\mathcal{T}_a$ pour des micro-ondes se propageant dans un milieu diffusant composé de billes de polystyrène. Dans cette figure, $s_a = \mathcal{T}_a/\overline{\mathcal{T}_a}$. Le paramètre g prend les valeurs (a) $g = 15$, (b) $g = 9$ et (c) $g = 2{,}25$. La distribution gaussienne est très bien observée pour le cas (a) d'un très faible désordre et des déviations apparaissent pour de plus forts désordres, c'est-à-dire pour de plus petites valeurs de g. Ces déviations sont bien décrites par la prise en compte, dans les différents cumulants, des corrections dues aux croisements des diffusons [273, 280], elles sont représentées en trait plein sur la figure (M. Stoytchev* et al. *[281]).*

12.7.3 Distribution gaussienne de la conductance

On peut aussi déterminer la distribution de probabilité du coefficient de transmission total $\mathcal{T}$ ou de la conductance (complément C7.2). La variance $\overline{\delta\mathcal{T}^2}$ est obtenue en intégrant sur les angles la fonction de corrélation $\overline{\delta\mathcal{T}_{ab}\delta\mathcal{T}_{a'b'}}$ donnée par (12.52). On a vu que seuls contribuent les diagrammes contenant deux croisements de diffusons. La variance correspondante (12.50) est de la forme

$$\overline{\delta\mathcal{T}^2} \propto \frac{\overline{\mathcal{T}}^2}{g^2} \quad . \tag{12.77}$$

Considérons maintenant le cumulant $\overline{\mathcal{T}^n}^c$. Il est obtenu comme le produit de n diffusons tous connectés entre eux. Le nombre minimal de croisement est $2n-2$ (fig. 12.23). En effet, chaque diffuson doit avoir au moins deux croisements afin d'éliminer toute dépendance angulaire. Puisque chaque croisement donne une réduction $1/g$,

$$\overline{\mathcal{T}^n}^c \propto \frac{\overline{\mathcal{T}}^n}{g^{2n-2}} \tag{12.78}$$

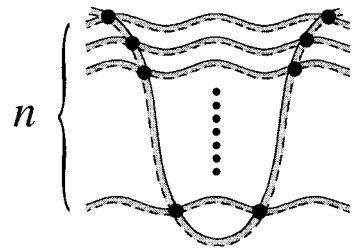


FIG. 12.23 – *Le nombre minimal de croisements de n diffusons à l'ordre le plus bas en* $1/g$ *est* $2n-2$.

et de manière équivalente, pour la conductance sans dimension $g = G/(e^2/h)$ (7.153)

$$\overline{g^n}^c \propto \frac{1}{g^{n-2}} \quad . \tag{12.79}$$

Dans la limite $g \to \infty$, les moments d'ordre $n > 2$ disparaissent et la distribution est gaussienne, comme la distribution $P(\mathcal{T}_a)$. De même, il existe des corrections pour g fini [277] qui décrivent les déviations à la distribution gaussienne.

Complément C12.1 Corrélation spatiale de l'intensité

Au lieu de considérer la fonction de corrélation angulaire du coefficient de transmission à travers un milieu diffusant, on s'intéresse maintenant à la fonction de corrélation spatiale de l'intensité mesurée à l'intérieur de ce milieu, pour une source de lumière monochromatique de vecteur d'onde k. Ce problème est similaire à celui des corrélations angulaires (section 12.4) et les fonctions de corrélations obtenues ont des structures voisines.

On considère une source ponctuelle située en un point $\boldsymbol{r}_0$ à l'intérieur du milieu. L'intensité correspondante a été définie par la relation (4.54) et sa fonction de corrélation est donc donnée par :

$$\overline{I(\boldsymbol{r})I(\boldsymbol{r}')} = \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2 \overline{G_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r})G_\epsilon^A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_0)G_\epsilon^R(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}')G_\epsilon^A(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_0)} \quad . \tag{12.80}$$

Afin de la calculer, on suit une démarche similaire à celle utilisée dans la section 12.2 pour la fonction de corrélation angulaire. La première contribution à la fonction de corrélation consiste à remplacer la moyenne du produit des intensités par le produit des valeurs moyennes

$$\overline{I(\boldsymbol{r})I(\boldsymbol{r}')} = \overline{I}(\boldsymbol{r})\overline{I}(\boldsymbol{r}') \quad . \tag{12.81}$$

Cette contribution est représentée par le diagramme de la figure 12.24 et correspond au produit de deux diffusons indépendants.

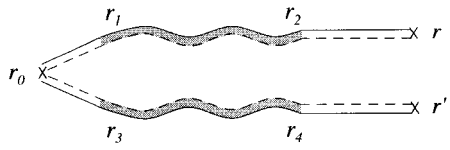


FIG. 12.24 – *Représentation de la fonction de corrélation de l'intensité à l'approximation de Drude-Boltzmann pour laquelle* $\overline{I(\boldsymbol{r})I(\boldsymbol{r}')} = \overline{I(\boldsymbol{r})}\ \overline{I(\boldsymbol{r}')}$.

La fonction de corrélation spatiale de l'intensité, définie par la fonction [16]

$$\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')} = \overline{I(\boldsymbol{r})I(\boldsymbol{r}')} - \overline{I}(\boldsymbol{r})\overline{I}(\boldsymbol{r}') \quad , \tag{12.82}$$

est engendrée par des diagrammes connectés. On définit de même la fonction de corrélation normalisée

$$\mathcal{C}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \frac{\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')}}{\overline{I}(\boldsymbol{r})\overline{I}(\boldsymbol{r}')} \quad . \tag{12.83}$$

[16] L'intensité moyenne $\overline{I}(\boldsymbol{r})$ est égale à l'intensité $I_d(\boldsymbol{r})$ à l'approximation du diffuson (voir la section 4.7). Nous la noterons ainsi dans la suite.

Nous allons maintenant évaluer ces fonctions en perturbation et comme pour les corrélations du coefficient de transmission, les classer en fonction du nombre de croisements de deux diffusons.

C12.1.1 Corrélations à courte portée

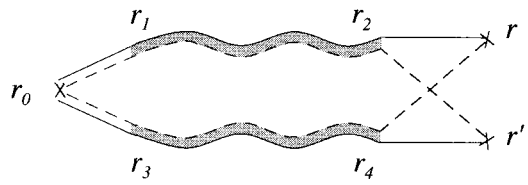


FIG. 12.25 – *Représentation de la fonction de corrélation de l'intensité* $\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')}^{(1)}$. *Le croisement des deux amplitudes entre les points* $\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_4, \boldsymbol{r}$ *et* $\boldsymbol{r}'$ *peut aussi se représenter à l'aide de la boîte de Hikami* $H^{(A)}$ *de la figure 4.16.*

La contribution dominante à la fonction de corrélation de l'intensité est donnée par le diagramme 12.25 et elle s'écrit

$$\begin{aligned}\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')}^{(1)} &= \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2 \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 d\boldsymbol{r}_3 d\boldsymbol{r}_4 |\overline{G}^R(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_1)|^2 |\overline{G}^R(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_3)|^2 \\ &\times \Gamma(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\Gamma(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r}_4)\,\overline{G}^R(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r})\overline{G}^A(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_2)\overline{G}^R(\boldsymbol{r}_4,\boldsymbol{r}')\overline{G}^A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}_4) \quad .\end{aligned} \tag{12.84}$$

Toutes les fonctions de Green moyennes sont prises à la même fréquence. En faisant l'approximation de variations spatiales lentes, on peut extraire le produit $\Gamma(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)\Gamma(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{r}_4)$ de l'intégrale, le remplacer par $\Gamma^2(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r})$ et faire apparaître quatre intégrales sur les variables $\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_3$ et $\boldsymbol{r}_4$. On rappelle que

$$\int d\boldsymbol{r}_2 \overline{G}^R(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r})\overline{G}^A(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_2) = \frac{l_e}{4\pi} g(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') \tag{12.85}$$

où la fonction $g(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ est définie par (3.96). En utilisant pour le facteur de structure $\Gamma(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r})$ la relation (4.63)

$$\Gamma(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}) = \frac{4\pi c}{l_e^2} I_d(r) = \frac{4\pi c}{l_e^2}\frac{1}{4\pi D r} \tag{12.86}$$

où $r = |\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}_0|$, on obtient [17]

$$\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')}^{(1)} = I_d^2(\boldsymbol{r}) g(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')^2 \quad . \tag{12.87}$$

[17] On mesure toutes les distances relativement à la source en $\boldsymbol{r}_0$.

La fonction de corrélation normalisée (12.83) s'écrit alors [266]

$$\boxed{\mathcal{C}_1(\Delta \boldsymbol{r}) = \frac{\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')}^{(1)}}{I_d^2(\boldsymbol{r})} = \left(\frac{\sin k\Delta r}{k\Delta r}\right)^2 e^{-\Delta r/l_e}} \tag{12.88}$$

où $\Delta r = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|$. Pour $\boldsymbol{r} = \boldsymbol{r}'$, il vient

$$\overline{I^2}(\boldsymbol{r}) = 2 \;\; I_d^2(\boldsymbol{r}) \quad , \tag{12.89}$$

c'est-à-dire le résultat énoncé par la loi de Rayleigh (12.9).

La fonction de corrélation $\mathcal{C}_1(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$ a été mesurée expérimentalement [284, 285]. La figure 12.26 montre sa dépendance spatiale pour la géométrie d'un long cylindre. La source est située sur la section d'entrée du cylindre tandis que les points $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$ sont sur l'interface de sortie.

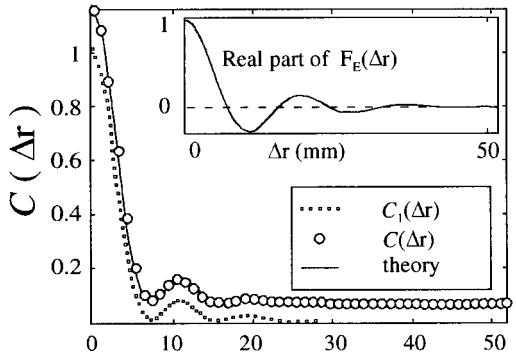


FIG. 12.26 – *Fonction de corrélation locale de l'intensité $\mathcal{C}(\Delta \boldsymbol{r})$ obtenue en variant la position du détecteur sur l'interface de sortie de l'onde en $z = L$. La fonction de corrélation $\mathcal{C}_1(\Delta \boldsymbol{r})$ est obtenue directement en prenant le carré de la fonction de corrélation du champ électrique représentée en médaillon. La différence $\mathcal{C} - \mathcal{C}_1$ décrit la contribution des corrélations à longue portée étudiée dans la section suivante. Ces résultats ont été obtenus pour des micro-ondes se propageant dans un milieu aléatoire de billes de polystyrène et la moyenne est effectuée sur un ensemble de réalisations distinctes du désordre [286].*

La généralisation de ce résultat au cas où l'on fait aussi varier la position de la source située en $\boldsymbol{r}_0$, c'est-à-dire où l'on corrèle les intensités $I(\boldsymbol{r}_0, \boldsymbol{r})$ et $I(\boldsymbol{r}_0', \boldsymbol{r}')$, est immédiate. La fonction de corrélation normalisée correspondante $\mathcal{C}_1(\Delta \boldsymbol{r}_0, \Delta \boldsymbol{r})$ se déduit de la figure 12.27 et elle généralise la relation (12.88) qui se récrit [286]

$$\mathcal{C}_1(\Delta \boldsymbol{r}_0, \Delta \boldsymbol{r}) = g^2(\Delta r_0) g^2(\Delta r) \tag{12.90}$$

où $\Delta r_0 = |\boldsymbol{r}_0 - \boldsymbol{r}_0'|$ correspond au déplacement du point source et $\Delta r = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|$ à celui du détecteur. Expérimentalement, les comportements de la fonction de corrélation $\mathcal{C}$ obtenus en faisant varier $\Delta \boldsymbol{r}$ ou $\Delta \boldsymbol{r}_0$ sont identiques [286].

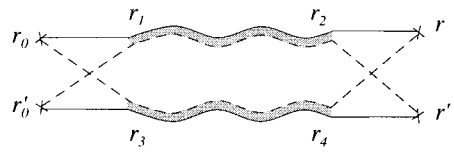


FIG. 12.27 – *Représentation de la fonction de corrélation locale de l'intensité obtenue en déplaçant la position $\boldsymbol{r}_0$ de la source et celle $\boldsymbol{r}$ du point de mesure. On pourrait représenter les croisements aux terminaisons en utilisant la boîte de Hikami $H^{(A)}$ de la figure 4.16.*

C12.1.2 Corrélations à longue portée

La fonction de corrélation $\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')}$ contient d'autres contributions. Ainsi, comme pour le cas des corrélations angulaires du coefficient de transmission, on peut identifier le terme noté $\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')}^{(2)}$, donné par le diagramme de la figure 12.28, et qui correspond à un seul croisement des deux diffusons. Le calcul de ce diagramme met en évidence des corrélations à longue portée.

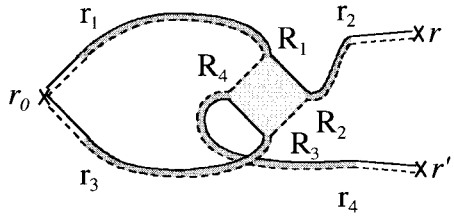


FIG. 12.28 – *Diagramme dont la contribution à la corrélation de l'intensité est à longue portée. L'interférence entre les deux diffusons est décrite par une boîte de Hikami.*

Le croisement des deux diffusons est décrit par la même boîte que celle utilisée dans le calcul des fluctuations du coefficient de transmission $C^{(2)}$ (fig. 12.9). Le diagramme 12.28 est l'analogue de 12.9.*a* et s'écrit

$$\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')}^{(2)} = \left(\frac{4\pi}{c}\right)^2 \int \prod_{i=1}^{4} d\mathbf{R}_i \prod_{j=1}^{4} d\boldsymbol{r}_j |\overline{G}^R(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_1)|^2 |\overline{G}^R(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_3)|^2 H(\boldsymbol{R}_i)$$
$$\times\, \Gamma(\boldsymbol{r}_1,\mathbf{R}_1)\Gamma(\boldsymbol{r}_3,\boldsymbol{R}_3)\Gamma(\boldsymbol{R}_2,\boldsymbol{r}_2)\Gamma(\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{r}_4)|\overline{G}^R(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r})|^2|\overline{G}^R(\boldsymbol{r}_4,\boldsymbol{r}')|^2 \quad (12.91)$$

où la fonction $H(\boldsymbol{R}_i)$ représente la contribution de la boîte décrivant le croisement des diffusons (complément C4.2). Dans le régime diffusif, les intégrales des fonctions de Green, toutes égales à $1/\gamma_e = l_e/4\pi$, se découplent. En utilisant la relation (4.63) qui relie $\Gamma(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r})$ à $I_d(\boldsymbol{r})$, on obtient

$$\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')}^{(2)} = \int \prod_{i=1}^{4} d\boldsymbol{R}_i I_d(\boldsymbol{R}_1) I_d(\boldsymbol{R}_3)\, H(\boldsymbol{R}_i)\, \Gamma(\boldsymbol{R}_2,\boldsymbol{r})\Gamma(\boldsymbol{R}_4,\boldsymbol{r}') \quad (12.92)$$

et de (4.152), on déduit [18]

$$\boxed{\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')}^{(2)} = \frac{2\pi l_e c^2}{3k^2} \int d\boldsymbol{R}\, I_d^2(\boldsymbol{R})\, \left[\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}} P_d(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r})\right].\left[\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}} P_d(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}')\right]} \tag{12.94}$$

Cette expression décrit un comportement à longue portée des corrélations d'intensité [288]. Elle est de la forme (exercice 12.4)

$$\mathcal{C}_2(\Delta\boldsymbol{r}) \propto \frac{1}{g} G(\Delta r) \quad , \tag{12.95}$$

où $G(\Delta r)$ est une fonction à longue portée, puisque $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$ sont reliés par des diffusons. Il est aisé de comprendre sa structure à partir de la figure 12.28. Le diagramme peut en effet être séparé en deux parties distinctes. La première va du point source $\boldsymbol{r}_0$ au point $\boldsymbol{R}$ de croisement des deux diffusons et elle est décrite par le terme $I_d^2(\mathbf{R})$. La seconde contient les deux diffusons qui décrivent la propagation vers les points finaux $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$. La boîte de Hikami se traduit par la présence des deux gradients.

Comme pour $\mathcal{C}_1$, on peut également déplacer le point source $\boldsymbol{r}_0$. La fonction de corrélation correspondante $\mathcal{C}_2(\Delta\boldsymbol{r}_0, \Delta\boldsymbol{r})$ décrite par le diagramme 12.29.*b* est alors pilotée par le terme d'interférence (3.97) à courte portée $g(\Delta\boldsymbol{r}_0)$ et se met sous la forme

$$\mathcal{C}_2(\Delta\boldsymbol{r}_0, \Delta\boldsymbol{r}) \propto \frac{1}{g}\, g(\Delta r_0) G(\Delta r) \quad . \tag{12.96}$$

En rajoutant la contribution de 12.29.*a*, on obtient

$$\mathcal{C}_2(\Delta\boldsymbol{r}_0, \Delta\boldsymbol{r}) \propto \frac{1}{g}\left[g(\Delta\boldsymbol{r}_0)G(\Delta r) + g(\Delta\boldsymbol{r})G(\Delta r_0)\right] \quad . \tag{12.97}$$

La fonction de corrélation spatiale $\mathcal{C}_2(\Delta\boldsymbol{r}_0, \Delta\boldsymbol{r})$ a été mesurée expérimentalement à l'aide de micro-ondes se propageant dans des suspensions solides de billes de polystyrène [284–286]. Les expressions obtenues précédemment ont également été étendues afin d'inclure l'effet d'une longueur d'absorption finie [287].

[18] En faisant porter l'action des gradients sur l'intensité I_d, on obtient l'expression équivalente :

$$\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')}^{(2)} = \frac{2\pi l_e c^2}{3k^2} \int d\boldsymbol{R}\left[\boldsymbol{\nabla}_{\boldsymbol{R}} I_d(\boldsymbol{R})\right]^2 P_d(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}) P_d(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r}') \quad . \tag{12.93}$$

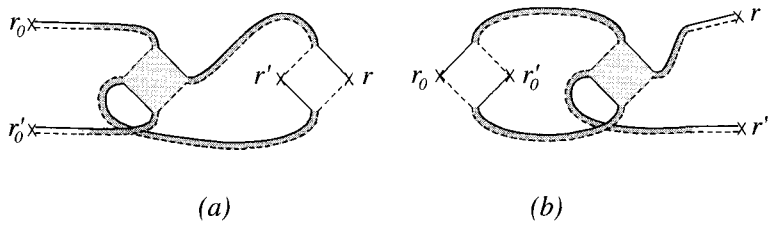


FIG. 12.29 – *Diagrammes donnant la fonction de corrélation* $\mathcal{C}_2(\Delta \boldsymbol{r}_0, \Delta \boldsymbol{r})$.

Exercice 12.3 : Dessiner les diagrammes permettant de calculer la fonction de corrélation spatiale $\mathcal{C}_3(\Delta \boldsymbol{r}_0, \Delta \boldsymbol{r})$ de l'intensité correspondant à deux croisements des deux diffusons.

Montrer que les diagrammes de la figure 12.11 donnent une contribution de la forme

$$\mathcal{C}_3(\Delta \boldsymbol{r}_0, \Delta \boldsymbol{r}) \propto \frac{1}{g^2}\left[1 + g(\Delta \boldsymbol{r}_0) g(\Delta \boldsymbol{r})\right] \quad . \tag{12.98}$$

Donner un exemple d'un diagramme supplémentaire qui, à cet ordre, donne une contribution du type $(1/g^2)\left[g(\Delta \boldsymbol{r}_0) + g(\Delta \boldsymbol{r})\right]$.

Exercice 12.4 : Fonction de corrélation $\mathcal{C}_2(\Delta \boldsymbol{r})$ pour une onde plane incidente

La fonction de corrélation (12.94) correspond à une source ponctuelle. On la calcule ici pour la géométrie d'une tranche de largeur finie L éclairée par une onde plane [288] (voir fig. 12.30).

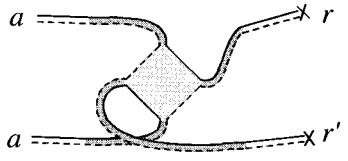


FIG. 12.30 – *Représentation de la fonction de corrélation spatiale* $\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')}^{(2)}$ *mesurée sur le plan de sortie pour une onde plane incidente selon* $\hat{\boldsymbol{s}}_a$. *Ce diagramme correspond à la fonction de corrélation calculée dans l'exercice 12.4.*

Montrer que la fonction de corrélation $\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')}^{(2)}$ évaluée pour $z = z' = L - l_e$ ne dépend que de la projection $\boldsymbol{\rho} = (\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}')_\perp$ sur le plan xOy

$$\overline{\delta I(\boldsymbol{r})\delta I(\boldsymbol{r}')}^{(2)} \simeq \int d^2\boldsymbol{q} \;\; e^{i\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{\rho}} F_2(qL) \quad , \tag{12.99}$$

où la fonction $F_2(x)$ est donnée par l'expression (12.44). La fonction de corrélation de l'intensité apparaît donc comme la transformée de Fourier de la fonction de corrélation angulaire étudiée dans la section 12.4.2. Montrer que cette transformée de Fourier conduit, pour la fonction de corrélation normalisée, à :

$$\mathcal{C}_2(\Delta \boldsymbol{r}) = \frac{9}{2k^2 l_e^2}\left(\frac{l_e}{L}\right)^3 G(\Delta r/L) \tag{12.100}$$

où la fonction $G(\Delta r/L)$ est donnée par

$$G(\Delta r/L) = \frac{L}{\Delta r} + \int_0^\infty dx J_0(x\Delta r/L) \left(\frac{\sinh 2x - 2x}{2\sinh^2 x} - 1 \right) \tag{12.101}$$

et où J_0 est une fonction de Bessel.
En déduire que la fonction de corrélation $\mathcal{C}_2(\Delta \boldsymbol{r})$ à cet ordre est à longue portée et qu'elle peut se mettre sous la forme

$$\mathcal{C}_2(\Delta \boldsymbol{r}) = \frac{3}{2\pi} \frac{1}{g} \left(\frac{S}{L^2} \right) G(\Delta r/L) \quad . \tag{12.102}$$

Elle est proportionnelle à $1/g$, et elle est donc beaucoup plus petite que $\mathcal{C}_1$.

Chapitre 13

Interactions et diffusion

On rappelle que ν_0 est la densité d'états totale moyenne par direction de spin et $\rho_0 = \nu_0/\Omega$ est la densité d'états par unité de volume. L'énergie $\Delta = 1/(\rho_0\Omega) = 1/\nu_0$ est la distance moyenne entre niveaux d'énergie par direction de spin. On utilisera le plus souvent le système CGS afin de présenter certains résultats sous la forme la plus souvent rencontrée dans la littérature. Sauf mention contraire, on prend $\hbar = 1$.

13.1 Introduction

Jusqu'à maintenant, on a décrit les propriétés spectrales et le transport électronique en négligeant les interactions entre électrons. Or dans un métal, ceux-ci sont couplés entre eux par l'interaction coulombienne. Pourtant le modèle des électrons indépendants s'avère constituer une excellente approximation. Ceci résulte de l'écrantage très efficace de l'interaction coulombienne qui a lieu sur une distance de l'ordre de la distance moyenne entre électrons. Néanmoins, l'interaction a des conséquences physiques remarquables qui peuvent être classées essentiellement en deux catégories :

- Chaque électron n'est plus uniquement sensible au potentiel de désordre, mais aussi aux fluctuations de densité électronique induites par les autres électrons. Ceci a pour effet de déplacer les niveaux d'énergie et donc de modifier les propriétés thermodynamiques et de transport, en particulier la densité d'états et la conductivité. La modification de la densité d'états est maximale autour du niveau de Fermi et c'est là un phénomène spectaculaire, signature directe de l'interaction. Par ailleurs, cette modification joue un rôle essentiel pour comprendre certaines caractéristiques du magnétisme orbital du gaz d'électrons, en particulier les courants permanents (chap. 14). La modification de la conductivité est du même ordre de grandeur que la correction de localisation faible, mais

elle est de nature très différente. En particulier, elle ne dépend pas du champ magnétique, ce qui rend son observation plus difficile.

- L'interaction entre électrons est un processus inélastique (l'énergie totale est conservée mais celle de chaque électron est modifiée). Chaque électron ne reste dans un état propre de l'équation de Schrödinger à une particule que pendant un temps fini. Les processus sensibles à la cohérence de phase, comme le cooperon, sont donc nécessairement affectés. L'interaction entre électrons, tout comme l'interaction avec d'autres degrés de liberté comme les phonons, est donc à l'origine d'un temps de cohérence de phase fini, noté τ_ϕ^{ee}, au-delà duquel la cohérence disparaît. Ce temps de cohérence fini peut aussi apparaître comme résultant d'un champ électromagnétique fluctuant qui déphase entre elles les trajectoires appariées qui contribuent au diffuson et au cooperon, d'une manière qualitativement similaire au déphasage induit par le mouvement des diffuseurs (chap. 6). L'équivalence entre l'effet de l'interaction coulombienne et celui d'un champ électromagnétique fluctuant n'est pas évidente. Elle résulte du théorème fluctuation-dissipation.

La nature diffusive du mouvement électronique joue un rôle essentiel car elle *renforce* l'effet de l'interaction. Ceci peut se comprendre de la manière qualitative suivante. À cause de la diffusion, la probabilité que deux électrons interagissent est augmentée car un électron se déplace moins rapidement que si son mouvement était balistique. L'interaction effective entre deux électrons s'en trouve renforcée puisque chacun a une probabilité plus grande de rester dans la région d'interaction. On conçoit donc que la modification des quantités physiques éventuellement affectées par l'interaction soit proportionnelle au temps passé dans cette région. Plus précisément, pour une propriété physique $X(E)$ associée à une échelle d'énergie E, on s'attend à une modification proportionnelle à la probabilité (5.5) de retour dans la région d'interaction pendant le temps $\hbar/E$,

$$\frac{\delta X(E)}{X} \propto \frac{1}{\rho_0 \hbar \Omega} \int_0^{\hbar/E} Z(t) dt \quad . \tag{13.1}$$

Les développements exposés dans ce chapitre consistent à étudier les effets conjugués du désordre et de l'interaction. Celle-ci est traitée comme une perturbation par rapport au modèle des électrons indépendants dans un potentiel désordonné.

13.2 Potentiel de Coulomb écranté

L'interaction coulombienne entre deux électrons distants de R est décrite par le potentiel $U_0(\boldsymbol{R}) = e^2/R$. Pour un système tridimensionnel,

sa transformée de Fourier s'écrit [1] $U_0(\boldsymbol{q}) = 4\pi e^2/q^2$. Le cas des autres dimensions est décrit dans le complément C13.1. Dans un métal, du fait de la présence des autres électrons, l'interaction de Coulomb est écrantée et, à l'approximation de Thomas-Fermi, elle devient [289]

$$U(\boldsymbol{q}) = \frac{4\pi e^2}{q^2 + \kappa^2} \tag{13.2}$$

ou encore

$$U(\boldsymbol{R}) = \frac{e^2}{R} e^{-\kappa R} \quad . \tag{13.3}$$

Le vecteur d'onde de Thomas-Fermi κ, inverse de la longueur d'écran, est défini par [289]

$$\boxed{\kappa^2 = 8\pi e^2 \rho_0 = 8\pi e^2 \frac{\nu_0}{\Omega}} \tag{13.4}$$

où ρ_0 est la densité d'états par unité de volume et par direction de spin. La valeur à $\boldsymbol{q} = 0$ de l'interaction écrantée est simplement reliée à la densité d'états par

$$U = U(\boldsymbol{q} = 0) = \int U(\boldsymbol{R}) d\boldsymbol{R} = \frac{1}{2\rho_0} \quad . \tag{13.5}$$

Pour un métal, $\kappa \simeq k_F$, c'est-à-dire que l'écrantage est très efficace et se fait sur une longueur de l'ordre de λ_F (voir remarque suivante) . Par conséquent, dans la limite de faible désordre, la longueur d'écran κ^{-1} est très inférieure au libre parcours moyen élastique l_e.

Dans un système diffusif, l'écrantage n'est pas instantané et il est important de décrire correctement sa dynamique. L'interaction effective entre électrons est une fonction $U(\boldsymbol{q}, \omega)$ du vecteur d'onde *et* de la fréquence. La réorganisation des charges est décrite par la fonction diélectrique $\epsilon(\boldsymbol{q}, \omega)$ reliée à la fonction de réponse densité-densité $\overline{\chi}_0(\boldsymbol{q}, \omega)$ par la relation $\epsilon(\boldsymbol{q}, \omega) = 1 + U_0(\boldsymbol{q})\overline{\chi}_0(\boldsymbol{q}, \omega)$. On a ainsi [289]

$$U(\boldsymbol{q}, \omega) = \frac{U_0(\boldsymbol{q})}{\epsilon(\boldsymbol{q}, \omega)} = \frac{U_0(\boldsymbol{q})}{1 + U_0(\boldsymbol{q})\overline{\chi}_0(\boldsymbol{q}, \omega)} \quad . \tag{13.6}$$

Dans la section C7.1.2, on montre que, à l'approximation de diffusion,

$$\overline{\chi}_0(\boldsymbol{q}, \omega) = 2\rho_0 \frac{Dq^2}{-i\omega + Dq^2} \quad . \tag{13.7}$$

On en déduit que l'interaction effective dépend aussi de la fréquence : on dit que l'interaction est *dynamiquement écrantée.* Ceci est une conséquence de la

[1] Dans le système CGS.

nature diffusive du mouvement des électrons. En utilisant (13.6), on obtient

$$U(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{4\pi e^2}{q^2}\frac{-i\omega + Dq^2}{-i\omega + Dq^2 + D\kappa^2} \quad . \tag{13.8}$$

La fonction diélectrique $\epsilon(\boldsymbol{q},\omega)$ se déduit de (13.7) :

$$\epsilon(\boldsymbol{q},\omega) = 1 + 2\rho_0\frac{4\pi e^2}{q^2}\frac{Dq^2}{-i\omega + Dq^2} \quad , \tag{13.9}$$

c'est-à-dire

$$\boxed{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega) = 1 + 4\pi\sigma_0 P_d(\boldsymbol{q},\omega)} \tag{13.10}$$

où $\sigma_0 = 2e^2 D\rho_0$ est la conductivité de Drude donnée par la relation d'Einstein (7.14) et où P_d est le diffuson (4.89) à l'approximation de diffusion. À cette même approximation, on a $ql_e \ll 1$ et *a fortiori* $q \ll \kappa$. La fonction diélectrique s'écrit

$$\epsilon(\boldsymbol{q},\omega) \simeq \frac{4\pi\sigma_0}{-i\omega + Dq^2} \tag{13.11}$$

et l'interaction effective dynamique est simplement reliée à la fonction de réponse densité-densité $\overline{\chi}_0(\boldsymbol{q},\omega)$ par

$$U(\boldsymbol{q},\omega) \simeq \frac{1}{\overline{\chi}_0(\boldsymbol{q},\omega)} = \frac{1}{2\rho_0}\frac{-i\omega + Dq^2}{Dq^2} \quad . \tag{13.12}$$

La limite statique, $\overline{\chi}_0 = 2\rho_0$, est obtenue en prenant $\omega = 0$.

Remarque : Le paramètre r_s

Afin de décrire l'importance des corrélations électroniques, on utilise souvent le nombre sans dimension r_s qui mesure le rapport entre l'énergie potentielle de Coulomb et l'énergie cinétique. L'énergie potentielle est d'ordre e^2/a où $a = n^{-1/d}$ est la distance moyenne entre électrons pour un gaz de densité n en dimension d. L'énergie cinétique typique est l'énergie de Fermi $p_F^2/2m \propto \hbar^2/(2ma^2)$. Le paramètre r_s est défini par le rapport

$$r_s \propto \frac{\text{énergie potentielle}}{\text{énergie cinétique}} \propto \frac{a}{a_0} \quad , \tag{13.13}$$

où $a_0 = \hbar^2/(m_0 e^2)$ est le rayon de Bohr et m_0 est la masse de l'électron libre (voir section 2.1.1). Le paramètre r_s est donc proportionnel à la distance moyenne entre électrons. À trois dimensions, on a

$$\frac{4\pi}{3} r_s^3 a_0^3 = \frac{1}{n} \quad . \tag{13.14}$$

Exprimons maintenant le vecteur de Fermi k_F et le vecteur d'écran κ en fonction de r_s. Puisque $k_F^3 = 3\pi^2 n$,

$$r_s = \left(\frac{9\pi}{4}\right)^{1/3}\frac{1}{k_F a_0} \quad . \tag{13.15}$$

Le paramètre d'écran κ est donné par $\kappa^2 = 8\pi e^2 \rho_0$, où $\rho_0 = mk_F/(2\pi^2\hbar^2)$ est la densité d'états au niveau de Fermi, par unité de volume et *par direction de spin*. Le rapport κ/k_F s'écrit donc :

$$\frac{\kappa}{k_F} = \left(\frac{16}{3\pi^2}\right)^{1/3} \left(\frac{m}{m_0}\right)^{1/2} \sqrt{r_s} \simeq 0,81 \left(\frac{m}{m_0}\right)^{1/2} \sqrt{r_s} \quad . \tag{13.16}$$

Par exemple, pour un métal comme le cuivre, on a $r_s = 2{,}67$ et $m/m_0 = 1{,}3$, soit $\kappa/k_F \simeq 1{,}51$. L'écrantage est donc très efficace dans un métal. Pour d'autres métaux, on pourra consulter la table 1.1 de la référence [289], en prenant garde au changement de définition.

13.3 Approximation de Hartree-Fock

Afin de décrire les effets liés à l'interaction coulombienne, on se place maintenant dans l'approximation de Hartree-Fock dont on ne donnera ici que les grandes lignes. Pour plus de détails, on pourra consulter [289]. Tout d'abord, l'approximation de Hartree consiste à chercher les solutions (ϵ_i, ϕ_i) de l'équation non linéaire

$$\epsilon_i \phi_i(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{2m}\Delta\phi_i(\boldsymbol{r}) + V_{ion}(\boldsymbol{r})\phi_i(\boldsymbol{r}) + \int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')n(\boldsymbol{r}')\phi_i(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}' \quad , \tag{13.17}$$

où $V_{ion}(\boldsymbol{r})$ est le potentiel à un corps décrivant l'interaction des électrons avec le réseau des ions et avec les impuretés. $U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ est le potentiel d'interaction coulombien (à deux corps) entre électrons. La densité électronique est

$$n(\boldsymbol{r}) = 2\sum_j f(\epsilon_j)|\phi_j(\boldsymbol{r})|^2 \tag{13.18}$$

et $f(\epsilon)$ est le facteur de Fermi. La neutralité électrique implique que

$$\overline{V}_{ion}(\boldsymbol{r}) + \int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\overline{n(\boldsymbol{r}')}d\boldsymbol{r}' = 0 \quad , \tag{13.19}$$

où on a remplacé la moyenne spatiale par celle sur le désordre. L'équation de Hartree se récrit alors

$$\epsilon_i \phi_i(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{2m}\Delta\phi_i(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})\phi_i(\boldsymbol{r}) + \int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')(n(\boldsymbol{r}')-\overline{n})\phi_i(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}' \tag{13.20}$$

où $V(\boldsymbol{r}) = V_{ion}(\boldsymbol{r}) - \overline{V}_{ion}$ est le potentiel de désordre défini dans le chapitre 2 et $\overline{n} = \overline{n(\boldsymbol{r})}$. À l'approximation de Hartree, l'équation non linéaire (13.20) est une équation de Schrödinger effective pour laquelle le potentiel auquel est soumis un électron dépend lui-même de la densité électronique, c'est-à-dire des fonctions d'ondes des autres électrons. Dans cette approximation, la fonction d'onde totale est le produit de fonctions à un électron et ne satisfait donc pas le principe de Pauli.

Afin de prendre en compte l'antisymétrie de la fonction d'onde, il convient de rajouter le terme de Fock qui décrit l'*échange* entre particules de même spin. L'équation (13.20) devient finalement [289, 290] :

$$\epsilon_i\phi_i(\boldsymbol{r}) = -\frac{1}{2m}\Delta\phi_i(\boldsymbol{r}) + V(\boldsymbol{r})\phi_i(\boldsymbol{r}) + \int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')(n(\boldsymbol{r}')-\overline{n})\phi_i(\boldsymbol{r})d\boldsymbol{r}' \\ - \sum_j f(\epsilon_j)\int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_j^*(\boldsymbol{r}')\phi_j(\boldsymbol{r})\phi_i(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}' \quad . \tag{13.21}$$

En principe, l'équation non linéaire (13.21) doit être résolue de façon auto-cohérente. C'est un problème difficile qui n'a pas de solution analytique en présence de désordre. On va la résoudre en considérant l'interaction U comme une perturbation et en nous limitant à l'ordre le plus bas. Les états non perturbés sont les états propres $\{\epsilon_i, \phi_i(\boldsymbol{r})\}$ de l'hamiltonien (2.1) en présence de désordre [2]. On calcule l'effet des interactions coulombiennes dans le cadre de l'approximation de Hartree-Fock en s'inspirant de la démarche développée au chapitre 3. En principe, on évalue la fonction de Green diagonale dans l'état ϕ_i en écrivant une équation de Dyson analogue à (3.67). On fait ainsi apparaître la *self-énergie* $\Sigma_i = \delta\epsilon_i + i\Gamma_i$ dont la partie réelle $\delta\epsilon_i$ mesure le déplacement du niveau d'énergie ϵ_i et la partie imaginaire Γ_i donne la largeur de ce niveau, c'est-à-dire l'inverse de son temps de vie [3]. Ces deux composantes de la self-énergie permettent de calculer les corrections à la densité d'états à une particule ainsi que le temps de vie d'un état électronique. On donne ici une présentation simplifiée de ce formalisme.

13.4 Correction à la densité d'états

13.4.1 Interaction statique

Dans un premier temps, on évalue les corrections à la densité d'états à une particule en calculant le déplacement $\delta\epsilon_i$ des niveaux d'énergie pour une interaction écrantée statique $U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$, donnée par la relation (13.3) à $d = 3$.

Le déplacement $\delta\epsilon_i$ s'obtient à partir de (13.21) et se met sous la forme $\delta\epsilon_i = \delta\epsilon_i^H + \delta\epsilon_i^F$ où la contribution de Hartree $\delta\epsilon_i^H$ est donnée, au premier ordre en perturbation, par

$$\delta\epsilon_i^H = \int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')|\phi_i(\boldsymbol{r})|^2\Big(n(\boldsymbol{r}')-\overline{n}\Big)d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \quad . \tag{13.22}$$

[2] On aurait pu suivre une démarche similaire à celle du chapitre 3 et traiter parallèlement le potentiel de désordre et les interactions en perturbation à partir de la base des ondes planes. Ce choix ne serait pas très heureux car un argument du type « règle d'or de Fermi » comme celui de la relation (3.1) introduit une largeur $\hbar/\tau_e$ au propagateur comme contribution des effets du désordre. Comme nous le verrons, cette largeur est bien supérieure à celle due à l'interaction. On traite donc d'emblée le désordre de manière non perturbative.

[3] Pour plus de détails sur le problème à N-corps on pourra consulter [291] et plus particulièrement [292] pour l'approximation de Hartree-Fock en présence de désordre.

De même, le terme d'échange ou de Fock $\delta\epsilon_i^F$ s'écrit

$$\delta\epsilon_i^F = -\sum_{j,\sigma} f(\epsilon_j) \int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_j^*(\boldsymbol{r}')\phi_j(\boldsymbol{r})\phi_i^*(\boldsymbol{r})\phi_i(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \quad . \tag{13.23}$$

L'énergie totale E_T est

$$\begin{aligned} E_T = E_T^0 &+ \frac{1}{2}\int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')n(\boldsymbol{r})\delta n(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \\ &- \sum_{i,j} f(\epsilon_i)f(\epsilon_j)\int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\phi_j^*(\boldsymbol{r}')\phi_j(\boldsymbol{r})\phi_i^*(\boldsymbol{r})\phi_i(\boldsymbol{r}')d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \end{aligned} \tag{13.24}$$

où E_T^0 est l'énergie totale en l'absence d'interaction et $\delta n(\boldsymbol{r}') = n(\boldsymbol{r}') - \overline{n}$. Le facteur 1/2 évite de compter deux fois l'interaction dans l'énergie totale. Le déplacement moyen d'un niveau d'énergie ϵ est défini par

$$\Delta_\epsilon = \frac{1}{\nu_0}\overline{\sum_i \delta(\epsilon-\epsilon_i)\delta\epsilon_i} \quad . \tag{13.25}$$

Puisque, en moyenne, chaque niveau d'énergie ϵ est changé en $\epsilon + \Delta_\epsilon$, la distance entre deux niveaux ϵ_1 et ϵ_2 devient $(\epsilon_2 - \epsilon_1)\left[1 + \partial\Delta_\epsilon/\partial\epsilon\right]$. Ce déplacement conduit à une modification relative de la densité d'états

$$\frac{\delta\nu}{\nu_0} = -\frac{\partial\Delta_\epsilon}{\partial\epsilon} \quad . \tag{13.26}$$

Considérons d'abord le *terme d'échange* (13.23). En y insérant la relation $f(\epsilon_j) = \int d\epsilon'\delta(\epsilon'-\epsilon_j)f(\epsilon')$ et en transformant à l'aide de (3.26) le produit des fonctions d'ondes en un produit de densités d'états non locales, ce terme s'écrit [4] :

$$\Delta_\epsilon^F = -\frac{1}{\nu_0}\int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon-\omega)d\omega \int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})}d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \quad . \tag{13.27}$$

En exprimant la fonction de corrélation de la densité d'états non locale $\rho_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ à l'aide de (4.204) et en utilisant (13.26), on obtient [5]

$$\delta\nu^F(\epsilon) = \frac{\rho_0}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f'(\epsilon-\omega)d\omega \int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \quad . \tag{13.28}$$

L'interaction (13.3) étant à courte portée (très inférieure à l_e), l'intégrale se factorise

$$\delta\nu^F(\epsilon) \simeq \frac{U\rho_0}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f'(\epsilon-\omega)d\omega \int \mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)d\boldsymbol{r} \quad , \tag{13.29}$$

[4] L'origine des énergies est prise au niveau de Fermi.

[5] On ne garde que la contribution du diffuson. Par ailleurs, on vérifie que le produit des valeurs moyennes donne une contribution négligeable.

pour faire apparaître le paramètre U défini par (13.5). La transformée de Fourier temporelle de la relation (5.5), $\int \mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)d\boldsymbol{r} = \int_0^\infty Z(t)\cos\omega t dt$, permet d'écrire la correction de densité d'états en fonction de la probabilité de retour à l'origine $Z(t)$. En utilisant (15.98) et $U\rho_0 = 1/2$, on obtient [6]

$$\delta\nu^F(\epsilon) = -\frac{1}{2\pi}\int_0^\infty \frac{\pi T t}{\sinh \pi T t} Z(t)\cos\epsilon t\ dt \quad . \tag{13.30}$$

La contribution du *terme de Hartree* à la correction de densité d'états s'obtient à partir des relations (13.22) et (13.25) :

$$\Delta_\epsilon^H = \frac{2}{\pi^2\nu_0}\int_{-\infty}^\infty f(\epsilon-\omega)d\omega \int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r})\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}')}^c d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \quad . \tag{13.31}$$

Le produit des densités locales intervenant dans cette expression est donné par (4.207). Du fait de la courte portée du potentiel, le terme dominant est celui à un seul diffuson. La relation (13.26) donne pour la correction de densité d'états

$$\delta\nu^H(\epsilon) = -2\frac{\rho_0}{\pi}\int_{-\infty}^\infty f'(\epsilon-\omega)d\omega \int g^2(\boldsymbol{R})U(\boldsymbol{R})\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \tag{13.32}$$

où la fonction $g(\boldsymbol{R})$ est définie par (3.97). Le terme à courte portée $g^2(\boldsymbol{R})U(\boldsymbol{R})$ s'intègre séparément et la contribution de Hartree à la densité d'états s'écrit

$$\delta\nu^H(\epsilon) = -\frac{F}{\pi}\int_{-\infty}^\infty f'(\epsilon-\omega)d\omega \int \mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\omega)d\boldsymbol{r} \tag{13.33}$$

où on a introduit le paramètre :

$$\boxed{F = \frac{\int g^2(\boldsymbol{R})U(\boldsymbol{R})d\boldsymbol{R}}{\int U(\boldsymbol{R})d\boldsymbol{R}} = \frac{1}{U}\int g^2(\boldsymbol{R})U(\boldsymbol{R})d\boldsymbol{R}} \tag{13.34}$$

avec $U = 1/2\rho_0$ (relation 13.5). Le paramètre F varie entre 0 pour un écrantage fort ($\kappa \to \infty$) et 1 pour un écrantage faible ($\kappa \to 0$). Pour plus de détails, on se reportera aux exercices 13.3 et 13.4. L'expression de $\delta\nu^H(\epsilon)$ est proportionnelle à (13.29) de sorte que la correction totale à la densité d'états par direction de spin s'écrit

$$\boxed{\delta\nu(\epsilon) = -\frac{\lambda_\nu}{2\pi}\int_0^\infty \frac{\pi T t}{\sinh \pi T t} Z(t)\cos\epsilon t\ dt} \tag{13.35}$$

[6] On remarque que le résultat ne dépend plus de la constante de couplage e^2. C'est parce que la longueur d'écran κ^{-1} est beaucoup plus petite que l_e. C'est donc la limite $U = U(q=0) = 4\pi e^2/\kappa^2$ qui intervient dans la relation (13.29). Ce rapport ne dépend plus de e^2.

avec $\lambda_\nu = 1-2F$. Cette valeur de λ_ν correspond à une interaction statique. Ce coefficient prend une autre valeur pour le cas de l'interaction dynamiquement écrantée $U(\boldsymbol{q},\omega)$ (p. 513). De plus, il dépend de la portée des interactions par l'intermédiaire du paramètre F. Puisque celui-ci est compris entre 0 et 1, le signe de la correction de densité d'états semble dépendre de la nature de l'interaction écrantée. Si le terme d'échange est plus grand que le terme de Hartree ($F \ll 1$), c'est-à-dire pour un potentiel dont la portée est plus grande que la longueur d'onde de Fermi, la correction de densité d'états est négative. C'est ce qui a systématiquement été observé expérimentalement. En principe, $\delta\nu(\epsilon)$ semble pouvoir devenir positive pour une interaction à très courte portée. Par exemple, dans le cuivre où $F \simeq 0{,}6$, on devrait s'attendre à une correction positive. Nous verrons dans la section 13.4.3 que cette possibilité est un *artefact* et que la prise en compte de l'interaction dynamiquement écrantée modifie l'amplitude de la correction.

La correction (13.35) à la densité d'états résulte du mouvement diffusif des électrons et dépend donc de la dimensionnalité [7] par l'intermédiaire de la probabilité $Z(t)$ qui, pour l'espace libre, est donnée par (5.23).

Par exemple, pour un système quasi-1d de volume Ω, à température nulle, on a $Z(t) = \Omega/\sqrt{4\pi Dt}$. On obtient ainsi, d'après (13.35) et (15.71) :

$$\delta\rho(\epsilon) = -\frac{\lambda_\nu}{4\pi\sqrt{2}}\frac{1}{\sqrt{D\epsilon}} \tag{13.36}$$

par direction de spin et par unité de volume. De même, à deux dimensions et dans la limite $\epsilon\tau_e \ll 1$, on obtient à partir de (15.72)

$$\delta\rho(\epsilon) = \frac{\lambda_\nu}{8\pi^2 D}\ln\epsilon\tau_e \tag{13.37}$$

et à trois dimensions, (15.73) conduit à

$$\delta\rho(\epsilon) = \frac{\lambda_\nu}{8\pi^2\sqrt{2}D}\left(\sqrt{\frac{\epsilon}{D}} - C\right) \tag{13.38}$$

où C est une constante indépendante de ϵ.

La dépendance de la correction de densité d'états en fonction de la probabilité intégrée de retour à l'origine est tout à fait similaire à celle de la correction de localisation faible $\Delta\sigma$ (7.56). On peut formellement écrire

$$\frac{\delta\rho}{\rho_0} \propto \frac{\Delta\sigma}{\sigma_0}(L_\phi = L_\epsilon) \quad , \tag{13.39}$$

[7] On rappelle que le mouvement diffusif des électrons dépend de la dimensionnalité d, mais l'interaction coulombienne est toujours tri-dimensionnelle si toutes les dimensions de l'échantillon sont plus grandes que κ^{-1}. Dans un semi-conducteur où κ^{-1} est grand, la forme de l'interaction peut changer en présence de grilles, à cause de la formation de charges images [290].

où $L_\epsilon = \sqrt{D/\epsilon}$. Ici la coupure aux temps longs est determinée par l'énergie ϵ au lieu du taux de cohérence de phase $1/\tau_\phi$. On peut résumer les relations précédentes pour la correction de densité d'états, dite aussi *anomalie de densité d'états* par

$$\boxed{\delta\rho(\epsilon) \propto -\frac{1}{D}\begin{cases} L_\epsilon - l_e & (d=3) \\ \ln\dfrac{L_\epsilon}{l_e} & (d=2) \\ \dfrac{1}{l_e} - \dfrac{1}{L_\epsilon} & (d=1) \end{cases}} \tag{13.40}$$

On note que l'amplitude de la correction relative de densité d'états est d'ordre $1/g$, où g est la conductance sans dimension.

Exercice 13.1 : Montrer que

$$\mathrm{Re}P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\epsilon) = \mathrm{Im}\int_\epsilon^\infty d\omega \int P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'',\omega)P(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}',\omega)d\boldsymbol{r}''$$

et plus généralement que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{Re}f'(\epsilon-\omega)P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega)d\omega = -\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon-\omega)d\omega \int P(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'',\omega)P(\boldsymbol{r}'',\boldsymbol{r}',\omega)d\boldsymbol{r}''$$

ou encore

$$\int_{-\infty}^{\infty} f'(\epsilon-\omega)\mathrm{Re}\ P(\boldsymbol{q},\omega)d\omega = -\int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon-\omega)\mathrm{Im}\ P^2(\boldsymbol{q},\omega)d\omega \tag{13.41}$$

où P décrit soit le diffuson P_d, soit le cooperon P_c.

Exercice 13.2 : Montrer que la correction de densité d'états (13.35) s'écrit aussi sous les formes équivalentes

$$\delta\nu(\epsilon) = -\frac{1-2F}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\epsilon-\omega)\sum_q \mathrm{Im}P_d^2(\boldsymbol{q},\omega) \tag{13.42}$$

ou

$$\delta\nu(\epsilon) = -\frac{1-2F}{4\pi}\int_0^\infty d\omega\left[\tanh\frac{\epsilon+\omega}{2T} + \tanh\frac{\omega-\epsilon}{2T}\right]\sum_q \mathrm{Im}P_d^2(\boldsymbol{q},\omega) \quad . \tag{13.43}$$

Exercice 13.3 : Le paramètre F représente le rapport des contributions de Hartree et de Fock (échange). En calculant la contribution de Hartree (13.32) dans l'espace réciproque, montrer que F se met également sous la forme [290]

$$F = \frac{\langle U(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\rangle}{U} \tag{13.44}$$

où $U(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')$ est la transformée de Fourier de l'interaction $U(\boldsymbol{r})$ et où la moyenne est prise sur les impulsions $\boldsymbol{p}$ et $\boldsymbol{p}'$ situées sur la surface de Fermi. Vérifier directement que

$$\langle U(\boldsymbol{p}-\boldsymbol{p}')\rangle = \int a(\boldsymbol{q})U(\boldsymbol{q})d\boldsymbol{q} = \int g^2(\boldsymbol{R})U(\boldsymbol{R})d\boldsymbol{R} \tag{13.45}$$

où $a(\boldsymbol{q})$ est la transformée de Fourier de $g^2(\boldsymbol{R})$.

Exercice 13.4 : Calcul de F à l'approximation de Thomas-Fermi

À trois dimensions, en utilisant l'expression $U(\boldsymbol{R}) = \frac{e^2}{R}e^{-\kappa R}$ ainsi que (3.97) pour $g(\boldsymbol{R})$, montrer que dans la limite $\kappa l_e \gg 1$,

$$F = \frac{\kappa^2}{4k_F^2} \ln\left(1 + \frac{4k_F^2}{\kappa^2}\right) \tag{13.46}$$

F tend vers 1 pour une interaction parfaitement écrantée (voir fig. 13.1). Pour le cuivre où $\kappa/k_F \simeq 1{,}51$, F est de l'ordre de 0,6.

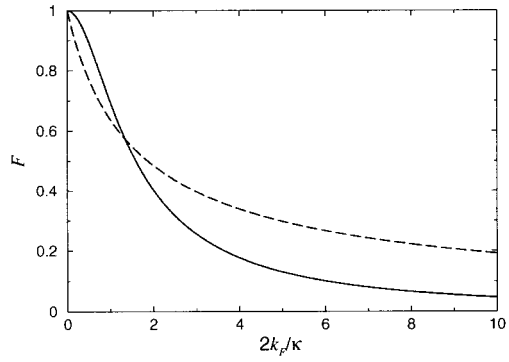


FIG. 13.1 – *Variation du paramètre F en fonction du rapport $2k_F/\kappa$, en dimensions $d = 2$ (tirets) et $d = 3$ (ligne continue).*

À deux dimensions, montrer que dans limite $\kappa l_e \gg 1$,

$$F = \frac{2}{\pi} \frac{\kappa}{\sqrt{\kappa^2 - 4k_F^2}} \arctan \frac{\sqrt{\kappa^2 - 4k_F^2}}{2k_F} \tag{13.47}$$

ou encore

$$F = \int \frac{d\theta}{2\pi} \frac{1}{1 + (2k_F/\kappa)\sin\theta/2} \quad . \tag{13.48}$$

On montrera d'abord qu'à deux dimensions $U(\boldsymbol{q}) = 2\pi e^2/(q + \kappa)$ et on utilisera l'expression (3.101) de $a(\boldsymbol{q})$ correspondante.

13.4.2 Conductance tunnel et anomalie de densité d'états

La modification de la densité d'états au voisinage du niveau de Fermi due à l'interaction entre électrons dans un métal désordonné peut être mise en évidence par des mesures de conductance tunnel. Le principe de l'expérience consiste à placer le conducteur que l'on souhaite étudier en contact avec un autre métal dont la densité d'états ρ_a est connue. On oxyde un des deux conducteurs avant de déposer le second. L'épaisseur de la couche d'oxyde ainsi constituée est contrôlable et constitue une barrière tunnel. La mesure du courant tunnel, proportionnel à la densité d'états des deux métaux, permet

de remonter à l'anomalie de densité d'états. Cette dépression de la conductance tunnel n'est d'ailleurs pas limitée au régime de faible désordre que l'on considère ici. C'est une caractéristique générale de l'effet de l'interaction coulombienne qui subsiste même pour de forts désordres (près de la transition métal-isolant) ou pour des semi-conducteurs.

Afin de comprendre le principe de la mesure, rappelons que le courant tunnel $I(V)$, pour une tension $V > 0$ appliquée entre les deux métaux a et b, dépend de la probabilité tunnel associée au transfert d'électrons entre les deux métaux. Le taux tunnel entre un état initial i du métal a et un état final f du métal b est donné par la règle d'or de Fermi

$$\Gamma_{i\to f}(V) = \frac{2\pi}{\hbar}|t_{if}|^2\delta(E_i - E_f + eV) \tag{13.49}$$

où t_{if} est un élément de matrice qui décrit le couplage entre les deux états et qui dépend de la géométrie de la jonction. Le taux tunnel entre le métal a et le métal b dépend des nombres d'occupation des états initiaux et finaux. Il est donné par

$$\Gamma_{ab}(V) = \frac{2\pi}{\hbar}\sum_{i,f}|t_{if}|^2 f(E_i)[1 - f(E_f)]\delta(E_i - E_f + eV) \tag{13.50}$$

où $f(E)$ est la distribution de Fermi. À température finie, il existe aussi une probabilité finie $\Gamma_{ba}(V)$ de transition de b vers a de sorte que le courant tunnel entre a et b est égal à

$$I = e(\Gamma_{ab} - \Gamma_{ba}) = 2\pi\frac{e}{\hbar}\sum_{if}|t_{if}|^2[f(E_i) - f(E_f)]\delta(E_i - E_f + eV) \quad . \tag{13.51}$$

En supposant que l'élément de matrice tunnel dépend peu de l'énergie et que la tension V et la température T sont petites, à la fois devant l'énergie de Fermi et la hauteur de la barrière tunnel, on peut remplacer les sommes par des intégrales et introduire les densités d'états respectives $\rho_a(\epsilon)$ et $\rho(\epsilon)$ de l'électrode de référence et du conducteur à étudier. On obtient alors

$$I(V) = 2\pi\frac{e}{\hbar}|t|^2\int_{-\infty}^{\infty}\rho_a(\epsilon)\rho(\epsilon + eV)\,[f(\epsilon) - f(\epsilon + eV)]\,d\epsilon \quad . \tag{13.52}$$

Si les densités d'états varient peu au niveau de Fermi (on les note alors ρ_a et ρ_0), l'intégrale prend une forme très simple et donne à basse tension un courant tunnel $I(V)$ proportionnel à V, et donc une caractéristique linéaire qui définit la conductance tunnel G_t

$$G_t = 2\pi\frac{e^2}{\hbar}|t|^2\rho_a\rho_0 \quad . \tag{13.53}$$

En supposant que la densité d'états de l'électrode de référence reste indépendante de l'énergie, une variation $\delta\rho(\epsilon)$ de la densité d'états du métal à étudier

conduit à une variation $\delta I(V)$ du courant et donc à une variation $\delta G_t(V)$ de la conductance tunnel telle que

$$\delta G_t(V) = \frac{d\delta I}{dV} = -2\pi\frac{e^2}{\hbar}\rho_a|t|^2\int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon\delta\rho(\epsilon)f'(\epsilon - eV) \tag{13.54}$$

de sorte qu'à température nulle,

$$\frac{\delta G_t(V)}{G_t} = \frac{\delta\rho(eV)}{\rho_0} \quad . \tag{13.55}$$

La réduction de la conductance tunnel est donc une mesure directe de la variation de la densité d'états due aux interactions coulombiennes.

Les premières expériences de conductance tunnel qui ont mis en évidence les variations données par (13.40) sont représentées sur la figure 13.2 qui montre la dépendance de la conductance tunnel G_t en fonction de V pour un contact tunnel oxyde d'indium-isolant-plomb avec des films d'oxyde d'indium de différentes épaisseurs. Lorsque l'épaisseur du film augmente, on observe le passage d'un comportement bidimensionnel (logarithmique) de l'anomalie de densité d'états à un comportement tridimensionnel proportionnel à $\sqrt{V}$.

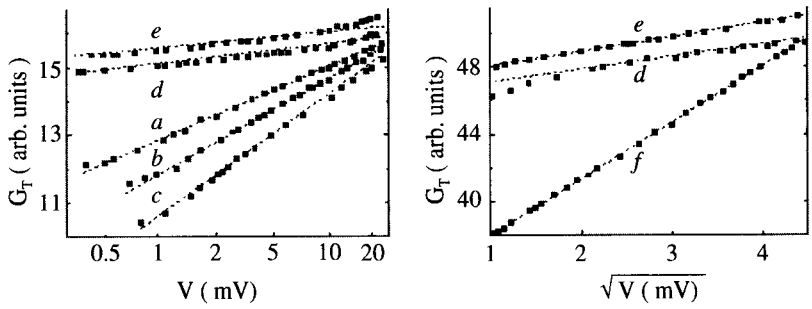


FIG. 13.2 – *Conductance tunnel en fonction de* $\ln V$ *(à gauche) et de* $\sqrt{V}$ *(à droite), pour une jonction oxyde d'indium-isolant-plomb. Les différentes courbes sont obtenues en faisant varier l'épaisseur du film d'oxyde d'indium : (a)* $a = 160$ *Å ; (b)* $a = 190$ *Å ; (c)* $a = 210$ *Å ; (d)* $a = 310$ *Å ; (e)* $a = 460$ *Å ; (f)* $a = 2600$ *Å (Y. Imry et Z. Ovadyahu,* Phys. Rev. Lett. **49**, *841 (1982)).*

Le comportement unidimensionnel a également été observé sur des fils d'aluminium [293]. Le comportement (13.36) en $1/\sqrt{V}$ est parfaitement apparent [8] sur la figure 13.3.

[8] La comparaison avec la prédiction théorique (13.36) est plus compliquée [293]. Elle prend en compte d'autres effets que nous avons négligés dans notre calcul, comme l'influence de l'environnement électromagnétique sur la conductance ainsi que les effets de géométrie finie. Il est intéressant toutefois de noter que tous ces effets supplémentaires laissent inchangée la dépendance de la conductance tunnel en fonction de la tension et se résument à une renormalisation de la constante de diffusion qui apparaît dans la fonction $Z(t)$ (voir l'exercice 13.9).

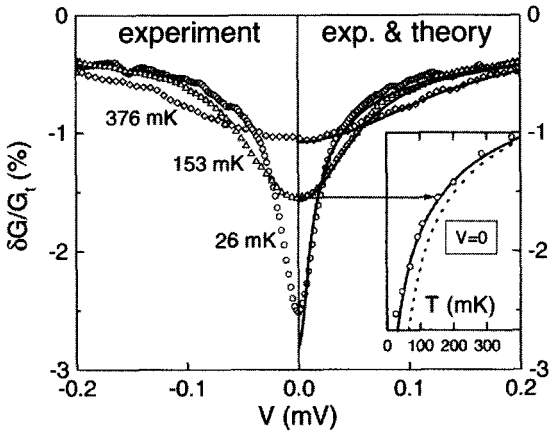


FIG. 13.3 – *Mesure de la conductance tunnel sur des fils d'aluminium en fonction de la tension et à différentes températures. Les courbes en trait plein correspondent à la prédiction théorique basée sur la relation (13.36), avec un coefficient de diffusion D^* renormalisé par la géométrie du système (exercice 13.9) [293].*

Exercice 13.5 : Conductance tunnel à température finie

À l'aide de (13.35) et (13.54), montrer qu'à température finie, la correction relative de conductance tunnel s'écrit (terme d'échange) :

$$\frac{\delta G_t(V,T)}{G_t} = -\frac{1}{2\pi\nu_0}\int_0^\infty Z(t)R^2(t)\cos eVt\ dt \tag{13.56}$$

où la fonction $R(t)$ est donnée par $R(t) = \pi Tt/\sinh(\pi Tt)$.

13.4.3 Interaction dynamiquement écrantée

La dérivation précédente de la densité d'états est approchée, car elle ne tient pas compte du fait que l'interaction est dynamiquement écrantée, c'est-à-dire qu'elle dépend aussi de la fréquence. Le calcul systématique [291] de la correction de densité d'états à l'approximation de Hartree-Fock en utilisant l'expression (13.6) du potentiel effectif d'interaction s'obtient en évaluant les deux diagrammes de la figure 13.4 (voir aussi 13.5). Les deux diagrammes supérieurs montrent les représentations usuelles des corrections de Hartree et d'échange (Fock) dans le formalisme du problème à N-corps [294]. Les deux diagrammes inférieurs présentent une représentation topologiquement équivalente mais qui met en relief le rôle du facteur de structure Γ décrivant la nature diffusive du mouvement des électrons et des fonctions $g(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ associées à la courte portée du potentiel d'interaction. Le terme d'échange (de Fock) contribuant à la variation δG^F de la fonction de Green due aux

interactions [294] s'obtient en séparant les variations spatiales lentes et rapides et, en utilisant le tableau (3.8) :

$$\delta G^F(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_0) = -\int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2i\pi} f(\epsilon-\omega)\frac{f^{2,1}}{\gamma_e}\int \Gamma_\omega(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r})\frac{1}{\gamma_e^2}U_\omega(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\Gamma_\omega(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_0)d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \tag{13.57}$$

c'est-à-dire, compte tenu de (4.37) et de l'expression de $f^{2,1}$ donnée dans la table (3.7) :

$$\delta G^F(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_0) = \rho_0 \int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon-\omega)d\omega \int P_d(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r},\omega)U_\omega(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')P_d(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_0,\omega)d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \tag{13.58}$$

$U_\omega(\boldsymbol{r})$ est la transformée de Fourier de $U(\boldsymbol{q},\omega)$ donnée par (13.12). La correction de densité d'états locale correspondante est reliée par (3.25) à la partie imaginaire de $\delta G^F(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_0)$

$$\delta\rho^F(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_0) = -\frac{\rho_0}{\pi}\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon-\omega)d\omega\int P_d(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r},\omega)U_\omega(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')P_d(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_0,\omega)d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}'. \tag{13.59}$$

La correction à la densité d'états totale s'obtient en intégrant sur $\boldsymbol{r}_0$ et s'écrit [9]

$$\delta\nu^F = -\frac{\rho_0}{\pi}\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon-\omega)d\omega\sum_{\boldsymbol{q}} U(\boldsymbol{q},\omega)P_d^2(\boldsymbol{q},\omega) \quad . \tag{13.61}$$

Dans la limite d'une interaction statique $U(\boldsymbol{q})$ on retrouve le résultat (13.29) (voir exercice 13.2). En revanche, pour une interaction dynamiquement écrantée et dans la limite où $q \ll \kappa$, on a

$$U(\boldsymbol{q},\omega) \simeq U\frac{-i\omega + Dq^2}{Dq^2} \quad . \tag{13.62}$$

À trois dimensions, le calcul redonne le résultat (13.28) de l'interaction statique, multiplié par un facteur 2 (voir exercice 13.6).

Considérons maintenant le terme de Hartree. Il s'obtient à partir du diagramme correspondant de la figure 13.4 et il donne une contribution δG^H à

[9] On note qu'une mesure de conductance tunnel permet d'avoir accès à la densité d'états *locale* $\delta\rho(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_0)$. Pour un système non invariant par translation, l'anomalie de densité d'états dépend du point de mesure et elle est proportionnelle à la probabitité de retour en $\boldsymbol{r}_0$

$$\delta\rho(\epsilon,\boldsymbol{r}_0) \propto \int_0^{\infty} \frac{\pi T t}{\sinh \pi T t} P(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_0,t)\cos\epsilon t dt \quad . \tag{13.60}$$

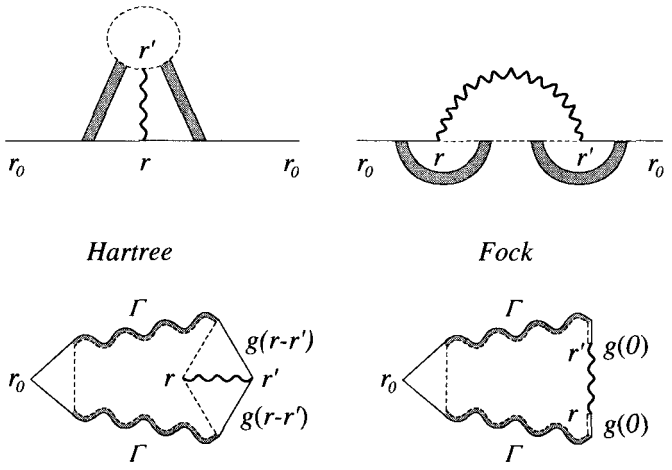


FIG. 13.4 – *Diagrammes de Hartree et d'échange (Fock) pour la densité d'états locale. Le diagramme de Hartree contient la fonction $g^2(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$ et le diagramme de Fock contient le facteur $g^2(0)=1$.*

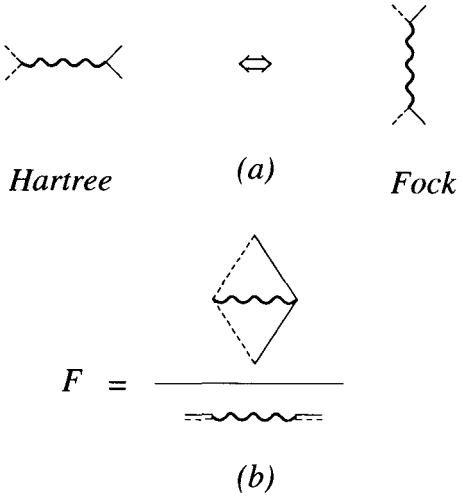


FIG. 13.5 – *Les deux diagrammes de Hartree et de Fock sont identiques moyennant la correspondance (a). (b) Représentation du paramètre F (13.34) comme le rapport de deux diagrammes.*

la fonction de Green locale de la forme [10]

$$\delta G^H(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_0) = -2\rho_0 \int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon-\omega)d\omega$$
$$\times \int P_d(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r},\omega) g^2(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') U(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') P_d(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_0,\omega) d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \quad . \qquad (13.63)$$

[10]Les contributions de Hartree (13.63) et de Fock (13.58) diffèrent par leur signe et par un facteur 2 qui proviennent respectivement de l'échange et du spin.

Pour ce terme, l'échange d'énergie lors de l'interaction est nul et l'interaction $U(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ reste statique. On a donc pour la correction de densité d'états locale

$$\delta\rho^H(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r}_0) = -2\frac{\rho_0}{\pi}\mathrm{Im}\int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon-\omega)d\omega \\ \times \int P_d(\boldsymbol{r}_0,\boldsymbol{r},\omega)g^2(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')U(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')P_d(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r}_0,\omega)d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \quad . \tag{13.64}$$

En intégrant sur $\boldsymbol{r}_0$ et en utilisant (13.45), on obtient

$$\delta\nu^H = 2F\frac{U\rho_0}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon-\omega)d\omega\sum_{\boldsymbol{q}}\mathrm{Im}P_d^2(\boldsymbol{q},\omega) \quad . \tag{13.65}$$

Pour le terme de Hartree, l'interaction *n'est pas* dynamiquement écrantée et on retrouve le résultat statique (13.33). Finalement, pour une interaction dynamiquement écrantée, la correction totale de densité d'états s'écrit

$$\boxed{\delta\nu = -\frac{\rho_0}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon-\omega)d\omega\sum_{\boldsymbol{q}}\mathrm{Im}\left[(U(\boldsymbol{q},\omega)-2FU)P_d^2(\boldsymbol{q},\omega)\right]} \tag{13.66}$$

À trois dimensions, l'exercice 13.6 montre que la prise en compte de l'écrantage dynamique dans le terme d'échange revient à multiplier sa contribution par un facteur 2. Le paramètre λ_ν, qui décrit l'amplitude de l'anomalie de densité d'états (13.35), devient donc $\lambda_\nu = 2-2F$. Par ailleurs, le calcul perturbatif qui conduit à (13.35) et (13.66) n'est valable que pour $F \ll 1$. On peut montrer que le préfacteur du terme d'échange n'est égal à 2 qu'au premier ordre de perturbation. À l'ordre suivant, il existe un terme linéaire en F (égal à $F/2$) de sorte que le préfacteur λ_ν de la correction de Hartree-Fock est en fait [290, 295] :

$$\lambda_\nu = 2-\frac{3F}{2} \quad , \quad d=3 \quad . \tag{13.67}$$

Par définition (13.34), on a $0 < F < 1$ et la correction est donc toujours *négative*. Pour l'étude des autres dimensionnalités, on se reportera à la référence [290] [11].

[11] Les résultats présentés ici sont obtenus dans la limite perturbative, c'est-à-dire lorsque $\delta\nu/\nu \ll 1$. Une expression non perturbative a été obtenue dans la référence [296].

Remarque

Il existe une autre contribution à l'anomalie de densité d'états obtenue en remplaçant les diffusons par des cooperons dans les diagrammes de la figure 13.4. Dans ce cas il n'est pas possible de s'arrêter à l'ordre le plus bas pour traiter l'interaction. Il convient alors de prendre en compte une somme infinie de diagrammes constitués de lignes d'interaction et de cooperons (cette somme est appelée renormalisation de Cooper). Cela conduit à une contribution supplémentaire à l'anomalie de densité d'états proportionnelle à celle du diffuson mais réduite par un facteur $1/\ln(T_c/\epsilon)$ (ou $\ln(\ln T_c\tau_e/\ln T_c/\epsilon)$ à deux dimensions). Pour l'interaction coulombienne, T_c est une énergie caractéristique de l'ordre de la largeur de bande. Pour une interaction attractive, T_c est la température de supraconductivité [290].

Exercice 13.6 : Montrer que, à trois dimensions, en prenant en compte l'écrantage dynamique de l'interaction, la contribution du terme d'échange est multipliée par un facteur 2.

Pour une interaction statique $U(\boldsymbol{q},\omega) = U$, la relation (13.61) montre que le terme d'échange fait intervenir l'intégrale

$$U \ \mathrm{Im} \int_0^\infty \frac{1}{(-i\omega + Dq^2)^2} q^2 dq \quad .$$

Si l'interaction est dynamiquement écrantée, c'est-à-dire pour $U(\boldsymbol{q},\omega) = U(-i\omega + Dq^2)/Dq^2$, l'intégrale devient

$$\frac{U}{D} \mathrm{Im} \int_0^\infty \frac{1}{-i\omega + Dq^2} dq \quad .$$

Une intégration par parties montre que l'écrantage dynamique de l'interaction multiplie le résultat statique par un facteur 2. Pour l'étude des autres dimensionnalités, on se reportera à la référence [290].

Exercice 13.7 : Montrer, à partir des relations (13.61) et (15.103), que la contribution du terme d'échange à la correction de densité d'états peut aussi s'écrire sous la forme

$$\delta\rho^F = -\frac{\rho_0}{2\pi\Omega} \int_0^\infty d\omega \left[\tanh\frac{\omega+\epsilon}{2T} + \tanh\frac{\omega-\epsilon}{2T}\right] \sum_{\boldsymbol{q}} \mathrm{Im}[U(\boldsymbol{q},\omega) P_d^2(\boldsymbol{q},\omega)] \ . \qquad (13.68)$$

Exercice 13.8 : Montrer que, pour une interaction statique $U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$, les formulations (13.61) et (13.29) sont équivalentes.

13.4.4 Effets capacitifs

On montre ici comment la géométrie du système peut jouer un rôle important pour la mesure de la correction de densité d'états tunnel. On considère par exemple un fil quasi-unidimensionnel de longueur L et de section carrée W^2, posé sur une électrode métallique dont il est séparé par une jonction tunnel d'épaisseur a. Dans ce cas, l'énergie coulombienne dépend de la capacité de la jonction et la composante uniforme de l'interaction est de la forme

$$U(\boldsymbol{q}=0,\omega) = \frac{e^2}{C} \quad , \qquad (13.69)$$

où C est la capacité de la jonction par unité de longueur. Par ailleurs, à courte distance, c'est-à-dire pour les grands vecteurs d'onde (mais toujours dans la limite diffusive), l'interaction dynamiquement écrantée garde la forme

$$U(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{2\rho_{1d}} \frac{-i\omega + Dq^2}{Dq^2} \quad , \tag{13.70}$$

où $\rho_{1d} = \rho_0 W^2$ est la densité d'états unidimensionnelle. Pour tenir compte du comportement à grande distance ($q \to 0$), on montre dans le complément C13.1 que l'interaction s'écrit sous la forme [293, 297, 298]

$$U(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{-i\omega + Dq^2}{2\rho_{1d} Dq^2 - i\omega C/e^2} \tag{13.71}$$

et peut se récrire

$$U(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{2\rho_{1d}} \frac{D^*}{D} \frac{-i\omega + Dq^2}{-i\omega + D^* q^2} \quad , \tag{13.72}$$

où le coefficient $D^* = 2\rho_0 W^2 e^2 D/C \gg D$ s'interprète comme le coefficient de diffusion associé à la propagation du champ électromagnétique dans la jonction [12]. Puisque la conductance du fil est $\sigma = 2e^2 D\rho_0$, il peut se récrire $D^* = 1/RC$ où $R = 1/(\sigma W^2)$ est la résistance par unité de longueur du fil et où C est la capacitance par unité de longueur de la jonction.

Exercice 13.9 : Calculer l'anomalie de densité d'états pour un fil au voisinage d'une électrode métallique [293, 297].

En insérant l'interaction (13.72) dans l'expression (13.66) de la correction de densité d'états et après intégration sur $\boldsymbol{q}$ et ω, on obtient, pour le terme d'échange à température nulle :

$$\delta\rho(\epsilon) = -\frac{1}{2\pi\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{D\epsilon}} \frac{D^*/D}{1 + \sqrt{D^*/D}} \quad . \tag{13.73}$$

Montrer que, pour un fil dont l'épaisseur est grande devant la longueur d'écran, le rapport $D^*/D \simeq (\kappa W)^2$ est grand et que la correction de densité d'états donnée par (13.36) doit être multipliée par le rapport $\sqrt{D^*/D}$. Montrer que le terme de Hartree n'est pas renormalisé.

Remarque : Blocage de Coulomb dynamique

Une autre description de la conductance tunnel consiste à la relier à l'impédance de l'environnement du système à étudier. On fait alors apparaître la probabilité qu'un électron qui traverse la barrière tunnel cède de l'énergie à son environnement [297, 299, 300]. Pour une géométrie où l'environnement est essentiellement constitué par le conducteur lui-même, cette formulation est équivalente à l'approche microscopique développée dans ce chapitre.

---

[12] Ce coefficient de diffusion du champ électromagnétique ne doit pas être confondu avec le coefficient de diffusion $D^* = v_F l^*/d$ introduit dans la relation (4.172) afin de décrire les collisions anisotropes.

13.5 Correction à la conductivité

La prise en compte de l'interaction entre électrons conduit aussi à une réduction de la conductivité. Sans entrer dans le détail des calculs, on peut concevoir que cette réduction est une conséquence de la correction de densité d'états. Toutes deux résultent de la diffusion d'un électron sur les fluctuations de charge engendrées par le désordre. La dépendance en température de la conductivité $\sigma(T)$ est reliée à sa dépendance en énergie à $T = 0$ K par la relation (7.124). Puisque la conductivité est proportionnelle à la densité d'états (relation d'Einstein), l'anomalie de densité d'états se traduit par une correction à la conductivité donnée par

$$\frac{\delta\sigma(T)}{\sigma_0} = \int d\epsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right) \frac{\delta\nu(\epsilon)}{\nu_0} \tag{13.74}$$

où σ_0 est la conductivité de Drude (7.14). Pour une interaction statique, la correction de densité d'états est donnée par (13.35) et en utilisant (15.98), on a [13]

$$\boxed{\delta\sigma(T) = -\lambda_\sigma \left(\frac{e^2 D}{\pi\Omega}\right) \int_0^\infty \left(\frac{\pi T t}{\sinh \pi T t}\right)^2 Z(t) dt} \tag{13.75}$$

avec $\lambda_\sigma = 1 - 2F$. Comme pour la correction de densité d'états , cette valeur correspond à une interaction statique. Pour un système quasi-1d, on a $Z(t) = \Omega/\sqrt{4\pi D t}$. À l'aide de (15.78), on en déduit

$$\delta\sigma(T) = -\lambda_\sigma \frac{e^2}{\pi^2}\frac{3}{8}\sqrt{\frac{\pi}{2}}\zeta\left(\frac{3}{2}\right)\left(\frac{D}{T}\right)^{1/2} \quad . \tag{13.76}$$

À deux dimensions $Z(t) = \Omega/4\pi D t$, et dans la limite $T\tau_e \ll 1$, on obtient, à l'aide de (15.79),

$$\delta\sigma(T) = -\lambda_\sigma \frac{e^2}{4\pi^2} \ln \frac{e^\gamma}{2\pi T \tau_e} \tag{13.77}$$

où $\gamma \simeq 0{,}577$ est la constante d'Euler. À trois dimensions, $Z(t) = \Omega/(4\pi D t)^{3/2}$ et (15.82) conduisent à

$$\delta\sigma(T) = -\lambda_\sigma \frac{e^2}{\pi^2}\frac{\sqrt{\pi}}{8\sqrt{2}}\zeta\left(\frac{1}{2}\right)\left(\frac{T}{D}\right)^{1/2} \tag{13.78}$$

à une constante soustractive près.

[13] Afin de comparer cette relation et les suivantes à celles du chapitre 7, on prendra soin de remettre $\hbar$. Ce résultat, qui peut aussi être obtenu à partir d'une autre méthode dite quasi-classique, est présenté sous cette forme dans la référence [301].

Comme pour l'anomalie de densité d'états, la prise en compte du caractère dynamique de l'interaction conduit à un résultat sensiblement différent. Un traitement complet montre qu'il suffit garder les résultats (13.76–13.78) avec (voir l'exercice 13.11) :

$$\lambda_\sigma = \frac{4}{d} - \frac{3F}{2} \quad . \tag{13.79}$$

Remarque

Tout comme pour la correction de densité d'états, il existe une autre contribution à $\delta\sigma(T)$ obtenue en remplaçant les diffusons par des cooperons (voir remarque p. 514). Cette contribution est proportionnelle à celle du diffuson mais réduite par un facteur $1/\ln(T_c/T)$ (ou $\ln(\ln T_c\tau_e/\ln T_c/T)$ à deux dimensions). Pour l'interaction coulombienne, T_c est une énergie caractéristique de l'ordre de la largeur de bande et telle que $T \ll T_c$. La correction est donc négative. Pour une interaction attractive, T_c est la température de supraconductivité, ce qui conduit, même pour $T \gg T_c$, à une augmentation de la conductivité. Il existe deux autres classes de diagrammes. Ceux dits de Maki-Thomson décrivent la diffusion des électrons par des fluctuations supraconductrices et conduisent à une correction proportionnelle à la correction de localisation faible [303,304]. Les corrections dites de Aslamasov-Larkin sont liées aux fluctuations des paires de Cooper et ne sont importantes qu'au voisinage de T_c. Pour une revue des développements théoriques et expérimentaux sur ce sujet, on consultera les références [290,305].

Il est utile de comparer la correction (13.75) avec la correction de localisation faible (7.53). Ces deux corrections sont du même ordre. Les mécanismes physiques à l'origine de ces corrections sont différents mais toutes deux sont reliées à la probabilité intégrée de retour à l'origine. Toutefois, les dépendances en température sont différentes. Pour la correction de localisation faible, la température intervient seulement par l'intermédiaire du temps de cohérence de phase $\tau_\phi(T) \propto T^{-p}$ (section 7.4.3). Si les dépendances en température sont différentes à $d = 1$ et à $d = 3$, elles sont toutes deux logarithmiques à deux dimensions (comparer 7.66 avec 13.76–13.78). Afin de mettre en évidence expérimentalement la correction due aux interactions, on applique un champ magnétique afin de supprimer la correction de localisation faible.

Exercice 13.10 : Montrer que :

$$\int_{-\infty}^{\infty} [f(\epsilon-\omega) - f(\epsilon+\omega)] \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right) d\epsilon = \frac{\partial}{\partial \omega}\left(\omega \coth \frac{\beta\omega}{2}\right) \quad . \tag{13.80}$$

Exercice 13.11 : Montrer que la correction de conductivité pour une interaction statique $U = 1/2\rho_0$ peut se mettre sous la forme

$$\frac{\delta\sigma}{\sigma_0} = -\frac{1-2F}{4\pi\nu_0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\partial}{\partial\omega}\left(\omega \coth \frac{\beta\omega}{2}\right) \sum_{\boldsymbol{q}} \mathrm{Im} P_d^2(\boldsymbol{q},\omega) \quad . \tag{13.81}$$

Pour cela, on part de la relation (13.42) pour la correction de densité d'états. Pour une interaction quelconque $U(\boldsymbol{q},\omega)$, la référence [302] montre que la correction s'écrit, pour le terme d'échange (voir exercice suivant) :

$$\frac{\delta\sigma}{\sigma_0} = -\frac{2}{\pi d\Omega} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\partial}{\partial\omega}\left(\omega \coth \frac{\beta\omega}{2}\right) \sum_{\boldsymbol{q}} Dq^2 \mathrm{Im}[U(\boldsymbol{q},\omega) P_d^3(\boldsymbol{q},\omega)] \quad . \tag{13.82}$$

Montrer que pour l'interaction dynamiquement écrantée $U(\boldsymbol{q},\omega) = U\frac{-i\omega+Dq^2}{Dq^2}$, la correction due à l'échange s'écrit :

$$\frac{\delta\sigma}{\sigma_0} = -\frac{1}{\pi\nu_0 d}\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\partial}{\partial\omega}\left(\omega\coth\frac{\beta\omega}{2}\right)\sum_{\boldsymbol{q}} \mathrm{Im}P_d^2(\boldsymbol{q},\omega) \tag{13.83}$$

et ne diffère du terme d'échange de (13.81) que par un facteur $4/d$.

Exercice 13.12 : Correction à la conductivité

La référence [302] présente le calcul de la contribution de l'interaction électronique à la conductivité. Pour le terme d'échange, ce calcul fait intervenir les trois diagrammes de la figure 13.6. Montrer que la somme de ces trois diagrammes est nulle.

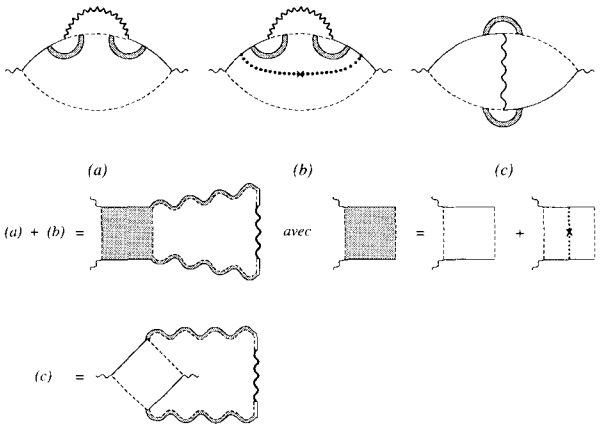


FIG. 13.6 – *Diagrammes d'échange contribuant à la conductivité. On donne une présentation topologiquement équivalente permettant de montrer que leur somme est nulle. Les termes de Hartree, dont la somme est aussi nulle, sont obtenus par la transformation de la figure 13.5.*

Pour le montrer, il est utile de redessiner ces diagrammes afin de mettre en relief plus explicitement les contributions à courte et longue portée (fig. 13.6). Cette représentation fait apparaître des boîtes de Hikami ayant une structure similaire à celles rencontrées pour les fluctuations de conductance. On montre que leur somme est nulle en utilisant les résultats de la section 11.2.1. D'après (11.17), la somme des diagrammes $(a) + (b)$ est proportionnelle à :

$$2\,\frac{k_F^2}{d}(H^{(A)} + H^{(B)}) = 2\,\frac{k_F^2}{d}\tilde{H}' = 2\,\frac{k_F^2}{d}2\pi\rho_0\tau_e^3 \quad . \tag{13.84}$$

Le facteur 2 tient compte des diagrammes identiques à (a) et (b) mais où les parties retardée et avancée ont été échangées. Le diagramme (c) est proportionnel à

$$-\frac{k_F^2}{d}H^{(A)} = -\frac{k_F^2}{d}4\pi\rho_0\tau_e^3 \quad . \tag{13.85}$$

Le signe $-$ provient de la moyenne sur les impulsions entrantes qui sont opposées. La somme de ces trois diagrammes est donc nulle.

Les diagrammes non nuls qui contribuent à la conductivité sont ceux de la figure 13.7. Ils sont construits à partir de deux fonctions retardées (ou avancées). D'après les considérations de la section 7.1, ces diagrammes sont plus petits que les précédents, d'un

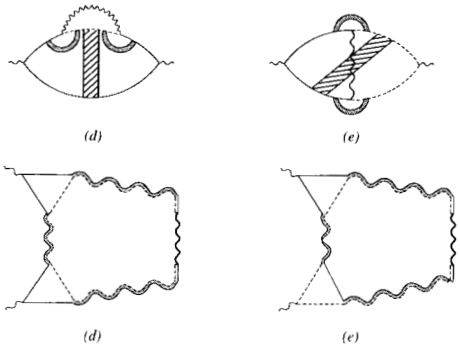


FIG. 13.7 – *Diagrammes de conductivité (échange). Les deux termes du haut correspondent à la représentation habituelle, tandis que les deux diagrammes du bas donnent une représentation topologiquement équivalente.*

facteur $1/k_F l_e$. Mais ils sont néanmoins divergents. En utilisant le développement $\overline{G}(\boldsymbol{k}-\boldsymbol{q}) = \overline{G}(\boldsymbol{k}) - \boldsymbol{v}.\boldsymbol{q}\overline{G}(\boldsymbol{k})^2$, montrer que chaque « triangle » est proportionnel au vecteur d'onde q et que ces deux diagrammes sont donc proportionnels à

$$\sum_{\boldsymbol{q}} q_x^2 \text{ Im } P_d^3(\boldsymbol{q},\omega)U(\boldsymbol{q},\omega) \quad . \tag{13.86}$$

13.6 Temps de vie d'un état électronique

13.6.1 Introduction : théorie de Landau et désordre

L'interaction coulombienne est fortement écrantée par la présence des autres électrons (section 13.2). Chacun d'eux, « habillé » par le nuage d'écran ainsi constitué, est appelé une *quasi-particule*. La théorie de Landau des « liquides de Fermi » formalise ce concept de quasi-particule et montre que leurs propriétés sont essentiellement les mêmes que celles des électrons sans interaction, moyennant une renormalisation des paramètres physiques tels que la masse de l'électron [306].

En fait, les quasi-particules interagissent faiblement par l'intermédiaire de l'interaction écrantée, aussi appelée interaction résiduelle. À cause de cette interaction, une quasi-particule, contrairement à une quasi-particule libre, acquiert un temps de vie fini. La théorie de Landau repose sur le fait que ce temps de vie diverge pour une quasi-particule proche du niveau de Fermi.

Dans cette section, on étudie le temps de vie de ces quasi-particules et on montre que le désordre joue un rôle essentiel. La détermination de ce temps de vie est cruciale afin de déterminer si les propriétés de basse énergie, c'est-à-dire au voisinage du niveau de Fermi, peuvent être encore décrites dans le cadre de la théorie de Landau des liquides de Fermi, c'est-à-dire au moyen de quasi-particules sans interaction. Ceci permettra de comprendre ce

qui limite la cohérence de phase dans le gaz d'électron en interaction, une question majeure de la physique mésoscopique.

En l'absence d'interaction résiduelle, une quasi-particule a un temps de vie infini. En présence de l'interaction, la probabilité $\mathcal{P}(t)$ que la quasi-particule reste dans son état initial est de la forme [306] :

$$\mathcal{P}(t) = e^{-t/\tau_{ee}(\epsilon)} \quad , \tag{13.87}$$

où $\tau_{ee}(\epsilon)$ est le temps de vie de la quasi-particule. Ce temps de vie dépend de l'énergie ϵ mesurée par rapport au niveau de Fermi. En l'absence de désordre, Landau a montré que, à trois dimensions, le temps de vie τ_{ee} d'une quasi-particule est donné par

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon, T)} \simeq \max\left(\frac{\epsilon^2}{\epsilon_F}, \frac{T^2}{\epsilon_F}\right) \quad . \tag{13.88}$$

Au voisinage du niveau de Fermi, le concept de quasi-particule est bien défini puisque la largeur $1/\tau_{ee}(\epsilon)$ d'un état tend vers zéro plus vite que son énergie ϵ lorsqu'on se rapproche du niveau de Fermi (voir le complément C13.2).

13.6.2 Temps de vie à température nulle

Dans cette section, nous allons montrer qu'en présence de désordre, la diffusion multiple augmente la probabilité que deux électrons interagissent et par conséquent diminue le temps de vie électronique. Plus précisément, à l'approximation de diffusion et à température nulle, le temps de vie peut s'écrire [290] [14]

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} \simeq \Delta \left(\frac{\epsilon}{E_c}\right)^{d/2} \qquad \epsilon \gg E_c \quad . \tag{13.89}$$

Le comportement en loi de puissance avec un exposant dépendant de la dimensionnalité d'espace d est la signature du régime de diffusion. E_c est l'énergie de Thouless et $\Delta = 1/\nu_0$ est la séparation moyenne entre niveaux d'énergie en l'absence d'interaction. Cette expression est limitée au cas où l'énergie d'excitation ϵ est grande devant E_c. Dans le cas contraire, le temps de vie varie comme [307]

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} \simeq \Delta \left(\frac{\epsilon}{E_c}\right)^{2} \qquad \epsilon \ll E_c \quad . \tag{13.90}$$

Afin d'évaluer le temps de vie électronique, on considère un état propre $|\alpha\rangle$, de l'hamiltonien désordonné et sans interaction, dont l'énergie ϵ_α est située

[14] On pourrait penser que la dépendance en température de $1/\tau_{ee}(T)$ est obtenue en remplaçant ϵ par T comme dans (13.88) pour le cas balistique, pour obtenir ainsi $1/\tau_{ee}(T) \propto T^{d/2}$. On montre dans la section 13.6.3 que ceci est incorrect pour $d \leq 2$.

au-dessus du niveau de Fermi [15]. Cet état interagit avec un état occupé $|\gamma\rangle$ d'énergie ϵ_γ (fig. 13.8). Le temps de vie de l'état $|\alpha\rangle$ est donné par la règle d'or de Fermi

$$\frac{1}{\tau_\alpha} = 4\pi \sum_{\beta\gamma\delta} |\langle\alpha\gamma|U|\beta\delta\rangle|^2 \delta(\epsilon_\alpha + \epsilon_\gamma - \epsilon_\beta - \epsilon_\delta) \quad . \tag{13.91}$$

Un facteur 2 tient compte de la dégénérescence de spin de l'état $|\gamma\rangle$. L'élément de matrice $\langle\alpha\gamma|U|\beta\delta\rangle$ décrit l'interaction entre les états $|\alpha\rangle$ et $|\gamma\rangle$ qui évoluent vers les états finaux $|\beta\rangle$ et $|\delta\rangle$. Notons que $\epsilon_\gamma < 0$ et que les états finaux, pour être accessibles, ont des énergies telles que $\epsilon_\beta > 0$ et $\epsilon_\delta > 0$.

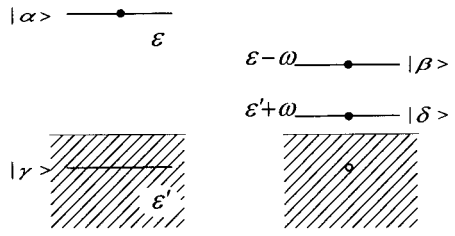


FIG. 13.8 – *Un électron dans l'état $|\alpha\rangle$ d'énergie ϵ interagit avec un autre électron $|\gamma\rangle$ d'énergie ϵ' de la mer de Fermi. L'état final est constitué de deux électrons au-dessus du niveau de Fermi et d'un trou.*

Exercice 13.13 : Vérifier que pour un élément de matrice constant, le temps de vie $\tau_{ee}(\epsilon)$ donné par (13.91) varie comme $1/\epsilon^2$.

Le temps de vie est de la forme

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} = 2\pi U^2 \nu_f(\epsilon)$$

où $\nu_f(\epsilon) = 2\sum'_{\beta\gamma\delta} \delta(\epsilon + \epsilon_\gamma - \epsilon_\beta - \epsilon_\delta)$ est la densité d'états finaux. La somme $\sum'$ est limitée aux états tels que $\epsilon_\gamma < 0$, $\epsilon_\beta > 0$ et $\epsilon_\delta > 0$. En remplaçant les sommes sur les états par des intégrales sur les énergies et en introduisant la densité d'états à une particule ν_0, on obtient

$$\nu_f(\epsilon) = 2\nu_0^3 \int_{-\infty}^{0} d\epsilon_\gamma \int_0^\infty d\epsilon_\beta \int_0^\infty d\epsilon_\delta \delta(\epsilon + \epsilon_\gamma - \epsilon_\beta - \epsilon_\delta) = \nu_0^3 \epsilon^2 \quad .$$

Si les éléments de matrice ne dépendent pas de l'énergie, le temps de vie varie comme $1/\epsilon^2$. Cette dépendance en énergie est simplement liée à la densité d'états finaux vers lesquels un état de quasi-particule peut se désintégrer. C'est l'origine de la dépendance (13.88) obtenue par Landau [306] (voir aussi le complément C13.2).

---

[15] Plus précisément, on considère les états de quasi-particule sans interaction, dont on suppose que le spectre possède les mêmes propriétés statistiques que le spectre des électrons sans interaction.

Afin de ne pas particulariser un état d'énergie ϵ, on moyenne le temps de vie sur tous les états $|\alpha\rangle$ ayant cette énergie. Ainsi, on calcule

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} = \frac{4\pi}{\nu_0} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} |\langle\alpha\gamma|U|\beta\delta\rangle|^2 \delta(\epsilon_\alpha + \epsilon_\gamma - \epsilon_\beta - \epsilon_\delta)\delta(\epsilon - \epsilon_\alpha) \quad . \tag{13.92}$$

En notant ϵ' l'énergie des états $|\gamma\rangle$, la conservation de l'énergie impose que les états finaux $|\beta\rangle$ et $|\delta\rangle$ aient les énergies $\epsilon - \omega$ et $\epsilon' + \omega$, où ω caractérise le transfert d'énergie au cours de l'interaction (fig. 13.8). Le temps de vie inverse se récrit

$$\begin{aligned}\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} &= \frac{4\pi}{\nu_0} \int_0^\epsilon d\omega \int_{-\omega}^0 d\epsilon' \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} |\langle\alpha\gamma|U|\beta\delta\rangle|^2 \\ &\quad \times\delta(\epsilon - \epsilon_\alpha)\delta(\epsilon' - \epsilon_\gamma)\delta(\epsilon - \omega - \epsilon_\beta)\delta(\epsilon' + \omega - \epsilon_\delta) \quad . \end{aligned} \tag{13.93}$$

Il convient de moyenner cette expression sur le désordre, de sorte que le temps de vie est donné par

$$\boxed{\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} = 4\pi\nu_0^3 \int_0^\epsilon \omega W^2(\omega) d\omega} \tag{13.94}$$

avec

$$W^2(\omega) = \frac{1}{\nu_0^4} \overline{\sum_{\alpha\beta\gamma\delta} |\langle\alpha\gamma|U|\beta\delta\rangle|^2 \delta(\epsilon - \epsilon_\alpha)\delta(\epsilon' - \epsilon_\gamma)\delta(\epsilon - \omega - \epsilon_\beta)\delta(\epsilon' + \omega - \epsilon_\delta)} \tag{13.95}$$

$W(\omega)$ est donc l'élément de matrice caractéristique dont on va voir qu'il ne dépend que du transfert d'énergie ω [16]. Dans la littérature, on définit parfois le « noyau » $K(\omega) = 4\pi\nu_0^3 W^2(\omega)$, de sorte que $1/\tau_{ee}(\epsilon) = \int_0^\epsilon \omega K(\omega) d\omega$.

On calcule maintenant $1/\tau_{ee}$ à l'approximation de diffusion. L'élément de matrice $\langle\alpha\gamma|U|\beta\delta\rangle$ évalué sur la base des fonctions propres $\phi_i(\boldsymbol{r})$ de l'hamiltonien (2.1), s'écrit

$$\langle\alpha\gamma|U|\beta\delta\rangle = \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 \phi_\alpha^*(\boldsymbol{r}_1)\phi_\gamma^*(\boldsymbol{r}_2)\phi_\beta(\boldsymbol{r}_1)\phi_\delta(\boldsymbol{r}_2) U_\omega(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) \quad , \tag{13.96}$$

où $U_\omega(\boldsymbol{r})$ est le potentiel dynamiquement écranté. En utilisant la relation (3.26) qui relie les fonctions d'onde à la densité d'états non locale $\rho_\epsilon(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$, on peut écrire $W^2(\omega)$ sous la forme

$$\begin{aligned} W^2(\omega) &= \frac{1}{\nu_0^4} \int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 d\boldsymbol{r}_1' d\boldsymbol{r}_2' U_\omega(\boldsymbol{r}_1 - \boldsymbol{r}_2) U_\omega(\boldsymbol{r}_1' - \boldsymbol{r}_2') \\ &\quad \times \overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}_1')\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}_1', \boldsymbol{r}_1)}\ \overline{\rho_{\epsilon'}(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}_2')\rho_{\epsilon'+\omega}(\boldsymbol{r}_2', \boldsymbol{r}_2)} \end{aligned} \tag{13.97}$$

[16] Pour cette raison, l'intégration sur ϵ' dans la relation (13.93) donne simplement un facteur ω. On a cependant laissé ϵ' dans la relation (13.95).

où on a découplé la moyenne du produit de quatre fonctions de Green en un produit de deux valeurs moyennes. Afin d'évaluer $W^2(\omega)$, on utilise [17] (4.204) et (3.98) de sorte que

$$\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})} = \frac{\pi}{\rho_0}\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',\omega) + \rho_0^2 g^2(\boldsymbol{R}) \tag{13.98}$$

dont la transformée de Fourier est donnée par

$$\frac{\rho_0}{\pi}\left(\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega) + \frac{\pi}{2|q|v_F}\theta(2k_f - |q|)\right) \quad . \tag{13.99}$$

Le second terme est indépendant du désordre et redonne exactement la contribution de Landau (13.213) provenant des grandes valeurs de q. Aux petites valeurs de q ($ql_e \ll 1$), c'est le premier terme, lié à la diffusion, qui domine. Il vaut

$$\begin{aligned} W^2(\omega) = \frac{1}{\pi^2\nu_0^2\Omega^2}\int d\boldsymbol{r}_1 d\boldsymbol{r}_2 d\boldsymbol{r}_1' d\boldsymbol{r}_2' U_\omega(\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2)U_\omega(\boldsymbol{r}_1'-\boldsymbol{r}_2') \\ \times\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_1',\omega)\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{r}_2,\boldsymbol{r}_2',-\omega) \end{aligned} \tag{13.100}$$

ou encore, en transformée de Fourier,

$$W^2(\omega) = \frac{1}{\pi^2\nu_0^2\Omega^2}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}|U(\boldsymbol{q},\omega)|^2[\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega)]^2 \quad . \tag{13.101}$$

Cette quantité est représentée sur la figure 13.9. À l'approximation de diffusion, le potentiel dynamiquement écranté est donné par (13.12) et donc [18]

$$W^2(\omega) = \frac{1}{4\pi^2\nu_0^4}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}\frac{1}{\omega^2 + D^2q^4} \quad , \tag{13.104}$$

qui ne dépend effectivement que de ω et qui s'exprime en fonction de la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t)$

$$W^2(\omega) = \frac{1}{4\pi^2\nu_0^4}\frac{1}{\omega}\int_0^\infty Z(t)\sin\omega t\, dt \quad . \tag{13.105}$$

---

[17] Le cooperon donne une contribution négligeable.

[18] On peut aussi écrire $W^2(\omega)$ sous la forme

$$W^2(\omega) = \frac{1}{4\pi^2\nu_0^4}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}\frac{1}{Dq^2}\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{4\pi^2\nu_0^4}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}\frac{1}{\omega}\mathrm{Im}P_d(\boldsymbol{q},\omega) \tag{13.102}$$

et le temps de vie s'écrit alors

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} = \frac{1}{\pi\nu_0}\int_0^\epsilon \omega d\omega\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}\frac{1}{Dq^2}\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{\pi\nu_0}\int_0^\epsilon d\omega\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}\mathrm{Im}P_d(\boldsymbol{q},\omega) \quad . \tag{13.103}$$

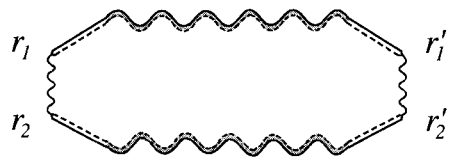


FIG. 13.9 – *Représentation diagrammatique de $W^2(\omega)$ correspondant à la relation (13.100). On note que la structure est très similaire à celle de la fonction de corrélation $K_\rho(\omega)$ de la densité d'états (fig. 10.11).*

Finalement, le temps de vie électronique (13.94) s'écrit

$$\boxed{\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} = \frac{2}{\pi\nu_0}\int_0^\infty \frac{Z(t)}{t}\sin^2\frac{\epsilon t}{2}dt} \tag{13.106}$$

Considérons un métal de volume Ω. De la dépendance de τ_{ee} en fonction de $Z(t)$, on peut déduire deux régimes de temps :

• pour $t \ll \tau_D$ où τ_D est le temps de Thouless (5.34), un électron vu comme un paquet d'onde diffusif n'est pas sensible à l'effet des bords et se comporte donc comme dans un milieu infini. La fonction $Z(t)$ est alors donnée par (5.23) soit $\Omega/(4\pi Dt)^{d/2}$. De (15.75), on déduit pour l'intégrale (13.105) [19]

$$W^2(\omega) = \frac{dc_d}{16}\frac{1}{\nu_0^4\omega^2}\left(\frac{\omega}{E_c}\right)^{d/2} \tag{13.107}$$

et le temps de vie est égal à

$$\boxed{\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} = \frac{\pi}{2}c_d\Delta\left(\frac{\epsilon}{E_c}\right)^{d/2}} \qquad (\epsilon \gg E_c) \tag{13.108}$$

où c_d est une constante définie par (10.63), avec $c_1 = \sqrt{2}/\pi^2$, $c_2 = 1/4\pi^2$, $c_3 = \sqrt{2}/6\pi^3$. Ce comportement a été effectivement mesuré dans des fils d'argent ($d = 1$) pour lesquels $W^2(\omega) \propto \omega^{-3/2}$ et $1/\tau_{ee}(\epsilon) \propto \epsilon^{1/2}$ [297, 308]. Si la loi en $\omega^{-3/2}$ est bien observée, le préfacteur obtenu expérimentalement est plus grand. Des comportements différents observés dans des fils d'or ou de cuivre ont été attribués à d'autres mécanismes de relaxation de l'énergie

[19] Le régime des petits temps est celui pour lequel l'énergie d'excitation ϵ est beaucoup plus grande que l'énergie de Thouless, $\epsilon \gg E_c$. Dans ce cas, la somme (13.104) sur les vecteurs d'onde peut être remplacée par une intégrale qui redonne l'expression (13.107).

tels que le couplage à des systèmes à deux niveaux [308] ou à des impuretés magnétiques [309] ;

Remarque : Conséquence de l'écrantage

Le comportement du temps de vie dépend très peu de la nature exacte du potentiel écranté. En effet, pour un potentiel parfaitement écranté, c'est-à-dire $U(\boldsymbol{q},\omega) = \Omega/2\nu_0$, la somme (13.104) s'écrit

$$W^2(\omega) = \frac{1}{4\pi^2\nu_0^4}\sum_{\boldsymbol{q}\neq 0}\frac{D^2q^4}{(\omega^2+D^2q^4)^2} \quad . \tag{13.109}$$

Pour des fréquences $\omega \gg E_c$, la somme peut être remplacée par une intégrale et on retrouve une loi de puissance identique à (13.107) :

$$W^2(\omega) \propto \frac{1}{\nu_0^4\omega^2}\left(\frac{\omega}{E_c}\right)^{d/2} \tag{13.110}$$

où seul le préfacteur est modifié.

Remarque : Temps de vie et rigidité spectrale

Il est intéressant de comparer les expressions de $1/\tau_{ee}(\epsilon)$ et de la variance $\Sigma^2(E)$ de la distribution des niveaux d'énergie dans le régime diffusif en l'absence d'interaction (relation 10.52). On trouve

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} = \frac{\pi\Delta}{2}\left[\Sigma^2(\epsilon) - \Sigma_0^2(\epsilon)\right], \tag{13.111}$$

où on a retranché la contribution $\Sigma_0^2(\epsilon)$ du mode uniforme. Cette relation découle de la similarité des diagrammes donnant la fonction de corrélation $K(\omega)$ et $W^2(\omega)$ représentés respectivement sur les figures 10.11 et 13.9.

• la limite $t \gg \tau_D$ correspond au régime ergodique pour lequel le paquet d'ondes électronique diffusif explore tout le volume Ω mis à sa disposition. On s'attend donc à ce que $Z(t)$ soit contrôlée uniquement par le mode zéro. Mais ce n'est pas le cas, car dans l'expression (13.104) on a précisément enlevé ce mode pour assurer la neutralité électrique. L'énergie d'excitation ϵ est inférieure à E_c et on ne peut plus remplacer la somme (13.104) par une intégrale. On obtient dans cette limite

$$W^2(\omega) = \frac{a_d}{4\pi^6}\frac{\Delta^4}{E_c^2} \propto \frac{\Delta^2}{g^2} \tag{13.112}$$

où le coefficient a_d est donné par la somme

$$a_d = \sum_{n_x,n_y,n_z}\frac{1}{(n_x^2+n_y^2+n_z^2)^2} \quad . \tag{13.113}$$

On note que le rapport E_c/Δ n'est autre que la condutance adimensionnée g définie par (7.25). Dans la limite $\omega \ll E_c$, l'élément de matrice caractéristique

de l'interaction est donc indépendant de l'énergie et d'ordre Δ/g. L'inverse du temps de vie s'écrit dans ce cas [307]

$$\boxed{\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} = \frac{a_d}{2\pi^5}\Delta\left(\frac{\epsilon}{E_c}\right)^2} \qquad (\epsilon \ll E_c) \tag{13.114}$$

Il est intéressant de remarquer que ce temps de vie dépend des conditions aux limites par l'intermédiaire du coefficient a_d. Par exemple, si l'échantillon n'est relié à des réservoirs que dans la direction Ox, les conditions aux limites $n_x \in \mathbb{N}^*, n_y \in \mathbb{N}, n_z \in \mathbb{N}$ sont les mêmes que pour le calcul de la somme (11.32) qui intervient pour les fluctuations de conductance. On a donc $a_d = b_d$. Si l'échantillon est isolé, seul le mode $n_x = n_y = n_z = 0$ est exclu de la somme, de sorte que $a_1 = b_1 = \pi^4/90$, $a_2 = b_1 + b_2 = 2{,}59$ et $a_3 = b_1 + b_2 + b_3 = 5{,}11$.

Exercice 13.14 : Montrer qu'à l'expression (13.97) s'ajoute aussi une contribution faisant intervenir le produit $\overline{\rho_\epsilon(\boldsymbol{r}_1, \boldsymbol{r}'_1)\rho_{\epsilon'+\omega}(\boldsymbol{r}'_2, \boldsymbol{r}_2)}\ \overline{\rho_{\epsilon'}(\boldsymbol{r}_2, \boldsymbol{r}'_2)\rho_{\epsilon-\omega}(\boldsymbol{r}'_1, \boldsymbol{r}_1)}$. Dessiner ce diagramme en s'aidant des figures 13.9 et 13.5. Montrer que cette contribution, négligée ici, est d'ordre F^2 [290]. Noter la dépendance, non plus en ω uniquement comme dans (13.97), mais en $\epsilon - \epsilon' - \omega$.

Remarque : Temps de vie et fonction diélectrique

On peut reformuler les expressions précédentes pour le temps de vie électronique en faisant apparaître la fonction diélectrique. Pour cela, on montre, à partir de (13.10), que celle-ci vérifie la relation :

$$\frac{1}{2\rho_0}\mathrm{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right] = \omega\frac{4\pi e^2}{q^2}\frac{\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega)}{|\epsilon(\boldsymbol{q},\omega)|^2} \quad , \tag{13.115}$$

de sorte que la combinaison $|U(\boldsymbol{q},\omega)|^2\,[\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega)]^2$ intervenant dans l'expression (13.101) de $W^2(\omega)$ vérifie

$$\omega|U(\boldsymbol{q},\omega)|^2\,[\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega)]^2 = \frac{4\pi e^2}{2\rho_0 q^2}\mathrm{Im}\left[-\frac{1}{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right]\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega) \tag{13.116}$$

ce qui, pour $W^2(\omega)$, conduit à

$$W^2(\omega) = \frac{1}{2\pi^2\nu_0^3\Omega}\sum_{\boldsymbol{q}}\frac{4\pi e^2}{q^2\omega}\mathrm{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right]\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega) \quad , \tag{13.117}$$

et pour le temps de vie (13.94) :

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} = \frac{2}{\pi\Omega}\int_0^\epsilon d\omega\sum_{\boldsymbol{q}}\frac{4\pi e^2}{q^2}\mathrm{Im}\left[\frac{-1}{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right]\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega) \quad . \tag{13.118}$$

13.6.3 Temps de vie à température finie

Le temps $\tau_{ee}(\epsilon)$ représente le temps de vie d'un électron injecté au-dessus de la mer de Fermi à $T = 0$ K. On suppose qu'à température finie, la probabilité qu'une quasi-particule reste dans son état initial est toujours de la forme [306]

$$\mathcal{P}(t, \epsilon, T) = e^{-t/\tau_{ee}(\epsilon,T)} \tag{13.119}$$

où $\tau_{ee}(\epsilon, T)$ est le temps de vie d'une quasi-particule à température et énergie finies. Pour calculer ce temps, on repart de la relation (13.94) en incluant les facteurs de Fermi [290] [20] :

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon, T)} = 4\pi\nu_0^3 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon' F(\epsilon, \epsilon', \omega) W^2(\omega) \tag{13.120}$$

où $F(\epsilon, \epsilon', \omega)$ s'écrit à partir des facteurs de Fermi $f_\epsilon = 1/(e^{\beta\epsilon} + 1)$

$$F(\epsilon, \epsilon', \omega) = f_{\epsilon'}(1 - f_{\epsilon-\omega})(1 - f_{\epsilon'+\omega}) + (1 - f_{\epsilon'}) f_{\epsilon-\omega} f_{\epsilon'+\omega} \quad . \tag{13.121}$$

Cette fonction contient deux termes. Le premier, le plus important lorsque $\epsilon > 0$, décrit la désintégration d'un état électronique au-dessus du niveau de Fermi. Le second, dominant lorsque $\epsilon < 0$, décrit la désintégration d'un état de trou dans la mer de Fermi. Lorsque $\epsilon = 0$, ces deux termes sont égaux. En intégrant sur ϵ' (relation 15.104), on obtient

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon, T)} = 4\pi\nu_0^3 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \; \omega W^2(\omega) f_{\epsilon-\omega} \frac{e^{\beta\epsilon} + 1}{e^{\beta\omega} - 1} \quad . \tag{13.122}$$

Ce temps de vie peut aussi s'obtenir à partir de la partie imaginaire de la self-énergie d'une quasi-particule en présence de l'interaction écrantée [292] [21]. À température nulle, on retrouve le résultat (13.108).

Remarque : Relaxation vers l'équilibre

Le temps $\tau_{ee}(\epsilon, T)$ peut aussi s'interpréter comme le temps caractéristique associé à la relaxation vers la distribution d'équilibre de Fermi. Celui-ci est défini à partir de l'équation de Boltzmann pour la distribution d'énergie n_ϵ [290, 310]

$$\begin{aligned} \frac{\partial n_\epsilon}{\partial t} &= -4\pi\nu_0^3 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega W^2(\omega) \\ &\times \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon' [n_\epsilon n_{\epsilon'}(1 - n_{\epsilon-\omega})(1 - n_{\epsilon'+\omega}) - n_{\epsilon-\omega} n_{\epsilon'+\omega}(1 - n_\epsilon)(1 - n_{\epsilon'})] \quad . \end{aligned} \tag{13.123}$$

[20] On ne regarde ici que l'effet de la température provenant de la statistique de Fermi et pas du couplage éventuel des électrons à d'autres degrés de liberté (phonons, ...).

[21] Compte tenu de (15.106), la relation (13.122) peut aussi se mettre sous la forme [292] :

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon, T)} = 2\pi\nu_0^3 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega W^2(\omega)\omega \left(\coth\frac{\beta\omega}{2} + \tanh\frac{\beta}{2}(\epsilon - \omega) \right) \quad .$$

Le terme de relaxation contient deux contributions qui décrivent respectivement les quasi-particules quittant un état quantique donné (appelée contribution « out ») et arrivant dans cet état (contribution « in »). À l'équilibre, n_ϵ est égal au facteur de Fermi $f_\epsilon = 1/(e^{\beta\epsilon}+1)$ et le terme entre crochets est nul. En linéarisant autour de la distribution d'équilibre $n_\epsilon = f_\epsilon + \delta n_\epsilon$, on obtient l'équation

$$\frac{\partial \delta n_\epsilon}{\partial t} = -4\delta n_\epsilon \pi \nu_0^3 \int_{-\infty}^{\infty} d\omega W^2(\omega) \times \int_{-\infty}^{\infty} d\epsilon' [f_{\epsilon'}(1-f_{\epsilon-\omega})(1-f_{\epsilon'+\omega}) + (1-f_{\epsilon'})f_{\epsilon-\omega}f_{\epsilon'+\omega}] \quad . \tag{13.124}$$

Le terme de droite est précisément de la forme $-\delta n_\epsilon/\tau_{ee}(\epsilon,T)$ ce qui permet d'interpréter $\tau_{ee}(\epsilon,T)$ comme le temps de relaxation vers la distribution d'équilibre.

13.6.4 Temps de vie d'une quasi-particule au niveau de Fermi

On va maintenant s'intéresser plus particulièrement au comportement du temps de vie pour une quasi-particule *au voisinage du niveau de Fermi* ($\epsilon = 0$) *et à température finie.* Des propriétés physiques comme la conductance étant exprimées en fonction des états *à une particule* au niveau de Fermi, il est en effet essentiel de comprendre ce qui limite la validité de la description en termes de quasi-particules indépendantes. Dans la suite, on note

$$\boxed{\tau_{in}(T) = \tau_{ee}(\epsilon = 0, T)} \tag{13.125}$$

le temps de relaxation de vie d'une quasi-particule au niveau de Fermi [22]. D'après la relation (13.122), on a [311]

$$\frac{1}{\tau_{in}(T)} = \frac{1}{\tau_{ee}(0,T)} = 8\pi\nu_0^3 \int_0^{\infty} d\omega W^2(\omega) \frac{\omega}{\sinh \beta\omega} \quad . \tag{13.126}$$

Remarque : Temps de relaxation de l'énergie et fonction diélectrique

À partir des relations (13.126) et (13.117), on exprime le temps de relaxation de l'énergie en fonction de la constante diélectrique

$$\frac{1}{\tau_{in}(T)} = \frac{4}{\pi\Omega} \int_0^{\infty} \frac{d\omega}{\sinh \beta\omega} \sum_{\boldsymbol{q}} \frac{4\pi e^2}{q^2} \mathrm{Im}\left(\frac{-1}{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right) \mathrm{Re} P_d(\boldsymbol{q},\omega) \quad . \tag{13.127}$$

[22] On prendra bien soin de ne pas confondre le temps de vie d'une quasi-particule au niveau de Fermi et à température finie $\tau_{in}(T) = \tau_{ee}(\epsilon = 0, T)$, avec le temps $\tau_{ee}(\epsilon = T, T = 0)$ parfois introduit dans la littérature en substituant simplement ϵ par T dans l'expression du temps de relaxation de l'énergie calculé à température nulle. Ce second temps n'a aucune signification physique.

En utilisant les relations (13.126) et (13.105), on peut aussi exprimer ce temps de vie en fonction de la probabilité $Z(t)$ de retour à l'origine :

$$\frac{1}{\tau_{in}(T)} = \frac{2}{\pi\nu_0}\int_0^\infty \frac{d\omega}{\sinh\beta\omega}\int_0^\infty dt Z(t)\sin\omega t \tag{13.128}$$

ou encore, en utilisant (15.105) :

$$\frac{1}{\tau_{in}(T)} = \frac{T}{2\nu_0}\int_0^\infty Z(t)\tanh\frac{\pi T t}{2}dt \quad . \tag{13.129}$$

Compte tenu de la forme (5.23) de $Z(t)$ pour la diffusion dans l'espace libre, l'intégrale sur le temps de (13.128) est proportionnelle à $\omega^{d/2-1}$ (relation 15.28)

$$\frac{1}{\tau_{in}(T)} = \frac{\pi d c_d}{2\nu_0}\int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega\sinh\beta\omega}\left(\frac{\omega}{E_c}\right)^{d/2} \quad . \tag{13.130}$$

Ainsi, à trois dimensions, on a

$$\frac{1}{\tau_{in}(T)} = \frac{\sqrt{2}}{4\pi^2\nu_0}\int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega\sinh\beta\omega}\left(\frac{\omega}{E_c}\right)^{3/2} \simeq \frac{T}{\nu_0}\int_0^T \frac{d\omega}{\omega^2}\left(\frac{\omega}{E_c}\right)^{3/2} \tag{13.131}$$

de sorte que

$$\frac{1}{\tau_{in}(T)} \simeq \Delta\left(\frac{T}{E_c}\right)^{3/2} \qquad (d=3) \tag{13.132}$$

à un facteur numérique près. On note que l'exposant de la loi de puissance est le même que celui de la dépendance en fonction de l'énergie d'excitation ϵ du temps de vie à température nulle donné par la relation (13.108). Ceci découle du fait que les processus qui contribuent à la relaxation des quasi-particules, décrits par la fonction $\omega W^2(\omega)$, sont ceux pour lesquels le transfert d'énergie ω est de l'ordre de T.

Il serait tentant de généraliser ce résultat à toute dimension et d'en déduire que $1/\tau_{in}(T) \propto T^{d/2}$. Ça n'est pas possible lorsque $d \leq 2$ car, dans ce cas, la relaxation des quasi-particules est due à des processus de basse énergie $\omega \simeq 0$ pour lesquels l'intégrale dans (13.128) diverge. En dimension $d \leq 2$, ce sont donc essentiellement les processus d'interaction électron-électron *avec faible transfert d'énergie* qui contribuent à la relaxation des quasi-particules. Or, $\tau_{in}(T)$ représente justement le temps de vie d'un état propre. Par conséquent, le transfert d'énergie ω ne peut lui-même être défini à mieux que $1/\tau_{in}$ près. Il n'y a donc pas de transfert d'énergie inférieur à $1/\tau_{in}(T)$, ce qui implique que l'intégrale (13.128) soit coupée de façon consistante pour des transferts d'énergie inférieurs à $1/\tau_{in}(T)$. On obtient donc lorsque $d \leq 2$, une relation autocohérente pour τ_{in} :

$$\frac{1}{\tau_{in}(T)} \simeq \frac{1}{\nu_0}\int_{1/\tau_{in}}^\infty \frac{d\omega}{\omega\sinh\beta\omega}\left(\frac{\omega}{E_c}\right)^{d/2} \simeq \frac{T}{\nu_0}\int_{1/\tau_{in}}^T \frac{d\omega}{\omega^2}\left(\frac{\omega}{E_c}\right)^{d/2} \tag{13.133}$$

où on a remplacé le facteur thermique par une coupure à $\omega \sim T$. À deux dimensions, $1/\tau_{in}(T)$ est proportionnel à la température (à des corrections logarithmiques près) :

$$\frac{1}{\tau_{in}(T)} \simeq \Delta \frac{T}{E_c} \ln \frac{E_c}{\Delta} \qquad (d=2) \quad . \tag{13.134}$$

À une dimension, dans la limite $T\tau_{in} \gg 1$, l'intégrale est proportionnelle à $\sqrt{\tau_{in}}$ de sorte que la relation autocohérente conduit à

$$\boxed{\frac{1}{\tau_{in}(T)} \simeq \Delta \left(\frac{E_c}{\Delta}\right)^{1/3} \left(\frac{T}{E_c}\right)^{2/3} \qquad (d=1)} \tag{13.135}$$

Remarque : Relaxation non exponentielle de l'énergie en dimension $d \leq 2$

Il peut sembler artificiel d'avoir à introduire comme coupure de basse énergie l'inverse du temps de vie d'une quasi-particule afin de déterminer celui-ci de manière autocohérente. La raison profonde de cette divergence à basse fréquence est que, pour $d \leq 2$, *la relaxation des quasi-particules n'est pas exponentielle.* Le taux de relaxation $-d\ln\mathcal{P}/dt$ n'est plus une constante comme le supposait la formule (13.119). En effet, partant d'un état d'énergie donnée, les états accessibles après un temps t sont restreints, en vertu de la règle d'or de Fermi, à des transferts d'énergie supérieurs à $1/t$. Ceci se traduit par une coupure à basse fréquence d'ordre $1/t$ [312]. Ainsi (13.127) devient :

$$\ln\mathcal{P} = -\frac{4t}{\pi\Omega}\int_{1/t}^{\infty}\frac{d\omega}{\sinh\beta\omega}\sum_{\boldsymbol{q}}\frac{4\pi e^2}{q^2}\mathrm{Im}\left(\frac{-1}{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right)\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega) \quad , \tag{13.136}$$

c'est-à-dire

$$\ln\mathcal{P} = -\frac{\pi d c_d}{2\nu_0}\, t\int_{1/t}^{\infty}\frac{d\omega}{\omega\sinh\beta\omega}\left(\frac{\omega}{E_c}\right)^{d/2} \quad . \tag{13.137}$$

Cette coupure ne modifie pas le comportement de la relaxation en dimension $d=3$, car l'intégrale converge à basse fréquence. En revanche, pour $d \leq 2$, le comportement a basse fréquence détermine celui de la relaxation. Considérons le cas $d=1$. On obtient, pour des temps $t \gg 1/T$:

$$\ln\mathcal{P} \simeq -\frac{\sqrt{2}}{2\pi\nu_0\sqrt{E_c}}\, T\, t\int_{1/t}^{T}\frac{d\omega}{\omega^{3/2}} \simeq -\frac{\sqrt{2}T}{\pi\nu_0\sqrt{E_c}}\, t^{3/2} \tag{13.138}$$

ce qui conduit bien à un comportement non exponentiel pour la relaxation des quasi-particules en dimension $d=1$:

$$\mathcal{P}(t,T) \sim e^{-[t/\tau_{in}(T)]^{3/2}} \qquad d=1 \tag{13.139}$$

avec

$$\frac{1}{\tau_{in}(T)} \sim \left(\frac{\Delta T}{E_c^{1/2}}\right)^{2/3} \quad . \tag{13.140}$$

Cet argument simple montre bien que la nature particulière de la divergence à basse fréquence est la signature d'un comportement non exponentiel. Par ailleurs, on retrouve le temps caractéristique obtenu en (13.135). En dimension $d=2$, on a

$$\mathcal{P}(t,T) \sim e^{-t/(\tau_{in}\ln Tt)} \quad . \tag{13.141}$$

Remarque : Validité du liquide de Fermi

Le taux de relaxation des quasi-particules $1/\tau_{in}(T)$ reste inférieur à la température T. On vérifie à l'aide de (13.132) et (13.134) que c'est toujours le cas pour $d \geq 2$. À une dimension, $1/\tau_{in}$ décroît moins vite que la température lorsque T diminue. On pourrait craindre que les quasi-particules ne soient plus bien définies à basse température et que la validité du liquide de Fermi se trouve remise en question. Néanmoins, on constate que $1/\tau_{in} \simeq T$ pour une température extrêmement basse, de l'ordre de Δ/g, avec $g \sim E_c/\Delta \gg 1$, qui n'est pas atteinte expérimentalement et qui est nulle à la limite thermodynamique.

13.7 Cohérence de phase

13.7.1 Introduction

Dans la section précédente, nous avons étudié la relaxation, caractérisée par le temps $\tau_{in}(T)$, d'une quasi-particule au niveau de Fermi et à température finie. En dimension $d \leq 2$, cette relaxation n'est pas exponentielle.

Dans cette section, on cherche à comprendre quels sont les processus limitant la cohérence de phase nécessaire à l'observation des effets d'interférence tels que la localisation faible. On notera τ_ϕ^{ee} le temps caractéristique associé à cette perte de cohérence de phase.

• Une première approche immédiate consiste à considérer que la cohérence de phase est limitée par le temps de vie des quasi-particules. En effet, puisque les trajectoires de diffusion multiple appariées dans le cooperon sont définies pour un état d'énergie donnée, elles ne peuvent interférer pour des temps supérieures à $\tau_{in}(T)$. Il en résulte un déphasage irréversible entre ces trajectoires et donc une perte de la cohérence de phase. Il est donc naturel de supposer que

$$\tau_\phi^{ee}(T) = \tau_{in}(T) = \tau_{ee}(\epsilon = 0, T) \quad . \tag{13.142}$$

De plus, il est apparu que la relaxation des quasi-particules n'est pas exponentielle pour $d \leq 2$. On peut donc se demander si la relaxation de la phase n'est pas elle aussi décrite par une relaxation temporelle non exponentielle.

• Une seconde approche consiste à suivre la démarche du chapitre 6 et à déterminer *directement* le déphasage $\langle e^{i\Phi(t)} \rangle$ accumulé entre les séquences de diffusion multiple conjuguées par renversement du sens du temps, du fait de l'interaction électron-électron. Pour cela, on remplace l'interaction entre électrons par une interaction effective qui décrit le couplage d'un seul électron à un champ électromagnétique fluctuant dû aux autres électrons [313–315]. Ce bruit électrique est appelé bruit de Nyquist.

• On montrera que, non seulement les deux temps caractéristiques τ_{in} et τ_ϕ^{ee} sont effectivement identiques, mais que les deux processus, *relaxation des quasi-particules* et *relaxation de la phase*, sont très similaires de sorte que la moyenne $\langle e^{i\Phi(t)} \rangle$ décroît de la même façon que la probabilité $\mathcal{P}(t, \epsilon = 0, T)$.

Remarque : Définition du temps de cohérence de phase

La définition du temps de cohérence de phase n'est pas unique. Elle dépend de la quantité physique dans laquelle il intervient. Pour les états qui contribuent au transport électronique et qui sont proches du niveau de Fermi, la définition (13.142) est tout à fait naturelle. Néanmoins, à température finie T, les états qui contribuent au transport sont situés dans une tranche de largeur T autour du niveau de Fermi et le temps de déphasage dépend en principe de l'énergie $\tau_\phi^{ee}(\epsilon, T)$. Il serait donc tout aussi naturel de considérer une moyenne de $\tau_\phi^{ee}(\epsilon, T)$ sur cette tranche d'énergie. Prenons l'exemple de la correction de localisation faible. Elle s'écrit

$$\delta\sigma(T) = \int \delta\sigma(\epsilon) \left(\frac{-\partial f}{\partial \epsilon} \right) d\epsilon \tag{13.143}$$

où $\delta\sigma(\epsilon)$ représente cette correction pour une énergie de Fermi ϵ. Par exemple, en dimension $d = 2$,

$$\delta\sigma(\epsilon) = -\frac{e^2}{\pi h} \ln \frac{\tau_\phi^{ee}(\epsilon, T)}{\tau_e} \quad . \tag{13.144}$$

On peut alors écrire la correction de localisation faible $\delta\sigma(T)$ sous la forme

$$\delta\sigma(T) = -\frac{e^2}{\pi h} \ln \frac{\tau_\phi^{ee}(T)}{\tau_e} \tag{13.145}$$

en définissant alors le temps de cohérence de phase $\tau_\phi^{ee}(T)$ par la moyenne [328]

$$\ln \tau_\phi^{ee}(T) = \int \left(\frac{-\partial f}{\partial \epsilon} \right) \ln \tau_\phi^{ee}(\epsilon, T) d\epsilon \quad . \tag{13.146}$$

La façon dont est faite la moyenne sur l'énergie ne conduit pas pour $\tau_\phi^{ee}(T)$ à des résultats significativement différents.

13.7.2 Cohérence de phase dans un champ électrique fluctuant

On cherche ici à déterminer comment l'interaction électron-électron conduit à un déphasage entre trajectoires conjuguées par renversement du sens du temps. On ne sait pas décrire directement l'effet de l'interaction sur le déphasage. Afin de résoudre ce problème, on remplace le champ électrique auquel chaque électron est soumis de la part des autres électrons par un champ électrique fluctuant présentant les caractéristiques imposées par le théorème fluctuation-dissipation.

On considère donc la contribution du cooperon à la probabilité de retour à l'origine $P_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t)$ dans un potentiel électrique $V(\boldsymbol{r}, t)$ dépendant du temps. Dans le complément C6.3, on montre que cette contribution peut s'écrire sous la forme (6.240) :

$$P_c(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t) = P_c^{(0)}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}, t) \left\langle e^{i\Phi} \right\rangle_{\mathcal{C}} \quad , \tag{13.147}$$

où $P_c^{(0)}$ est la probabilité en l'absence du potentiel fluctuant. Φ est la phase relative accumulée le long d'une trajectoire de diffusion au bout du temps t (relations 6.238 et 6.239) :

$$\Phi = \frac{e}{\hbar} \int_0^t [V(\boldsymbol{r}(\tau), \tau) - V(\boldsymbol{r}(\tau), \overline{\tau})] d\tau \tag{13.148}$$

où $\overline{\tau} = t - \tau$ et où $\langle \cdots \rangle_{\mathcal{C}}$ désigne la valeur moyenne prise sur la distribution des chemins de diffusion.

Il convient aussi de moyenner sur les fluctuations thermiques du potentiel électrique ($\langle \cdots \rangle_T$). Ces fluctuations étant gaussiennes [23], la valeur moyenne $\langle e^{i\Phi} \rangle_T$ est donnée par :

$$\langle e^{i\Phi} \rangle_T = e^{-\frac{1}{2}\langle \Phi^2 \rangle_T} \quad . \tag{13.149}$$

Il s'agit donc de déterminer la moyenne $\langle e^{i\Phi} \rangle_{T,\mathcal{C}}$ *à la fois* sur les chemins de diffusion et sur les fluctuations thermiques. Commençons par calculer $\langle \Phi^2 \rangle_T$. À partir de (13.148), on a :

$$\langle \Phi^2 \rangle_T = \frac{e^2}{\hbar^2} \int_0^t \int_0^t \langle [V(\tau_1) - V(\overline{\tau}_1)][V(\tau_2) - V(\overline{\tau}_2)] \rangle_T \, d\tau_1 d\tau_2 \tag{13.150}$$

où on a noté $V(\tau) = V(\boldsymbol{r}(\tau), \tau)$ et $V(\overline{\tau}) = V(\boldsymbol{r}(\tau), \overline{\tau})$. On introduit le corrélateur $\langle VV \rangle_T(\boldsymbol{q}, \omega)$ par la transformée de Fourier

$$\langle V(\boldsymbol{r}, \tau) V(\boldsymbol{r}', \tau') \rangle_T = \int \frac{d\boldsymbol{q}}{(2\pi)^d} \frac{d\omega}{2\pi} \langle VV \rangle_T(\boldsymbol{q}, \omega) e^{i[\boldsymbol{q}.(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}') - \omega(\tau - \tau')]} \quad . \tag{13.151}$$

Sa moyenne thermique est reliée par le théorème fluctuation-dissipation à la constante diélectrique [306, 316, 317] [24] :

$$e^2 \langle VV \rangle_T(\boldsymbol{q}, \omega) = \frac{4\pi e^2}{q^2} \mathrm{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(\boldsymbol{q}, \omega)} \right] \frac{2}{1 - e^{-\beta\omega}} \tag{13.152}$$

où, d'après (13.11), $\mathrm{Im}(-1/\epsilon(\boldsymbol{q}, \omega)) = \omega / 4\pi\sigma_0$. Par ailleurs, les processus qui contribuent au déphasage ont une énergie $|\omega|$ inférieure à la température. En effet, à cause du principe de Pauli, un électron au niveau de Fermi ne peut pas échanger avec son environnement une énergie supérieure à T. Pour $|\omega| < T$, on remplace alors la fonction thermique par son développement de haute température :

$$\boxed{e^2 \langle VV \rangle_T(\boldsymbol{q}, \omega) = \frac{2e^2 T}{\sigma_0 q^2}} \tag{13.153}$$

[23] Les modes du champ électromagnétique sont quadratiques et leurs fluctuations sont donc gaussiennes.

[24] On ne considère ici que les fluctuations longitudinales du champ électromagnétique. Les fluctuations transverses sont écrantées par l'effet de peau [313–315] et, sauf dans des géométries confinées, on peut les négliger.

L'intégrande dans (13.151) ne dépend donc plus de la fréquence, de sorte que l'intégrale sur ω conduit à [25]

$$\langle V(\boldsymbol{r},\tau)V(\boldsymbol{r}',\tau')\rangle_T = \frac{\delta(\tau-\tau')}{(2\pi)^d}\frac{2T}{\sigma_0}\int \frac{d\boldsymbol{q}}{q^2}e^{i\boldsymbol{q}.(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')} \tag{13.154}$$

et en insérant cette expression dans (13.150) :

$$\boxed{\left\langle \Phi^2 \right\rangle_T = \frac{4e^2T}{\sigma_0\hbar^2}\int_0^t d\tau \int \frac{d\boldsymbol{q}}{(2\pi)^d}\frac{1}{q^2}[1-\cos\boldsymbol{q}.(\boldsymbol{r}(\tau)-\boldsymbol{r}(\overline{\tau}))]} \tag{13.155}$$

Cette quantité dépend du chemin $\boldsymbol{r}(\tau)$. Il reste à effectuer la moyenne

$$\left\langle e^{-\frac{1}{2}\langle\Phi^2\rangle_T}\right\rangle_{\mathcal{C}} \tag{13.156}$$

sur la distribution des chemins de diffusion fermés qui contribuent au cooperon $P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},t)$. Cette moyenne s'obtient en suivant la démarche de la référence [313], c'est-à-dire à partir de l'intégrale fonctionnelle

$$\begin{aligned} P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},t) &= \int_{\boldsymbol{r}(0)=\boldsymbol{r}}^{\boldsymbol{r}(t)=\boldsymbol{r}} \mathcal{D}\{\boldsymbol{r}\}\exp\left(-\int_0^t \frac{\dot{\boldsymbol{r}}^2(\tau)}{4D}d\tau - \frac{1}{2}\langle\Phi^2\rangle_T\right) \\ &= P_c^{(0)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},t).\left\langle e^{-\frac{1}{2}\langle\Phi^2\rangle_T}\right\rangle_{\mathcal{C}} \end{aligned} \tag{13.157}$$

où $P_c^{(0)}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},t)$ est la probabilité de retour en l'absence de champ fluctuant.

Afin de découpler les chemins $\boldsymbol{r}(\tau)$ et $\boldsymbol{r}(\overline{\tau})$ qui interviennent dans $\left\langle \Phi^2 \right\rangle_T$, on utilise d'abord la relation de semi-groupe (5.7) sous la forme

$$P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},0,t) = \int d\boldsymbol{R}\; P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{R},0,t/2)P_c(\boldsymbol{R},\boldsymbol{r},t/2,t) \tag{13.158}$$

en notant explicitement les temps initiaux et finaux. Puis on effectue le changement de variables $\boldsymbol{R}(\tau) = [\boldsymbol{r}(\tau)+\boldsymbol{r}(\overline{\tau})]/\sqrt{2}$ et $\boldsymbol{\rho}(\tau) = [\boldsymbol{r}(\tau)-\boldsymbol{r}(\overline{\tau})]/\sqrt{2}$. Après intégration sur $\boldsymbol{R}$, il reste $P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},t) = C(\boldsymbol{\rho}=0,\boldsymbol{\rho}=0,t/2)$ avec [313] :

$$C(\boldsymbol{\rho}=0,\boldsymbol{\rho}=0,\frac{t}{2}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\int_{\boldsymbol{\rho}(0)=0}^{\boldsymbol{\rho}(t/2)=0}\mathcal{D}\{\boldsymbol{\rho}\}\exp\left(-\int_0^{t/2}\left[\frac{\dot{\boldsymbol{\rho}}^2(\tau)}{4D}+U(\boldsymbol{\rho})\right]d\tau\right) \tag{13.159}$$

où on a introduit le potentiel effectif $U(\boldsymbol{\rho})$ défini par

$$U(\boldsymbol{\rho}) = \frac{4e^2T}{\sigma_0\hbar^2}\int\frac{d\boldsymbol{q}}{(2\pi)^d q^2}\left[1-\cos\boldsymbol{q}.\boldsymbol{\rho}\sqrt{2}\right] \quad . \tag{13.160}$$

[25] En fait, à cause de la coupure T sur l'énergie ω, la fonction δ de la relation (13.154) est une fonction piquée de largeur $1/T$. Mais les temps caractéristiques, en premier lieu le temps de relaxation de l'énergie, sont beaucoup plus grands que $1/T$ (remarque p. 531), ce qui justifie le remplacement par une fonction δ [315, 318].

L'intégrale $C(0,0,t)$ est solution de l'équation différentielle [26] :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - D\Delta_{\boldsymbol{\rho}} + U(\boldsymbol{\rho})\right] C(0,\boldsymbol{\rho},t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\delta(\boldsymbol{\rho})\delta(t) \quad . \tag{13.163}$$

On va maintenant étudier le déphasage à partir de la solution de cette équation différentielle.

Exercice 13.15 : Bruit de Nyquist

À partir du théorème fluctuation-dissipation écrit sous la forme (13.153), retrouver l'expression de Nyquist du bruit de tension dans un conducteur (en rétablissant la constante de Boltzmann k_B) [319, 320] :

$$\langle V^2\rangle_T(\omega) = 2k_BTR \tag{13.164}$$

pour ω positif *et* négatif. $V = V(L) - V(0)$ est la tension aux bornes d'un fil de résistance R, de longueur L et de section S. À partir de (13.151) et (13.153), on calcule les fluctuations thermiques de la tension pour la géométrie d'un fil (en utilisant la loi d'Ohm $R = L/(S\sigma_0)$) :

$$\langle V(r)V(r')\rangle_T(\omega) = \int \frac{dq}{2\pi}\frac{2Rk_BT}{q^2L}e^{iq(r-r')} \quad . \tag{13.165}$$

En fixant $r = 0$ et $r' = L$ aux bornes de l'échantillon et en utilisant l'intégrale (15.86), on obtient la relation (13.164).

13.7.3 Temps de cohérence de phase en dimension $d = 1$

On s'intéresse plus spécialement au cas $d = 1$, pour lequel on sait que la relaxation de l'énergie présente des caractéristiques particulières liées à l'importance des échanges d'énergie à faible transfert (section 13.6.3). On peut s'attendre à des caractéristiques de même nature pour la relaxation de la phase. On considère un fil quasi-unidimensionnel de section S. En utilisant (15.86), la fluctuation de phase (13.155) s'écrit

$$\left\langle \Phi^2 \right\rangle_T = \frac{2e^2T}{\hbar^2\sigma_0 S}\int_0^t |r(\tau) - r(\overline{\tau})|d\tau \tag{13.166}$$

de sorte que

$$U(\rho) = \frac{2\sqrt{2}e^2T}{\hbar^2\sigma_0 S}|\rho| \quad . \tag{13.167}$$

---

[26] On rappelle que l'intégrale fonctionnelle

$$F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t) = \int_{\boldsymbol{r}(0)=\boldsymbol{r}}^{\boldsymbol{r}(t)=\boldsymbol{r}'} \mathcal{D}\{\boldsymbol{r}\}\exp\left(-\int_0^t\left[\frac{\dot{\boldsymbol{r}}^2(\tau)}{4D} + U(\boldsymbol{r})\right]d\tau\right) \tag{13.161}$$

est solution de l'équation différentielle :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - D\Delta_{\boldsymbol{r}'} + U(\boldsymbol{r}')\right] F(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}',t) = \delta(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\delta(t) \quad . \tag{13.162}$$

L'équation différentielle (13.163) pour C devient :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - D\frac{\partial^2}{\partial \rho^2} + \frac{2\sqrt{2}e^2T}{\hbar^2\sigma_0 S}|\rho|\right] C(0,\rho,t) = \frac{1}{\sqrt{2}}\delta(\rho)\delta(t) \quad . \tag{13.168}$$

La résolution de cette équation différentielle permet en principe de déterminer $C(0,0,t)$ et d'en déduire $P_c(r,r,t)$, c'est-à-dire la dépendance temporelle de la fonction $\left\langle e^{-\frac{1}{2}\langle\Phi^2\rangle_T}\right\rangle_C$. On cherche à déterminer comment l'interaction électron-électron affecte les propriétés physiques liées à la cohérence de phase. Considérons plus précisement la correction de localisation faible. Elle est donnée par la relation (7.53)

$$\Delta\sigma = -\frac{se^2D}{\pi\hbar}\int_0^\infty dt P_c(r,r,t)e^{-\gamma t} \tag{13.169}$$

avec $\gamma = 1/\tau_\gamma$, où τ_γ regroupe les temps de déphasage associés à tous les processus (supposés décrits par une relaxation exponentielle de la phase) autres que l'interaction électron-électron. La correction de localisation faible est précisément reliée à la transformée de Laplace de la probabilité $P_c(r,r,t)$:

$$\begin{aligned} P_\gamma(r,r) &= \int_0^\infty P_c(r,r,t)e^{-\gamma t}dt \\ &= \int_0^\infty C(0,0,t/2)e^{-\gamma t}dt \\ &= 2C_{2\gamma}(0,0) \end{aligned} \tag{13.170}$$

où $C_\gamma(\rho,\rho')$, transformée de Laplace de $C(\rho,\rho',t)$, rentre directement dans l'expression (13.169) :

$$\Delta\sigma = -\frac{2se^2D}{\pi\hbar}C_{2\gamma}(0,0) \quad . \tag{13.171}$$

Elle est solution de l'équation différentielle :

$$\left[-D\frac{\partial^2}{\partial\rho^2} + \frac{2\sqrt{2}e^2T}{\hbar^2\sigma_0 S}|\rho| + 2\gamma\right] C_{2\gamma}(0,\rho) = \frac{1}{\sqrt{2}}\delta(\rho) \quad . \tag{13.172}$$

En introduisant le temps caractéristique, dit de Nyquist [27] [319] :

$$\tau_N = \left(\frac{\hbar^2\sigma_0 S}{e^2T\sqrt{D}}\right)^{2/3} \quad , \tag{13.173}$$

[27] Ce temps caractéristique est proportionnel au temps de relaxation de l'énergie τ_{in} donné par (13.135). On revient plus loin sur cette remarque.

on déduit l'équation différentielle sans dimension :

$$\left[-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + |x| + \frac{\tau_N}{\tau_\gamma}\right] C_{2\gamma}(0,x) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{\tau_N}{D}}\delta(x) \quad . \tag{13.174}$$

À l'aide de (15.90, 15.91), on obtient :

$$P_\gamma(r,r) = 2C_{2\gamma}(0,0) = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\tau_N}{D}}\frac{\mathrm{Ai}(\tau_N/\tau_\gamma)}{\mathrm{Ai}'(\tau_N/\tau_\gamma)} \quad , \tag{13.175}$$

où Ai et Ai′ désignent respectivement la fonction d'Airy et sa dérivée [321]. De la relation (13.171), on déduit la correction de localisation faible :

$$\boxed{\Delta\sigma = s\frac{e^2}{hS}\sqrt{D\tau_N}\frac{\mathrm{Ai}(\tau_N/\tau_\gamma)}{\mathrm{Ai}'(\tau_N/\tau_\gamma)}} \tag{13.176}$$

au lieu de

$$\Delta\sigma = -s\frac{e^2}{hS}\sqrt{D\tau_\gamma} \tag{13.177}$$

en l'absence d'interaction électron-électron (voir 7.56). Dans la limite $\tau_\gamma \ll \tau_N$, on obtient

$$\Delta\sigma = -s\frac{e^2}{hS}\sqrt{D\tau_\gamma}\left[1 - \frac{1}{4}\left(\frac{\tau_\gamma}{\tau_N}\right)^{3/2}\right] \quad . \tag{13.178}$$

Inversement, pour $\tau_N \ll \tau_\gamma$

$$\Delta\sigma = -1{,}372\, s\frac{e^2}{hS}\sqrt{D\tau_N} \quad . \tag{13.179}$$

Pour cela, on a utilisé les formes asymptotiques (15.92, 15.93). Enfin en utilisant l'expression approchée (15.94) du rapport Ai/Ai′, on obtient une très bonne approximation pour la correction de localisation faible en fonction des temps τ_γ et τ_N [322] :

$$\Delta\sigma \simeq -s\frac{e^2}{hS}\sqrt{D}\left(\frac{1}{2\tau_N} + \frac{1}{\tau_\gamma}\right)^{-1/2} \quad . \tag{13.180}$$

Cette approximation revient à supposer une relaxation exponentielle de la phase de la forme $\langle e^{i\Phi}\rangle_{T,\mathcal{C}} = e^{-2t/\tau_N}$. On montre dans l'exercice 13.16 et sur la figure 13.10 la forme exacte de cette relaxation qui en fait n'est pas exponentielle. À cette approximation, on déduit que pour estimer le temps total de relaxation de la phase en présence de plusieurs processus de déphasage, il suffit d'ajouter les inverses des temps de déphasage. Le temps de cohérence

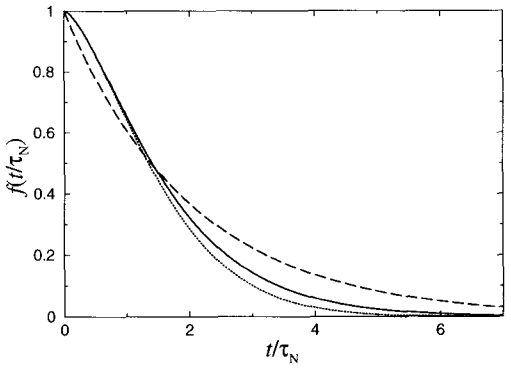


FIG. 13.10 – *Relaxation de la phase. La ligne continue représente la fonction* $\langle e^{i\Phi}\rangle_{T,\mathcal{C}} = f(t/\tau_N)$ *reconstruite à partir de l'équation (13.182). Pointillés : approximation* $e^{-\frac{\sqrt{\pi}}{4}\left(\frac{t}{\tau_N}\right)^{3/2}}$ *obtenue à partir du développement (13.184) aux temps courts. La relaxation de la phase est clairement non exponentielle. L'approximation (en tirets)* $e^{-t/2\tau_N}$ *permet d'introduire le temps caractéristique* $\tau_\phi^{ee} = 2\tau_N$.

de phase τ_ϕ^{ee} – ou temps de relaxation de la phase – en présence d'interaction électron-électron est donc donné par :

$$\boxed{\tau_\phi^{ee} = 2\tau_N = 2\left(\frac{\hbar^2\sigma_0 S}{e^2 T\sqrt{D}}\right)^{2/3}} \tag{13.181}$$

Exercice 13.16 : Relaxation de la phase

• Chercher la dépendance temporelle du facteur de phase $\langle e^{i\Phi}\rangle_{T,\mathcal{C}} = f(t/\tau_N)$. À partir de la transformée de Laplace de $P_c(r,r,t)$, montrer que la relation (13.175) peut s'écrire

$$\int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{4\pi Dt}} f\left(\frac{t}{\tau_N}\right) e^{-t/\tau_\gamma} dt = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{\tau_N}{D}}\frac{\mathrm{Ai}(\tau_N/\tau_\gamma)}{\mathrm{Ai}'(\tau_N/\tau_\gamma)} \quad . \tag{13.182}$$

En notant que les zéros de la fonction d'Airy et de sa dérivée sont situés sur l'axe réel négatif, effectuer l'intégrale dans le plan complexe en utilisant le fait que $\mathrm{Ai}''(x) = x\mathrm{Ai}(x)$ et montrer que [312]

$$\left\langle e^{i\Phi}\right\rangle_{T,\mathcal{C}} = \sqrt{\frac{\pi t}{\tau_N}}\sum_{n=1}^{\infty}\frac{e^{-|u_n|t/\tau_N}}{|u_n|} \tag{13.183}$$

où les u_n sont les zéros de la fonction Ai'. Pour n grand, ils sont donnés par $|u_n| = \left(\frac{3\pi}{2}(n-\frac{3}{4})\right)^{2/3}$ [321]. Montrer que pour, $t < \tau_N$:

$$\left\langle e^{i\Phi}\right\rangle_{T,\mathcal{C}} \simeq e^{-\sqrt{\pi}/4(t/\tau_N)^{3/2}} \quad . \tag{13.184}$$

On note ainsi qu'aux temps courts la relaxation de la phase a la même dépendance temporelle que la relaxation d'une quasi-particule (13.139). Comme on le voit sur la figure 13.10, la fonction $f(t/\tau_N)$ est non exponentielle.

• Calculer explicitement la moyenne $\langle\Phi^2\rangle_{T,\mathcal{C}}$ sur les trajectoires browniennes de temps t. Pour cela, on montre que $|\mathbf{r}(\tau)| = \sqrt{\frac{4D}{\pi t}\tau|t-\tau|}$. Utiliser ce résultat pour obtenir une approximation de $\langle e^{i\Phi}\rangle_{T,\mathcal{C}}$ aux temps courts :

$$\left\langle e^{i\Phi}\right\rangle_{T,\mathcal{C}} = \left\langle e^{-\frac{1}{2}\langle\Phi^2\rangle_T}\right\rangle_{\mathcal{C}} \simeq e^{-\frac{1}{2}\langle\Phi^2\rangle_{T,\mathcal{C}}} = e^{-\frac{\sqrt{\pi}}{4}(t/\tau_N)^{3/2}} \quad . \tag{13.185}$$

13.7.4 Cohérence de phase et relaxation des quasi-particules

Il est très intéressant de comparer les résultats obtenus pour la *relaxation de la phase* avec ceux obtenus dans la section 13.7.4 pour décrire la *relaxation des quasi-particules.* On note que le temps de cohérence de phase $\tau_\phi^{ee}(T)$ obtenu en dimension $d = 1$ est paramétriquement identique au temps de relaxation de l'énergie $\tau_{in}(T)$ donné par (13.135).

Afin de comprendre cette similarité, revenons plus en détails sur la structure des expressions qui décrivent la relaxation de l'énergie et de la phase. La relaxation de l'énergie est décrite par (13.136) [28] :

$$\begin{aligned} -\ln\mathcal{P}(t) = \frac{4}{\pi\hbar^2}\, t \int_{1/t}^{\infty} \frac{d\omega}{\sinh\beta\omega} \int \frac{d\boldsymbol{q}}{(2\pi)^d}\frac{4\pi e^2}{q^2} \\ \times \operatorname{Im}\left(\frac{-1}{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right)\operatorname{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega) \quad . \end{aligned} \tag{13.187}$$

Par ailleurs, nous avons calculé directement le déphasage induit sur le cooperon par les fluctuations du champ électrique. Ce déphasage est caractérisé par les valeurs moyennes (13.150) et (13.151). En utilisant la relation (5.21), $\langle e^{i\boldsymbol{q}.\boldsymbol{r}(\tau)}\rangle_{\mathcal{C}} = e^{-Dq^2\tau}$, on obtient la fluctuation de la phase sous la forme [29]

$$\begin{aligned} \frac{1}{2}\langle\Phi^2\rangle_{T,\mathcal{C}} = \frac{1}{\pi\hbar^2}\int_0^t\int_0^t d\tau_1 d\tau_2 \int\frac{d\boldsymbol{q}}{(2\pi)^d}\int_{|\omega|<T} d\omega \frac{4\pi e^2}{q^2}\operatorname{Im}\left(\frac{-1}{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right)\frac{1}{1-e^{-\beta\omega}} \\ \times e^{-Dq^2|\tau_1-\tau_2|}\operatorname{Re}\left(e^{-i\omega(\tau_1-\tau_2)} - e^{-i\omega(\tau_1-\overline{\tau}_2)}\right) \end{aligned} \tag{13.188}$$

---

[28] Les expressions (13.187) et (13.190) peuvent être considérablement simplifiées en notant que

$$\frac{4\pi e^2}{q^2}\operatorname{Im}\left(\frac{-1}{\epsilon}\right)\operatorname{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{2\rho_0}\operatorname{Im}P_d(\boldsymbol{q},\omega) \quad . \tag{13.186}$$

On a choisi de garder des expressions où la constante diélectrique apparaît explicitement.

[29] En fait, on montre que $\langle e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}(\tau)}\rangle_{\mathcal{C}} = e^{-Dq^2\tau|t-\tau|/t}$. Mais l'approximation utilisée, est suffisante dans la limite des grands temps [314].

où $\overline{\tau} = t - \tau$. L'intégrale sur ω est limitée à T, conséquence du principe de Pauli discutée page 533.

Afin de mettre en évidence l'équivalence des approches conduisant aux relations (13.187) et (13.188), considérons cette dernière expression. Au lieu d'intégrer sur la fréquence comme on l'a fait pour obtenir (13.154), intégrons d'abord sur les temps τ_1 et τ_2. Après un calcul fastidieux, on obtient [30] :

$$\frac{1}{2}\langle\Phi^2\rangle_{T,\mathcal{C}} \simeq \frac{2}{\pi\hbar^2}\, t \int_{|\omega|<T} \frac{d\omega}{1-e^{-\beta\omega}} \int \frac{d\boldsymbol{q}}{(2\pi)^d}\frac{4\pi e^2}{q^2} \times \mathrm{Im}\left(\frac{-1}{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right)\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega)\left(1-\frac{\sin\omega t}{\omega t}\right) \quad . \tag{13.190}$$

Ainsi, de façon tout à fait remarquable, on note que c'est la compensation entre les deux corrélateurs $\langle V(\tau_1)V(\tau_2)\rangle_T$ et $\langle V(\tau_1)V(\overline{\tau_2})\rangle_T$ introduits dans (13.150) qui, à cause du terme $(1-\sin\omega t/\omega t)$, conduit tout naturellement à une coupure proportionnelle à $1/t$ pour les basses fréquences et à une dépendance temporelle en $t^{3/2}$ de $\langle\Phi^2\rangle_{T,\mathcal{C}}$ [31].

Les relations (13.187) et (13.190) montrent que les dépendances temporelles de la relaxation d'une quasi-particule et de la relaxation de la phase sont identiques, moyennant les remarques suivantes :

• Si on peut admettre que la cohérence de phase est nécessairement limitée par le temps de vie des quasi-particules, il est loin d'être évident *a priori* que les deux processus de relaxation soient identiques. En particulier la fréquence de transfert ω a une signification différente. Pour la relaxation de l'énergie, c'est un transfert d'énergie entre états quantiques, alors que pour la relaxation de la phase, c'est la fréquence des modes de fluctuation du potentiel électrique. La correspondance entre les deux mécanismes est assurée par le théorème fluctuation-dissipation.

• Dans (13.190), la coupure inférieure sur les énergies ω apparaît de façon naturelle. Elle est liée à la différence des deux corrélateurs et donc à la

[30] On note que, pour une fonction $F(\omega)$ impaire,

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{F(\omega)d\omega}{1-e^{-\beta\omega}} = \int_0^{\infty} F(\omega)\coth\frac{\beta\omega}{2}d\omega \quad .$$

On peut ainsi récrire (13.190) sous la forme équivalente

$$\frac{1}{2}\langle\Phi^2\rangle_{T,\mathcal{C}} \simeq \frac{1}{\pi\hbar^2}\, t\int_0^T d\omega\coth\frac{\beta\omega}{2}\int\frac{d\boldsymbol{q}}{(2\pi)^d}\frac{4\pi e^2}{q^2} \times \mathrm{Im}\left(\frac{-1}{\epsilon(\boldsymbol{q},\omega)}\right)\mathrm{Re}P_d(\boldsymbol{q},\omega)\left(1-\frac{\sin\omega t}{\omega t}\right) \quad . \tag{13.189}$$

[31] Il faut noter que dans le calcul menant à la relation (13.190), on a supposé que $Dq^2t \gg 1$. Cette hypothèse, aussi considérée dans la référence [314], revient à négliger d'autres termes qui ont le même comportement en temps.

structure du cooperon qui couple deux trajectoires conjuguées par renversement du sens du temps. Dans (13.187), elle résulte de la règle d'or de Fermi. On voit donc le rôle essentiel joué par le corrélateur $\langle V(\tau_1)V(\overline{\tau_2})\rangle_T$ qui décrit la corrélation de potentiel entre trajectoires conjuguées par renversement du sens du temps.

• Le résultat (13.187) obtenu par la règle d'or de Fermi contient le facteur thermique $\omega/\sinh\beta\omega$, que l'on peut récrire sous la forme

$$\frac{\omega}{\sinh\beta\omega} = \frac{2\omega}{1-e^{-\beta\omega}}\,[1-f(-\omega)] \quad . \tag{13.191}$$

On reconnaît ici la fonction thermique $\omega/(1-e^{-\beta\omega})$ qui caractérise les fluctuations thermiques du champ électromagnétique (13.152). Elle est multipliée par un facteur de Fermi $1-f(-\omega)=f(\omega)$. Celui-ci coupe la contribution des échanges d'énergie à une valeur de l'ordre de T. Il trouve son origine dans la contrainte liée au principe de Pauli, explicitement prise en compte par les facteurs de Fermi de la relation (13.121). Par contre le calcul de la relaxation de la phase conduisant à (13.190) ne fait apparaître que le premier terme $\omega/(1-e^{-\beta\omega})$, car il décrit l'interaction d'un seul électron avec le champ électromagnétique fluctuant. Mais il faut tenir compte de l'existence de la mer de Fermi. Un électron d'énergie ϵ ne peut donc céder l'énergie ω que si l'état $\epsilon-\omega$ est vide, d'où un facteur $1-f(\epsilon-\omega)$. Pour des électrons au niveau de Fermi, cela conduit au résultat (13.191). Le facteur de Fermi doit donc être rajouté dans l'intégrale (13.190). L'énergie échangée avec le champ électromagnétique fluctuant dû aux autres électrons ne peut être supérieure à T. Avec cette précaution, il apparaît que relaxation de l'énergie et de la phase sont des mécanismes équivalents [318] [32].

La relaxation de l'énergie et la relaxation de la phase sont décrites par la même échelle de temps :

$$\tau_\phi^{ee}(T) = \tau_{in}(T)$$

13.7.5 Temps de cohérence de phase en dimensions $d=2$ et $d=3$

Dans le cas quasi-1d, ce sont les fluctuations de basse fréquence qui contribuent principalement à la relaxation de la phase. Il est instructif de reconsi-

[32] Ce point a été à l'origine d'une controverse [323, 324] motivée par des résultats expérimentaux [325] qui semblaient montrer une saturation du temps de cohérence de phase à basse température. Supposer que l'énergie qu'un électron peut échanger avec son environnement électrique n'est pas limitée par la température – la divergence qui apparaît à haute fréquence n'étant plus limitée par la température mais par le taux de collision élastique $1/\tau_e$ – conduit au résultat d'une saturation du temps de cohérence de phase à basse température.

dérer les résultats obtenus dans la section 13.7.2, pour les dimensionnalités 2 et 3. Comme pour $d = 1$, on pourrait déterminer le potentiel $U(\boldsymbol{\rho})$ et résoudre l'équation différentielle (13.162). On se limite ici à des considérations plus qualitatives en évaluant les fluctuations $\langle\Phi^2\rangle_T$ de la phase.

Pour $d = 2$, l'intégrale (13.155) sur le vecteur d'onde diverge et doit être coupée à $Dq^2 \simeq T$ car il ne peut y avoir d'échange avec les fluctuations du champ électrique pour des énergies supérieures à T. En utilisant (15.87), on obtient

$$\frac{1}{2}\left\langle\Phi^2\right\rangle_T = \frac{e^2T}{\pi\sigma_0\hbar^2 a}\int_0^t d\tau \log\frac{2}{q_c|\boldsymbol{r}(\tau)-\boldsymbol{r}(\overline{\tau})|} \sim \frac{e^2T}{2\pi\sigma_0\hbar^2 a} t \ln\frac{1}{Tt} \tag{13.192}$$

où $q_c \simeq \sqrt{T/D}$ et a est l'épaisseur du film. Ainsi, en dimension $d = 2$, la relaxation de la phase est exponentielle avec une correction logarithmique. Le taux de cohérence de phase, défini par $\frac{1}{2}\left\langle\Phi^2\right\rangle_T \simeq 1$, varie linéairement en température [313] :

$$\frac{1}{\tau_N} \simeq \frac{e^2T}{2\pi\sigma_0\hbar^2 a}\ln\frac{2\pi\sigma_0\hbar a}{e^2} \tag{13.193}$$

et on note que ce temps est similaire à celui décrivant la relaxation de l'énergie (13.134).

En dimension $d = 3$, l'intégrale (13.155) diverge pour les grands vecteurs d'onde et comme pour $d = 2$, elle doit être coupée pour $q_c \sim \sqrt{T/D}$. On obtient ainsi une relaxation exponentielle avec le temps caractéristique τ_N donné par

$$\frac{1}{\tau_N} = \frac{e^2T^{3/2}}{\pi^2\sigma_0\hbar^2\sqrt{D}} \tag{13.194}$$

et on retrouve bien un résultat analogue à (13.132).

On voit donc qu'en dimensions 2 et 3, la relaxation de la phase ainsi que celle d'une quasi-particule sont associées à des processus impliquant des transferts d'énergie de l'ordre de la température T.

13.7.6 Mesures du temps de cohérence de phase τ_ϕ^{ee}

La méthode usuelle pour obtenir expérimentalement le temps de cohérence de phase consiste à mesurer la magnétorésistance et à en déduire la correction de localisation faible (section 7.5). Celle-ci est une signature de la cohérence de phase et elle peut être supprimée par un certain nombre de mécanismes de déphasage déjà évoqués. Ceux-ci peuvent résulter de l'action d'un champ magnétique, du couplage spin-orbite (τ_{so}), du couplage à des impuretés magnétiques (τ_m), de l'interaction électron-phonon (τ_{ph}) ou de l'interaction électron-électron (τ_ϕ^{ee}). On rappelle par ailleurs que la correction de localisation faible ne contient pas de dépendance intrinsèque en température, contrairement par exemple aux fluctuations de conductance : elle ne dépend

que de L_ϕ, mais pas directement de L_T. Certains de ces mécanismes sont bien contrôlés : le champ magnétique est un paramètre extérieur et c'est précisément l'étude de la magnétorésistance qui permet de déterminer les autres temps caractéristiques ; le couplage spin-orbite peut être contrôlé en modifiant la concentration d'atomes lourds dans l'échantillon. Enfin, le couplage électron-phonon décroît très rapidement à basse température $1/\tau_{ph} \propto T^3$ et peut alors être négligé. Ne restent essentiellement que le couplage aux impuretés magnétiques et l'interaction électron-électron.

En principe, l'ajustement des courbes expérimentales par l'expression théorique de la magnétoconductance permet de remonter aux différents temps caractéristiques. Par exemple, en dimension $d = 2$, la magnétoconductance peut être ajustée à l'aide de l'expression (7.81).

En dimension $d = 1$, l'expression (7.56) permet de déterminer la magnétorésistance d'un fil de longueur L en présence d'un champ magnétique perpendiculaire au fil (exercice 7.3)

$$\frac{\Delta R}{R} = s\frac{e^2}{h}\frac{R}{2}\left(3L_{trip.} - L_{sing.}\right) \tag{13.195}$$

où les contributions triplet et singulet sont données par (relation 7.74)

$$\frac{1}{L^2_{trip.}} = \frac{1}{D}\left(\frac{1}{\tau_\phi^{ee}} + \frac{4}{3\tau_{so}} + \frac{2}{3\tau_m}\right) + \frac{W^2}{12L_B^4} \tag{13.196}$$

et

$$\frac{1}{L^2_{sing.}} = \frac{1}{D}\left(\frac{1}{\tau_\phi^{ee}} + \frac{2}{\tau_m}\right) + \frac{W^2}{12L_B^4} \quad . \tag{13.197}$$

où $L_B = \sqrt{\hbar/2eB}$ est la longueur magnétique. La figure 13.11 montre le résultat d'une expérience réalisée sur un fil d'or, où le temps de cohérence de phase varie effectivement comme $T^{2/3}$ ainsi que le prédit la relation (13.181). La figure 13.12 présente des résultats obtenus sur des fils métalliques d'or, d'argent et de cuivre. La dépendance en $T^{2/3}$ est observée sur les fils d'or et d'argent. On constate qu'à plus haute température le temps τ_ϕ s'écarte notablement du comportement prédit par la relation (13.181). Ceci découle du fait qu'il apparaît alors d'autres degrés de liberté qui sont eux-mêmes source de déphasage, principalement le couplage électron-phonon [314]. Ce dernier donne une contribution proportionnelle à T^3 que nous ne calculons pas ici. En utilisant la relation

$$\frac{1}{\tau_\phi} = AT^{2/3} + BT^3 \tag{13.198}$$

où A et B sont des paramètres ajustables, on obtient pour les fils d'argent la courbe en trait plein.

Il semble acquis que les processus qui conduisent à la saturation du temps de cohérence de phase à basse température soient des processus *extrinsèques*

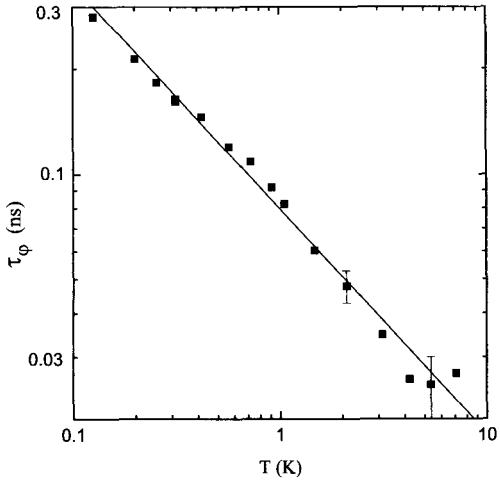


FIG. 13.11 – *Temps de cohérence de phase τ_ϕ^{ee} en fonction de la température mesuré dans un fil d'or. La ligne droite correspond à $\tau_\phi \propto T^{-0,64}$ (P.M. Echternach* et al., Phys. Rev. B **48**, *11516 (1993)).*

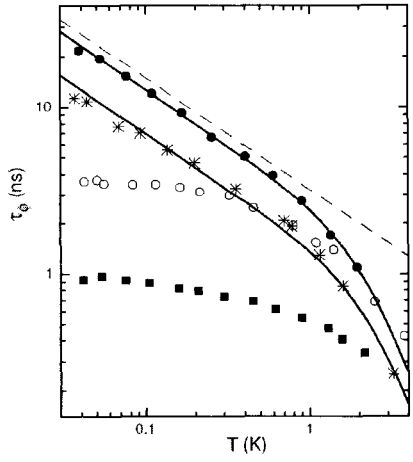


FIG. 13.12 – *Comportement du temps de cohérence de phase τ_ϕ de quatre fils métalliques (argent (• et ○), or (∗) et cuivre (■)) par mesure de la magnétorésistance [322]. Dans les échantillons les plus purs (argent (•) et or (∗)), on observe une dépendance $\tau_\phi^{-1}(T) = AT^{2/3} + BT^3$ (lignes pleines). La ligne en tirets représente la contribution $AT^{2/3}$ pour l'argent. Pour de l'argent moins pur (○) et pour le cuivre (■), ce comportement en loi de puissance n'est pas observé. La saturation à basse température a été attribuée à d'autres mécanismes de déphasage.*

liés au couplage à d'autres degrés de libertés (tels que les impuretés magnétiques [309], des systèmes à deux niveaux [322] ou plus généralement des mécanismes indépendants de la température) et ne soient pas liés à la physique du gaz d'électrons en interaction. Ainsi la figure 13.12 montre que la saturation pour les fils d'argent dépend du degré de pureté de l'échantillon [33].

[33] Des travaux expérimentaux récents confirment effectivement que le comportement de τ_ϕ à basse température est piloté par les impuretés magnétiques et qu'il est non monotone : il montre d'abord une tendance vers la saturation puis une remontée à plus basse température [322]. Ce comportement est attribué à la physique de l'effet Kondo qui tend à écranter les impuretés magnétiques à basse température (voir remarque, p. 235). À plus basse température, le couplage (RKKY) entre impuretés magnétiques peut aussi jouer un rôle [326].

Complément C13.1 Potentiel coulombien écranté en géométrie confinée

Dans la section 13.2, on décrit le potentiel écranté pour un échantillon tridimensionnel. Plus généralement, la forme de l'interaction dépend de la dimension d'espace d et de l'environnement de l'échantillon. Pour un échantillon isolé, la transformée de Fourier du potentiel coulombien e^2/R dépend de la dimensionnalité d de la façon suivante

$$U_0(\boldsymbol{q}) = \begin{cases} \dfrac{4\pi e^2}{q^2} & (d=3) \\ \dfrac{2\pi e^2}{q} & (d=2) \\ 2e^2 \ln \dfrac{1}{qW} & (d=1) \end{cases} . \tag{13.199}$$

La dernière expression correspond à un fil quasi-unidimensionnel de section W^2 et elle est valable dans la limite des distances grandes devant W, c'est-à-dire pour $qW \ll 1$ [34]. D'après (13.6), le potentiel écranté statique ($\omega = 0$) est donné par la relation $U(\boldsymbol{q}) = U_0(\boldsymbol{q})/[1+2\rho_0 U_o(\boldsymbol{q})]$ où ρ_0 est la densité d'états en dimension d. On obtient ainsi :

$$U(\boldsymbol{q}) = \begin{cases} \dfrac{4\pi e^2}{q^2+\kappa_3^2} & (d=3) \\ \dfrac{2\pi e^2}{q+\kappa_2} & (d=2) \\ \dfrac{2e^2}{\ln^{-1}\frac{1}{qW} + 4e^2\rho_{1d}} & (d=1) \end{cases} . \tag{13.200}$$

En dimension 3, le vecteur d'écran κ_3 est donné par $\kappa_3^2 = \kappa^2 = 8\pi e^2 \rho_{3d}$ où ρ_{3d} est la densité d'états par unité de volume et par direction de spin en $d = 3$. En dimension 2, le vecteur d'écran est donné par $\kappa_2 = 4\pi e^2 \rho_{2d}$ où ρ_{2d} est la densité d'états en $d = 2$. Par exemple pour un échantillon quasi-bidimensionnel d'épaisseur W, on a $\rho_{2d} = \rho_{3d} W$, de sorte que $\kappa_{2d} = \kappa_{3d}^2 W/2$.

[34] Pour le cas $d = 1$, la coupure dans le logarithme dépend de la façon dont est introduite la coupure due à l'épaisseur W.

L'interaction dynamiquement écrantée est donnée par (13.6), c'est-à-dire

$$U(\boldsymbol{q},\omega) = \begin{cases} \dfrac{4\pi e^2}{q^2 + \kappa_3^2 \frac{Dq^2}{-i\omega + Dq^2}} & (d=3) \\ \dfrac{2\pi e^2}{q + \kappa_2 \frac{Dq^2}{-i\omega + Dq^2}} & (d=2) \\ \dfrac{2e^2}{\ln^{-1}\frac{1}{qW} + 4e^2\rho_{1d}\frac{Dq^2}{-i\omega + Dq^2}} & (d=1) \end{cases} \quad . \tag{13.201}$$

En toute dimension, dans la limite diffusive $q \to 0$, l'interaction écrantée tend vers la même forme

$$U(\boldsymbol{q},\omega) \underset{q\to 0}{\longrightarrow} \frac{1}{2\rho_d}\frac{-i\omega + Dq^2}{Dq^2} \quad . \tag{13.202}$$

Toutefois, en dimension 1, ce comportement du potentiel écranté peut conduire à des divergences (par exemple pour le calcul de la correction de densité d'états dans la relation (13.66)) et la forme complète de l'interaction doit être conservée.

De façon générale, en géométrie confinée, la forme de l'interaction coulombienne dépend de la nature de l'environnement (voir par exemple la section 13.4.4 et la référence [290]). Par exemple, si on considère un échantillon bidimensionnel placé à une distance a d'une grille métallique, la charge image induite par la grille modifient l'interaction statique qui devient

$$U_0(\boldsymbol{q}) = \frac{2\pi e^2}{q}\left(1 - e^{-2qa}\right) \tag{13.203}$$

de sorte que pour les distances inférieures à a, c'est-à-dire $qa \gg 1$, on retrouve l'interaction coulombienne $2d$. À grande distance, c'est-à-dire $qa \ll 1$, l'interaction devient

$$U_0(q \to 0) = 4\pi e^2 a \quad . \tag{13.204}$$

Cette interaction est de la forme $U_0(q \to 0) = e^2/C$, où on définit la capacité par unité de surface $C = 1/(4\pi a)$.

De même, pour un fil de section W^2 placé à distance a d'une grille, l'interaction statique devient

$$U_0(\boldsymbol{q}) = 2e^2\left[\ln\frac{e^{-\gamma}}{qW} - K_0(2qa)\right] \quad , \tag{13.205}$$

où $\gamma \simeq 0{,}577$ est la constante d'Euler et où K_0 est une fonction de Bessel modifiée [321] (15.65). Dans la limite $qa \ll 1$, on retrouve bien le résultat unidimensionnel [33]. À grande distance, c'est-à-dire $qa \ll 1$, on obtient

$$U_0(q \to 0) = 2e^2 \ln\frac{a}{W} \tag{13.206}$$

qui est de la forme $U_0(q \to 0) = e^2/C$ où on définit la capacité par unité de longueur $C = 1/(2\ln a/W)$.

Une fois obtenue l'interaction statique $U_0(\boldsymbol{q})$ pour ces géométries particulières, on en déduit l'interaction dynamiquement écrantée par la relation (13.6) :

$$U(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{1}{U_0^{-1}(q) + 2\rho_d \frac{Dq^2}{-i\omega + Dq^2}} \tag{13.207}$$

et dans la limite diffusive pour laquelle $U_0(q \to 0, \omega) = e^2/C$,

$$U(q \to 0) \to \frac{-i\omega + Dq^2}{2\rho_d Dq^2 - i\omega C/e^2} \quad , \tag{13.208}$$

qui est l'expression (13.71).

Enfin, il est important de remarquer que la forme de l'interaction écrantée dépend de l'échelle de longueur considérée. Par exemple pour un fil, pour les longueurs inférieures à l'épaisseur W du fil, l'interaction à une forme tridimensionnelle et elle a une forme unidimensionnelle pour les longueurs plus grandes. Ainsi, si on s'intéresse à des phénomènes à l'énergie ϵ, la nature de l'interaction sera $3d$ ou $1d$ selon que la longueur caractéristique $L_\epsilon = \sqrt{D/\epsilon}$ associée à l'énergie est plus petite ou plus grande que W.

Complément C13.2 Temps de vie en l'absence de désordre

Ce complément reprend le calcul du temps de vie d'une quasi-particule pour un gaz d'électrons en interaction en l'absence de désordre. Ce calcul est à la base de la théorie de Landau des liquides de Fermi.

En l'absence de désordre, les états propres sont des ondes planes indexées par leur impulsion, c'est-à-dire $|\alpha\rangle = |\boldsymbol{p}\rangle$, $|\gamma\rangle = |\boldsymbol{p}'\rangle$, $|\beta\rangle = |\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}\rangle$ et $|\delta\rangle = |\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{q}\rangle$. Ainsi, la relation (13.92) s'écrit :

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} = \frac{4\pi}{\nu_0}\int_0^{\epsilon} d\omega \int_{-\omega}^{0} d\epsilon' \sum_{\boldsymbol{p}\boldsymbol{p}'\boldsymbol{q}} \frac{|U_{\boldsymbol{q}}|^2}{\Omega^2} \times \delta(\tilde{\epsilon}-\epsilon_{\boldsymbol{p}})\delta(\tilde{\epsilon}'-\epsilon_{\boldsymbol{p}'})\delta(\tilde{\epsilon}-\omega-\epsilon_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}})\delta(\tilde{\epsilon}'+\omega-\epsilon_{\boldsymbol{p}'+\boldsymbol{q}}) \tag{13.209}$$

où $\tilde{\epsilon} = \epsilon + \epsilon_F$ et $\tilde{\epsilon}' = \epsilon' + \epsilon_F$. On dénote par $U_{\boldsymbol{q}}$ la transformée de Fourier du potentiel d'interaction écranté qui dans l'approximation de Thomas-Fermi est donnée par la relation (13.2). La relation de dispersion quadratique des électrons implique que $\epsilon_{\boldsymbol{p}-\boldsymbol{q}} = \epsilon_{\boldsymbol{p}} - \boldsymbol{v}_F.\boldsymbol{q} + q^2/2m$ et $\sum_{\boldsymbol{p}} = \nu_0 \int d\epsilon_{\boldsymbol{p}} d\varpi$. L'intégration sur les impulsions $\boldsymbol{p}$ et $\boldsymbol{p}'$ conduit à

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} = 2\pi\nu_0 \int_0^{\epsilon} \omega d\omega \sum \frac{|U_{\boldsymbol{q}}|^2}{\Omega^2} \int \delta(\omega - \boldsymbol{v}.\boldsymbol{q} + \frac{q^2}{2m})\delta(\omega - \boldsymbol{v}'.\boldsymbol{q} - \frac{q^2}{2m}) d\varpi d\varpi' \tag{13.210}$$

où ϖ (resp. ϖ') est l'angle solide $(\boldsymbol{v},\boldsymbol{q})$ (resp. $(\boldsymbol{v}',\boldsymbol{q})$) déterminé par les directions $\boldsymbol{v}$ (resp. $\boldsymbol{v}'$) et $\boldsymbol{q}$. Après intégration sur les angles et dans la limite $\omega \ll \epsilon_F$, on obtient :

$$\frac{1}{\tau_{ee}(\epsilon)} = 2\pi\nu_0^3\epsilon^2\langle|U|^2\rangle \tag{13.211}$$

où l'interaction est décrite par le paramètre

$$\langle|U|^2\rangle = \frac{1}{4\nu_0^2\Omega^2} \sum_{|\boldsymbol{q}|<2k_F} \frac{|U_{\boldsymbol{q}}|^2}{(v_F q)^2} \quad . \tag{13.212}$$

En dimension $d = 3$, compte tenu de l'expression (13.2) du potentiel écranté et dans la limite $k_F \ll \kappa$ [306], on en déduit :

$$\boxed{\frac{1}{\tau_{ee}} = \frac{\pi^2}{64}\frac{\kappa}{k_F}\frac{\epsilon^2}{\epsilon_F}} \tag{13.213}$$

où κ est la longueur d'écran inverse (13.4). Notons que l'amplitude de l'interaction est d'ordre

$$\langle|U|^2\rangle \propto \frac{\Delta^3}{\epsilon_F} \quad . \tag{13.214}$$

Pour κ et k_F quelconques, on obtient :

$$\begin{aligned}\frac{1}{\tau_{ee}} &= \frac{\pi\epsilon^2}{16}\frac{\kappa^4}{k_F\epsilon_F}\int_0^{2k_F}\frac{dq}{(q^2+\kappa^2)^2} \\ &= \frac{\kappa}{k_F}\frac{\pi\epsilon^2}{16\epsilon_F}\left(\frac{k_F\kappa}{\kappa^2+4k_F^2}+\frac{1}{2}\arctan\frac{2k_F}{\kappa}\right) \qquad (13.215)\end{aligned}$$

qui donne le résultat (13.213) dans la limite $\kappa \ll k_F$ et qui, dans la limite $\kappa \gg k_F$ devient

$$\frac{1}{\tau_{ee}} = \frac{\pi}{8}\frac{\epsilon^2}{\epsilon_F} \quad . \qquad (13.216)$$

Chapitre 14

Magnétisme orbital et courants permanents

Dans ce chapitre, on rétablit $\hbar$ et on prendra $k_B = 1$ pour la constante de Boltzmann, sauf mention explicite.

14.1 Introduction

La cohérence de phase affecte les propriétés de transport des systèmes électroniques (la conductance et ses fluctuations). Le but de ce chapitre est d'étudier les effets de la cohérence de phase sur les propriétés thermodynamiques, essentiellement l'aimantation des conducteurs désordonnés. On s'intéressera en particulier au courant permanent dans un anneau métallique mésoscopique désordonné non supraconducteur, mis en évidence au début des années 1990. On montrera que l'aimantation et le courant permanent sont des phénomènes de même nature. Seule la géométrie de l'échantillon fait que l'on parle de l'une ou l'autre de ces propriétés. On étudiera d'abord les caractéristiques générales de l'aimantation d'un système désordonné, en s'intéressant particulièrement au cas d'un plan infini dans un champ magnétique uniforme. Puis on étudiera le courant permanent qui circule dans un anneau traversé par un flux magnétique.

Bien que l'étude du courant permanent semble *a priori* plus simple que celle de la conductance, puisqu'il s'agit d'une propriété d'équilibre thermodynamique et non de transport, il se trouve que son calcul pose de nouvelles questions assez subtiles, en particulier en ce qui concerne la valeur moyenne. Pour cela, il est crucial de prendre en compte l'interaction coulombienne entre électrons, ce que nous ferons en nous limitant à l'approximation de Hartree-Fock (voir chap. 13).

Un métal soumis à un champ magnétique B uniforme est le siège d'un moment magnétique $\mathcal{M}$ donné par la dérivée du grand potentiel

thermodynamique $\Phi(T,\mu,B) = -k_BT\ln\mathcal{Z}_g$ par rapport au champ :

$$\mathcal{M}(\mathcal{B}) = -\left(\frac{\partial\Phi}{\partial B}\right)_{\mu,T} \quad . \tag{14.1}$$

$\mathcal{Z}_g$ est la fonction de partition grand-canonique. On définit l'aimantation M comme le moment magnétique par unité de volume et la susceptibilité magnétique χ décrit la réponse linéaire du système en champ faible :

$$M = \frac{\mathcal{M}}{\Omega} \qquad \chi = lim_{B\to 0}\frac{dM}{dB} \quad . \tag{14.2}$$

Si le système a la forme d'un anneau de rayon R, le moment magnétique $\mathcal{M}$ correspond à celui d'une spire de surface $S = \pi R^2$ parcourue par un courant $I = \mathcal{M}/S$, qu'on a pris l'habitude d'appeler *courant permanent.* Ce courant peut donc s'écrire sous la forme

$$I(\phi) = -\left(\frac{\partial\Phi}{\partial\phi}\right)_{\mu,T} \tag{14.3}$$

où $\phi = BS$ est le flux à travers l'anneau.

Le but de ce chapitre est de caractériser la distribution de moment magnétique $\mathcal{M}$. Dans un métal faiblement désordonné, on montre que l'aimantation moyenne $\overline{\mathcal{M}}$ et la fluctuation $\overline{\delta\mathcal{M}^2}^{1/2}$ s'écrivent en fonction de la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t)$, de façon très analogue à la conductance moyenne ou à ses fluctuations, étudiées dans les chapitres 7 et 11.

Le formalisme qui permet de calculer l'aimantation et le courant permanent est le même. Les expressions que nous allons obtenir pour ces quantités en fonction de $Z(t)$ seront donc analogues. Si on s'intéresse au courant permanent, il suffira de remplacer le moment magnétique $\mathcal{M}$ par le courant I et le champ magnétique B par le flux ϕ.

Commençons par l'étude d'un gaz d'électrons sans interaction. Le grand potentiel Φ s'écrit en fonction des niveaux d'énergie à une particule ϵ_n, solutions de l'hamiltonien (2.2) avec les conditions aux limites appropriées [1]

$$\Phi = -2k_BT\sum_n \ln(1+e^{\beta(\epsilon_F-\epsilon_n)}) \quad . \tag{14.4}$$

Le facteur 2 tient compte de la dégénerescence de spin. On peut récrire ce potentiel comme une intégrale

$$\Phi(T,B) = -2k_BT\int_0^\infty \nu(\epsilon,B)\ln\left(1+e^{\beta(\epsilon_F-\epsilon)}\right)d\epsilon \tag{14.5}$$

[1]On considère un gaz d'électrons dégénéré c'est-à-dire tel que $T \ll T_F$. On supposera donc que le potentiel chimique ne dépend pas de la température et est égal à sa valeur à température nulle $\epsilon_F(B) = \epsilon_F$.

où la dépendance du spectre d'énergie avec le champ est contenue dans la densité d'états $\nu(\epsilon, B) = \sum_n \delta(\epsilon - \epsilon_n(B))$. On en déduit pour le moment magnétique l'expression

$$\boxed{\mathcal{M}(T, B) = 2k_B T \int_0^\infty \frac{\partial \nu(\epsilon, B)}{\partial B} \ln\left(1 + e^{\beta(\epsilon_F - \epsilon)}\right) d\epsilon} \tag{14.6}$$

En intégrant deux fois par parties le potentiel Φ, on obtient respectivement les expressions

$$\Phi(B) = -2 \int_0^\infty N(\epsilon, B) f(\epsilon) d\epsilon \tag{14.7}$$

et

$$\Phi(B) = 2 \int_0^\infty \mathcal{N}(\epsilon, B) \frac{\partial f}{\partial \epsilon} d\epsilon \tag{14.8}$$

où $N(\epsilon, B)$ est la densité d'états intégrée (ou fonction de comptage) par direction de spin : $N(\epsilon, B) = \int_0^\epsilon \nu(\epsilon', B) d\epsilon'$. On note $\mathcal{N}(\epsilon, B)$ la densité d'états intégrée deux fois et $f(\epsilon)$ le facteur de Fermi. À température nulle, $\Phi(B)$ s'exprime simplement :

$$\Phi(B) = -2\mathcal{N}(\epsilon_F, B) \quad . \tag{14.9}$$

En utilisant l'expression (14.7), on peut écrire le moment magnétique sous la forme

$$\mathcal{M}(B) = 2 \int_0^\infty \frac{\partial N(\epsilon, B)}{\partial B} f(\epsilon) d\epsilon = -2 \sum_n f(\epsilon_n) \frac{\partial \epsilon_n}{\partial B} \tag{14.10}$$

qui apparaît donc comme la somme des contributions de chaque niveau d'énergie occupé. À température nulle, on a :

$$\mathcal{M}(T = 0, B) = -2 \int_0^{\epsilon_F} \frac{\partial \nu(\epsilon, B)}{\partial B} (\epsilon - \epsilon_F) d\epsilon \tag{14.11}$$

ou encore

$$\mathcal{M}(T = 0, B) = -2 \sum_{\epsilon_n < \epsilon_F} \frac{\partial \epsilon_n}{\partial B} \quad . \tag{14.12}$$

14.2 Gaz d'électrons libres dans un champ uniforme

14.2.1 Rappel : le cas sans désordre

Susceptibilité de Landau et effet de Haas-Van Alphen

On considère un gaz bidimensionnel dont la surface S tend vers l'infini. Les états propres de l'équation de Schrödinger sont les niveaux de Landau,

d'énergie $\epsilon_n = (n + 1/2)\hbar\omega_c$ où $\omega_c = eB/m$ est la fréquence cyclotron, et de dégénérescence eB/h, par unité de surface et par direction de spin. Ainsi, la densité d'états ν par direction de spin s'écrit :

$$\nu(\epsilon, B) = \frac{eB}{h} S \sum_{n>0} \delta\left(\epsilon - (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c\right) \quad . \tag{14.13}$$

Il est commode de symétriser la somme sur n à l'aide d'une fonction $\theta(\epsilon)$:

$$\nu(\epsilon, B) = \frac{eB}{h} S \sum_{n} \delta\left(\epsilon - (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c\right) \theta(\epsilon) \quad . \tag{14.14}$$

Une transformation de Poisson (15.95) permet alors d'obtenir la décomposition de Fourier de la densité d'états :

$$\nu(\epsilon, B) = \frac{mS}{2\pi\hbar^2} \left[1 + 2\sum_{p=1}^{\infty}(-1)^p \cos\frac{2\pi p\epsilon}{\hbar\omega_c}\right] \theta(\epsilon) \quad , \tag{14.15}$$

dont on déduit la densité d'états intégrée

$$N(\epsilon, B) = \frac{mS}{2\pi\hbar^2} \left[\epsilon + 2\sum_{p=1}^{\infty}(-1)^p \frac{\hbar\omega_c}{2\pi p} \sin\frac{2\pi p\epsilon}{\hbar\omega_c}\right] \theta(\epsilon) \tag{14.16}$$

et la densité d'états intégrée deux fois :

$$\mathcal{N}(\epsilon) = \frac{mS}{2\pi\hbar^2} \left[\frac{1}{2}\epsilon^2 + 2\sum_{p=1}^{\infty}(-1)^p (\frac{\hbar\omega_c}{2\pi p})^2 \left(1 - \cos\frac{2\pi p\epsilon}{\hbar\omega_c}\right)\right] \theta(\epsilon) \quad . \tag{14.17}$$

De (14.9), on déduit qu'à température nulle, la variation avec le champ du grand potentiel $\Phi(B)$ est égale à

$$\delta\Phi(B) = \Phi(B) - \Phi(0) = -\frac{mS\omega_c^2}{2\pi^3} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^p}{p^2} \left(1 - \cos\frac{2\pi p\epsilon_F}{\hbar\omega_c}\right) \quad . \tag{14.18}$$

À énergie de Fermi ϵ_F fixée, le potentiel thermodynamique et le moment magnétique $\mathcal{M}$ donné par (14.1) oscillent fortement avec le champ magnétique [2]. Ces oscillations constituent l'*effet de Haas-van Alphen*. Elles disparaissent avec la température pour ne laisser que le terme non oscillant

$$\delta\Phi(B) = -\frac{e^2 S}{2\pi^3 m} B^2 \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^p}{p^2} = \frac{e^2 S}{24\pi m} B^2 \tag{14.19}$$

[2] On suppose que le potentiel chimique ϵ_F est fixé et ne varie pas avec le champ magnétique. En fait, pour un système dont la densité électronique est fixée, le potentiel chimique oscille avec le champ, de façon importante en dimension deux. Pour plus de détails sur l'effet de Haas-van Alphen, on pourra consulter par exemple les références [329, 330].

qui définit la susceptibilité de Landau à deux dimensions, par unité de surface

$$\chi_L = -\frac{e^2}{12\pi m} = -\frac{2}{3}\mu_B^2 \rho_0(\epsilon_F) \quad , \tag{14.20}$$

où $\rho_0(\epsilon_F) = \nu_0/\Omega$ est la densité d'états au niveau de Fermi par direction de spin et $\mu_B = e\hbar/2m$ est le magnéton de Bohr.

Effet de la température

À température finie, le grand potentiel est donné par (14.8). Le terme non oscillant de l'expression (14.18) est inchangé puisque $\int_0^\infty -\partial f/\partial\epsilon d\epsilon = 1$. Le terme oscillant contient l'intégrale

$$\int_0^\infty \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right) \cos\frac{2\pi p\epsilon}{\hbar\omega_c} d\epsilon = \frac{2\pi^2 p/\beta\hbar\omega_c}{\sinh 2\pi^2 p/\beta\hbar\omega_c} \cos\frac{2\pi p\epsilon_F}{\hbar\omega_c}$$

dont on a remplacé la borne inférieure par $-\infty$ et où on a utilisé les relations (15.97) et (15.53). Le grand potentiel à température finie s'écrit donc

$$\delta\Phi(B) = -\frac{S}{2}\chi_L B^2 \left(1 + \frac{12}{\pi^2}\sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^p}{p^2} R\left(\frac{2\pi^2 p}{\beta\omega_c}\right) \cos\frac{2\pi p\epsilon_F}{\hbar\omega_c}\right) \tag{14.21}$$

avec $R(x) = x/\sinh x$. Les oscillations du grand potentiel $\delta\Phi(B)$ et donc du moment magnétique sont amorties à température finie et disparaissent lorsque $k_B T$ devient plus grand que $\hbar\omega_c$.

Exercice 14.1 : Susceptibilié de Landau et oscillations de Haas-van Alphen en dimension $d = 3$

Les niveaux d'énergie s'écrivent :

$$\epsilon = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega_c + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \quad .$$

En dimension $d = 3$, la densité d'états intégrée deux fois, $\mathcal{N}^{3d}$ s'écrit très simplement en fonction de $\mathcal{N}^{2d}$ pour $d = 2$ (14.17) :

$$\mathcal{N}^{3d}(\epsilon) = L_z \int_0^{\sqrt{2m\epsilon}/\hbar} \frac{dk_z}{\pi} \mathcal{N}^{2d}\left(\epsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m}\right)$$

où L_z est l'épaisseur de l'échantillon dans la direction parallèle au champ. Le terme non oscillant du potentiel $\delta\Phi(B)$ est donc multiplié par $k_F L_z/\pi$ et on a :

$$\chi_L^{3d} = \frac{k_F}{\pi}\chi_L^{2d} = -\frac{e^2 k_F}{12\pi^2 m} = -\frac{1}{3}\mu_B^2 \rho_0(\epsilon_F) \tag{14.22}$$

où $\rho_0(\epsilon_F)$ est la densité d'états à trois dimensions par unité de volume et par direction de spin.
Le terme oscillant contient l'intégrale :

$$I = \int_0^{k_F} \cos\left(\frac{2\pi p}{\hbar\omega_c}(\epsilon - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m})\right) \frac{dk_z}{\pi} \quad .$$

Dans la limite $\epsilon_F \gg \hbar\omega_c$, la borne supérieure de l'intégrale est remplacée par $+\infty$. En utilisant la relation de Fresnel (15.55), cette intégrale s'écrit :

$$I = \frac{1}{\pi\sqrt{2}}\left(\frac{m\omega_c}{2\hbar p}\right)^{1/2}\cos\left(\frac{2\pi p\epsilon}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4}\right) \tag{14.23}$$

et on obtient finalement :

$$\delta\Phi(B) = -\frac{\Omega}{2}\chi_L^{3d}B^2\left[1 + \frac{6}{\pi^2}\sum_{p=1}^{\infty}\frac{(-1)^p}{p^2}\left(\frac{\hbar\omega_c}{2p\epsilon_F}\right)^{1/2}\cos\left(\frac{2\pi p\epsilon_F}{\hbar\omega_c} - \frac{\pi}{4}\right)\right] \quad .$$

14.2.2 Aimantation moyenne

On a vu (section 3.3) que le désordre, caractérisé par un temps élastique moyen τ_e, a pour effet d'élargir les niveaux d'énergie, de telle sorte que la densité d'états moyenne (3.92) s'écrit :

$$\rho(\epsilon) = \int_0^{\infty} g(\epsilon - \epsilon')\rho_0(\epsilon')d\epsilon' \tag{14.24}$$

avec

$$g(\epsilon) = \frac{\hbar/2\pi\tau_e}{\epsilon^2 + (\hbar/2\tau_e)^2} \quad . \tag{14.25}$$

Du fait de cet élargissement, la moyenne (14.8) du grand potentiel à température nulle est donnée par :

$$\Phi(B) = 2\int_0^{\infty} \mathcal{N}(\epsilon, B)g(\epsilon - \epsilon_F)d\epsilon \quad . \tag{14.26}$$

Les termes oscillants de l'expression (14.18) sont maintenant de la forme :

$$\int_{-\infty}^{\infty} g(\epsilon - \epsilon_F)\cos\frac{2\pi p\epsilon}{\hbar\omega_c}d\epsilon = e^{-\pi p/\omega_c\tau_e}\cos\frac{2\pi p\epsilon_F}{\hbar\omega_c} \quad . \tag{14.27}$$

La fonction $g(\epsilon - \epsilon_F)$ étant piquée autour de ϵ_F, on a remplacé la borne inférieure de l'intégrale par $-\infty$ et utilisé l'intégrale (15.54). On en déduit que les harmoniques du grand potentiel décroissent exponentiellement avec $\omega_c\tau_e$:

$$\delta\Phi(B) = -\frac{1}{2}\chi_L B^2\left(1 + \frac{12}{\pi^2}\sum_{p=1}^{\infty}\frac{(-1)^p}{p^2}e^{-\pi p/\omega_c\tau_e}\cos\frac{2\pi p\epsilon_F}{\hbar\omega_c}\right) \quad . \tag{14.28}$$

Le moment magnétique moyen [3] $\mathcal{M}$ est donné par (14.1). Si $1/\tau_e$ n'est plus négligeable devant ϵ_F, le terme non oscillant diminue lui aussi, puisque l'intégrale $\int_0^{\infty} g(\epsilon)d\epsilon$ n'est plus égale à 1. La susceptibilité de Landau moyenne $\chi_L(\tau_e)$ devient :

$$\chi_L(\tau_e) = \chi_L(\tau_e = \infty)\int_0^{\infty}\frac{\rho_0(\epsilon)}{\rho_0(\epsilon_F)}g(\epsilon - \epsilon_F)d\epsilon \quad . \tag{14.29}$$

---

[3] Pour alléger les notations, on désigne aussi par $\mathcal{M}$ le moment magnétique moyen.

Le désordre introduit des corrections d'ordre $1/\epsilon_F\tau_e$ en dimension $d = 2$ et d'ordre $1/(\epsilon_F\tau_e)^2$ pour $d = 3$, dont l'origine provient de la correction à la densité d'états moyenne (section 3.3) [331]. C'est le seul effet du désordre sur la susceptibilité moyenne.

On va maintenant étudier les fluctuations d'aimantation. Celles-ci font intervenir la moyenne d'un produit de densité d'états et sont donc reliées à la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t)$. On s'attend à voir apparaître des effets liés à la cohérence de phase, analogues à ceux mis en évidence dans l'étude des corrélations de densité d'états (chap. 10).

14.2.3 Fluctuations de l'aimantation

Si l'aimantation moyenne est peu affectée par le désordre, il n'en est pas de même des fluctuations. Après un changement d'origine des énergies, le moment magnétique (14.11) se récrit [4] :

$$\mathcal{M}(T=0,B) = -2\int_{-\epsilon_F}^{0} \frac{\partial\nu(\epsilon,B)}{\partial B}\,\epsilon\,d\epsilon \quad . \tag{14.30}$$

La variance $\overline{\delta\mathcal{M}^2}$ définie par $\overline{\delta\mathcal{M}^2} = \overline{\mathcal{M}^2} - \overline{\mathcal{M}}^2$ s'écrit :

$$\overline{\delta\mathcal{M}^2} = \frac{4}{\Delta^2}\partial_B\partial_{B'}\int_{-\epsilon_F}^{0}\int_{-\epsilon_F}^{0} \epsilon\epsilon' K(\epsilon-\epsilon',B,B')d\epsilon d\epsilon' \quad , \tag{14.31}$$

où $\partial_B = \partial/\partial B$ et où $K(\omega,B,B')$ est la fonction de corrélation normalisée de la densité d'états définie par (10.4), et calculée ici pour deux valeurs différentes du champ magnétique. On a écrit pour cela la densité d'états $\nu(\epsilon,B)$ sous la forme $\nu(\epsilon,B) = \Omega\rho(\epsilon,B) = \rho(\epsilon,B)/(\Delta\rho_0)$. L'énergie Δ est la séparation moyenne entre niveaux d'énergie de même spin. À l'approximation de diffusion, la fonction de corrélation K s'écrit comme la somme de deux contributions K_d et K_c (section C4.4) [5] :

$$K(\omega,B,B') = K_d(\omega,\frac{B-B'}{2}) + K_c(\omega,\frac{B+B'}{2}) \tag{14.32}$$

de sorte que

$$\overline{\delta\mathcal{M}^2} = \frac{\hbar^2}{\Delta^2}\int_{-\epsilon_F}^{0}\int_{-\epsilon_F}^{0} \epsilon\epsilon'\left[K_c''(\epsilon-\epsilon',0) - K_d''(\epsilon-\epsilon',B)\right]d\epsilon d\epsilon' \quad , \tag{14.33}$$

où $''$ désigne la dérivée seconde $\partial^2/\partial B^2$ par rapport au champ. En introduisant le facteur de forme $\tilde{K}(t)$, transformée de Fourier de la fonction de corrélation

[4] On rappelle que $\nu = \rho\Omega$.

[5] Voir note 4, p. 222, et la remarque de la page 224.

$K(\omega)$ et en utilisant la relation [6] $\int_{-\infty}^{0} \epsilon\, e^{i\epsilon t} d\epsilon = 1/t^2$, on déduit la relation entre la variance et la dépendance en champ du facteur de forme

$$\overline{\delta\mathcal{M}^2} = \frac{2\hbar^2}{\Delta^2} \int_0^\infty \frac{\tilde{K}_c''(t,B) - \tilde{K}_d''(t,0)}{t^4} dt \quad . \tag{14.34}$$

Finalement, en utilisant la relation (10.51) entre le facteur de forme et la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t)$, on obtient :

$$\boxed{\overline{\delta\mathcal{M}^2} = \frac{\hbar^2}{2\pi^2} \int_0^\infty \frac{Z_c''(t,B) - Z_d''(t,0)}{t^3} dt} \tag{14.35}$$

Suivant les situations considérées, l'intégrale peut ne pas converger, soit aux temps courts, soit au temps longs. Il faut dans ce cas introduire les coupures correspondantes τ_e et τ_ϕ. L'intégrande contient alors le facteur multiplicatif $(e^{-t/\tau_\phi} - e^{-t/\tau_e})$. Cette procédure de coupure a déjà été utilisée pour le calcul de la correction de localisation faible à la conductivité (7.54).

La relation (14.35) dépend de la géométrie à travers l'expression de $Z(t)$. Dans l'exemple de la diffusion dans un plan, la probabilité de retour est donnée par (6.41). Dans la limite $BDt \ll \phi_0$, elle se développe sous la forme [7] :

$$\begin{aligned} Z(t,B) &= \frac{BS/\phi_0}{\sinh 4\pi BDt/\phi_0} \\ &= S\left(\frac{1}{4\pi Dt} - \frac{2\pi}{3} Dt \frac{B^2}{\phi_0^2} + \frac{56\pi^3}{45} D^3 t^3 \frac{B^4}{\phi_0^4} + \cdots\right) \quad . \end{aligned} \tag{14.36}$$

L'intégrale (14.35) est donc proportionnelle à B^4 et l'intégrale restante est

$$\overline{\delta\mathcal{M}^2} \propto \int_0^\infty e^{-t/\tau_\phi} dt = \tau_\phi \tag{14.37}$$

de sorte que

$$\overline{\delta\mathcal{M}^2} = \frac{112\pi}{15} \hbar^2 D^3 \tau_\phi \frac{B^2}{\phi_0^4} S \quad . \tag{14.38}$$

On en déduit la fluctuation relative de susceptibilité [333, 334]

$$\frac{(\delta\chi^2)^{1/2}}{|\chi_L|} = \sqrt{\frac{84}{5\pi}} \frac{L_\phi}{\sqrt{S}}\, k_F l_e \qquad (d=2) \quad . \tag{14.39}$$

---

[6] En fait, à cause de sa borne inférieure finie, $\int_{-\epsilon_F}^{0} \epsilon\, e^{i\epsilon t} d\epsilon$ contient une contribution qui oscille avec l'énergie de Fermi ϵ_F. On peut vérifier que cette contribution est négligeable lorsque l'énergie de Fermi est grande devant l'énergie de Thouless, $\epsilon_F \gg E_c$. Par ailleurs, les niveaux de bas de bande ne donnent pas de contribution au courant permanent [332]. Ceci justifie la formule $\int_{-\infty}^{0} \epsilon\, e^{i\epsilon t} d\epsilon = 1/t^2$.

[7] L'expression (6.41) pour $Z(t,B)$ a été obtenue dans l'approximation eikonale (section 6.3), c'est-à-dire pour des champs faibles tels que $\omega_c \tau_e \ll 1$.

Contrairement à l'aimantation moyenne, l'amplitude des fluctuations d'aimantation dépend de la longueur de cohérence de phase. Ces fluctuations, obtenues pour un système macroscopique de taille $L > L_\phi$, peuvent s'interpréter comme résultant de la superposition de $N = (L/L_\phi)^d$ sous-systèmes incohérents entre eux. La fluctuation relative d'aimantation varie donc comme $1/\sqrt{N} \propto (L_\phi/L)^{d/2}$. Dans chaque sous-système de taille L_ϕ où la cohérence de phase est complète, les fluctuations sont beaucoup plus grandes que la valeur moyenne, dans un rapport $k_F l_e \gg 1$.

À température finie, l'expression (14.31) devient :

$$\overline{\delta\mathcal{M}^2} = \frac{\hbar^2}{\beta^2\Delta^2}\partial_B\partial_{B'}\iint \ln(1+e^{-\beta\epsilon})\ln(1+e^{-\beta\epsilon'})K(\epsilon-\epsilon',B,B')d\epsilon d\epsilon' \quad . \tag{14.40}$$

De la relation (10.51) entre le facteur de forme et la probabilité de retour à l'origine et de (15.101), on déduit

$$\boxed{\overline{\delta\mathcal{M}^2} = \frac{\hbar^2}{2\pi^2}\int_0^\infty \frac{Z_c''(t,B)-Z_d''(t,0)}{t^3}\left(\frac{\pi T t}{\sinh \pi T t}\right)^2 dt} \tag{14.41}$$

La température introduit donc une coupure aux temps longs qui, même dans la limite $L_\phi \to \infty$, limite les fluctuations d'aimantation. Ainsi

$$\overline{\delta\mathcal{M}^2} \propto \int_0^\infty \left(\frac{\pi T t}{\sinh \pi T t}\right)^2 dt = \frac{\pi}{6T} \tag{14.42}$$

et on obtient [335] :

$$\frac{(\delta\chi^2)^{1/2}}{|\chi_L|} = \sqrt{\frac{14}{5}}\frac{L_T}{\sqrt{S}}\,k_F l_e \qquad (d=2) \quad ,$$

où L_T est la longueur thermique définie par $L_T^2 = \hbar D/T$.

Exercice 14.2 : Fluctuations d'aimantation à trois dimensions

Dans ce cas, la probabilité de retour $Z(t)$ est multipliée par le facteur $1/\sqrt{4\pi D t}$ qui décrit la diffusion dans la direction du champ magnétique. Montrer que

$$\frac{(\delta\chi^2)^{1/2}}{|\chi_L|} = \sqrt{\frac{21\pi}{5}}\frac{l_e}{L_\phi}\left(\frac{L_\phi}{L}\right)^{3/2} \qquad \text{si } L_\phi \ll L_T \tag{14.43}$$

$$\frac{(\delta\chi^2)^{1/2}}{|\chi_L|} = \sqrt{\frac{42I}{5}}\frac{l_e}{L_T}\left(\frac{L_T}{L}\right)^{3/2} \qquad \text{si } L_T \ll L_\phi \tag{14.44}$$

où, en utilisant (15.78), on obtient le coefficient $I = 3/4\sqrt{\pi/2}\zeta(3/2) \simeq 2{,}456$. Ce calcul a été effectué par une autre méthode dans la référence [335].

14.3 Effet des interactions

On a considéré jusqu'à présent la réponse magnétique d'un gaz d'électrons sans interaction. La prise en compte de l'interaction entre électrons conduit à une contribution supplémentaire à l'aimantation moyenne qui peut être importante et qui est liée à la cohérence de phase.

14.3.1 Approximation de Hartree-Fock

On se place dans l'approximation de Hartree-Fock (section 13.3) [336]. Considérons d'abord le cas $T = 0$ K où la contribution $\delta\overline{E}_T$ des interactions à l'énergie moyenne totale s'écrit, d'après la relation (13.24), en fonction de la densité locale : $n(\boldsymbol{r}) = 2\sum_j^{occ} |\phi_j(\boldsymbol{r})|^2 = 2\int_{-\epsilon_F}^0 \rho_\epsilon(\boldsymbol{r})d\epsilon$:

$$\delta\overline{E}_T = \frac{1}{2}\int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\overline{\delta n(\boldsymbol{r})\delta n(\boldsymbol{r}')}d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' - \int U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')\overline{\sum_{i,j}^{occ}\phi_j^*(\boldsymbol{r}')\phi_j(\boldsymbol{r})\phi_i^*(\boldsymbol{r})\phi_i(\boldsymbol{r}')}d\boldsymbol{r}d\boldsymbol{r}' \quad . \tag{14.45}$$

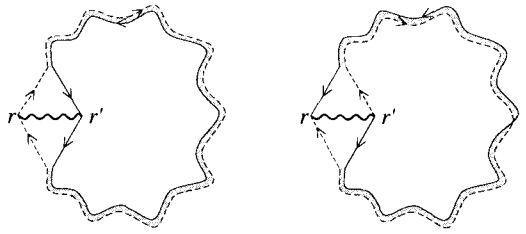
Les sommes $\sum^{occ}$ portent sur les états occupés. Cette expression fait apparaître des produits de fonctions d'ondes qui ont été étudiées dans le complément C4.5. On ne garde ici que la contribution du cooperon qui seule dépend du champ magnétique. D'après la relation (4.208), on obtient

$$\overline{\delta n(\boldsymbol{r})\delta n(\boldsymbol{r}')} = \frac{4}{\pi}\rho_0\int_{-\epsilon_F}^0\int_{-\epsilon_F}^0 g^2(\boldsymbol{R})P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\epsilon_1-\epsilon_2)d\epsilon_1 d\epsilon_2 \tag{14.46}$$

où $\boldsymbol{R} = \boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'$ et où le facteur 4 tient compte de la dégénérescence de spin. Le deuxième terme de (4.208) est à longue portée. Une fois multiplié par l'interaction (13.3) à courte portée $U(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r}')$, il devient négligeable après intégration. Le terme d'échange s'écrit en fonction de $\overline{\mathrm{Im}G_{\epsilon_1}(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')\mathrm{Im}G_{\epsilon_2}(\boldsymbol{r}',\boldsymbol{r})}$ et, à l'aide de (4.204), on obtient

$$\overline{\sum_{i,j}^{occ}\phi_j^*(\boldsymbol{r}')\phi_j(\boldsymbol{r})\phi_i^*(\boldsymbol{r})\phi_i(\boldsymbol{r}')} = \frac{2}{\pi}\rho_0\int_{-\epsilon_F}^0\int_{-\epsilon_F}^0 g^2(\boldsymbol{R})P_c(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r},\epsilon_1-\epsilon_2)d\epsilon_1 d\epsilon_2 \quad . \tag{14.47}$$

Seules les fonctions d'onde de spin identiques contribuent au terme d'échange, ce qui conduit au facteur 2. En insérant (14.46) et (14.47) dans la relation (14.45), l'intégration spatiale fait apparaître le facteur F défini par (13.34) qui décrit l'amplitude de l'interaction électronique. On note que les contributions du cooperon aux termes de Hartree et de Fock sont identiques à un facteur 2 près, dû à la dégénerescence de spin. Elles sont toutes les deux proportionnelles à F. Rappelons que ça n'était pas le cas pour la correction de Hartree-Fock à l'origine de l'anomalie de densité d'états (section 13.4.1),



Hartree *Fock (échange)*

FIG. 14.1 – *Contributions de Hartree-Fock à l'aimantation.*

pour laquelle seul le terme de Hartree était proportionnel à F (comparer les figs. 13.4 et 14.1). Finalement, la contribution notée $\mathcal{M}_{ee} = -\frac{\partial \delta \overline{E}_T}{\partial B}$ de l'interaction coulombienne à l'aimantation moyenne s'écrit, en utilisant (13.5) :

$$\mathcal{M}_{ee} = -\frac{F\hbar}{2\pi}\partial_B \int_{-\epsilon_F}^{0}\int_{-\epsilon_F}^{0} \mathrm{Re}Z_c(\epsilon_1 - \epsilon_2, B)d\epsilon_1 d\epsilon_2 \tag{14.48}$$

ou encore

$$\mathcal{M}_{ee} = -\frac{F\hbar}{2\pi}\partial_B \int_0^{\infty} \omega \mathrm{Re}Z_c(\omega, B)d\omega \quad . \tag{14.49}$$

Enfin une transformée de Fourier et l'utilisation de la relation [6] $\int_{-\infty}^{0} e^{-i\epsilon t}d\epsilon = 1/t$ conduit à [8] :

$$\boxed{\mathcal{M}_{ee} = -\frac{F\hbar}{2\pi}\int_0^{\infty} \frac{Z_c'(t,B)}{t^2}dt} \tag{14.50}$$

Considérons à titre d'exemple l'aimantation du plan infini. Le développement (14.36) montre que le terme linéaire en champ dans $Z'(t,B)$ varie linéairement avec le temps t. L'intégrale diverge donc logarithmiquement et doit être coupée aux temps courts par τ_e et aux temps longs par τ_ϕ :

$$\mathcal{M}_{ee} = -\frac{F\hbar}{2\pi}\int Z_c'(t,B)\frac{dt}{t^2}(e^{-t/\tau_\phi} - e^{-t/\tau_e}) \quad . \tag{14.51}$$

En champ faible, on obtient [9] :

$$\mathcal{M}_{ee} = \frac{2F}{3}\frac{\hbar DS}{\phi_0^2}B\ln\frac{\tau_\phi}{\tau_e} \quad . \tag{14.52}$$

[8] Dans la littérature, on trouve également la notation $\lambda_0 = FU\rho_0 = F/2$.

[9] On peut aussi obtenir le résultat (14.52) à partir de (14.49) et (15.31) en limitant l'intégration entre $1/\tau_\phi$ et $1/\tau_e$.

L'interaction coulombienne contribue donc à la réponse magnétique moyenne du gaz d'électrons. Cette réponse, proportionnelle à $k_F l_e$, est grande devant la susceptibilité de Landau χ_L (14.20) et elle dépend logarithmiquement du temps de cohérence de phase τ_ϕ :

$$\chi_{ee} = \chi_L \frac{F}{\pi} k_F l_e \ln \frac{\tau_\phi}{\tau_e} \quad . \tag{14.53}$$

14.3.2 Renormalisation de Cooper

Le calcul qui conduit aux expressions (14.48–14.53) est incomplet. C'est un calcul perturbatif où l'interaction a été traitée à l'ordre le plus bas. Pour aller au-delà, on peut montrer qu'il est nécessaire de sommer une série de perturbation à tous les ordres en interaction [337,338]. Cette sommation conduit à un résultat similaire à (14.49) mais où l'interaction a été renormalisée :

$$\overline{\mathcal{M}_{ee}} = -\frac{\hbar}{\pi} \partial_B \int_0^\infty \omega \mathrm{Re}\lambda(\omega) Z_c(\omega, B) d\omega \quad . \tag{14.54}$$

L'interaction effective $\lambda(\omega)$ dépend de l'échelle d'énergie $\hbar\omega$ [10] :

$$\lambda(\omega) = \frac{\lambda_0}{1 + \lambda_0 \Pi_c(\omega)} \tag{14.55}$$

où $\lambda_0 = F/2$ et $\Pi_c(\omega) = \ln \omega_{\max}/\omega$. La structure de cette interaction effective résulte de la sommation d'une série géométrique qui décrit les ordres successifs du développement de perturbation. Cette structure est analogue à la sommation de diagrammes qui décrit l'instabilité supraconductrice d'un métal. Pour cette raison, cette renormalisation de l'interaction est appelée « renormalisation dans le canal de Cooper » ou « renormalisation de Cooper ». La forme (14.55) est générale et ne dépend pas de la nature de l'interaction nue λ_0. En revanche, l'énergie caractéristique $\hbar\omega_{\max}$ dépend de la nature de l'interaction. Dans le cas de l'interaction coulombienne, le paramètre $\lambda_0 = F/2$ est positif et l'énergie caractéristique $\hbar\omega_{\max}$ est l'énergie de Fermi ϵ_F. En introduisant la température $T_0 = \epsilon_F e^{1/\lambda_0}$, on récrit l'interaction effective sous la forme

$$\lambda(\omega) = \frac{1}{\ln T_0/\hbar\omega} \quad . \tag{14.56}$$

Revenons maintenant au cas de l'aimantation d'un plan infini. En remplaçant l'interaction $\lambda_0 = F/2$ par l'interaction effective $1/\ln(T_0/\omega)$, la susceptibilité, calculée à partir de (14.54), devient [11] :

$$\mathcal{M}_{ee} = \frac{4}{3} \frac{\hbar D S}{\phi_0^2} \int_{1/\tau_\phi}^{1/\tau_e} \frac{d\omega}{\omega \log T_0/\omega} \quad . \tag{14.57}$$

[10] L'expression (14.54) est approchée. L'interaction renormalisée dépend aussi des modes propres E_n de l'équation de diffusion. On n'entre pas ici dans les détails du calcul. On pourra consulter pour cela la référence [339].

[11] Voir note 9.

L'intégrale (15.57) donne :

$$\chi_{ee} = \frac{4\hbar D}{3\phi_0^2} S \ln \frac{\ln T_0\tau_\phi/\hbar}{\ln T_0\tau_e/\hbar} = \frac{2}{\pi}\chi_L \; k_F l_e \; \ln \frac{\ln T_0\tau_\phi/\hbar}{\ln T_0\tau_e/\hbar} \tag{14.58}$$

au lieu de (14.53). Cette contribution à la susceptibilité est très supérieure à la susceptibilité de Landau, dans un rapport $k_F l_e$ [337].

14.3.3 Température finie

Afin d'évaluer le rôle de la température, on se limite ici au calcul au premier ordre en interaction. À température finie, l'expression (14.48) du moment magnétique devient

$$\mathcal{M}_{ee} = -\frac{F\hbar}{2\pi}\partial_B \int_{-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{Re} Z_c(\epsilon_1 - \epsilon_2, B) f(\epsilon_1) f(\epsilon_2) d\epsilon_1 d\epsilon_2 \tag{14.59}$$

où $f(\epsilon)$ est le facteur de Fermi. Après une transformation de Fourier, on obtient (voir 15.100) :

$$\boxed{\mathcal{M}_{ee} = -\frac{F\hbar}{2\pi}\int_0^{\infty} Z_c'(t,B)\frac{\pi^2 T^2}{\sinh^2 \pi T t} dt} \tag{14.60}$$

Pour le plan infini, dans la limite $L_\phi \to \infty$, l'intégrale est coupée aux grands temps par la température. En gardant la coupure τ_e aux petits temps, on a (voir 15.79) :

$$\mathcal{M}_{ee} = \frac{2F}{3}\frac{\hbar D S}{\phi_0^2} B \ln \frac{\hbar e^\gamma}{2\pi T \tau_e} \tag{14.61}$$

où $\gamma \simeq 0{,}577$ est la constante d'Euler. On retrouve un résultat analogue à (14.52), où il suffit de remplacer $\hbar/\tau_\phi$ par la température T. En tenant compte de la renormalisation de l'interaction, on obtiendrait pour la susceptibilité χ_{ee} un résultat analogue à (14.58), en remplaçant $\hbar/\tau_\phi$ par T [337].

Exercice 14.3 : Montrer que l'expression (14.59) du moment magnétique moyen $\mathcal{M}_{ee}$ peut se mettre sous la forme [340, 341]

$$\mathcal{M}_{ee} = -\frac{F\hbar}{2\pi}\partial_B \int_0^{\infty} \omega \coth \frac{\beta\omega}{2} Z_c(\omega) d\omega \quad . \tag{14.62}$$

Utiliser pour cela la relation (15.100).

14.4 Courant permanent dans un anneau

Au lieu de considérer une géométrie simplement connexe comme le plan, on s'intéresse maintenant au cas d'un anneau traversé par un flux magnétique ϕ. Ce flux peut être engendré par une ligne de flux Aharonov-Bohm ou par un champ magnétique constant. On suppose que l'anneau est suffisamment fin pour que le champ n'y pénètre pas. Nous avons déjà rencontré cette géométrie de l'anneau à plusieurs reprises. Tout d'abord dans la section 1.2, où nous avons vu que la conductance non moyennée d'un anneau connecté à des réservoirs est une fonction périodique du flux Aharonov-Bohm de période égale au quantum de flux ϕ_0. Puis dans la section 7.6.1, nous avons montré que la conductance moyenne a des oscillations de période $\phi_0/2$ qui résultent des effets de localisation faible.

Dans cette section, on considère d'abord le cas d'un anneau unidimensionnel sans désordre. Ensuite, on étudiera le cas d'un anneau quasi-unidimensionnel, c'est-à-dire permettant un mouvement transverse dans l'anneau.

L'existence d'un courant permanent à l'équilibre thermodynamique dans un anneau métallique a été proposée par Hund [342] dans les années 1930, puis il a été calculé par Bloch et par Kulik dans le cas d'un anneau unidimensionnel sans désordre [343, 344]. Mais c'est la proposition en 1983 par Büttiker, Imry et Landauer qu'un tel courant puisse exister même en présence de désordre qui a largement motivé les recherches sur ce problème [345]. La difficulté expérimentale provient de l'amplitude très faible du courant et du moment magnétique induit. Dans l'état actuel de nos connaissances, les résultats obtenus ne sont pas bien décrits quantitativement par la théorie que nous proposons ici, basée sur l'approximation de Hartree-Fock pour des électrons dans le régime diffusif. Ceci a motivé un grand nombre de travaux théoriques sur ce sujet basés sur des prémices différents. On a choisi de développer l'approche de Hartree-Fock qui est actuellement la seule approche quantitative.

Le courant permanent, défini par la relation (14.3), est donné en l'absence d'interaction par l'expression

$$I = 2\frac{\partial}{\partial\phi}\int_0^\infty \mathcal{N}(\epsilon,\phi)\left(-\frac{\partial f}{\partial\epsilon}\right)d\epsilon \tag{14.63}$$

et à température nulle

$$I = 2\frac{\partial\mathcal{N}(\epsilon_F,\phi)}{\partial\phi} \quad . \tag{14.64}$$

14.4.1 Anneau unidimensionnel sans désordre : périodicité et effet de parité

Le cas de l'anneau strictement unidimensionnel est assez académique, mais il va nous permettre de préciser certaines caractéristiques du courant permanent, en particulier sa périodicité avec le flux magnétique et d'aborder le

problème de la moyenne sur un ensemble d'anneaux. On ne prend pas en compte le spin de l'électron qui, comme dans le cas de l'aimantation de Landau, n'induit qu'un facteur de dégénérescence 2.

Considérons un anneau unidimensionnel sans désordre, de périmètre L (fig. 14.2). Dans la jauge symétrique, le potentiel vecteur $\boldsymbol{A}$ n'a qu'une composante azimuthale constante et égale à $\boldsymbol{A} = \boldsymbol{e}_\theta \phi / L$. L'équation de Schrödinger correspondante s'écrit

$$-\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{\partial}{\partial x} + 2i\pi\frac{\varphi}{L})^2\phi_n(x) = E_n\phi_n(x) \tag{14.65}$$

avec la condition de continuité de la fonction d'onde sur l'anneau

$$\phi_n(x+L) = \phi_n(x) \tag{14.66}$$

ϕ est le flux à travers l'anneau et $\varphi = \phi/\phi_0$ est le flux réduit en unité de $\phi_0 = h/e$.

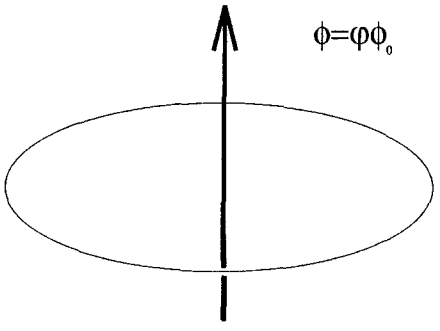


FIG. 14.2 – *Anneau unidimensionnel traversé par un flux Aharonov-Bohm $\phi = \varphi\phi_0$.*

Remarque : Flux Aharonov-Bohm et conditions aux limites

En effectuant une transformation de jauge, la fonction d'onde définie par

$$\phi'_n(x) = \phi_n(x)e^{-i\frac{e}{\hbar}\int_0^x A dl} \tag{14.67}$$

s'écrit, pour le cas d'un flux Aharonov-Bohm

$$\phi'_n(x) = \phi_n(x)e^{-2i\pi\varphi\frac{x}{L}} \quad . \tag{14.68}$$

Elle obéit à une équation de Schrödinger d'où le flux a été éliminé

$$-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{d^2}{dx^2}\phi'_n(x) = \epsilon_n\phi'_n(x) \tag{14.69}$$

mais où la dépendance en flux est maintenant contenue dans la condition aux limites

$$\phi'_n(x+L) = \phi'_n(x)e^{-2i\pi\varphi} \quad . \tag{14.70}$$

Avec ce changement de jauge, on a éliminé le potentiel vecteur de l'hamiltonien. Mais la fonction d'onde qui en résulte obéit à une nouvelle condition aux limites qui dépend du flux. On voit ainsi qu'un flux Aharonov-Bohm est équivalent à un changement de condition aux limites.

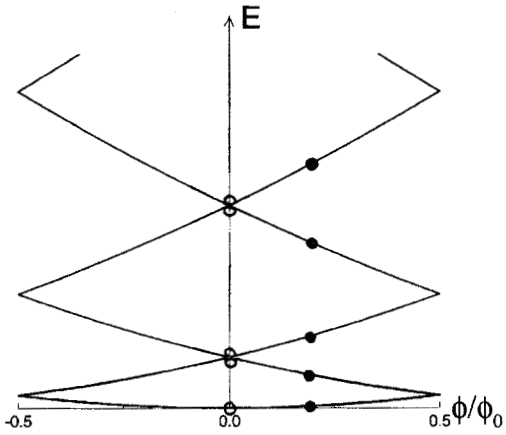


FIG. 14.3 – *Spectre d'un anneau unidimensionnel sans désordre dans une représentation de zone réduite.*

Les niveaux d'énergie, représentés sur la figure 14.3, sont donnés par [12] :

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{2\pi}{L}\right)^2 (n-\varphi)^2 \tag{14.71}$$

où n est un entier relatif. La densité d'états

$$\nu(\epsilon,\phi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta\left(\epsilon - \epsilon_n\right) \tag{14.72}$$

peut, par une transformation de Poisson (15.96) se mettre sous la forme

$$\nu(\epsilon,\phi) = \frac{L}{2\pi}\sum_{p=-\infty}^{\infty}\int_{-\infty}^{\infty} \delta\left(\epsilon - \epsilon(k)\right) e^{ipkL} dk \ \cos 2\pi p\varphi \tag{14.73}$$

où $\epsilon(k) = \hbar^2 k^2/2m$. La densité d'états intégrée :

$$N(\epsilon,\phi) = \int_0^{\epsilon} \nu(\epsilon',\phi) d\epsilon' \tag{14.74}$$

a donc la décomposition de Fourier :

$$N(\epsilon,\phi) = N_0(\epsilon) + \frac{2}{\pi}\sum_{p=1}^{\infty}\frac{\sin pk(\epsilon)L}{p} \ \cos 2\pi p\varphi \tag{14.75}$$

[12] C'est aussi le spectre de l'équation de diffusion pour le cooperon dans un anneau désordonné (section 6.4.1). Mais pour le cooperon, φ est remplacé par 2φ.

où $k(\epsilon) = \frac{1}{\hbar}\sqrt{2m\epsilon}$ et où $N_0(\epsilon) = k(\epsilon)L/\pi$ est la densité d'états moyenne intégrée. La densité d'états intégrée deux fois et prise au niveau de Fermi s'écrit

$$\mathcal{N}(\epsilon_F, \phi) = \int_0^{\epsilon_F} N(\epsilon, \phi) d\epsilon = \int_0^{k_F} N(\epsilon, \phi) \frac{\partial \epsilon}{\partial k} dk \tag{14.76}$$

c'est-à-dire,

$$\mathcal{N}(\epsilon_F, \phi) = \mathcal{N}_0(\epsilon_F) - \frac{2\hbar v_F}{\pi L} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p^2} \left(\cos pk_F L - \frac{\sin pk_F L}{pk_F L} \right) \cos 2\pi p\varphi \tag{14.77}$$

où $v_F = \hbar k_F/m$ est la vitesse de Fermi. On en déduit donc immédiatement le courant par la relation (14.64)

$$I(\phi) = \frac{2}{\pi} I_0 \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p} \left(\cos pk_F L - \frac{\sin pk_F L}{p} \right) \sin 2\pi p\varphi \tag{14.78}$$

où $I_0 = ev_F/L$ est le courant porté par un seul niveau au voisinage de ϵ_F. Si le nombre d'électrons est grand, c'est-à-dire si $k_F L \gg 1$, on obtient [346]

$$\boxed{I(\phi) = \frac{2}{\pi} I_0 \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\cos pk_F L}{p} \sin 2\pi p\varphi} \tag{14.79}$$

Cette expression est celle du courant permanent d'un anneau dont le potentiel chimique (et donc le vecteur d'onde k_F) est fixé et ne dépend pas du flux. En revanche, si c'est le nombre de particules N qui est fixé dans chaque anneau, le vecteur de Fermi est égal à $k_F = N\pi/L$ et le courant devient :

$$I(N, \phi) = \frac{2}{\pi} I_0 \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^{pN}}{p} \sin 2\pi p\varphi \quad . \tag{14.80}$$

Le courant dépend maintenant de façon cruciale de la parité du nombre N d'électrons dans l'anneau. Ceci est illustré sur la figure 14.4. En particulier l'ajout d'un électron change le signe du courant.

Exercice 14.4 : Montrer que, dans l'intervalle $[-\pi, \pi]$, le courant (14.80) peut se récrire :

$$I = I_0 (1 - 2\varphi) \qquad \varphi > 0$$
$$I = I_0 (-1 - 2\varphi) \qquad \varphi < 0$$

si N est pair et

$$I = -2I_0\varphi$$

si N est impair. Ces expressions peuvent s'obtenir directement en sommant les courants individuels $i_n(\phi)$ de tous les niveaux, avec

$$i_n(\phi) = -\frac{\partial \epsilon_n}{\partial \phi} = -\frac{1}{\phi_0} \frac{\partial \epsilon_n}{\partial \varphi} = -\frac{4\pi^2\hbar^2}{mL^2}(n - \varphi) \quad .$$

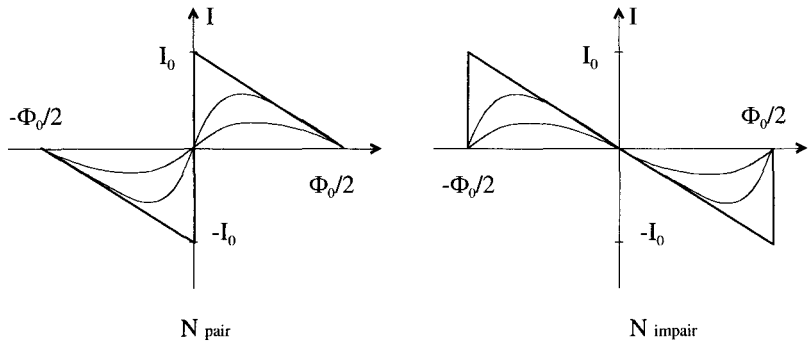


FIG. 14.4 – *Courant permanent d'un anneau unidimensionnel sans désordre. La variation $I(\phi)$ présente une discontinuité qui disparaît à température finie. Noter que le signe du courant dépend de la parité du nombre d'électrons.*

Effet de la température

À température finie, l'amplitude des harmoniques du courant s'obtient, comme l'aimantation, à partir de la relation (14.63). En linéarisant la relation de dispersion autour du niveau de Fermi $\epsilon = \epsilon_F + \hbar v_F(k - k_F)$, on a

$$\int_{-\infty}^{\infty} \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right) \cos pkL d\epsilon = \frac{\pi p L}{\beta \hbar v_F} \frac{1}{\sinh \frac{\pi p L}{\beta \hbar v_F}} \cos pk_F L \quad . \tag{14.81}$$

Chaque harmonique du courant $I(\phi)$ est multipliée par la fonction

$$R(T/T_p) = \frac{T/T_p}{\sinh T/T_p} \quad . \tag{14.82}$$

Les oscillations de courant sont donc amorties exponentiellement avec une température caractéristique $T_p = \frac{\Delta}{p\pi^2}$ de disparition de l'harmonique p. L'énergie $\Delta = \pi \hbar v_F / L$ est la distance moyenne entre niveaux. Noter que cette fonction est caractéristique des effets en température d'un gaz de Fermi (relations 13.35, 14.41 et 14.60). Le courant disparaît exponentiellement dès que la température devient de l'ordre de la distance entre niveaux.

Effet du désordre

Un temps de collision élastique fini conduit à un élargissement du niveau de Fermi, décrit par la fonction lorentzienne $g(\epsilon)$ (14.25)

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\cos pkL}{p} g(\epsilon - \epsilon_F) d\epsilon = e^{-pL/2l_e} \frac{\cos pk_F L}{p} \quad . \tag{14.83}$$

Cet élargissement du niveau de Fermi $\epsilon_F \to \epsilon_F + i\hbar/2\tau_e$ décrit dans la section 3.3 est équivalent à l'existence d'une partie imaginaire pour le vecteur

d'onde $k_F \to k_F + i/2l_e$. Pour une parité donnée du nombre d'électrons, le courant moyen est

$$\overline{I}(\phi) = \frac{2}{\pi} I_0 \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^{pN}}{p} e^{-pL/2l_e} \sin 2\pi p\varphi \quad . \tag{14.84}$$

Chacune de ses harmoniques décroît exponentiellement. Dans le cas impair, le comportement du courant moyen lorsque $\phi \to 0$ peut se récrire [347] :

$$\overline{I}(\phi) = -2\frac{I_0}{\phi_0}\phi \left(1 - \tanh \frac{L}{4l_e}\right) \quad . \tag{14.85}$$

Ainsi, dès que le libre parcours moyen élastique devient supérieur au périmètre L de l'anneau, le courant permanent moyen est exponentiellement faible.

Remarque

Il est instructif de comparer les structures du courant permanent (14.79) et des oscillations de Haas-van Alphen considérées dans la section 14.2.1. Dans les deux cas, à champ fixé, le potentiel thermodynamique oscille avec l'énergie de Fermi. Pour les oscillations de de Haas-van Alphen, la phase des oscillations est $2\pi p\epsilon_F/\hbar\omega_c$ alors que pour le courant permanent, elle est égale à $pk_F L = p\pi\epsilon_F/2\Delta$. On peut ainsi définir une énergie caractéristique ϵ^*, qui dans le premier cas est d'ordre $\hbar\omega_c$ et dans le second cas d'ordre Δ. Cette énergie caractéristique mesure la « rigidité » des oscillations, puisqu'une variation de potentiel chimique de l'ordre de ϵ^* change la phase de ces oscillations. On peut aussi caractériser cette rigidité par le nombre d'électrons $n^* = \epsilon^*/\Delta$ qu'il faudrait rajouter au système pour changer la phase des oscillations. On voit ainsi que les oscillations de Haas-van Alphen sont stables puisque $n^* \to \infty$ dans la limite thermodynamique alors que pour le courant permanent, l'ajout d'un seul électron ($n^* = 1$) modifie la phase des oscillations. Dans la limite $\omega\tau_e \gg 1$ et $k_B T < \hbar\omega_c$ les oscillations de Haas-van Alphen subsistent tandis que le courant permanent moyen disparaît dès que la température ou le taux de diffusion $\hbar/\tau_e$ sont de l'ordre de Δ.

14.4.2 Courant moyen

Considérons maintenant un ensemble d'anneaux isolés les uns des autres, et dont on mesure l'aimantation totale. En divisant cette aimantation par le nombre d'anneaux, on obtient le courant moyen circulant dans un anneau. La moyenne est réalisée sur le nombre d'électrons et sur la configuration de désordre qui tous deux diffèrent d'un anneau à l'autre. On a vu dans la section précédente que, à une dimension, le signe du courant est aléatoire et dépend de la parité du nombre d'électrons. Donc, *a priori*, le courant moyen semble s'annuler, de sorte qu'une expérience réalisée sur un grand nombre d'anneaux isolés devrait produire un moment magnétique total nul. En fait, comme le montre la figure 14.4, le courant est très anharmonique. En moyennant l'expression (14.80) sur N, c'est-à-dire sur un grand nombre d'anneaux avec des

nombres d'électrons variables, on obtient une valeur du courant moyen *finie qui oscille avec la période* $\phi_0/2$:

$$\overline{I}(\phi) = \frac{1}{\pi} I_0 \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p} e^{-pL/l_e} \sin 4\pi p\varphi \quad . \tag{14.86}$$

Ce courant reste toutefois exponentiellement petit dès que la circonférence L de l'anneau est plus grande que le libre parcours moyen l_e.

En fait, pour décrire une situation plus réaliste que le cas de l'anneau strictement unidimensionnel, il faut prendre en compte la dispersion électronique dans les directions transverses. Prenons l'exemple d'un cylindre de périmètre L, de hauteur L_z et d'épaisseur négligeable. L'équation de Schrödinger s'écrit :

$$\left(-\frac{\hbar^2}{2m} \left[\left(\frac{\partial}{\partial x} + 2i\pi\varphi \right)^2 + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right] + V(\boldsymbol{r}) \right) \phi_n(\boldsymbol{r}) = \epsilon_n \phi_n(\boldsymbol{r}) \quad . \tag{14.87}$$

La condition de continuité de la fonction d'onde autour du cylindre et la condition d'annulation de la fonction d'onde sur les bords quantifient les niveaux d'énergie :

$$\epsilon_n = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{L} \right)^2 (n + \varphi)^2 + \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m} \tag{14.88}$$

où le vecteur d'onde transverse est $k_z = n_z \pi / L_z$ avec $n_z \in \mathbb{N}^*$. Le nombre M de canaux transverses [13] est égal à $M = k_F W/\pi$. Puisque l'énergie est la somme de contributions longitudinales et transverses, on obtient simplement le courant total à partir de (14.79) comme la somme de contributions indépendantes dues aux différents canaux transverses [348]

$$I(\phi) = \frac{2}{\pi} I_0 \sum_{m=1}^{M} \sum_{p=1}^{\infty} \frac{k_x}{k_F} \frac{\cos p k_x L}{p} \sin 2\pi p\varphi \tag{14.89}$$

avec $k_x^2 = k_F^2 - k_z^2$. Dans le cas d'un anneau quasi-unidimensionnel où $L_z \ll L$, le cosinus varie rapidement avec k_z et le courant moyen est nul. Afin d'estimer le courant typique, on suppose que les arguments du cosinus correspondant à différentes valeurs de k_z sont totalement décorrélés et on montre alors simplement [348] que le courant typique varie comme $\sqrt{M}$.

La situation décrite ici est en fait peu physique car elle ne prend pas en compte l'effet du désordre qui est de lever la dégénérescence des niveaux d'énergie (figs. 14.5 et 14.6).

[13] Les canaux transverses sont introduits dans la section C7.2.1 (relations 7.142 et 7.147).

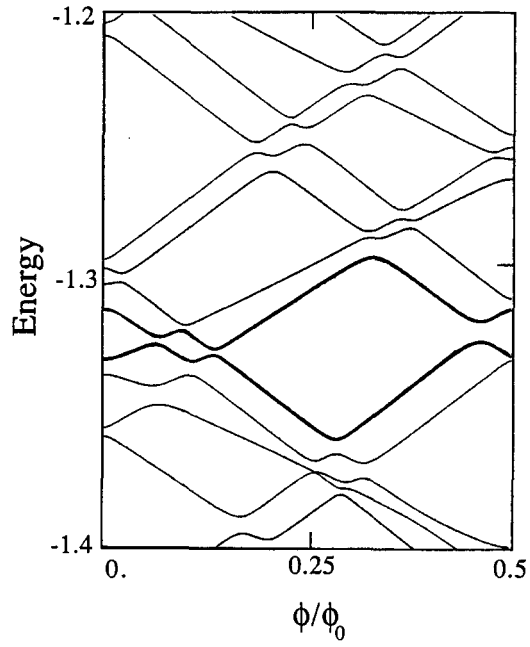


FIG. 14.5 – *Spectre d'un anneau quasi-unidimensionnel multicanal traversé par un flux Aharonov-Bohm ϕ. Un très faible désordre suffit à lever les dégénerescences. Ce spectre est calculé pour le modèle d'Anderson pour un échantillon de taille $L_x = 50\,a$, $L_z = 10\,a$ refermé le long de la direction x et traversé par le flux, $W = 0{,}2\,t$. a est le pas du réseau [349].*

14.5 Diffusion et courant permanent

Le courant permanent dépend par définition de la densité d'états. Celle-ci s'exprime à l'aide d'une seule fonction de Green. En moyenne et pour un désordre faible, la fonction de Green moyenne est donnée par (3.89) et donc le courant moyen est exponentiellement petit dès que $L > l_e$. On va d'abord estimer la variance de la distribution de courant permanent. On montrera ensuite que, du fait de l'interaction entre électrons, il apparaît une contribution non nulle au courant moyen.

On considère un ensemble d'anneaux quasi-unidimensionnels, c'est-à-dire de section finie. On suppose que le mouvement des électrons est tridimensionnel et on résout l'équation de Schrödinger correspondante. En rechance, du fait de la géométrie très anisotrope, les quantités moyennes à l'approximation de diffusion sont obtenues à partir des solutions de l'équation de diffusion unidimensionnelle (section 5.5.4). On prend en compte la dégénérescence de spin.

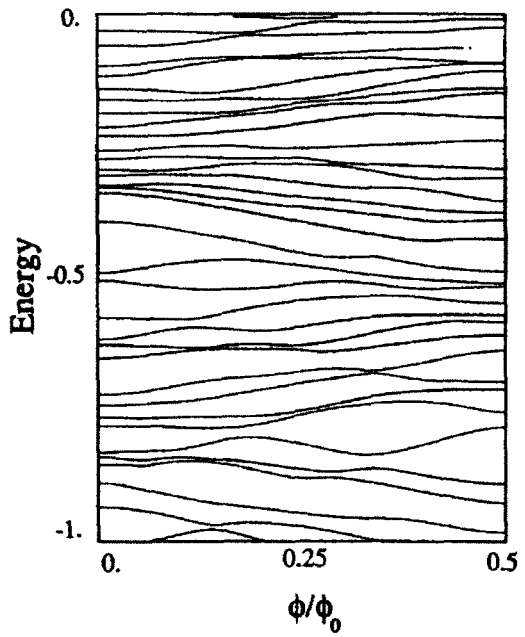


FIG. 14.6 – *Spectre d'un anneau quasi-unidimensionnel multicanal traversé par un flux Aharonov-Bohm $\phi = \varphi\phi_0$, dans le régime diffusif. Ce spectre est calculé pour le modèle d'Anderson pour un échantillon de taille $L_x = 20\,a$, $L_z = 10\,a$ refermé le long de la direction x et traversé par le flux, $W = t$. a est le pas du réseau [349].*

14.5.1 Courant typique d'un anneau désordonné

Le calcul de la variance $\overline{\delta I^2}$ de la distribution de courant permanent, définie par $\overline{\delta I^2} = \overline{I^2} - \overline{I}^2$, est calqué sur celui de la section 14.2.3 pour le moment magnétique $\overline{\delta \mathcal{M}^2}$. Il suffit de remplacer le moment magnétique $\mathcal{M}$ par le courant I et le champ magnétique par le flux ϕ. Dans la littérature, la quantité $\overline{\delta I^2}^{1/2}$ est souvent appelée *courant typique* et elle est notée I_{typ}. On déduit de (14.35) l'expression

$$\boxed{I_{typ}^2 = \frac{\hbar^2}{2\pi^2}\int_0^\infty \frac{Z_c''(t,\phi) - Z_d''(t,0)}{t^3}dt} \tag{14.90}$$

où $Z_c'' = \partial^2 Z/\partial\phi^2$. Du développement en nombres d'enroulement (6.54) de la probabilité de retour à l'origine

$$Z_c(t,\phi) = \frac{1}{\sqrt{4\pi E_c t}}\sum_{p=-\infty}^{\infty} e^{-p^2L^2/4Dt}\cos 4\pi p\varphi \quad , \tag{14.91}$$

on déduit le développement de Fourier du courant typique

$$I_{typ}^2 = \sum_{p=1}^{\infty} I_p^2 \sin^2(2\pi p\varphi) \quad , \tag{14.92}$$

avec

$$I_p^2 = \frac{32p^2}{\phi_0^2} \int_0^{\infty} \frac{e^{-p^2/4E_c t}}{\sqrt{4\pi E_c}\, t^{7/2}} dt \quad . \tag{14.93}$$

L'intégrale (15.62) permet d'obtenir l'amplitude des harmoniques du courant typique :

$$I_p^2 = \frac{384}{p^3} \left(\frac{E_c}{\phi_0}\right)^2 \quad . \tag{14.94}$$

Il est important de noter que, contrairement au cas de l'aimantation typique (14.35), l'intégrale converge aux temps courts. Ceci découle du fait que le poids des boucles faisant au moins un tour autour de l'anneau est exponentiellement faible aux temps courts.

En présence de déphasage, il apparaît dans $Z(t)$ un terme multiplicatif supplémentaire e^{-t/τ_ϕ} lié au temps de cohérence de phase fini τ_ϕ. Les harmoniques du courant sont donc aussi réduites par un facteur e^{-pL/L_ϕ}. Plus précisément, en utilisant la relation (15.60), les harmoniques (14.93) sont maintenant de la forme

$$I_p^2 = \frac{384}{p^3} \left(\frac{E_c}{\phi_0}\right)^2 \left[1 + p\frac{L}{L_\phi} + \frac{p^2}{3}\left(\frac{L}{L_\phi}\right)^2\right] e^{-pL/L_\phi} \quad . \tag{14.95}$$

Dans la limite $L \ll L_\phi$, le premier terme est le plus grand. Le courant typique est donc

$$\boxed{I_{typ} = 8\sqrt{6}\frac{E_c}{\phi_0} \sin 2\pi\varphi} \tag{14.96}$$

Ce courant peut s'interpréter comme celui associé à un seul électron qui effectuerait par diffusion un tour de l'anneau en un temps τ_D [350] (voir fig. 14.7). En effet, de la relation (5.35), $E_c = \hbar/\tau_D$, on déduit

$$I_{typ} \simeq \frac{e}{\tau_D} \quad . \tag{14.97}$$

Cette valeur est à comparer à celle, $I_0 = ev_F/L$, obtenue dans (14.78) et donnant l'amplitude caractéristique du courant en l'absence de désordre. Plus précisément, on a $I_{typ}/I_0 \simeq l_e/L$.

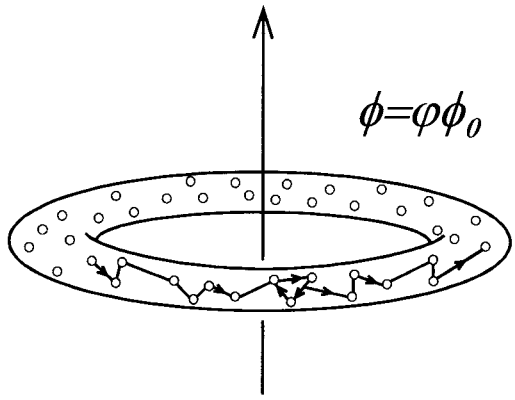


FIG. 14.7 – *Anneau désordonné traversé par un flux Aharonov-Bohm. Un éléctron diffuse autour de l'anneau en un temps τ_D.*

Exercice 14.5 : Courant typique à température finie

À température finie, l'intégrande de (14.90) est multiplié par le facteur thermique $(\pi Tt/\sinh \pi Tt)^2$, tout comme l'aimantation dans la relation (14.41). En déduire la dépendance en température des harmoniques du courant typique :

$$I_p^2(T) = I_p^2(0) f^2(T) \tag{14.98}$$

avec

$$f^2(T) = \frac{4}{3\sqrt{\pi}} \int_0^\infty e^{-1/x} R^2 \left(\frac{\pi T p^2 x}{4E_c} \right) \frac{dx}{x^{7/2}} \tag{14.99}$$

et $R(x) = x/\sinh x$.

Exercice 14.6 : Courant typique dans un cylindre

Soit un cylindre de périmètre L et de hauteur L_z traversé par un flux magnétique parallèle à son axe. Dans la limite $L_\phi \to \infty$, montrer que, pour $L_z \gg pL$, les harmoniques du courant sont données par :

$$I_p^2 = \frac{1024}{\pi p^3} \left(\frac{E_c}{\phi_0} \right)^2 \frac{L_z}{pL} \quad .$$

En comparant avec le courant de l'anneau (14.95), on voit que ce courant correspond, pour l'harmonique p, à l'addition incohérente de L_z/pL anneaux.
Montrer que pour L_ϕ fini, le courant devient :

$$I_p^2 = \frac{128}{\pi p^3} \left(\frac{E_c}{\phi_0} \right)^2 \frac{p^2 L^2 L_z}{L_\phi^3} K_3 \left(p \frac{L}{L_\phi} \right)$$

où K_3 est une fonction de Bessel modifiée [351].

14.5.2 Effet des interactions sur le courant moyen

En l'absence d'interaction électron-électron, le courant moyen est nul (section 14.4.2). Que devient-il en présence de l'interaction coulombienne ? Nous avons vu que, à l'approximation de Hartree-Fock, il existe une contribution supplémentaire à l'aimantation moyenne donnée par (14.50). Pour la géométrie de l'anneau, cela correspond à un courant moyen fini :

$$\boxed{I_{ee} = -\frac{F\hbar}{2\pi}\int_0^\infty \frac{Z_c'(t,\phi)}{t^2}dt} \tag{14.100}$$

Compte tenu de l'expression (14.91) de $Z(t,\phi)$, le développement en harmoniques de ce courant est

$$I_{ee}(\phi) = \sum_{p=1}^{\infty} I_{ee,p}\sin(4\pi p\varphi) \quad , \tag{14.101}$$

avec

$$I_{ee,p} = 2p\frac{F}{\phi_0}\int_0^\infty \frac{e^{-p^2/4E_c t - t/\tau_\phi}}{\sqrt{4\pi E_c}\, t^{5/2}}dt \quad . \tag{14.102}$$

En utilisant (15.60), on obtient

$$I_{ee,p} = 8\frac{F}{\phi_0}\frac{E_c}{p^2}\left(1 + p\frac{L}{L_\phi}\right)e^{-pL/L\phi} \quad . \tag{14.103}$$

En ne retenant que la première harmonique, et dans la limite mésoscopique $L \ll L_\phi$, le courant permanent moyen varie donc comme

$$I_{ee}(\phi) = 8F\frac{E_c}{\phi_0}\sin 4\pi\varphi \quad . \tag{14.104}$$

Comme pour le cas de l'aimantation du plan infini (section 14.3), ce calcul correspond au premier ordre en interaction et doit être corrigé par les termes d'ordre supérieur. Cette renormalisation de Cooper décrite dans la section 14.3 conduit à remplacer l'interaction $\lambda_0 = F/2$ par l'interaction effective $\lambda(\omega) = 1/\ln(T_0/\omega)$ avec $T_0 = \epsilon_F e^{1/\lambda_0}$. Récrivons la relation (14.49) sous la forme :

$$I_{ee}(\phi) = -\frac{\hbar}{\pi}\partial_\phi\int_0^\infty \frac{\omega}{\ln T_0/\omega}\mathrm{Re}Z_c(\omega,\phi)d\omega \quad . \tag{14.105}$$

En insérant la fonction $Z_c(\omega,\phi)$, transformée de Fourier de $Z_c(t,\phi)$, donnée par 6.54 :

$$Z(\omega,\phi) = \sum_{p=-\infty}^{\infty}\sqrt{\frac{i}{4\omega E_c}}e^{-p\sqrt{-i\omega/E_c}+4ip\pi\varphi} \quad , \tag{14.106}$$

on retrouve la décomposition de Fourier :

$$I_{ee} = \sum_{p=1}^{\infty} I_{ee,p} \sin(4\pi p\varphi) \quad , \tag{14.107}$$

avec

$$I_{ee,p} = -\frac{4p}{\phi_0} \int_0^{\infty} \frac{1}{\ln T_0/\omega} \mathrm{Re}\sqrt{\frac{i\omega}{4E_c}} e^{-p\sqrt{-i\omega/E_c}} d\omega \quad . \tag{14.108}$$

Le logarithme étant une fonction lentement variable, l'intégrale est sensiblement égale à :

$$I_{ee,p} = 16 \frac{\lambda_{eff}(p)}{\phi_0} \frac{E_c}{p^2} \quad , \tag{14.109}$$

avec

$$\lambda_{eff}(p) \simeq \frac{1}{\ln\left(p^2 \frac{T_0}{E_c}\right)} \quad . \tag{14.110}$$

On constate ainsi que la renormalisation de Cooper n'affecte pas toutes les harmoniques de la même façon et que l'échelle d'énergie associée à l'harmonique p est E_c/p^2, ce qui correspond au temps p^2L^2/D nécessaire pour diffuser p fois autour de l'anneau. En négligeant le contenu en harmoniques, le courant permanent moyen est donc sensiblement égal à [339] :

$$\boxed{\overline{I}_{ee} \simeq 16\lambda_{eff} \frac{E_c}{\phi_0} \sin 2\pi\varphi} \tag{14.111}$$

avec

$$\lambda_{eff} \sim \frac{1}{\ln T_0/E_c} \quad . \tag{14.112}$$

Exercice 14.7 : Courant moyen à température finie

À température finie, l'intégrande de (14.100) est multiplié par le facteur thermique $(\pi Tt/\sinh \pi Tt)^2$. En déduire la dépendance en température du courant moyen lié aux interactions coulombiennes :

$$I_{ee}(T) = I_{ee}(0) g(T) \tag{14.113}$$

avec

$$g(T) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^{\infty} e^{-1/x} R^2\left(\frac{\pi T p^2 x}{4E_c}\right) \frac{dx}{x^{5/2}} \tag{14.114}$$

et $R(x) = x/\sinh x$. Cette fonction $g(T)$ est très bien approchée par la fonction [340] :

$$g(T) = e^{-T/3E_c} \quad . \tag{14.115}$$

Exercice 14.8 : Courant moyen dans un cylindre

Soit un cylindre de périmètre L et de hauteur L_z, traversé par un flux magnétique parallèle à son axe. Montrer que, pour $L_\phi \to \infty$, les harmoniques du courant moyen lié aux interactions coulombiennes sont données par :

$$I_{ee,p} = \frac{8F}{\pi p^2}\frac{E_c}{\phi_0}\left(\frac{L_z}{pL}\right) \quad .$$

En comparant ce courant moyen avec celui (14.103) d'un anneau, on note, qu'il correspond à l'addition cohérente de L_z/pL anneaux. Pour L_ϕ fini, montrer que :

$$I_{ee,p} = \frac{4F}{\pi p}\frac{E_c}{\phi_0}\frac{LL_z}{L_\phi^2}K_2\left(p\frac{L}{L_\phi}\right) \quad .$$

14.5.3 Courant permanent et couplage spin-orbite

L'existence d'un couplage spin-orbite affecte profondément le transport cohérent et change le signe de la magnétorésistance en présence d'un champ magnétique (section 7.5.2). Il modifie le déphasage relatif entre les trajectoires appariées qui contribuent au cooperon (section 6.5.5). Quantitativement, il donne lieu à une atténuation exponentielle de la probabilité intégrée de retour à l'origine $Z(t)$ (6.134).

Le courant permanent s'exprimant aussi au moyen de la probabilité intégrée $Z(t)$, on peut se poser la question de l'effet du couplage spin-orbite. On montre ici qu'il n'affecte pas le courant permanent moyen mais qu'il réduit le courant typique (exercice 14.11).

La raison en est que la correction de Hartree-Fock (14.45) à l'énergie totale ne dépend pas du couplage spin-orbite. En effet, le terme de Hartree fait intervenir la combinaison de fonction d'ondes

$$\text{Hartree} \propto \sum_{\alpha,\beta} \phi^*_{i,\alpha}(\boldsymbol{r})\phi_{i,\alpha}(\boldsymbol{r})\phi^*_{j,\beta}(\boldsymbol{r}')\phi_{j,\beta}(\boldsymbol{r}') \tag{14.116}$$

tandis que pour le terme de Fock

$$\text{Fock} \propto -\sum_{\alpha,\beta} \phi^*_{i,\alpha}(\boldsymbol{r})\phi_{i,\beta}(\boldsymbol{r}')\phi^*_{j,\beta}(\boldsymbol{r}')\phi_{j,\alpha}(\boldsymbol{r})\delta_{\alpha,\beta} \tag{14.117}$$

où α et β sont les spins. Les dépendances spatiales de ces deux contributions sont identiques (section 13.3). Nous ne considérons donc que les termes de spin qui s'écrivent

$$\begin{aligned} \text{Hartree} &\propto \sum_{\alpha,\beta}\langle\alpha\beta|\alpha\beta\rangle = 4 \\ \text{Fock} &\propto -\sum_{\alpha,\beta}\langle\alpha\beta|\beta\alpha\rangle = -2 \end{aligned} \tag{14.118}$$

de sorte que

$$\text{Hartree} + \text{Fock} \propto \sum_{\alpha,\beta} \left[\langle\alpha\beta|\alpha\beta\rangle - \langle\alpha\beta|\beta\alpha\rangle\right] = 2 \quad . \tag{14.119}$$

En insérant la relation de fermeture $|S\rangle\langle S| + \sum_i |T_i\rangle\langle T_i| = 1$ dans la base singulet-triplet (6.115), et en notant que $\langle T_i|\alpha\beta\rangle = \langle T_i|\beta\alpha\rangle$ et $\langle S|\alpha\beta\rangle = -\langle S|\beta\alpha\rangle$, il apparaît que

$$\text{Hartree} + \text{Fock} \propto 2\sum_{\alpha,\beta} \langle\alpha\beta|S\rangle\langle S|\alpha\beta\rangle \quad . \tag{14.120}$$

Il n'y a pas de terme triplet dans l'hamiltonien de Hartree-Fock. Or, ce sont les seuls termes affectés par le couplage spin-orbite (sections 6.5.4 et 6.5.5). L'aimantation et les courants permanents ne sont donc pas modifiés par le couplage spin-orbite.

Exercice 14.9 : En utilisant la base singulet-triplet (6.115), vérifier les relations :

$$\begin{aligned}
\sum_{\alpha,\beta} \langle\beta\alpha|S\rangle\langle S|\alpha\beta\rangle &= -1 \\
\sum_{\alpha,\beta} \langle\alpha\beta|S\rangle\langle S|\alpha\beta\rangle &= 1 \\
\langle\alpha\alpha|S\rangle\langle S|\alpha\alpha\rangle &= 0
\end{aligned} \tag{14.121}$$

et en déduire que, pour un fort couplage spin-orbite,

$$\begin{aligned}
Fock &\propto \sum_{\alpha,\beta} \langle\beta\alpha|S\rangle\langle S|\alpha\beta\rangle = -1 \\
Hartree &\propto \sum_{\alpha,\beta} \langle\alpha\beta|S\rangle\langle S|\alpha\beta\rangle = 1 \quad .
\end{aligned} \tag{14.122}$$

Le terme de Fock est donc multiplié par $-1/2$. C'est le facteur bien connu de la magnétorésistance en présence de couplage spin-orbite (6.134). Le terme de Hartree est multiplié par $1/4$, ce qui laisse effectivement la somme (Hartree + Fock) invariante et égale à 2 [339].

Exercice 14.10 : Montrer qu'un fort couplage spin-orbite divise le courant typique par 2. On remarquera pour cela que

$$I_{typ}^2 \propto \sum_{\alpha,\beta} \langle\alpha\beta|\alpha\beta\rangle \tag{14.123}$$

devient

$$I_{typ}^2 \propto \sum_{\alpha,\beta} \langle\alpha\beta|S\rangle\langle S|\alpha\beta\rangle \quad . \tag{14.124}$$

Exercice 14.11 : Montrer que le couplage à des impuretés magnétiques réduit le courant permanent.

En utilisant les résultats de la section 6.5, montrer que le courant est encore donné par l'expression (14.100) où la probabilité de retour $Z(t, B)$ est réduite par le facteur exponentiel $e^{-t/2\tau_m}$ où τ_m est le temps de déphasage associé aux impuretés magnétiques [339].

14.5.4 Bref panorama expérimental

Les paragraphes précédents présentent une description des courants permanents dont il n'est pas encore sûr qu'elle puisse décrire la situation expérimentale actuelle dont nous donnons maintenant un bref panorama.

La mesure du courant permanent est en fait une mesure d'aimantation réalisée avec un SQUID. L'aimantation d'un anneau est très faible, ce qui rend cette expérience extrêmement délicate. Revenons sur l'ordre de grandeur du courant d'un anneau. Le courant moyen comme le courant typique sont d'ordre E_c/ϕ_0 c'est-à-dire e/τ_D, ou $ev_F l_e/L^2$, ce qui correspond à un moment magnétique $\mathcal{M}$ de l'ordre de $ev_F l_e$ qui, en unités du magnéton de Bohr $\mu_B = e\hbar/2m$ s'écrit

$$\mathcal{M} \simeq \mu_B k_F l_e \quad .$$

Dans un métal, $k_F l_e$ varie entre 10 et 100. Afin de mesurer cette aimantation très faible, deux types d'expériences ont été réalisées.

• Expériences avec un grand nombre d'anneaux indépendants

On mesure dans ce cas l'aimantation d'un grand nombre d'anneaux isolés. C'est de cette façon qu'a été détectée pour la première fois l'existence d'un courant permanent [352]. Il s'agit d'un ensemble de 10^7 anneaux de cuivre, de périmètre $L = 2$ μm et avec un libre parcours moyen l_e estimé à 20 nm. Cette expérience mesure un courant moyen oscillant avec la période $\phi_0/2$. Compte tenu de l'estimation de $E_c = \hbar D/L^2 \simeq 20$ mK, l'amplitude de ce courant moyen, de l'ordre de 0,4 nA, peut se mettre sous la forme

$$I_{exp} \simeq 6\frac{E_c}{\phi_0}$$

où on a utilisé $v_F = 1{,}6\ 10^6$ m/s. La comparaison de ce résultat avec l'expression (14.111) conduit à une valeur l'interaction effective de $\lambda_{eff} \simeq 0{,}4$, plus grande d'environ un ordre de grandeur que la valeur $\lambda_{eff} = 1/\ln(T_0/E_c)$ estimée théoriquement (14.112). Par contre, la relation (14.115) décrit bien la dépendance en température.

Deux autres expériences, l'une sur 10^4 anneaux semi-conducteurs [353], l'autre sur 10^5 anneaux d'argent [354] ont corroboré ces résultats. Le courant moyen oscille avec la période $\phi_0/2$. Son amplitude est plus grande que les prédictions basées sur le modèle de la section 14.5.2 et surtout il est diamagnétique alors que d'après (14.111) on s'attend à un courant qui a le signe de l'interaction effective, c'est-à-dire paramagnétique. Toutefois on a supposé là que l'interaction dominante était l'interaction coulombienne. Si l'interaction dominante est attractive à cause du couplage électron-phonon, le système peut devenir supraconducteur. La fréquence caractéristique $\omega_{\max}$ introduite en (14.55) est alors la fréquence de Debye ω_D et la température critique est donnée par $T_c = \hbar\omega_D e^{-1/|\lambda_0|}$. Si la température T_c est plus petite que l'énergie

de Thouless, on montre que l'interaction effective λ_{eff} devient alors [339] :

$$\lambda_{eff} \simeq -\frac{1}{\ln E_c/T_c} \quad . \tag{14.125}$$

Ce mécanisme est très intéressant car il montre qu'un métal éventuellement supraconducteur à une température extrêmement basse (le cuivre ou l'argent) pourrait être le siège de courants permanents diamagnétiques bien au-dessus de la température critique.

• Expériences sur un seul anneau

D'autres expériences ont été réalisées sur un seul anneau ou un très petit nombre d'anneaux. Dans ce cas, on observe un courant permanent oscillant avec la période ϕ_0. Une première expérience [355] sur un anneau d'or semblait montrer l'existence d'un courant de l'ordre de $\sim 0{,}3 - 2{,}0\ ev_F/L$, c'est-à-dire un à deux ordres de grandeur plus grand que la prédiction théorique du courant typique (14.96). Une autre expérience plus récente [356] a mesuré un courant d'amplitude compatible avec le résultat (14.96). Par contre le signe observé correspond lui aussi à un courant diamagnétique.

Enfin, une autre expérience a été réalisée dans une hétérojonction semiconductrice [357]. Le désordre y est relativement faible et le libre parcours moyen $l_e \sim 11\ \mu$m est du même ordre de grandeur que le périmètre de l'anneau : $l_e/L \simeq 1{,}3$, de sorte que l'on se trouve à la limite entre les régimes diffusif et balistique.

En conclusion, la physique des courants permanents est encore mal comprise, que ce soit l'amplitude et surtout le signe. Notre souci dans ce chapitre a plutôt été de montrer la similitude existant entre le courant permanent d'un anneau et l'aimantation d'un film. Ceux sont des quantités de même nature ; seule diffère la géométrie des trajectoires de diffusion. Il serait particulièrement intéressant de mesurer la susceptibilité de films métalliques à basse température afin de vérifier si la réponse orbitale est effectivement augmentée par rapport à la contribution de Landau et si elle est diamagnétique comme les courants permanents.

Complément C14.1 Courant moyen dans l'ensemble canonique

Dans le chapitre 14, on a supposé que l'énergie de Fermi ne dépendait pas du flux. Mais expérimentalement, c'est le nombre de particules N qui est fixé dans chaque anneau. Cette contrainte, $N = \int_0^{\epsilon_F} \rho(\epsilon, \phi) d\epsilon$, conduit à une dépendance du niveau de Fermi avec le flux, $\epsilon_F(\phi)$. Celle-ci est corrélée à la dépendance en flux de la densité d'états. Le courant permanent à température nulle [14], est maintenant donné par la relation (14.8)

$$I_N = \frac{\partial \mathcal{N}(\epsilon_F(\phi))}{\partial \phi} \tag{14.126}$$

et il peut avoir un valeur moyenne *a priori* non négligeable. Ce courant, appelé courant canonique [15], se calcule en effectuant un développement autour du niveau de Fermi. En notant $\epsilon_F = \overline{\mu(\phi)}$ le niveau de Fermi moyen, on obtient :

$$I_N = -\left.\frac{\partial \Phi}{\partial \phi}\right|_{\epsilon_F(\phi)} = -\left.\frac{\partial \Phi}{\partial \phi}\right|_{\epsilon_F} - \left.\frac{\partial^2 \Phi}{\partial \mu \partial \phi}\right|_{\epsilon_F} [\epsilon_F(\phi) - \epsilon_F] \quad . \tag{14.127}$$

Par définition, le premier terme de cette expression est le courant « grand-canonique » étudié dans la section 14.4.2. En moyenne, il est nul lorsque $L \gg l_e$. La dérivée $-\frac{\partial \Phi}{\partial \mu}$ est le nombre d'électrons N. Par conséquent :

$$I_N = I_{\epsilon_F} + \left.\frac{\partial N}{\partial \phi}\right|_{\epsilon_F} [\epsilon_F(\phi) - \epsilon_F] \quad . \tag{14.128}$$

La relation $\delta\mu|_N = -\Delta \delta N|_\mu$ relie la variation du potentiel chimique à nombre de particules fixé à celle du nombre de particules à potentiel chimique fixé. Après moyenne sur le désordre et en négligeant le premier terme $\overline{I}_{\epsilon_F}$, on en déduit [358] :

$$\overline{I}_N = -\frac{\Delta}{2}\frac{\partial}{\partial \phi}\Sigma^2(\epsilon_F, \phi) = -\frac{\Delta}{2}\frac{\partial}{\partial \phi}\int_0^{\epsilon_F}\int_0^{\epsilon_F} K(\epsilon, \epsilon', \phi) d\epsilon d\epsilon' \tag{14.129}$$

où $\Sigma(E) = \overline{N(E)^2} - \overline{N(E)}^2$ est la fluctuation (10.9) du nombre de niveaux. Ainsi, lorsque le nombre d'électrons dans chaque anneau est fixé, il apparaît un courant moyen fini qui résulte de la fluctuation du nombre de niveaux d'énergie d'un échantillon à un autre [341, 358–360]. Des relations (10.13) et (10.51), on déduit [16]

$$\overline{I}_N = -\Delta \frac{\partial}{\partial \phi}\int_0^\infty \frac{\tilde{K}(t, \varphi)}{t^2} dt = -\frac{\Delta}{4\pi^2}\frac{\partial}{\partial \phi}\int_0^\infty \frac{Z(t, \varphi)}{t} dt \quad . \tag{14.130}$$

[14] Sans le spin.

[15] Le mot « canonique« peut prêter à confusion. La calcul utilise toujours l'ensemble grand canonique avec la contrainte que le nombre moyen de particules est fixé et indépendant du flux.

[16] Voir note 6.

De (14.91) on déduit le développement en harmoniques

$$\overline{I}_N = \frac{2}{\pi}\frac{\Delta}{\phi_0}\sum_{p=1}^{\infty} e^{-pL/L_\phi}\sin(4\pi p\varphi) \tag{14.131}$$

ou encore, en effectuant la somme [361] :

$$\overline{I}_N = \frac{\Delta}{\pi\phi_0}\frac{\sin 4\pi\varphi}{\cosh L/L_\phi - \cos 4\pi\varphi} \quad . \tag{14.132}$$

Ce courant doit être doublé pour tenir compte de la dégénérescence de spin. Il oscille avec la période $\phi_0/2$ et il est *paramagnétique* à petit flux. Ceci se comprend bien à partir de la relation (14.129). Le courant moyen mesure le changement de rigidité spectrale quand l'invariance par renversement du temps est brisée par le flux : la variance $\Sigma^2(\epsilon_F, \phi)$ décroît quand ϕ est non nul ce qui conduit à un courant paramagnétique.

Ce courant reste très faible, de l'ordre de Δ/ϕ_0, c'est-à-dire comparable au courant porté par un seul niveau d'énergie. Cette contribution au courant moyen est donc beaucoup plus petite que celle résultant des interactions coulombiennes obtenue dans la section 14.3.

Finalement, il est intéressant de comparer la forme fonctionnelle de ce courant à celle (7.88) obtenue pour la correction de localisation faible à la conductivité d'un anneau traversé par un flux Aharonov-Bohm.

Chapitre 15

Formulaire

Un certain nombre de relations présentées ici sont reproduites à partir des deux références :

- M. Abramowitz et I. Stegun, *Handbook of Mathematical Functions*, Dover, New York (1970) ;
- I. Gradshteyn et I. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products*, Academic Press, London (1980).

15.1 Densité d'états et conductance

- Densité d'états pour une relation de dispersion $\epsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

$$\rho_0(\epsilon) = \frac{dA_d}{(2\pi)^d} \frac{mk^{d-2}}{\hbar^2} \tag{15.1}$$

où A_d est le volume de la sphère de rayon unité :

$$A_d = \frac{\pi^{d/2}}{\Gamma(1+d/2)}, \quad A_3 = \frac{4\pi}{3}, \quad A_2 = \pi, \quad A_1 = 2 \quad . \tag{15.2}$$

En particulier

$$\rho_0(\epsilon) = \frac{mk}{2\pi^2\hbar^2} \quad (d=3) \quad = \frac{m}{2\pi\hbar^2} \quad (d=2) \quad = \frac{m}{\pi k \hbar^2} \quad (d=1) \quad . \tag{15.3}$$

- Conductivité et conductance classiques

$$\sigma_0 = se^2 D\rho_0 = s\frac{e^2}{\hbar}\frac{A_d}{(2\pi)^d} k_F^{d-1} l_e \tag{15.4}$$

$$G = \sigma_0 L^{d-2} = s\frac{e^2}{\hbar}\frac{A_d}{(2\pi)^d}(k_F L)^{d-2} k_F l_e \quad . \tag{15.5}$$

En dimension $d = 3$:

$$G = s\frac{e^2}{h}\frac{k_F^2 l_e}{3\pi}\frac{A}{L} = s\frac{e^2}{h}\left(\frac{l_e}{3L}\right)\left(\frac{k_F^2 A}{\pi}\right) \quad . \tag{15.6}$$

En dimension $d = 2$:

$$G = s\frac{e^2}{h}\left(\frac{l_e}{2L}\right)k_F L \quad . \tag{15.7}$$

En dimension $d = 1$:

$$G = s\frac{e^2}{h}\frac{2l_e}{L} \quad . \tag{15.8}$$

15.2 Transformées de Fourier - Définitions

$$\tilde{F}(\boldsymbol{k}) = \int F(\boldsymbol{r})e^{-i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}d\boldsymbol{r} \tag{15.9}$$

$$\tilde{f}(\omega) = \int f(t)e^{i\omega t}dt \tag{15.10}$$

$$F(\boldsymbol{r}) = \frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}}\tilde{F}(\boldsymbol{k})e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} = \frac{1}{(2\pi)^d}\int \tilde{F}(\boldsymbol{k})e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}d\boldsymbol{k} \tag{15.11}$$

$$f(t) = \frac{1}{2\pi}\int \tilde{f}(\omega)e^{-i\omega t}d\omega \tag{15.12}$$

$$\frac{1}{\Omega}\sum_{\boldsymbol{k}} e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}} = \frac{1}{(2\pi)^d}\int e^{i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}d\boldsymbol{k} = \delta(\boldsymbol{r}) \tag{15.13}$$

$$\int e^{-i\boldsymbol{k}.\boldsymbol{r}}d\boldsymbol{r} = \Omega\delta_{\boldsymbol{k},0} = (2\pi)^d\delta(\boldsymbol{k}) \tag{15.14}$$

$\delta(\boldsymbol{k})$ est la fonction de Dirac et $\delta_{\boldsymbol{k},0}$ est le symbole de Kronecker.

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-i\omega t}dt = 2\pi\delta(\omega) \qquad \int_{-\infty}^{\infty} e^{i\omega t}d\omega = 2\pi\delta(t) \quad . \tag{15.15}$$

15.3 Probabilité $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega)$

La probabilité $P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$ vérifie :

$$\begin{aligned} P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) &= P^*(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}, t) \\ P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) &= P^*(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}, -\omega) \quad . \end{aligned} \tag{15.16}$$

De plus, s'il y a invariance par renversement du sens du temps, elle vérifie :

$$\begin{aligned} P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t) &= P(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}, t) \\ P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', \omega) &= P(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}, \omega) \quad . \end{aligned} \tag{15.17}$$

$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t)$ a pour transformée de Fourier $P(\boldsymbol{q}, \omega) = \frac{1}{-i\omega + Dq^2}$.
$P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', |t|)$ a pour transformée de Fourier $2\mathrm{Re}P(\boldsymbol{q}, \omega)$.

$$P(\boldsymbol{q}, t_1)P(\boldsymbol{q}, t_2) = P(\boldsymbol{q}, t_1 + t_2)$$

$$\int d\boldsymbol{r}' P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}', t_1)P(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}'', t_2) = P(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'', t_1 + t_2)$$

$$\mathrm{Re}P(\boldsymbol{q}, \epsilon) = \mathrm{Im} \int_{-\infty}^{\omega} d\omega P^2(\boldsymbol{q}, \omega) \quad . \tag{15.18}$$

- **Espace libre**

$P(\boldsymbol{R}, \omega)$ est la transformée de Fourier de $P(\boldsymbol{R}, t)$ définie par (5.19) où $R = |\boldsymbol{r} - \boldsymbol{r}'|$. Pour $d \geq 2$, l'intégrale diverge aux temps courts et doit être limitée par le temps de collision τ_e. Ainsi on définit :

$$P(\boldsymbol{R}, \omega) = \frac{1}{(4\pi D)^{d/2}} \int_0^{\infty} \frac{1}{t^{d/2}} e^{-R^2/4Dt}(1 - e^{-t/\tau_e})e^{i\omega t} dt \tag{15.19}$$

avec

$$P^{(1d)}(\boldsymbol{R}, \omega) = \frac{1}{\sqrt{-4i\omega D}} e^{-R\sqrt{-i\omega/D}} \tag{15.20}$$

$$P^{(2d)}(\boldsymbol{R}, \omega) = \frac{1}{2\pi D} \left[K_0 \left(\sqrt{\frac{-i\omega}{D}} R \right) - K_0 \left(R/\sqrt{D\tau_e} \right) \right] \tag{15.21}$$

$$P^{(3d)}(\boldsymbol{R}, \omega) = \frac{1}{4\pi D R} \left[e^{-R\sqrt{\frac{-i\omega}{D}}} - e^{-R/\sqrt{D\tau_e}} \right] \quad . \tag{15.22}$$

La probabilité intégrée de retour à l'origine s'écrit, pour un système de volume L^d, et dans la limite $t \ll L^2/D$:

$$Z(t) = \frac{L^d}{(4\pi D t)^{d/2}} = \left(\frac{\tau_D}{4\pi t} \right)^{d/2} \tag{15.23}$$

où $\tau_D = L^2/D$ est le temps de Thouless. La transformée de Fourier $Z(\omega)$ est obtenue à l'aide de (15.70). Pour $d \geq 2$, l'intégrale diverge aux temps courts et doit être limitée par le temps de collision τ_e. On définit :

$$Z(\omega) = \int_0^{\infty} Z(t)(1 - e^{-t/\tau_e})e^{i\omega t} dt \quad . \tag{15.24}$$

À l'aide de (15.71, 15.72 et 15.73), on obtient pour $\omega\tau_e \ll 1$:

$$Z^{(1d)}(\omega) = \sqrt{\frac{i\tau_D}{4\omega}} \tag{15.25}$$

$$Z^{(2d)}(\omega) = \frac{\tau_D}{4\pi}\ln(i/\omega\tau_e) \tag{15.26}$$

$$Z^{(3d)}(\omega) = \frac{\tau_D^{3/2}}{4\pi}(\sqrt{1/\tau_e} - \sqrt{-i\omega}) \quad . \tag{15.27}$$

Pour $d < 4$, on a :

$$\mathrm{Im}Z(\omega) = \frac{\pi^2 d c_d}{4}\frac{1}{\omega}\left(\frac{\omega}{E_c}\right)^{d/2} \tag{15.28}$$

où c_d est donné par :

$$c_d = \frac{1}{d2^{d-1}\pi^{\frac{d}{2}+1}\sin(\frac{\pi d}{4})\Gamma(\frac{d}{2})} \ , \quad c_1 = \frac{\sqrt{2}}{\pi^2} \ , \quad c_2 = \frac{1}{4\pi^2} \ , \quad c_3 = \frac{\sqrt{2}}{6\pi^3} \quad . \tag{15.29}$$

- **Plan infini ($d = 2$) en champ magnétique, $\omega\tau_e \ll 1$**

$$\begin{aligned} Z_c(\omega, B) &= \int_0^\infty \frac{BS/\phi_0}{\sinh 4\pi BDt/\phi_0} e^{i\omega t}(1 - e^{-t/\tau_e})dt \\ &= \frac{S}{4\pi D}\left[\psi\left(\frac{1}{2} + \frac{\hbar}{4eDB\tau_e}\right) - \psi\left(\frac{1}{2} - i\frac{\hbar\omega}{4eDB}\right)\right] \end{aligned} \tag{15.30}$$

et si $B \to 0$:

$$Z(\omega, B) = \frac{S}{4\pi D}\left[\ln(i/\omega\tau_e) + \frac{2e^2B^2D^2}{3\hbar^2\omega^2}\right] \quad . \tag{15.31}$$

- **Anneau 1d et flux Aharonov-Bohm**

La transformée de Fourier de (6.54) est ($\varphi = \phi/\phi_0$) :

$$Z(\omega, \phi) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \sqrt{\frac{1}{-4i\omega E_c}} e^{-m\sqrt{-i\omega/E_c} + 4im\pi\varphi} \quad . \tag{15.32}$$

15.4 Divers

- **Matrices de Pauli**

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad . \tag{15.33}$$

- **Fonction Γ**

$$\Gamma(s) = \int_0^\infty t^{s-1} e^{-t}\, dt \tag{15.34}$$

$$\Gamma(1) = 1$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) = \sqrt{\pi}$$

$$\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$$

$$\Gamma(n) = (n-1)!$$

$$\Gamma\left(n+\frac{1}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2^n}(2n-1)!!$$

$$\Gamma\left(\frac{1}{2}-n\right) = (-1)^n \frac{2^n\sqrt{\pi}}{(2n-1)!!}$$

$$\Gamma\left(\frac{d}{2}\right) = \frac{\sqrt{\pi}}{2^{(d-2)}}(d-2)!! \tag{15.35}$$

$$\Gamma(1-x)\Gamma(x) = \frac{\pi}{\sin \pi x} \quad .$$

- **Fonction Digamma $\Psi(x)$**

$$\Psi(x) = \frac{d \ln \Gamma(x)}{dx} \tag{15.36}$$

$$\Psi(x) = \int_0^\infty \left(\frac{e^{-t}}{t} - \frac{e^{-xt}}{1-e^{-t}}\right) dt \tag{15.37}$$

$$\Psi\left(\frac{1}{2}+x\right) \simeq \ln x + \frac{1}{24x^2} + \cdots, \quad \text{pour} \quad x \to \infty \tag{15.38}$$

$$\sum_{n=0}^{N} \frac{1}{n+x} = \ln N - \Psi(x), \quad \text{pour} \quad N \to \infty \tag{15.39}$$

$$\frac{1}{2}\int_0^\infty \frac{e^{-yt}-e^{-zt}}{\sinh(t/2)} dt = \Psi\left(z+\frac{1}{2}\right) - \Psi\left(y+\frac{1}{2}\right) \tag{15.40}$$

$$\int_0^\infty e^{-yx}\left(\frac{1}{x} - \frac{1}{\sinh x}\right) dx = \Psi\left(y+\frac{1}{2}\right) - \ln y/2$$

$$\Psi\left(\frac{1}{2}+x\right) \simeq \Psi(1/2) + x\Psi'(1/2) + \cdots, \quad \text{pour} \quad x \to 0 \tag{15.41}$$

$$\Psi(\frac{1}{2}) = -\gamma - 2\ln 2 \tag{15.42}$$

où $\gamma \simeq 0{,}577$ est la constante d'Euler.

- **Fonction zeta de Riemann $\zeta(x)$**

$$\zeta\left(\frac{1}{2}\right) \simeq -1{,}460$$
$$\zeta\left(\frac{3}{2}\right) \simeq 2{,}612$$
$$\zeta(2) = \sum_1^\infty \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}$$
$$\zeta(4) = \sum_1^\infty \frac{1}{n^4} = \frac{\pi^4}{90}$$
$$\sum_1^\infty \frac{(-1)^{n+1}}{n^2} = \frac{\pi^2}{12} \quad . \tag{15.43}$$

- **Fonction $E_n(z)$**

$$E_n(z) = \int_1^\infty dt \frac{e^{-zt}}{t^n} \tag{15.44}$$

$$\int_0^\infty E_n(z)dz = \frac{1}{n}, \qquad \int_0^\infty zE_n(z)dz = \frac{1}{n+1} \tag{15.45}$$

$$\int_0^\infty dz' E_1(|z-z'|) = 2 - E_2(z) \tag{15.46}$$

$$\int_0^\infty dz' z' E_1(|z-z'|) = 2z + E_3(z) \tag{15.47}$$

$$\int_0^\infty dz' z' E_1(z+z') = E_3(z) \quad . \tag{15.48}$$

Dans la limite $z \to \infty$,

$$\begin{aligned} I_1 &= \int_0^\infty dz' E_1(|z-z'|) \to 2 \\ I_2 &= \int_0^\infty dz'(z-z') E_1(|z-z'|) \to 0 \\ I_3 &= \int_0^\infty dz'(z-z')^2 E_1(|z-z'|) \to \frac{4}{3} \\ \int_0^\infty E_2(z)E_3(z)dz &= \frac{1}{8} \quad , \end{aligned} \tag{15.49}$$

$$\begin{aligned}
\int_0^\infty E_2(z)^2 dz &= \frac{2}{3}(1-\ln 2) \\
\int_0^\infty E_3(z)^2 dz &= \frac{1}{5}(2\ln 2 - 1) \\
\int_0^\infty E_2(z)dz \int_0^\infty E_1(|z-z'|)dz' &= \frac{1}{3}(1+2\ln 2) \\
\int_0^\infty E_3(z)dz \int_0^\infty E_1(|z-z'|)dz' &= \frac{13}{24} \\
\int_0^\infty dz E_2(z) \int_0^\infty dz' E_2(z') E_1(|z-z'|) &= \frac{1}{3} + \frac{\pi^2}{12} - \frac{4}{3}\ln 2 \\
\int_0^\infty dz E_3(z) \int_0^\infty dz' E_2(z') E_1(|z-z'|) &= \frac{1}{3}\ln 2 - \frac{1}{12} \\
\int_0^\infty dz E_3(z) \int_0^\infty dz' E_3(z') E_1(|z-z'|) &= \frac{56}{45}\ln 2 - \frac{79}{360} - \frac{\pi^2}{18}
\end{aligned} \tag{15.50}$$

- **Relations utiles**

$$\int_0^\infty x J_0^2(ax) J_0(bx) dx = \frac{2}{\pi b}\frac{1}{\sqrt{4a^2-b^2}}, \quad \text{si } b < 2a \tag{15.51}$$

$$\int d^2\boldsymbol{\rho} J_0(\lambda\rho) e^{i\boldsymbol{k}_\perp\cdot\boldsymbol{\rho}} = \frac{2\pi}{k_\perp}\delta(\rho - k_\perp) \tag{15.52}$$

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{\cos ax}{\cosh^2 bx} dx = \frac{a\pi}{b^2 \sinh\frac{a\pi}{2b}} \tag{15.53}$$

$$\int_{-\infty}^\infty \frac{b}{(x-a)^2+b^2}\cos cx\ dx = \pi e^{-bc}\cos ac \tag{15.54}$$

$$\int_0^\infty \cos\frac{1}{2}\pi x^2 dx = \int_0^\infty \sin\frac{1}{2}\pi x^2 dx = \frac{1}{2} \tag{15.55}$$

$$\sum_{n>0}\frac{\cos nx}{n^2+a^2} = \frac{\pi}{2a}\frac{\cosh a(\pi - |x|)}{\sinh \pi a} - \frac{1}{2a^2} \tag{15.56}$$

$$\int_0^\infty \frac{x^{1/2}}{(x-a)^2+b^2} dx = \pi(a^2+b^2)^{1/4}\cos(\frac{1}{2}\arctan\frac{b}{a})$$

$$\int_a^b \frac{dx}{x\ln x} = \ln\frac{b}{a} \tag{15.57}$$

$$e^{z\cos\theta} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} I_n(z) e^{in\theta} \tag{15.58}$$

$$\int_0^\infty \frac{e^{-\frac{\beta}{x}-\gamma x}}{x^\alpha}dx = 2\left(\frac{\gamma}{\beta}\right)^{\frac{\alpha-1}{2}} K_{\alpha-1}(2\sqrt{\beta\gamma}) \quad . \tag{15.59}$$

Pour α demi-entier, les fonctions de Bessel modifiées K sont reliées à des polynômes finis :

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \frac{e^{-\frac{\beta}{x}-\gamma x}}{x^{n+\frac{1}{2}}}dx &= 2\left(\frac{\gamma}{\beta}\right)^{\frac{2n-1}{4}} K_{n-\frac{1}{2}}(2\sqrt{\beta\gamma}) \\ &= \sqrt{\pi}\frac{\gamma^{\frac{n-1}{2}}}{\beta^{\frac{n}{2}}}e^{-2\sqrt{\beta\gamma}}\sum_{k=0}^{n-1}\frac{(n+k-1)!}{k!(n-k-1)!(4\sqrt{\beta\gamma})^k} \quad .\end{aligned} \tag{15.60}$$

En particulier,

$$\int_0^\infty \frac{e^{-\frac{\beta}{x}-\gamma x}}{x^{\frac{1}{2}}}dx = \sqrt{\frac{\pi}{\gamma}}e^{-2\sqrt{\beta\gamma}} \tag{15.61}$$

et dans la limite $\gamma \to 0$, on obtient :

$$\int_0^\infty \frac{e^{-\frac{\beta}{x}}}{x^{n+\frac{1}{2}}}dx = \frac{\sqrt{\pi}}{\beta^{n-\frac{1}{2}}}\frac{(2n-2)!}{(n-1)!4^{n-1}} = \frac{\sqrt{\pi}}{\beta^{n-\frac{1}{2}}}\frac{(2n-3)!!}{2^{n-1}} \tag{15.62}$$

$$\int_0^\infty \frac{e^{-\frac{\beta}{x}}}{x^n}dx = \frac{(n-2)!}{\beta^{n-1}} \tag{15.63}$$

$$K_0(x) \simeq \sqrt{\frac{\pi}{2x}}e^{-x}, \quad \text{pour} \quad x \to \infty \tag{15.64}$$

$$K_0(x) \sim -\gamma - \ln x/2 \quad , \quad \text{pour} \quad x \to 0 \tag{15.65}$$

où $\gamma \simeq 0{,}577$ est la constante d'Euler.

$$z^n K_n(z) \to (n-1)!2^{n-1}, \quad \text{pour} \quad z \to 0 \quad n > 0 \tag{15.66}$$

$$z^{n-\frac{1}{2}}K_{n-\frac{1}{2}}(z) \to \sqrt{\frac{\pi}{2}}\frac{(2n-2)!}{(n-1)!2^{n-1}} = \sqrt{\frac{\pi}{2}}(2n-3)!!, \quad z \to 0 \tag{15.67}$$

$$(2n)!! = n!\ 2^n \tag{15.68}$$

$$(2n+1)!! = \frac{(2n+1)!}{(2n)!!} = \frac{(2n+1)!}{n!2^n} \quad . \tag{15.69}$$

$$\int_0^\infty \frac{1}{t^{d/2}}e^{-i\omega t}dt = \Gamma\left(1-\frac{d}{2}\right)(i\omega)^{\frac{d}{2}-1}, \quad \text{pour} \quad d < 2 \tag{15.70}$$

$$\int_0^\infty \frac{1}{\sqrt{t}} \cos \epsilon t \; dt = \sqrt{\frac{\pi}{2\epsilon}} \tag{15.71}$$

$$\int_0^\infty \frac{1}{t}(1 - e^{-t/\tau_e}) \cos \epsilon t \; dt = \frac{1}{2} \ln \left(1 + \frac{1}{\epsilon^2 \tau_e^2} \right) \tag{15.72}$$

$$\int_0^\infty \frac{1}{t^{3/2}}(1 - e^{-t/\tau_e}) \cos \epsilon t \; dt = \sqrt{\pi} \left[-\sqrt{2\epsilon} + 2 \left(\frac{1}{\tau_e^2} + \epsilon^2 \right)^{1/4} \cos \frac{\arctan \epsilon \tau_e}{2} \right] \tag{15.73}$$

$$\int_0^\infty \frac{1}{t^{d/2}}(e^{-\gamma t} - e^{-\delta t}) dt = \Gamma(1 - \frac{d}{2})[\gamma^{\frac{d}{2}-1} - \delta^{\frac{d}{2}-1}], \qquad d < 4 \tag{15.74}$$

$$\int_0^\infty \frac{\sin \omega t}{t^{d/2}} dt = \frac{\pi \omega^{d/2-1}}{2 \sin(\pi d/4) \Gamma(d/2)}, \qquad d < 4 \tag{15.75}$$

$$\int_0^\infty \frac{\sin^2 \frac{\epsilon t}{2}}{t^{d/2}} dt = -\frac{\pi \epsilon^{d/2-1}}{4 \cos(\pi d/4) \Gamma(d/2)}, \qquad d > 2 \tag{15.76}$$

$$\int_0^\infty x^\mu e^{-\gamma x} dx = \frac{1}{\gamma^{\mu+1}} \Gamma(\mu), \qquad \mu > -1$$

$$\int_0^\infty \sin^2(ax) e^{-bx} \frac{dx}{x} = \frac{1}{4} \ln \left(1 + \frac{4a^2}{b^2} \right) \quad . \tag{15.77}$$

$$\int_0^\infty \frac{x^{\mu-1}}{\sinh^2 ax} dx = \frac{4}{(2a)^\mu} \Gamma(\mu) \zeta(\mu - 1), \qquad \mu > 2 \tag{15.78}$$

$$\int_0^\infty x \frac{1 - e^{-ax}}{\sinh^2 x} dx \simeq \ln \frac{a e^\gamma}{2}, \quad a \gg 1 \tag{15.79}$$

où $\gamma \simeq 0{,}577$ est la constante d'Euler.

$$\int_0^\infty \frac{1}{x^{3/2}}(1 - e^{-ax}) dx = 2\sqrt{\pi a} \tag{15.80}$$

$$\int_0^\infty \sqrt{x} \left(\frac{1}{\sinh^2 x} - \frac{1}{x^2} \right) dx = -\sqrt{\frac{\pi}{2}} \zeta(1/2) \tag{15.81}$$

$$\int_0^\infty \frac{\sqrt{x}}{\sinh^2 x}(1 - e^{-ax}) dx \simeq 2\sqrt{\pi a} - \sqrt{\frac{\pi}{2}} \zeta(1/2), \quad a \gg 1 \tag{15.82}$$

$$\int_0^\infty \frac{\tanh x}{x^{3/2}} dx = \sqrt{\frac{2}{\pi}} (2\sqrt{2} - 1) \zeta \left(\frac{3}{2} \right) \tag{15.83}$$

$$\int_0^\infty \frac{\tanh x}{x} e^{-\beta x} \simeq \ln \frac{4}{\pi \beta} \qquad \text{lorsque} \quad \beta \to 0 \tag{15.84}$$

$$\int_0^\infty \frac{\tanh x}{\sqrt{x}} e^{-\beta x} \simeq \sqrt{\frac{\pi}{\beta}} \qquad \text{lorsque} \quad \beta \to 0 \quad . \tag{15.85}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{dx}{x^2}(1 - \cos px) = \pi|p| \tag{15.86}$$

$$\int_0^\infty \frac{dx}{x}[J_0(x) - e^{-px}] = \ln 2p \tag{15.87}$$

$$\int_0^\infty e^{-px} \sin qx \frac{dx}{x} = \arctan \frac{q}{p} \tag{15.88}$$

$$\int_0^\infty x^a e^{-bx^2} = \frac{1}{2\, b^{\frac{a+1}{2}}} \Gamma\left(\frac{a+1}{2}\right) \quad . \tag{15.89}$$

L'équation différentielle

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + x_0 + |x|\right) C(x) = A\delta(x) \tag{15.90}$$

a pour solution :

$$C(x) = -\frac{A}{2} \frac{\mathrm{Ai}(x_0 + |x|)}{\mathrm{Ai}'(x_0)} \tag{15.91}$$

$$\frac{\mathrm{Ai}(x)}{\mathrm{Ai}'(x)} \simeq -\frac{1}{\sqrt{x}}\left(1 - \frac{1}{4x^{3/2}}\right), \quad \text{pour} \quad x \to \infty \tag{15.92}$$

$$\frac{\mathrm{Ai}(x)}{\mathrm{Ai}'(x)} \simeq -\frac{\Gamma[1/3]}{3^{1/3}\Gamma(2/3)} + x \simeq -1{,}372 + x, \quad \text{pour} \quad x \to 0 \tag{15.93}$$

$$\frac{\mathrm{Ai}(x)}{\mathrm{Ai}'(x)} \simeq -\frac{1}{\sqrt{1/2 + x}}, \quad \forall x > 0, \quad \text{à 4 \% près} \quad . \tag{15.94}$$

15.5 Formules de Poisson

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n) = \sum_{m \in \mathcal{Z}} \int_{-\infty}^{\infty} f(y) e^{2i\pi m y} dy \tag{15.95}$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n + \varphi) = \sum_{m \in \mathcal{Z}} \int_{-\infty}^{\infty} f(y) e^{2i\pi m y} dy \;\; e^{2i\pi m \varphi}$$

et si f est une fonction paire :

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} f(n - \varphi) = \sum_{m \in \mathcal{Z}} \int_{-\infty}^{\infty} f(y) e^{2i\pi m y} dy \;\; \cos 2\pi m \varphi \quad . \tag{15.96}$$

15.6 Dépendances en température

$f(\epsilon) = 1/(e^{\epsilon} + 1)$ est le facteur de Fermi.

$$f'(\epsilon) = -\frac{\beta}{4\cosh^2 \frac{\beta\epsilon}{2}} \tag{15.97}$$

$$f'(\omega) = -\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\pi T t}{\sinh \pi T t} \cos \omega t dt \tag{15.98}$$

$$f(\omega) = -\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\pi T t}{\sinh \pi T t} \frac{\sin \omega t}{t} dt \tag{15.99}$$

$$\begin{aligned}\int d\epsilon \int d\epsilon' M(\epsilon - \epsilon') f(\epsilon) f(\epsilon') &= \int \frac{\pi^2 T^2}{(\sinh \pi T t)^2} \tilde{M}(t) dt \\ &= -\int_0^{\infty} d\omega M(\omega) \omega \coth \frac{\beta\omega}{2}\end{aligned} \tag{15.100}$$

où $\tilde{M}(t)$ est la transformée de Fourier de $M(\epsilon)$:

$$\tilde{M}(t) = \frac{1}{2\pi}\int M(\epsilon) e^{-i\epsilon t} d\epsilon$$

$F(\epsilon) = -\frac{1}{\beta}\ln(1 + e^{-\beta\epsilon})$ est l'intégrale du facteur de Fermi.

$$\int d\epsilon \int d\epsilon' M(\epsilon - \epsilon') F(\epsilon) F(\epsilon') = \int \frac{\pi^2 T^2}{(t \sinh \pi T t)^2} \tilde{M}(t) dt \tag{15.101}$$

$$\begin{aligned}\int d\epsilon \int d\epsilon' M(\epsilon - \epsilon') \frac{\partial f}{\partial \epsilon} \frac{\partial f}{\partial \epsilon'} &= \int \frac{\pi^2 T^2 t^2}{(\sinh \pi T t)^2} \tilde{M}(t) dt \\ &= \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{\beta\omega}{2} \coth \frac{\beta\omega}{2} - 1 \right) \frac{\beta}{\sinh^2 \beta\omega/2} M(\omega) d\omega \ .\end{aligned} \tag{15.102}$$

Pour une fonction $I(\omega)$ impaire :

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon - \omega) I(\omega) d\omega = \frac{1}{2}\int_0^{\infty} d\omega \left[\tanh \frac{\epsilon + \omega}{2T} + \tanh \frac{\omega - \epsilon}{2T} \right] I(\omega) d\omega \tag{15.103}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} f(\epsilon)[1 - f(\epsilon + \omega)]d\epsilon = \frac{\omega}{1 - e^{-\beta\omega}} \tag{15.104}$$

$$\int_{0}^{\infty} \frac{\sin \omega t}{\sinh \beta\omega} d\omega = \frac{\pi}{2\beta} \tanh \frac{\pi t}{2\beta} \tag{15.105}$$

$$\frac{e^{\beta\epsilon} + 1}{e^{\beta\omega} - 1} f(\epsilon - \omega) = \frac{1}{2}\left(\coth \frac{\beta\omega}{2} - \tanh \frac{\beta}{2}(\omega - \epsilon)\right) \quad . \tag{15.106}$$

Pour une fonction $P(\omega)$ paire :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \frac{P(\omega)}{1 - e^{-\beta\omega}} d\omega = \int_{0}^{\infty} P(\omega) \coth \frac{\beta\omega}{2} d\omega \quad . \tag{15.107}$$

Bibliographie

Chapitre 1

[1] R.A. Webb et S. Washburn, *Quantum interference fluctuations in disordered metals*, Physics Today (Dec. 1988), p. 2

[2] Y. Aharonov et D. Bohm, *Significance of electromagnetic potentials in quantum theory*, Phys. Rev. **115**, 485 (1959)

[3] Y. Imry et R.A. Webb, *Quantum interference and the Aharonov-Bohm effect*, Scientific American, **260**, 36 (1989)

[4] E.J. Post, *Sagnac effect*, Rev. Mod. Phys. **39**, 475 (1967) ; F. Hasselbach et M. Nicklaus, *Sagnac experiment with electrons: observation of the rotational phase shift of electron waves in vacuum*, Phys. Rev. A **48**, 143 (1993)

[5] M. Peshkin et A. Tonomura, *The Aharonov-Bohm effect*, Lecture notes in Physics **340**, Springer-Verlag, Heidelberg (1989)

[6] R.A. Webb, S. Washburn, C.P. Umbach et R.P. Laibowitz, *Observation of h/e Aharonov-Bohm oscillations in normal-metal rings*, Phys. Rev. Lett. **54**, 2696 (1985)

[7] D.Yu. Sharvin et Yu.V. Sharvin, *Magnetic-flux quantization in a cylindrical film of a normal metal*, JETP Lett. **34**, 272 (1981)

[8] A. Schuster, *Radiation through a foggy atmosphere*, Astrophys. J. **21**, 1 (1905) ; H.C. van de Hulst, *Multiple light scattering*, Vols. 1 et 2, Academic, New York (1980) ; S. Chandrasekhar, *Radiative transfer*, Dover, New York (1960)

[9] Y. Imry, *The physics of mesoscopic systems*, dans "Directions in condensed matter physics", G. Grinstein et Mazenko éditeurs, World Scientific (1986)

[10] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, seconde édition, Oxford (2002)

[11] F. Scheffold et G. Maret, *Universal conductance of light*, Phys. Rev. Lett. **81**, 5800 (1998)

[12] M. Born et E. Wolf, *Principles of optics*, chapitre X, 7e édition, Cambridge (1999)

[13] La dénomination « boîte de Hikami » est la plus couramment utilisée : S. Hikami, *Anderson localization in a nonlinear-σ-model representation*, Phys. Rev. B **24**, 2671 (1981). Cette notion a aussi été introduite par L.P. Gorkov, A. Larkin et D.E. Khmelnitskii, *Particle conductivity in a two-dimensional random potential*, JETP Lett. **30**, 228 (1979)

Chapitre 2

---

[14] D. Pines et P. Nozières, *The theory of quantum liquids*, Vol. 1, Addison-Wesley (1989)

[15] U. Frisch, *Wave propagation in random media*, dans "Probabilistic methods in applied mathematics", A.T. Barucha-Reid eds., Vol. 1, pp. 76-198, Academic Press New York (1968). On pourra aussi consulter : A. Ishimaru, *Wave propagation and scattering in random media*, 2 tomes, Academic Press (1978)

[16] On pourra consulter en particulier B. Douçot et R. Rammal, *On Anderson localization in nonlinear random media*, Europhys. Lett. **3**, 969 (1987) ; P. Devillard et B. Souillard, *Polynomially decaying transmission for the nonlinear Schrödinger equation in a random medium*, J. Stat. Phys. **43**, 423 (1986)

[17] L. Landau et E. Lifchitz, *Mécanique des fluides*, éditions Mir (1989)

[18] M. Belzons, E. Guazzelli et O. Parodi, *Gravity waves on a rough bottom: experimental evidence of one-dimensional localization*, J. Fluid Mech. **186**, 539 (1988) ; M. Belzons, P. Devillard, F. Dunlop, E. Guazzelli, O. Parodi et B. Souillard, *Localization of surface waves on a rough bottom: theories and experiments*, Europhys. Lett. **4**, 909 (1987)

[19] M.V. Berry, R.G. Chambers, M.D. Large, C. Upstill et J.C. Walmsley, *Wavefront dislocations in the Aharonov-Bohm effect and its water wave analogue*, Eur. J. Phys. **1**, 154 (1980)

[20] A. Tourin, A. Derode, P. Roux, B.A. van Tiggelen et M. Fink, *Time-dependent coherent backscattering of acoustic waves*, Phys. Rev. Lett. **79**, 3637 (1997) et A. Tourin, M. Fink et A. Derode, *Multiple scattering of sound*, Waves in Random Media **10**, 31 (2000)

[21] D. Sornette et B. Souillard, *Strong localization of waves by internal resonances*, Europhys. Lett. **7**, 269 (1988)

[22] L. Landau et E. Lifchitz, *Théorie de l'élasticité*, éditions Mir (1989)

[23] R.L. Weaver, *Wave chaos in elastodynamics* dans *Waves and imaging through complex media*, P. Sebbah ed., Kluwer (2001) ; B.A. van Tiggelen, L. Margerin et M. Campillo, *Coherent backscattering of elastic waves: Specific role of source, polarization, and near field*, J. Acous. Soc. Amer. **110**, 1291 (2001)

[24] S.M. Cohen et J. Machta, *Localization of third sound by a disordered substrate*, Phys. Rev. Lett. **54**, 2242 (1985)

[25] C. Dépollier, J. Kergomard et F. Laloë, *Anderson localisation of waves in acoustical random one-dimensional lattices*, Ann. Phys. (France) **11**, 457 (1986)

[26] E. Akkermans et R. Maynard, *Weak localization and anharmonicity of phonons*, Phys. Rev. B **32**, 7850 (1985)

[27] K. Arya, Z.B. Su et J. Birman, *Anderson localization of electromagnetic waves in a dielectric medium of randomly distributed metal particles*, Phys. Rev. Lett. **57**, 2725 (1986)

[28] M. Campillo et A. Paul, *Long range correlations in the diffuse seismic coda*, Science **229**, 547 (2003)

[29] C.W.J. Beenakker et H. van Houten, *Quantum transport in semiconductor nanostructures*, Solid State Physics, Vol. 44, H. Ehrenreich et D. Turnbull eds., Academic Press, New York (1991), pp. 1-228

[30] C.M. Marcus, R.M. Westervelt, P.F. Hopkins et A.C. Gossard, *Conductance fluctuations and quantum chaotic scattering in semiconductor microstructures*, Chaos **3**, 643 (1993) ; H. Baranger, R.A. Jalabert et A.A. Stone, *Quantum-chaotic scattering effects in semiconductor microstructures*, Chaos **3**, 665 (1993) ; K. Richter, D. Ullmo et R.A. Jalabert, *Orbital magnetism in the ballistic regime: geometrical effects*, Phys. Rep. **276**, 1 (1996)

[31] R. Prange et S. Girvin eds., *The quantum Hall effect*, Springer (1990)

[32] I.M. Lifschits, S.A. Gredeskul et L.A. Pastur, *Introduction to the theory of disordered systems*, John Wiley (1988)

[33] J.M. Luck, *Systèmes désordonnés unidimensionnels*, Aléa Saclay (1992)

[34] S.F. Edwards, *A new method for the evaluation of electric conductivity in metals*, Phil. Mag. **3**, 1020 (1958)

[35] P.W. Anderson, *Absence of diffusion in certain random lattices*, Phys. Rev. **109**, 1492 (1958)

[36] B. Kramer et A. MacKinnon, *Localization: theory and experiment*, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993)

[37] Pour une discussion de la substitution de Peierls, on pourra consulter: J. Callaway, *Quantum theory of solids*, chap. 6, Academic Press (1974)

[38] R. Peierls, *Zur theorie des diamagnetismus von leitungselektronen*, Z. Phys. **80**, 763 (1933) ; W. Kohn, *Theory of Bloch electrons in a magnetic field: the effective hamiltonian*, Phys. Rev. **115**, 1460 (1959) ; G.H. Wannier, *Dynamic of band electrons in electric and magnetic fields*, Rev. Mod. Phys. **34**, 645 (1962)

[39] M.L. Goldberger et K.M. Watson, *Collision theory*, J. Wiley, New York (1964)

[40] R.G. Newton, *Scattering theory of waves and particles*, Springer-Verlag (1982)

[41] H.C. van de Hulst, *Multiple light scattering*, Vols. 1 et 2, Academic, New York (1980)

[42] K. Gottfried, *Quantum Mechanics*, Addison-Wesley (1989)
[43] R. Loudon, *the quantum theory of light*, Clarendon Press, Oxford (1986)
[44] K. Huang, *Statistical mechanics*, Wiley (1987)
[45] L.D. Landau et E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics (Non-relativistic theory)*, sections 140 et 144, Pergamon (1977)
[46] D.S. Saxon, *Tensor scattering matrix for the electromagnetic field*, Phys. Rev. **100**, 1771 (1955)
[47] C.A. Mueller, T. Jonckheere, C. Miniatura et D. Delande, *Weak localization of light by cold atoms: the impact of quantum internal structure*, Phys. Rev. A **64**, 053804 (2001)
[48] B.A. van Tiggelen et R. Maynard, *Reciprocity and coherent backscattering of light*, dans *Wave propagation in complex media*, G. Papanicolaou ed., IMA, Springer (1997)
[49] M. Kerker, *The scattering of light and other electromagnetic radiations*, Academic, New York (1969) et C.F. Bohren et D.R. Huffman, *Absorption and scattering of light by small particles*, John Wiley (1983)
[50] J.D. Jackson, *Classical electrodynamics*, J. Wiley, New York (1975)
[51] N. Ashcroft et D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College, Philadelphia (1976)
[52] M. Abramowitz et I.A. Stegun, *Handbook of mathematical functions*, Dover (1972)
[53] A. Lagendijk et B.A. van Tiggelen, *Resonant multiple scattering of light*, Phys. Reports **270**, 143 (1996)
[54] Ce sujet est généralement traité dans les manuels de mécanique quantique. On pourra consulter par exemple, G. Baym, *Lectures on quantum mechanics*, W.A. Benjamin (1973)
[55] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc et G. Grynberg, *Processus d'interaction entre photons et atomes*, Savoirs actuels, InterEditions, Editions du CNRS (1988)
[56] A. Messiah, *Mécanique quantique*, chapitre XIII-V, Dunod, Paris (1960)
[57] A.R. Edmonds, *Angular momentum in quantum mechanics*, Princeton (1960)
[58] C.A. Müller et C. Miniatura, *Multiple scattering of light by atoms with internal degeneracy*, J. Phys. A **35**, 10163 (2002) ; A. Omont, *Étude théorique du déplacement des raies de résonance magnétique causé par la diffusion multiple cohérente de la lumière de résonance*, J. Phys. Rad. **26**, 576 (1965)
[59] L.D. Landau et E.M. Lifshitz, *Quantum Electrodynamics*, section 60, Pergamon (1982)

Chapitre 3

---

[60] M.L. Goldberger et K.M. Watson, *Collision theory*, J. Wiley, New York (1964)

[61] E.N. Economou, *Green's functions in quantum physics*, Springer-Verlag (1979)
[62] S. Doniach et E.H. Sondheimer, *Green's functions for solid state physicists*, Frontiers in Physics, W.A. Benjamin (1974)
[63] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov et I.Y. Dzyaloshinskii, *Quantum field theoretical methods in statistical physics*, Pergamon Press (1965)
[64] M. Abramowitz et I.A. Stegun, *Handbook of mathematical functions*, Dover (1972)
[65] N. Ashcroft et D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College, Philadelphia (1976)
[66] V.L. Berezinskii, *Kinetics of a quantum particle in a one-dimensional random potential*, JETP **38**, 620 (1974) ; A.A Abrikosov et I.A. Rizhkin, *Conductivity of quasi-one-dimensional metal systems*, Adv. Phys. **27**, 147 (1978)
[67] S. Hershfield, *Current conservation and resistance fluctuations in a four probe geometry*, Ann. Phys. **196**, 12 (1989)
[68] R. Berkovits et S. Feng, *Correlations in coherent multiple scattering*, Phys. Rep. **238**, 135 (1994)

Chapitre 4

---

[69] S. Chakravarty et A. Schmid, *Weak-localization: the quasiclassical theory of electrons in a random potential*, Phys. Rep. **140**, 193 (1986)
[70] B.A. van Tiggelen et R. Maynard, *Reciprocity and coherent backscattering of light*, dans *Wave propagation in complex media*, G. Papanicolaou ed., IMA, Springer (1997)
[71] V.N. Prigodin, B.L. Altshuler, K.B. Efetov et S. Iida, *Mesoscopic dynamical echo in quantum dots*, Phys. Rev. Lett. **72**, 546 (1994)
[72] S. Chandrasekhar, *Radiative transfer*, Dover, New York (1960).
[73] J.S. Langer et T. Neal, *Breakdown of the concentration expansion for the impurity potential resistivity of metals*, Phys. Rev. Lett. **16**, 984 (1966) ; T. Neal, *Breakdown of the concentration expansion for the zero-temperature impurity resistivity*, Phys. Rev. **169**, 508 (1968)
[74] Y. Pomeau et P. Résibois, *Time dependent correlation functions and mode-mode coupling theories*, Phys. Rep. C **19**, 63 (1975)
[75] T.R. Kirkpatrick et J.R. Dorfman, *Divergences and long-time tails in two- and three-dimensional quantum Lorentz gases*, Phys. Rev. A **28**, 1022 (1983)
[76] L.P. Gorkov, A. Larkin et D.E. Khmelnitskii, *Particle conductivity in a two-dimensional random potential*, JETP Lett. **30**, 228 (1979)
[77] S. Hikami, *Anderson localization in a nonlinear-σ-model representation*, Phys. Rev. B **24**, 2671 (1981)

[78] M.C.W. van Rossum et T.M. Nieuwenhuizen, *Multiple scattering of classical waves: microscopy, mesoscopy and diffusion*, Rev. Mod. Phys. **71**, 313 (1999)

[79] D. Vollhardt et P. Wölfle, *Diagrammatic, self-consistent treatment of the Anderson localization problem in $d \leq 2$ dimensions*, Phys. Rev. B **22**, 4666 (1980)

[80] C.L. Kane, R.A. Serota et P.A. Lee, *Long-range correlations in disordered metals*, Phys. Rev. B **37**, 6701 (1988)

[81] M.B. Hastings, A.D. Stone et H.U. Baranger, *Inequivalence of weak-localization and coherent backscattering*, Phys. Rev. B **50**, 8230 (1994)

[82] Ya.M. Blanter et A.D. Mirlin, *Correlations of eigenfunctions in disordered systems*, Phys. Rev. E **55**, 6514 (1997)

Chapitre 5

---

[83] W. Feller, *An introduction to probability theory and its applications*, John Wiley, New York (1950) et S. Chandrasekar dans A. Wax, *Selected papers on noise and stochastic processes*, Dover, New York (1954)

[84] H.S. Carlslaw et J.C. Jaeger, *Operational methods in applied mathematics*, Dover (1963)

[85] M. Berger, P. Gauduchon et E. Mazet, *Le spectre d'une variété Riemannienne*, Lectures Notes in Mathematics **194**, Springer Verlag (1971)

[86] A. Ishimaru, *Wave propagation and scattering in random media*, Vol. 1, chapitres 7 et 9, Academic Press, New York (1978)

[87] A. Schuster, *Radiation through a foggy atmosphere*, Astrophys. J. **21**, 1 (1905)

[88] S. Chandrasekhar, *Radiative transfer*, Dover, New York (1960)

[89] U. Frisch, *Probabilistic methods in applied mathematics*, Vol. 1, A.T. Bharucha-Reid ed., Academic, New York (1968)

[90] J.X. Xhu, D.J. Pine et D.A. Weitz, *Internal reflection of diffusive light in random media*, Phys. Rev. A **44**, 3948 (1991)

[91] A. Ishimaru, Y. Kuga, R. Cheung et K. Shimizu, *Scattering and diffusion of a beam wave in randomly distributed scatterers*, J. Opt. Soc. Am. **73**, 131 (1983)

[92] E. Akkermans, P.E. Wolf et R. Maynard, *Coherent backscattering of light by disordered media: Analysis of the peak line shape*, Phys. Rev. Lett. **56**, 1471 (1986)

[93] P.M. Morse et H. Feshbach, *Methods of theoretical Physics*, Mc Graw Hill (1953)

[94] M. Kac, *Can you hear the shape of a drum ?*, Amer. Math. Month. **73**S, 1 (1966)

[95] H.P. Baltes et E.R. Hilf, *Spectra of finite systems*, B.I. Wissenschaftsverlag, Wien, Zürich (1976)

[96] S. Rosenberg, *The Laplacian on a Riemannian manifold*, Cambridge University Press, Cambridge (1997)

[97] K. Stewartson et R.T. Waechter, *On hearing the shape of a drum: further results*, Proc. Camb. Phil. Soc. **69**, 353 (1971)

[98] V.E. Kravtsov et V.I. Yudson, *Topological spectral correlations in 2D disordered systems*, Phys. Rev. Lett. **82**, 157 (1999)

[99] S. Alexander, *Superconductivity of networks*, Phys. Rev. B **27**, 1541 (1983)

[100] B. Douçot et R. Rammal, *Interference effects and magnetoresistance oscillations in normal-metal networks: weak localization approach*, J. Phys. (Paris) **47**, 973 (1986)

[101] M. Pascaud et G. Montambaux, *Persistent currents on networks*, Phys. Rev. Lett. **82**, 4512 (1999)

[102] E. Akkermans, A. Comtet, J. Desbois, G. Montambaux et C. Texier, *Spectral determinant on quantum graphs*, Ann. Phys. **284**, 10 (2000)

[103] M. Pascaud, *Magnétisme orbital de conducteurs mésoscopiques désordonnés*, thèse, Université Paris-Sud (1998)

[104] D. Hofstadter, *Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields*, Phys. Rev. B **14**, 2239 (1976)

[105] C. Texier et G. Montambaux, *Weak localization in multiterminal networks of diffusive wires*, Phys. Rev. Lett. **92**, 186801 (2004)

Chapitre 6

---

[106] M. Robnik et M.V. Berry, *False time-reversal violation and energy level statistics: the role of anti-unitary symmetry*, J. Phys. A **19**, 669 (1986)

[107] Y. Aharonov et D. Bohm, *Significance of electromagnetic potentials in quantum theory*, Phys. Rev. **115**, 485 (1959)

[108] L'approximation eikonale a été utilisée par Gorkov dans la dérivation microscopique des équations de Ginzburg-Landau pour les supraconducteurs de type II sous champ magnétique. L.P. Gorkov, *Microscopic derivation of the Ginzburg-Landau equations in the theory of superconductivity*, Sov. Phys. JETP, **9**, 1364 (1959). Une excellente discussion de cette approximation est donnée dans A.L. Fetter et J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, MacGraw-Hill, p. 468 (1971)
Les déviations à l'approximation eikonale et l'effet de la quantification des niveaux de Landau sont discutés dans M. Rasolt et Z. Tesanovic, *Theoretical aspects of superconductivity in very high magnetic fields*, Rev. Mod. Phys. **64**, 709 (1992)

[109] P.A. Lee et M.G. Payne, *Pair propagator approach to fluctuation-induced diamagnetism in superconductors-effects of impurities*, Phys. Rev. B **5**, 923 (1972)

[110] P.G. de Gennes, *Superconductivity of metals and alloys*, Addison Wesley (1989)

[111] G. Baym, *Lectures on quantum mechanics*, W.A. Benjamin (1973)
[112] S. Hikami, A. Larkin et Y. Nagaoka, *Spin-orbit interaction and magnetoresistance in the two-dimensional random systems*, Prog. Theor. Phys. **63**, 707 (1980) ; A.A. Golubentsev, *Direct calculation of the conductivity of films with magnetic impurities*, JETP Lett. **41**, 642 (1985)
[113] S. Chakravarty et A. Schmid, *Weak localization: the quasiclassical theory of electrons in a random potential*, Phys. Rep. **140**, 193 (1986)
[114] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Quantum Mechanics (Non-relativistic theory)*, sections 140 et 144, Pergamon (1977)
[115] G. Grüner et F. Zawadowski, *Magnetic impurities in non-magnetic metals*, Rep. Prog. Phys. **37**, 1497 (1974)
[116] M.B. Maple, *Magnetism*, Vol. 5, H. Suhl ed., Academic, New York (1973) ; C. Van Haesendonck, J. Vranken et Y. Bruynseraede, Phys. Rev. Lett. **58**, 1968 (1987)
[117] G. Grüner et A. Zawadowski, *Magnetic impurities in non-magnetic metals*, Rep. Prog. Phys. **37**, 1497 (1974)
[118] F. Pierre, A.B. Gougam, A. Anthore, H. Pothier, D. Esteve et N. Birge, *Dephasing of electrons in mesoscopic metal wires*, Phys. Rev. B **68**, 85413 (2003)
[119] A. Messiah, *Mécanique quantique*, Dunod, Paris (1960)
[120] G. Bergmann, *Weak-localisation in thin films*, Phys. Rep. **107**, 1 (1984)
[121] E. Akkermans, P.E. Wolf, R. Maynard et G. Maret, *Theoretical study of the coherent backscattering of light by disordered media*, J. Phys. (France) **49**, 77 (1988)
[122] P.E. Wolf, G. Maret, E. Akkermans et R. Maynard, *Optical coherent backscattering by random media: An experimental study*, J. Phys. (France) **49**, 63 (1988)
[123] A.A. Golubentsev, *Suppression of interference effects in multiple scattering of light*, Sov. Phys. JETP **59**, 26 (1984)
[124] M.J. Stephen et G. Cwillich, *Rayleigh scattering and weak localization: Effects of polarization*, Phys. Rev. B **34**, 7564 (1986)
[125] G. Maret et P.E. Wolf, *Multiple light scattering from disordered media. The effect of brownian motion of scatterers*, Z. Phys. B **65**, 409 (1987)
[126] M.J. Stephen, *Temporal fluctuations in wave propagation in random media*, Phys. Rev. B **37**, 1 (1988)
[127] D.J. Pine, D.A. Weitz, P.M. Chaikin et E. Herbolzheimer, *Diffusing wave spectroscopy*, Phys. Rev. Lett. **60**, 1134 (1988)
[128] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, seconde édition, Oxford (2002) ; Y. Imry, *Elementary explanation of the inexistence of decoherence at zero temperature for systems with purely elastic scattering*, arXiv:cond-mat/0202044
[129] P.B. Gilkey, *Invariance theory, the heat equation and the Atiyah-Singer index theorem*, CRC Press (1995)

[130] R.P. Feynman et A.R. Hibbs, *Quantum mechanics and path integrals*, McGraw-Hill, New York (1965) ; G. Roepstorff, *Path integral approach to quantum physics: an introduction*, Springer-Verlag, New York (1994)

[131] A. Comtet, J. Desbois et S. Ouvry, *Winding of planar brownian curves*, J. Phys A **23**, 3562 (1990) ; B. Duplantier, *Areas of planar Brownian curves*, J. Phys A **22**, 3033 (1989)

[132] S.F. Edwards, *Statistical mechanics with topological constraints: I*, Proc. Phys. Soc. **91**, 513 (1967). On pourra aussi consulter F.W. Wiegel, *Introduction to path-integral methods in physics and polymer science*, World Scientific (1986)

[133] B.L. Altshuler, A.G. Aronov et D.E. Khmelnitskii, *Effects of electron-electron collisions with small energy transfers on quantum localisation*, J. Phys. C **15**, 7367 (1982)

[134] G. Bergmann, *Weak anti-localization – an experimental proof for the destructive interference of rotated spin 1/2*, Sol. Stat. Com. **42**, 815 (1982)

[135] E. Akkermans, Ch. Miniatura et C.A. Müller, *Phase coherence times in the multiple scattering of photons by cold atoms*, arXiv:cond-mat/0206298 (2002)

[136] C.A. Mueller, T. Jonckheere, C. Miniatura et D. Delande, *Weak localization of light by cold atoms: the impact of quantum internal structure*, Phys. Rev. A **64**, 053804 (2001)

[137] C.A. Müller et C. Miniatura, *Multiple scattering of light by atoms with internal degeneracy*, J. Phys. A **35**, 10163 (2002). Voir aussi : J.P. Barrat, *Étude de la diffusion multiple cohérente de la lumière de résonance optique. Application au niveau 6^3P_1 du mercure*, J. Phys. Rad. **20**, 633 (1959) ; A. Omont, *Étude théorique du déplacement des raies de résonance magnétique causé par la diffusion multiple cohérente de la lumière de résonance*, J. Phys. Rad. **26**, 576 (1965) ; M.I. Dyakonov et V.I. Perel, *Coherence relaxation during diffusion of resonance radiation*, Sov. Phys. JETP **20**, 997 (1965)

[138] A.R. Edmonds, *Angular momentum in quantum mechanics*, Princeton (1960)

Chapitre 7

---

[139] C.L. Kane, R.A. Serota et P.A. Lee, *Long-range correlations in disordered metals*, Phys. Rev. B **37**, 6701 (1988)

[140] J. Rammer, *Quantum transport theory*, Frontiers in Physics, Perseus books (1998)

[141] P.M. Chaikin et T.C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press (2000)

[142] N. Ashcroft et D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College, Philadelphia (1976)

[143] D.J. Thouless, *Electrons in disordered systems and the theory of localization*, Phys. Rep. **13**, 93 (1974) ; J.T. Edwards et D.J. Thouless, *Numerical studies of localization in disordered systems*, J. Phys. C **5** 807 (1972) ; E. Akkermans et G. Montambaux, *Conductance and statistical properties of metallic spectra*, Phys. Rev. Lett. **68**, 642 (1992)

[144] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello et T.V. Ramakrishnan, *Scaling theory of localization: absence of quantum diffusion in two dimensions*, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979)

[145] S. Chakravarty et A. Schmid, *Weak-localization: the quasiclassical theory of electrons in a random potential*, Phys. Rep. **140**, 193 (1986)

[146] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov et I.Y. Dzyaloshinskii, *Quantum field theoretical methods in statistical physics*, Pergamon Press (1965)

[147] S. Doniach et E.H. Sondheimer, *Green's functions for solid state physicists*, Frontiers in Physics, W.A. Benjamin (1974)

[148] P. Wölfle et R.N. Bhatt, *Electron localization in anisotropic systems*, Phys. Rev. B **30**, 3452 (1984)

[149] H. Bouchiat, *Experimental signatures of phase coherent transport*, Les Houches Summer School, Session LXI, E. Akkermans, G. Montambaux, J.-L. Pichard et J. Zinn-Justin eds., Elsevier Science (1995)

[150] B. Kramer et A. MacKinnon, *Localization: theory and experiment*, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993)

[151] P.A. Lee et T.V. Ramakrishnan, *Disordered electronic systems*, Rev. Mod. Phys. **57**, 287 (1985)

[152] B.L.Altshuler, A.G. Aronov, M.E. Gershenson et Yu.V. Sharvin, *Quantum effects in disordered metal films*, Physics Review, Vol. 9, p. 225, Soviet Scientific reviews (1987)

[153] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Oxford (1997)

[154] G. Bergmann, *Weak localization in thin films*, Phys. Rep. **107**, 1 (1984)

[155] B.L. Altshuler et A.G. Aronov, *Magnetoresistance of Thin Films and of Wires in a Longitudinal Magnetic Field*, JETP Lett. **33**, 499 (1981)

[156] S. Hikami, A. Larkin et Y. Nagaoka, *Spin-orbit interaction and magnetoresistance in the two-dimensional random systems*, Prog. Theor. Phys. **63**, 707 (1980)

[157] B. Pannetier, J. Chaussy, R. Rammal et P. Gandit, *Magnetic flux quantization in the weak-localizalization regime of a nonsuperconducting metal*, Phys. Rev. Lett. **53**, 718 (1984)

[158] I.S. Gradshsteyn et I.M Ryzhik, *Table of integrals, series and products*, Academic Press (1980)

[159] D.Yu. Sharvin et Yu.V. Sharvin, *Magnetic flux quantization in a cylindrical film of a normal metal*, JETP Lett. **34**, 272 (1981)

[160] B.L. Altshuler, A.G. Aronov et B.Z. Spivak, *The Aharonov-Bohm effect in disordered conductors*, JETP Lett. **33**, 94 (1981)

[161] S. Washburn et R.A. Webb, *Aharonov-Bohm effect in normal metal, quantum coherence and transport*, Adv. Phys. **35**, 412 (1986)

[162] A.G. Aronov et Yu.V. Sharvin, *Magnetic flux effects in disordered conductors*, Rev. Mod. Phys. **59**, 755 (1987)

[163] B. Pannetier, J. Chaussy et R. Rammal, *First observation of Altshuler-Aronov-Spivak effect in gold and copper*, Phys. Rev. B **31**, 3209 (1985)

[164] B. Pannetier, J. Chaussy et R. Rammal, *Quantum interferences in superconducting and normal metal arrays*, Phys. Scripta. **13**, 245 (1986)

[165] B. Douçot et R. Rammal, *Quantum Oscillations in Normal-Metal Networks*, Phys. Rev. Lett. **55**, 1148 (1985) et *Interference effects and magnetoresistance oscillations in normal metal networks: 1-weak localization approach*, J. Phys. (France) **47**, 973 (1986)

[166] R.A. Webb, S. Washburn, C.P. Umbach et R.P. Laibowitz, *Observation of h/e Aharonov-Bohm oscillations in normal-metal rings*, Phys. Rev. Lett. **54**, 2696 (1985)

[167] M. Murat, Y. Gefen et Y. Imry, *Ensemble and temperature averaging of quantum oscillations in normal- metal rings*, Phys. Rev. B **34**, 657 (1986)

[168] J. Rammer et A.L. Shelankov, *Weak localization in inhomogeneous magnetic fields*, Phys. Rev. B **36**, 3135 (1987)

[169] S.J. Bending, K. von Klitzing et K. Ploog, *Weak localization in a distribution of magnetic flux tubes*, Phys. Rev. Lett. **65**, 1060 (1990)

[170] R.P. Feynman, *The Feynman lectures on physics, Electromagnetism*, section 22-6, Addison-Wesley (1970)

[171] D. Vollhardt et P. Wölfle, *Self-consistent theory of Anderson localization*, Proc. fourth Taniguchi International Symposium on the Theory of Condensed Matter, p. 26 Springer (1982) ; *Diagrammatic self-consistent treatment of the Anderson localization problem in* $d \leq 2$, Phys. Rev. B **22**, 4666 (1980)

[172] D. Forster, *Hydrodynamic fluctuations, broken symmetry, and correlation functions*, Addison-Wesley (1983)

[173] R. Landauer, *Spatial variation of currents and fields due to localized scatterers in metallic conduction*, IBM J. Res. Develop. **1**, 233 (1957) et *Electrical resistance of disordered one-dimensional lattices*, Phil. Mag. **21**, 863 (1970)

[174] Pour plus de détail le lecteur est invité à consulter S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge (1995) ; Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, Oxford (1997) et IBM J. Res. Develop. **32**, 304 (1988)

[175] M. Büttiker, *Symmetry of electrical conduction*, IBM J. Res. Develop. **32**, 317 (1988)

[176] D.S. Fisher et P.A. Lee, *Relation between the conductivity and the transmission matrix*, Phys. Rev. B **23**, 6851 (1981)

[177] C.W.J. Beenakker, *Random-matrix theory of quantum transport*, Rev. Mod. Phys. **69**, 731 (1997)

[178] M.B. Hastings, A.D. Stone et H.U. Baranger, *Inequivalence of weak-localization and coherent backscattering*, Phys. Rev. B **50**, 8230 (1994)

Chapitre 8

[179] A. Schuster, *Radiation through a foggy atmosphere*, Astrophys. J. **21**, 1 (1905)

[180] K.M. Watson, *Multiple scattering of electromagnetic waves in an underdense plasma*, J. Math. Phys. **10**, 688 (1969)

[181] D.A. de Wolf, *Electromagnetic reflection from an extended turbulent medium: cumulative forward-scatter single-backscatter approximation*, IEEE Transactions on Antennas and Propagation **19**, 254 (1971)

[182] Yu.N. Barabanenkov, *Wave corrections to the transport equation for backscattering*, Isz.VUZ Radiofiz. **16**, 88 (1973)

[183] A.A. Golubentsev, *Suppression of interference effects in multiple scattering of light*, Sov. Phys. JETP **59**, 26 (1984)

[184] E. Akkermans et R. Maynard, *Weak localization of waves*, J. Phys. Lett. (France) **46**, L-1045 (1985)

[185] Y. Kuga et A. Ishimaru, J. Opt. Soc. Am. A **8**, 831 (1984) ; L. Tsang et A. Ishimaru, *Backscattering enhancement of random discrete scatterers*, J. Opt. Soc. Am. A **1**, 836 (1984) ; L. Tsang et A. Ishimaru, *Theory of backscattering enhancement of random discrete isotropic scatterers based on the summation of all ladder and cyclical diagrams*, J. Opt. Soc. Am. A **2**, 1331 (1985) et L. Tsang et A. Ishimaru, *Radiative wave and cyclical transfer equation for dense nontenuous media*, J. Opt. Soc. Am. A **2**, 2187 (1985)

[186] P.E. Wolf et G. Maret, *Weak localization and coherent backscattering of photons in disordered media*, Phys. Rev. Lett. **55**, 2696 (1985)

[187] M.P. van Albada et A. Lagendijk, *Observation of weak localization of light in a random medium*, Phys. Rev. Lett. **55**, 2692 (1985)

[188] Pour une revue préliminaire et une liste de références jusqu'en 1991, on pourra consulter Yu.N. Barabenenkov, Yu.A. Kravtsov, V.D. Ozrin et A.I. Saichev, *Enhanced backscattering in optics*, Progress in Optics, Vol. XXIX, North-Holland (1991)

[189] E. Akkermans, P.E. Wolf et R. Maynard, *Coherent backscattering of light by disordered media: Analysis of the peak line shape*, Phys. Rev. Lett. **56**, 1471 (1986)

[190] E. Akkermans, P.E. Wolf, R. Maynard et G. Maret, *Theoretical study of the coherent backscattering of light by disordered media*, J. Phys. (France) **49**, 77 (1988)

[191] M.B. van der Mark, M.P. van Albada et A. Lagendijk, *Light scattering in strongly scattering media: Multiple scattering and weak localization*, Phys. Rev. B **37**, 3575 (1988)

[192] H.C. van de Hulst, *Multiple light scattering*, Vols. 1 et 2, Academic, New York (1980)

[193] A. Ishimaru, *Wave propagation and scattering in random media*, Vols. 1 et 2, Academic Press, New York (1978)

[194] On pourra consulter la référence [188] (p. 142 et suivantes) pour une discussion de ce point.

[195] Pour une solution exacte du problème de la rétrodiffusion cohérente pour des ondes scalaires et des collisions isotropes : E.E. Gorodnichev, S.L. Dudarev et D.B. Rogozkin, *Coherent wave backscattering by random medium. Exact solution of the albedo problem*, Phys. Lett. A **144**, 48 (1990)

[196] A. Ishimaru, Y. Kuga, R.L.T. Cheung et K. Shimizu, *Scattering and diffusion of a beam wave in randomly distributed scatterers*, J. Opt. Soc. Am. **73**, 131 (1983)

[197] A. Ishimaru et L. Tsang, *Backscattering enhancement of random discrete scatters of moderate sizes*, J. Opt. Soc. Am. A **5**, 228 (1988)

[198] P.E. Wolf, G. Maret, E. Akkermans et R. Maynard, *Optical coherent backscattering by random media: An experimental study*, J. Phys. (France) **49**, 63 (1988)

[199] M. Stephen et G. Cwillich, *Rayleigh scattering and weak localization: effects of polarization*, Phys. Rev. B **34**, 7564 (1986)

[200] M. Kaveh, M. Rosenbluh, I. Edrei et I. Freund, *Weak localization and light scattering from disordered solids*, Phys. Rev. Lett. **57**, 2049 (1986)

[201] S. Etemad, R. Thomson et M.J. Andrejco, *Weak localization of photons: Universal fluctuations and ensemble averaging*, Phys. Rev. Lett. **57**, 575 (1986)

[202] D.S. Wiersma, M.P. van Albada, B.A. van Tiggelen et A. Lagendijk, *Experimental evidence for recurrent multiple scattering events of light in disordered media*, Phys. Rev. Lett. **74**, 4193 (1995) et B.A. van Tiggelen, D.S. Wiersma et A. Lagendijk, *Self-consistent theory for the enhancement factor in coherent backscattering*, Europhys. Lett. **30**, 1 (1995)

[203] D.S. Wiersma, *Light in strongly scattering and amplifying random media*, PhD thesis, Amsterdam (1995)

[204] M.P. van Albada, M.B. van der Mark et A. Lagendijk, *Observation of weak localization of light in a finite slab: anisotropy effects and light path classification*, Phys. Rev. Lett. **58**, 361 (1987)

[205] M.I. Mishchenko, *Enhanced backscattering of polarized light from discrete random media: calculations in exactly the backscattering direction*, J. Opt. Soc. Am. A **9**, 4578 (1992) et M.I. Mishchenko, *Diffuse and coherent backscattering by discrete random media. I. Radar reflectivity, polarization ratios, and enhancement factors for a half-space of polydisperse, nonabsorbing and absorbing spherical particles*, J. Quant. Spect. Radiat. Transfer **56**, 673 (1996)

[206] T. Okamoto et T. Asakura, *Enhanced backscattering of partially coherent light*, Opt. Lett. **21**, 369 (1996)

[207] R. Lenke et G. Maret, *Multiple scattering of light: coherent backscattering and transmission*, Progr. Colloid Polym. Sci. **104**, 126 (1997)

[208] H.C. Bryant et J. Nelson, *The glory*, Scientific American **60** (juillet 1974)

[209] R. Lenke, U. Mack et G. Maret, *Comparison of the "glory" with coherent backscattering of light in turbid media*, J. Opt. A: Pure Appl. Opt. **4**, 309 (2002) et R. Lenke, R. Tweer et G. Maret, *Coherent backscattering of turbid samples containing large Mie spheres*, J. Opt. A: Pure Appl. Opt. **4**, 293 (2002)

[210] G. Muller, *Seeliger analyzed observations*, Publ. Obs. Potsdam **8**, 193 (1893)

[211] W.W. Montgomery et R.H. Kohl, *Opposition effect experimentation*, Optics Lett. **5**, 546 (1980)

[212] B. Hapke et D. Blewett, *Coherent backscatter model for the unusual radar reflectivity of icy satellites*, Nature **352**, 46 (1991), B. Hapke, R.M. Nelson et W.D. Smythe, *The opposition effect of the Moon: the contribution of coherent backscatter*, Science **260**, 509 (1993)

[213] B. Lyot, *Recherche sur la polarisation de la lumière des planètes et de quelques substances terrestres*, Ann. Obs. Paris **8**, 89 (1929)

[214] M.I. Mishchenko, *On the nature of the polarization opposition effect exhibited by Saturn's rings*, The Astrophysical Journal **411**, 351 (1993)

[215] G. Labeyrie, F. de Tomasi, J.-C. Bernard, C.A. Müller, C. Miniatura et R. Kaiser, *Coherent backscattering of light by cold atoms*, Phys. Rev. Lett. **83**, 5266 (1999) et G. Labeyrie, C.A. Müller, D.S. Wiersma, C. Miniatura and R. Kaiser, *Observation of coherent backscattering of light by cold atoms*, J. Opt. B **2**, 672 (2000)

[216] C.A. Müller, T. Jonckheere, C. Miniatura et D. Delande, *Weak localization of light by cold atoms: the impact of quantum internal structure*, Phys. Rev. A **64**, 053804 (2001) ; T. Jonckheere, C.A. Müller, R. Kaiser, C. Miniatura et D. Delande, *Multiple scattering of light by atoms in the weak localization regime*, Phys. Rev. Lett. **85**, 4269 (2000) ; C.A. Müller, PhD thesis, Munich/Nice (2001), non publié, et C.A. Müller et C. Miniatura, *Weak localisation of light by atoms with quantum internal structure*, dans *Wave scattering in complex media, from theory to applications*, S.E. Skipetrov et B.A. van Tiggelen eds., NATO series, Kluwer, Dordrecht (2003)

[217] M. Fink, *Time reversed acoustics*, Physics Today, p. 34, mars (1997)

[218] A. Tourin, A. Derode, P. Roux, B.A. van Tiggelen et M. Fink, *Time-dependent coherent backscattering of acoustic waves*, Phys. Rev. Lett. **79**, 3637 (1997)

[219] R. Vreeker, M.P. van Albada, R. Sprik et A. Lagendijk, Phys. Lett. A **132**, 51 (1988)

Chapitre 9

[220] B.J. Berne et R. Pecora, *Dynamic light scattering with applications to chemistry, biology and physics*, John Wiley (1976)

[221] R. Loudon, *The quantum theory of light*, Clarendon Press, Oxford (1986)

[222] M.C. Teich et B. Saleh, *Photon bunching and antibunching*, Progress in Optics **26**, 1 (1988)

[223] G. Maret et P.E. Wolf, *Multiple light scattering from disordered media. The effect of brownian motion of scatterers*, Z. Phys. B **65**, 409 (1987)

[224] P.E. Wolf et G. Maret, *Dynamics of brownian particles from strongly multiple light scattering*, p. 37, Scattering in volumes and surfaces, M. Nieto-Vesperinas et J.C. Dainty eds., North-Holland (1990)

[225] D.J. Pine, D.A. Weitz, P.M. Chaikin et E. Herbolzheimer, *Diffusing wave spectroscopy*, Phys. Rev. Lett. **60**, 1134 (1988)

[226] E. Guyon, J.P. Hulin et L. Petit, *Hydrodynamique physique*, InterEditions/Editions du CNRS (1991)

[227] D. Bicout, E. Akkermans et R. Maynard, *Dynamical correlations for multiple light scattering in laminar flow*, J. Phys. I **1**, 471 (1991)

[228] X.L. Wu, D.J. Pine, J.S. Huang, P.M. Chaikin et D.A. Weitz, *Diffusing-wave spectroscopy in a shear flow*, J. Opt. Soc. Am. B **7**, 15 (1990)

Chapitre 10

[229] B. Kramer et A. MacKinnon, *Localization: theory and experiment*, Rep. Prog. Phys. **56**, 1469 (1993)

[230] T. Ohtsuki, K. Slevin et T. Kawarabayashi, *Review of recent progress on numerical studies of the Anderson transition*, Ann. der Phys. **8**, 655 (1999)

[231] O. Bohigas, *Random matrix theories and chaotic dynamics* dans *Chaos and Quantum Physics, Proceedings of the Les Houches Summer School, Session LII*, M.J. Giannoni, A. Voros et J. Zinn-Justin eds., North-Holland, Amsterdam (1991), p. 91

[232] O. Bohigas, M.J. Giannoni et C. Schmit dans *Quantum Chaos and Statistical Nuclear Physics*, T.H. Seligman et N. Nishioka eds., Lecture Notes in Physics, Vol. 263, Springer, Berlin (1986), p. 18

[233] D. Delande, *Chaos in atomic and molecular physics* dans *Chaos and Quantum Physics, Proceedings of the Les Houches Summer School, Session LII*, M.J. Giannoni, A. Voros et J. Zinn-Justin eds., North-Holland, Amsterdam (1991), p. 665

[234] H.-J. Stöckmann, *Quantum chaos: an introduction*, Cambridge University Press (1999)

[235] La littérature sur ce problème dit du « chaos quantique » est phénoménale ! Ce sujet sort du cadre de ce livre et nous ne donnerons ici qu'un petit nombre de references qui constituent un cadre de lecture : A. Ozorio de Almeida, *Hamiltonian systems: Chaos and quantization*, Cambridge University Press (1988) ; M. Tabor, *Chaos and integrability in nonlinear dynamics. An introduction*, Wiley, New York (1989) ; F. Haake, *Quantum signatures of chaos*, Springer Berlin (1992) et B. Eckardt, Phys. Reports **163**, 205 (1988)

[236] E.P. Wigner, *Statistical properties of real symmetric matrices with many dimensions*, Can. Math. Congr. Proc., Univ. of Toronto Press, Toronto, Canada (1957), p. 174

[237] E.P. Wigner, *On the distribution of the roots of certain symmetric matrices*, Ann. Math. **67**, 325 (1958) ; F.J. Dyson, *Statistical theory of energy levels of complex systems I-III*, J. Math. Phys. **3**, 140 (1962) ; F.J. Dyson et M.L. Mehta, *ibid IV-V*, J. Math. Phys. **4**, 701 (1963)

[238] M.L. Mehta, *Random Matrices*, Academic Press, New York (1991)

[239] L.P. Gor'kov et G.M. Éliashberg, *Minute metallic particles in an electromagnetic field*, Sov. Phys. JETP **21**, 940 (1965)

[240] B.L. Altshuler et B. Simons, *Universalities: from Anderson localization to quantum chaos*, École d'été des Houches, *Mesoscopic Quantum Physics*, Session LXI, E. Akkermans, G. Montambaux, J.-L. Pichard et J. Zinn-Justin eds., Elsevier, Amsterdam (1995)

[241] R.S. Whitney, I.V. Lerner et R.A. Smith, *Can the trace formula describe weak localization ?*, Waves in Random Media **9**, 179 (1999)

[242] K.B. Efetov, *Supersymmetry and theory of disordered metals*, Adv. Phys. **32**, 53 (1983) ; K.B. Efetov, *Supersymmetry in disorder and Chaos*, Cambridge University Press (1997)

[243] T. Guhr, A. Müller-Groeling et H.A. Weidenmüller, *Random-matrix theories in quantum physics: common concepts*, Phys. Rep. **299**, 189 (1998)

[244] A.D. Mirlin, *Statistics of energy levels and eigenfunctions in disordered and chaotic systems: Supersymmetry approach*, Proceedings of the International School of Physics "Enrico Fermi", Course CXLIII, G. Casati, I. Guarneri et U. Smilansky eds., IOS Press, Amsterdam (2000)

[245] N. Dupuis et G. Montambaux, *Aharonov-Bohm flux and statistics of energy levels in metals*, Phys. Rev. B **43**, 14390 (1991)

[246] B.L. Al'tshuler and B. Shklovskiĭ, *Repulsion of energy levels and conductivity in small metal samples*, Sov. Phys. JETP **64**, 127 (1986)

[247] N. Argaman, Y. Imry et U. Smilansky, *Semiclassical analysis of spectral correlations in mesoscopic systems*, Phys. Rev. B **47**, 4440 (1993)

[248] J.H. Hannay et A.M. Ozorio de Almeida, *Periodic orbits and a correlation function for the semiclassical density of states*, J. Phys. A **17**, 3429 (1983)

[249] V.N. Prigodin, B.L. Al'tshuler, K.B. Efetov et S. Iida, *Mesoscopic dynamical echo in quantum dots*, Phys. Rev. Lett. **72**, 546 (1994).

[250] A. Altland et Y. Gefen, *Spectral statistics of nondiffusive disordered electron systems: A comprehensive approach*, Phys. Rev. B **51**, 10671 (1995)

[251] A. Pandey et M.L. Mehta, *Gaussian ensembles of random hermitian matrices intermediate between orthogonal and unitary ones*, Comm. Math. Phys. **87**, 449 (1983)

[252] A. Altland, S. Iida et K.B. Efetov, *The cross-over between orthogonal and unitary symmetry in small disordered systems: a supersymmetry approach*, J. Phys. A **26**, 3545 (1993)

Chapitre 11

---

[253] S. Washburn, *Fluctuations in the extrinsic conductivity of disordered metals*, IBM Journ. Res. Dev. **32**, 335 (1988)

[254] A.D. Stone, *Magnetoresistance fluctuations in mesoscopic wires and rings*, Phys. Rev. Lett. **54**, 2692 (1985)

[255] P.A. Lee et A.D. Stone, *Universal conductance fluctuations in metals*, Phys. Rev. Lett. **55**, 1622 (1985)

[256] B.L. Al'tshuler, *Fluctuations in the extrinsic conductivity of disordered conductors*, Sov. Phys. JETP Lett. **41**, 648 (1985)

[257] B.L. Al'tshuler et B. Shklovskiĭ, *Repulsion of energy levels and conductivity of small metal samples*, Sov. Phys. JETP **64**, 127 (1986)

[258] P.A. Lee, D. Stone et H. Fukuyama, *Universal conductance fluctuations in metals: effects of finite temperature, interactions, and magnetic field*, Phys. Rev. B **35**, 1039 (1987)

[259] I. Aleiner et Ya. Blanter, *Inelastic scattering time for conductance fluctuations*, Phys. Rev. B **65**, 115317 (2002)

[260] R.A. Serota, S. Feng, C. Kane et P.A. Lee, *Conductance fluctuations in small disordered conductors: thin-lead and isolated geometries*, Phys. Rev. B **36**, 5031 (1987)

[261] M. Pascaud et G. Montambaux, *Interference effects in mesoscopic disordered rings and wires*, Phys-Uspekhi **41**, 182 (1998)

[262] V. Chandrasekhar, P. Santhanam et D.E Prober, *Effect of spin-orbit ans spin-flip scattering on conductance fluctuations*, Phys. Rev. B **42**, 6823 (1990)

[263] S. Feng, *Mesoscopic conductance fluctuations in the presence of spin-orbit coupling and Zeeman splitting*, Phys. Rev. B **39**, 8722 (1989)

Chapitre 12

[264] J.W. Goodman, *Statistical Optics*, Wiley, New York (1985)

[265] F. Scheffold, W. Hartl, G. Maret et E. Matijevic, *Observation of long-range correlations in temporal intensity fluctuations of light*, Phys. Rev. B **56**, 10942 (1997)

[266] B. Shapiro, *Large intensity fluctuations for wave propagation in random media*, Phys. Rev. Lett. **57**, 2168 (1986)

[267] I. Freund, M. Rosenbluh et S. Feng, *Memory effects in propagation of optical waves through disordered media*, Phys. Rev. Lett. **61**, 2328 (1988)

[268] S. Feng et P.A. Lee, *mesoscopic conductors and correlations in laser speckle patterns*, Science **251**, 633 (1991)

[269] R. Berkovits et S. Feng, *Correlations in coherent multiple scattering*, Phys. Rep. **238**, 135 (1994)

[270] S. Feng, C. Kane, P.A. Lee et A.D. Stone, *Correlations and fluctuations of coherent wave transmission through disordered media*, Phys. Rev. Lett. **61**, 834 (1988)

[271] *Mesoscopic Phenomena in Solids*, B.L. Altshuler, P.A. Lee et R.A. Webb eds., North Holland, Amsterdam (1991)

[272] M.C.V. van Rossum et Th. M. Nieuwenhuizen, *Multiple scattering of classical waves: microscopy, mesoscopy and diffusion*, Rev. Mod. Phys. **71**, 313 (1999)

[273] R. Pnini, *Correlation of speckle in random media*, dans *Waves and imaging through complex media*, P. Sebbah ed., Kluwer (2001), p. 391

[274] M.J. Stephen, *interference, fluctuations and correlations in the diffusive scattering from a disordered medium*, dans [271]

[275] F. Scheffold et G. Maret, *Universal conductance of light*, Phys. Rev. Lett. **81**, 5800 (1998)

[276] J.F. de Boer, M.P. van Albada et A. Lagendijk, *Transmission and intensity correlations in wave propagation through random media*, Phys. Rev. B **45**, 658 (1992)

[277] B.L. Altshuler, V.E. Kravtsov et I.V. Lerner, *Distribution of mesoscopic fluctuations and relaxation processes in disordered conductors*, dans [271] et I.V. Lerner, *Rigorous perturbation results in the theory of mesoscopic fluctuations: distribution functions and time-dependent phenomena* dans *Quantum coherence in mesoscopic systems*, B. Kramer ed., Plenum (1991)

[278] P.E. Wolf, G. Maret, E. Akkermans et R. Maynard, *Optical coherent backscattering by random media: An experimental study*, J. Phys. (France) **49**, 63 (1988)

[279] J.F. de Boer, M.C.W. van Rossum, M.P. van Albada, T.M. Nieuwenhuizen et A. Lagendijk, *Probability distribution of multiple scattered light measured in total transmission*, Phys. Rev. Lett. **73**, 2567 (1994)

[280] T.M. Nieuwenhuizen et M.C.W. van Rossum, *Intensity distributions of waves transmitted through a multiple scattering medium*, Phys. Rev. Lett. **74**, 2674 (1995)

[281] M. Stoytchev et A.Z. Genack, *Measurement of the probability distribution of total transmission in random waveguides*, Phys. Rev. Lett. **79**, 309 (1997)

[282] E. Kogan et M. Kaveh, *Random matrix theory approach to the intensity distributions of waves propagating in a random medium*, Phys. Rev. B **52**, R3813 (1995)

[283] S.A. van Langen, P.W. Brouwer et C.W.J. Beenakker, *Non perturbative calculation of the probability distribution of plane wave transmission through a disordered waveguide*, Phys. Rev. B **53**, R1344 (1996)

[284] A.Z. Genack, N. Garcia et W. Polkosnik, *Long-range intensity correlation in random media*, Phys. Rev. Lett. **65**, 2129 (1990)

[285] P. Sebbah, R. Pnini et A.Z. Genack, *Field and intensity correlation in random media*, Phys. Rev. E **62**, 7348 (2000)

[286] P. Sebbah, B. Hu, A.Z. Genack, R. Pnini et B. Shapiro, *Spatial-field correlation: the building block of mesoscopic fluctuations*, Phys. Rev. Lett. **88**, 123901-1 (2002)

[287] R. Pnini et B. Shapiro, *Intensity correlation in absorbing random media*, Phys. Lett. A **157**, 265 (1991)

[288] M.J. Stephen et G. Cwilich, *Intensity correlations and fluctuations of light scattered from a random medium*, Phys. Rev. Lett. **59**, 285 (1987)

Chapitre 13

---

[289] N. Ashcroft et D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College, Philadelphia (1976)

[290] B. L. Altshuler et A. G. Aronov, *Electron-electron interaction in disordered conductors*, dans "Electron-electron interactions in disordered systems", A.L. Efros et M. Pollak eds., Elsevier (1985), p. 1

[291] A.L. Fetter et J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle systems*, McGraw-Hill (1971) ; S. Doniach et E.H. Sondheimer, *Green's Functions for Solid State Physicists*, W.A. Benjamin (1974)

[292] E. Abrahams, P.W. Anderson, P.A. Lee et T.V. Ramakrishnan, *Quasiparticle lifetime in disordered two-dimensional metals*, Phys. Rev. B **24**, 6783 (1981)

[293] F. Pierre, H. Pothier, P. Joyez, N.O. Birge, D. Esteve et M. Devoret, *Electrodynamic dip in the local density of states of a metallic wire*, Phys. Rev. Lett. **86**, 1590 (2001)

[294] A.A. Abrikosov, L.P. Gorkov et I.Y. Dzyaloshinskii, *Quantum field theoretical methods in statistical physics*, Pergamon Press (1965)

[295] A.M. Finkelshtein, *Influence of Coulomb interaction on the properties of disordered metals*, Sov. Phys. JETP **57**, 97 (1983)

[296] A. Kamenev et A. Andreev, *Electron-electron interactions in disordered metals: Keldysh formalism*, Phys. Rev. B **60**, 2218 (1999)

[297] F. Pierre, *Interactions électron-électron dans les fils mésoscopiques*, Vol. 4, Ann. Phys. **26** (2001)

[298] B.L. Altshuler, A.G. Aronov et A. Yu. Zyuzin, JETP **59**, 415 (1984)

[299] G.L. Ingold et Yu. Nararov, *Charge tunneling rates in ultrasmall junctions*, dans *Single Charge tunneling*, H. Grabert et M. Devoret eds., Plenum (1982)

[300] Yu. Nazarov, *Anomalous current-voltage characteristics of tunnel junctions*, JETP **68**, 561 (1990)

[301] P. Schwab and R. Raimondi, *Quasiclassical theory of charge transport in disordered interacting electron systems*, Ann. Phys. **12**, 471 (2003)

[302] B.L. Altshuler, A.G. Aronov et P.A. Lee, *Interaction effects in disordered Fermi systems in two dimensions*, Phys. Rev. Lett. **44**, 1288 (1980)

[303] A.I. Larkin, *Reluctance of two-dimensional systems*, JETP Lett. **31**, 219 (1980)

[304] M. Gijs, C. Van Haesendonck et Y. Bruynseraede, *Quantum oscillations in the superconducting fluctuation regime of cylindrical Al films*, Phys. Rev. B **30**, 2964 (1984)

[305] A.G. Aronov et Yu.V. Sharvin, *Magnetic flux effects in disordered conductors*, Rev. Mod. Phys. **59**, 755 (1987)

[306] D. Pines et P. Nozières, *The theory of quantum liquids*, Vol. 1, Addison-Wesley (1989)

[307] U. Sivan, Y. Imry et A.G. Aronov, *Quasi-particle lifetime in a quantum dot*, **28**, 115 (1994)

[308] F. Pierre, H. Pothier, D. Esteve et M.H. Devoret, *Energy redistribution between quasiparticles in mesoscopic silver wires*, J. Low Temp. Phys. **118**, 437 (2000)

[309] A. Kaminski et L.I. Glazman, *Electron energy relaxation in the presence of magnetic impurities*, Phys. Rev. Lett. **86**, 2400 (2001) ; M.G. Vavilov, A. Kaminski et L.I. Glazman, *Electron energy and phase relaxation on magnetic impurities*, Proceedings of LT23 Conference (2002)

[310] A. Schmid, *On the dynamics of electrons in an impure metal*, Z. Phys. **271**, 251 (1974)

[311] W. Eiler, *Electron-electron interaction and weak-localization*, J. Low Temp. Phys. **56**, 481 (1984)

[312] G. Montambaux et E. Akkermans, *Non exponential quasiparticle decay and phase relaxation in low dimensional conductors*, arXiv:cond-mat/0405523

[313] B.L. Altshuler, A.G. Aronov et D.E. Khmelnitskii, *Effects of electron-electron collisions with small energy transfers on quantum localization*, J. Phys. C **15**, 7367 (1982)

[314] S. Chakravarty et A. Schmid, *Weak-localization: the quasiclassical theory of electrons in a random potential*, Phys. Rep. **140**, 193 (1986)

[315] A. Stern, Y. Aharonov et Y. Imry, *Phase uncertainty and loss of interference: a general picture*, Phys. Rev. A **41**, 3436 (1990)

[316] R. Kubo, *The fluctuation-dissipation theorem*, Rep. Prog. Phys. **29**, 255 (1966)

[317] E.M. Lifshitz et L.P. Pitaevskii, *Statistical Physics*, Vol. 2, Pergamon Press (1980)

[318] Y. Imry, *Introduction to Mesoscopic Physics*, seconde édition, Oxford (2002)

[319] H. Nyquist, *Thermal agitation of electric charge in conductors*, Phys. Rev. **32**, 110 (1928)

[320] H.R. Callen et T.A. Welton, *Irreversibility and generalized noise*, Phys. Rev. B **83**, 34 (1951)

[321] M. Abramowitz et I. Stegun eds., *Handbook of mathematical functions*, Dover (1970)

[322] F. Pierre, A.B. Gougam, A. Anthore, H. Pothier, D. Esteve et N. Birge, *Dephasing of electrons in mesoscopic metal wires*, Phys. Rev. B **68**, 85413 (2003)

[323] D.S. Golubev et A.D. Zaikin, *Quantum Decoherence in Disordered Mesoscopic Systems*, Phys. Rev. Lett. **81**, 1074 (1998)

[324] I. Aleiner, B.L. Altshuler et M.E. Gershenson, *Interaction effects and phase relaxation in disordered systems*, Waves in Random Media **9**, 201 (1999)

[325] P. Mohanty, E.M.Q. Jariwala et R.A. Webb, *Intrinsic Decoherence in Mesoscopic Systems*, Phys. Rev. Lett. **78**, 3366 (1997)

[326] F. Schopfer, C. Bäuerle, W. Rabaud et L. Saminadayar, *Anomalous temperature dependence of the dephasing time in mesoscopic Kondo wires*, Phys. Rev. Lett. **90**, 56801 (2003)

[327] E.M. Lifshitz et L.P. Pitaevskii, *Statistical Physics*, Pergamon, New York (1980)

[328] B.N. Narozhny, G. Zala et I.L. Aleiner, *Interaction corrections at intermediate temperatures: dephasing time*, Phys. Rev. B **65**, 180202 (2002)

Chapitre 14

---

[329] D. Shoenberg, *Magnetic oscillations in metals*, Cambridge University Press (1984)

[330] T. Champel, *Chemical potential oscillations and de Haas-van Alphen effect*, Phys. Rev. **64**, 54407 (2001)

[331] R.B. Dingle, *Some magnetic properties of metals*, Proc. Roy. Soc. A **211**, 517 (1952)

[332] A. Szafer et B.L. Altshuler, *Universal correlation in the spectra of disordered systems with an Aharonov-Bohm flux*, Phys. Rev. Lett. **70**, 587 (1993)

[333] H. Fukuyama, *Fluctuations of the Landau diamagnetism in mesoscopic systems*, J. Proc. Soc. Jpn. **58**, 47 (1989)

[334] E. Akkermans et B. Shapiro, *Fluctuations in the diamagnetic response of disordered metals*, Europhys. Lett. **11**, 467 (1990)

[335] A. Raveh et B. Shapiro, *Fluctuations in the orbital magnetic response of mesoscopic conductors*, Europhys. Lett. **19**, 109 (1992)

[336] N. Ashcroft et D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College, Philadelphia (1976)

[337] B.L. Altshuler, A.G. Aronov et A.Y. Zyuzin, *Thermodynamic properties of disordered conductors*, Sov. Phys. JETP **57**, 889 (1983)

[338] A. Altshuler et A. Aronov, *Electron-electron interactions in disordered systems*, A. Efros et M. Pollack eds., North Holland (1985)

[339] U. Eckern, *Coherence and destruction of coherence in mesoscopic rings*, Z. Phys. B **82**, 393 (1991)

[340] V. Ambegaokar et U. Eckern, *Coherence and persistent current in mesoscopic rings*, Phys. Rev. Lett. **65**, 381 (1990) et **67**, 3192 (1991)

[341] A. Schmid, *Persistent currents in mesoscopic rings by suppression of charge fluctuations*, Phys. Rev. Lett. **66**, 80 (1991)

[342] F. Hund, *Rechnungen über das magnetische verhalten von kleinen metallstücken bei tiefen temperaturen*, Ann. Phys. (Leipzig) **32**, 102 (1938).

[343] F. Bloch, *Off-Diagonal Long-Range Order and Persistent Currents in a Hollow Cylinder*, Phys. Rev. A **137**, 787 (1965)

[344] I.O. Kulik, *Magnetic flux quantization in the normal state*, Sov. Phys. JETP **31**, 1172 (1970)

[345] M. Büttiker, Y. Imry et R. Landauer, *Josephson behavior in small normal one-dimensional rings*, Phys. Lett. A **96**, 365 (1983)

[346] H.F. Cheung, Y. Gefen, E.K. Riedel et W-H. Shih, *Persistent currents in small one-dimensional metallic rings*, Phys. Rev. B, **37**, 6050 (1988)

[347] O. Entin–Wohlman et Y. Gefen, Europhys. Lett., *Persistent currents in two-dimensional metallic cylinders*, Europhys. Lett. **8**, 477 (1989)

[348] H.F. Cheung, Y.Gefen et E.K. Riedel, *Isolated rings of mesoscopic dimensions. Quantum coherence and persistent currents*, IBM J. Res. Develop. **32**, 359 (1988)

[349] H. Bouchiat et G. Montambaux, *Persistent currents in mesoscopic rings: ensemble averages and half-flux-quantum periodicity*, J. Phys. (Paris) **50**, 2695 (1989)

[350] H.F. Cheung, E.K. Riedel et Y. Gefen, *Persistent currents in mesoscopic rings and cylinders*, Phys. Rev. Lett. **62**, 587 (1989)

[351] I. Gradshteyn et I. Ryzhik, *Table of integrals, series and products*, Academic Press, London (1980)

[352] L.P. Lévy, G. Dolan, J. Dunsmuir et H. Bouchiat, *Persistent currents in mesoscopic copper rings*, Phys. Rev. Lett. **64**, 2074 (1990).

[353] B. Reulet, M. Ramin, H. Bouchiat et D. Mailly, *Dynamic Response of Isolated Aharonov-Bohm Rings Coupled to an Electromagnetic Resonator*, Phys. Rev. Lett. **75**, 124 (1995)

[354] R. Deblock, R. Bel, B. Reulet, H. Bouchiat et D. Mailly, *Diamagnetic Orbital Response of Mesoscopic Silver Rings*, Phys. Rev. Lett. **89**, 206803 (2002)

[355] V. Chandrasekhar, R.A. Webb, M.J. Brady, M.B. Ketchen, W.J. Gallaghern et A. Kleinsasser, *Magnetic response of a single, isolated gold loop*, Phys. Rev. Lett. **67**, 3578 (1991)

[356] E.M.Q. Jariwala, P. Mohanty, M.B. Ketchen et R.A. Webb, *Diamagnetic Persistent Current in Diffusive Normal-Metal Rings*, Phys. Rev. Lett. **86**, 1594 (2001)

[357] D. Mailly, C. Chapelier et A. Benoit, *Experimental observation of persistent current in GaAs-AlGaAs single loop*, Phys. Rev. Lett. **70**, 2020 (1993)

[358] B.L. Altshuler, Y. Gefen et Y. Imry, *Persistent differences between canonical and grand canonical averages in mesoscopic ensembles: large paramagnetic orbital susceptibilities*, Phys. Rev. Lett. **66**, 88 (1991)

[359] F. von Oppen et E. Riedel, *Average persistent current in a mesoscopic ring*, Phys. Rev. Lett. **66**, 84 (1991)

[360] E. Akkermans, *Scattering phase shift analysis of persistent currents in mesoscopic Aharonov-Bohm geometries*, Europhys. Lett. **15**, 709 (1991)

[361] S. Oh, A.Yu. Zyuzin et R.A. Serota, *Orbital magnetism of mesoscopic systems*, Phys. Rev. B **44**, 8858 (1991).

Index

A

Absorption
  d'un photon, 70
  longueur d', 356, 368, 386
Acoustiques (ondes), 40
Aharonov-Bohm
  effet, 5, 6, 27, 40, 221, 312, 315, 316
  effet (plan infini), 262
  flux, 565
Aimantation
  orbitale, 30, 552
  orbitale (fluctuations), 30, 557, 559
  orbitale moyenne, 556
  orbitale moyenne
    (terme d'interaction), 561
Aire algébrique, 266
Aire algébrique (courbe brownienne
    fermée), 226
Albédo, 10, 13, 23, 344, 346, 385, 458
  cohérent, 23, 350, 351, 359, 386,
    388, 469
  d'une tranche de largeur finie, 353
  dépendant du temps, 354, 385
  des planètes, 344
  incohérent, 347–349, 463
Amplitude
  complexe, 11, 108, 256, 345, 459,
    460
  de diffusion (équation
    de Helmholtz), 50, 57
  de diffusion (équation
    de Schrödinger), 51
Anderson
  localisation d', 170, 375
  modèle d', 46, 398, 414, 426
  transition, 305
Anomalie de densité d'états, 31, 506,
    509
Antilocalisation, 310
Approximation de diffusion, 114
Approximation du diffuson, 108, 110
Aslamasov-Larkin, 517

B

Balistique
  propagation, 107
  système, 41, 399, 580
BCS (instabilité supraconductrice),
    119
Bethe-Salpeter (équation de), 111, 239
Billards quantiques, 399
Bistatique (coefficient), 344
Boltzmann (équation de), 13, 527
Born
  approximation de, 55, 56, 65, 146
Bose-Einstein (condensation de), 375
Bragg (réflexion de), 38
Brownien (mouvement des diffuseurs),
    255, 258, 383
Brownienne (trajectoire), 225, 266
Bruit blanc, 44, 80, 110
Büttiker, 327

C

Canaux transverses, 302, 304, 326, 327
  dimension d, 332
  taches de speckle, 467
Cavités électromagnétiques, 399
Chaleur
  équation de la, 164
  noyau de la, 165, 202, 224, 504
  noyau de la (pour un flux
    Aharonov-Bohm), 228, 262,
    264, 316
  noyau de la (déphasage), 260

noyau de la (en champ magnétique), 225, 307, 558
noyau de la (pour un milieu périodique), 171
Champ magnétique et déphasage du cooperon, 220
Chaos, 16, 400, 611
Clausius-Mosotti (formule de), 66
Clebsch-Gordan (coefficients de), 74, 242
Cohérence de phase
longueur de, 9, 14, 17, 26, 301, 315
temps de, 260, 301, 498, 531, 535, 538, 541, 542, 544
temps de (dépendance en température), 305, 308
temps de (diffusion atomique résonnante), 287
Collisions
anisotropes, 113, 146, 188, 196, 200, 296, 297, 341, 358, 368, 387, 428, 437
indépendantes, 94, 109
isotropes, 58, 296, 339
théorie des, 49
Conductance
adimensionnée g, 142, 294, 304, 427, 462
distribution, 487
électrique, 15, 294
électrique (guide d'onde), 328
électrique (moyenne), 332
électrique moyenne, 327
quasi-1d, 303
tunnel, 507, 509
Conductivité électrique, 14
dépendance spatiale, 290
moyenne, 290
moyenne (dans l'espace réel), 338
tenseur, 289, 430
Cooper (renormalisation de), 562, 575
Cooperon, 23, 116, 119, 129, 291, 299, 339, 350
en champ magnétique, 222
et équation de diffusion, 121, 223, 434
et limite ergodique, 419
spin-orbite et impuretés magnétiques, 241, 245
Corrélations
spectrales, 15, 30, 402, 405, 482
spectrales des matrices aléatoires, 410
spectrales en régime diffusif, 414
Coulomb
blocage de, 509
interaction de, 31, 301, 305
interaction de (et magnétisme orbital), 560
potentiel de (écranté), 498
Courant
permanent, 552
densité de (associée au facteur de structure), 150
opérateur, 290, 297
permanent (ensemble canonique), 581
permanent (valeur typique), 572, 573
permanent dans le régime diffusif, 571
permanent dans un anneau, 564
permanent dans un anneau sans désordre, 567
permanent et spin-orbite, 577
permanent moyen dans un anneau, 569
tunnel, 508
Croisement quantique, 19, 122, 133, 141, 463, 469, 472
Cumulant, 43, 45
de l'intensité lumineuse, 489
Cyclotron (fréquence), 221, 306, 554

D

de Haas-van Alphen (effet), 553–555, 569
Densité d'états
correction en présence de l'interaction coulombienne statique, 560
correction en présence de l'interaction coulombienne dynamique, 510
correction en présence de l'interaction coulombienne statique, 502

définition (Helmholtz), 87
définition (Schrödinger), 84
d'une particule libre (dépendance dimensionnelle), 86
électronique, 29
en champ magnétique uniforme, 554
et déterminant spectral, 203
fluctuations de, 29
Helmholtz (dépendance dimensionnelle), 88
interaction coulombienne dynamique, 512
interaction coulombienne statique, 504
locale, 84, 160
locale (terme de Fock), 511
loi du demi-cercle, 410, 423
moyenne, 96
Schrödinger à trois dimensions, 86
Densité électronique locale, 501
Déphasage, 26, 110, 215, 498
dû à la dynamique des diffuseurs, 255
dû au mouvement brownien, 258
en présence de spin-orbiteen présence de spin-orbite, 278
Dépliage du spectre, 404
Dépolarisation
coefficients de, 360
temps de, 252
temps de (diffusion atomique résonnante), 286
Déterminant
spectral, 202, 203, 208, 211
spectral et flux Aharonov-Bohm, 264
Diagramme
irréductible, 90
réductible, 90
Diagramme croisé, 118
Diagramme en échelle, 112
Diélectrique (constante), 37, 64
Diélectrique (fonction), 499, 526
Diffusif (régime), 114, 420
Diffusion
anisotrope, 303
approximation de, 114, 125, 184, 188, 189, 199, 353
constante de, 18, 115
constante de (cas anisotrope), 151, 297, 298, 340, 437
constante de (renormalisation), 140
dipôlaire, 64
dipôlaire de photons, 69
équation de, 18
équation de Green, 164
équation de (pour Γ_ω), 115
équation de (pour Γ_ω), 125
équation de (pour Γ'_ω) en champ magnétique, 222
équation de (pour I_d), 125
équation de (pour P_d), 115
isotrope, 51
libre, 168
libre (propriété de récurrence), 170
propriété de récurrence, 167, 173
résonnante, 68, 73, 281
simple, 49
Diffuson, 18, 108, 112, 295, 347
approximation, 110
en champ magnétique, 222, 557
polarisation de la lumière, 253
spin-orbite et impuretés magnétiques, 240
Dirichlet (conditions aux limites), 173, 174, 177, 201, 437, 442
Distance moyenne entre niveaux Δ, 294, 397
Dopage, 41
Drude, 22
formule de, 293, 297, 300, 306
Drude-Boltzmann
approximation de, 107, 291, 292
Dynamique des diffuseurs, 28, 29, 254
Dyson
équation, 91
équation (diffusion multiple), 89
équation (pour une collision), 55

E

Écoulement laminaire, 393
Ecran
dynamique, 499, 510
interaction coulombienne, 497, 525
Edwards, 268, 269

Edwards (modèle d'), 44, 49, 57, 60, 80, 94, 95, 146, 152
Eikonale (approximation), 221, 228, 558, 601
Einstein (relation d'), 293, 294, 340, 430, 433
Elastique (onde), 41
Emission
d'un photon, 70
spontanée (taux de), 74
Émission spontanée (taux), 75
Enroulements (nombre d'), 171, 177, 182, 228, 263, 313, 572
Equation de Green (Schrödinger), 86
Équation de Green (Helmholtz), 87
Ergodique
hypothèse, 257, 364, 382
régime, 16, 19, 30, 172, 173, 402, 414, 525
régime (pour les corrélations spectrales), 419
Euler (relation d'), 207
Euler (équation d'), 38, 40
Euler-Poincaré (caractéristique d'), 206, 264
Excitons, 41
Exponentielle étirée, 259

F

F (paramètre d'interaction), 504, 506
Facteur de forme $\tilde{K}(t)$
en regime diffusif, 416
en régime diffusif, 420
GOE, 411
GUE, 411
transition GOE-GUE, 423
Facteur de forme $\tilde{K}(t)$, 403
Facteur de forme $\tilde{K}(t)$, 557
Poisson, 405
Facteur de structure, 110
diffusion atomique résonnante, 287
diffusion Rayleigh, 250, 252
du cooperon (équation intégrale), 119
du cooperon (équation intégrale) en champ magnétique, 222
du cooperon (spin-orbite et impuretés magnétiques), 242
du diffuson (spin-orbite et impuretés magnétiques), 241
équation intégrale, 112
équation intégrale dans le cas anisotrope, 150
pour des collisions anisotropes, 147, 295, 297
spin-orbite et impuretés magnétiques, 238
Facteur d'efficacité, 66, 67
Fermi
liquide de, 35, 519, 531
règle d'or de, 76, 79, 502, 508, 521
Feynman (chaîne de), 319
Fick
loi de, 151
loi de (pour l'intensité moyenne), 190
Fluctuation-dissipation (théorème), 533, 535
Fluctuations
de conductivité, 435
de densité d'états, 430
de la constante de diffusion, 430, 434
relatives de conductance, 15, 426
universelles de conductance, 15, 425, 426, 435, 436, 474, 475, 487
Flux
associé à l'équation de Schrödinger, 51
de photons, 52, 71, 187
du vecteur de Poynting, 52, 345
Fonction de comptage $N(E)$, 403, 553
Fonction de corrélation
à deux points de la densité d'états, 402, 410, 415
angulaire du coefficient de transmission, 458
de la polarisation, 362
du désordre, 43–45, 57, 146
$K(\omega)$, 402
$K_D(\omega)$ de la constante de diffusion, 436
$K(\omega)$ en champ magnétique, 557
$K(\omega)$ en régime diffusif, 416

$K(\omega)$ en régime diffusif, 416, 421, 433, 436
$K(\omega)$ GOE, 410
$K(\omega)$ GUE, 410
$K(\omega)$ Poisson, 405
spatiale de l'intensité lumineuse, 489
spatiale de l'intensité lumineuse (courte portée), 490
spatiale de l'intensité lumineuse (longue portée), 492
temporelle de lintensite en reflexion, 386
temporelle de lintensite tranche, 390
temporelle de l'intensité, 380, 381
temporelle de l'intensité (en transmission), 391, 478
temporelle du champ électrique, 28, 255, 259, 379, 383, 386
temporelle du champ électrique (en réflexion), 385
Fonction de distribution
de la conductance, 487
du coefficient de transmission, 485
Fonction de Green
avancée, 82
dépendance dimensionnelle, 86
(équation de Schrödinger), 81
guide d'onde, 328, 330
libre (équation de Helmholtz), 49, 87
libre (équation de Schrödinger), 85
moyenne (Helmholtz), 348
moyenne en champ magnétique, 221
moyenne (Helmholtz), 96
moyenne (Schrödinger), 89, 96
pour la diffusion Rayleigh, 65
retardée, 82
Fonction de réponse densité-densité, 499
Fonction de réponse densité-densité, 323
Fonctionnelle génératrice, 43
Fraunhoffer (approximation de), 50, 65, 348, 350

G

Gauss-Bonnet (théorème de), 206
Gaussien
modèle, 42, 45, 57, 95
paquet d'ondes, 104
Gaussienne (loi), 168, 405, 484
Gloire, 371
GOE (Ensemble Orthogonal Gaussien), 410, 449
Goldstone (mode), 129, 149, 217, 219, 252, 441
Gorkov-Eliashberg, 401
Graphes, 208
Gravité (ondes de), 38
GSE (Ensemble Symplectique Gaussien), 410
GUE (Ensemble Unitaire Gaussien), 410

H

Hall (effet), 42
Hamiltonien
d'un gaz d'électrons libres, 35
impuretés magnétiques, 231
spin-orbite, 231
Harper, 213
Hartree-Fock
approximation de, 31, 501, 560, 577
Heisenberg (temps de), 143, 401, 411
Hélicité, 72, 73, 248
Hélium superfluide, 41
Helmholtz (équation de), 36, 44, 88, 345
Hikami (boîtes de), 341, 435
Hikami (boîtes de), 19, 33, 133, 138, 432, 434, 452, 469, 492
à l'approximation de diffusion, 136
dépendance spatiale, 134
Hofstadter, 213
Homotopie (nombre d'), 171

I

Images (méthode des), 181, 201, 349
pour un anneau, 182
Impuretés magnétiques, 92, 231, 278, 295, 300, 310, 449

Indice optique, 37, 345
Indice (théorème), 264
Intégrable (système), 398
Intensité
  rayonnée (contribution du cooperon), 124, 350
  rayonnée (contribution du diffuson), 124, 347
  rayonnée (Helmholtz), 122
  rayonnée moyenne, 123, 194, 359
  spécifique $I(\hat{s}, \boldsymbol{r})$, 187
Invariance
  par renversement du temps, 117, 220, 410, 413

J

Jacobien, 407, 409
Jauge
  invariance de, 223
  transformation de, 565

K

Kac, 205
Kondo (effet), 235
Kubo (formule de), 318, 328, 428, 430

L

Lagrangien
  en présence d'un champ magnétique, 265
Lamb (déplacement de), 74
Landau
  niveaux de, 224, 553
  quantification de, 221
  susceptibilité de, 553, 555, 556
  susceptibilité de (fluctuations), 558
  susceptibilité de (terme d'interaction), 562
  théorie de (des liquides de Fermi), 519
Landauer, 325
Landauer (formule de), 325, 336, 454, 460, 467
Langer-Neal, 132
Largeur angulaire du cooperon, 131, 299, 352, 355, 364
Lévy (loi de) des aires algébriques, 266
Lévy (loi de) des aires algébriques, 226, 266
Liaisons fortes, 46
Libre parcours moyen
  de transport, 151, 189
  diffusion atomique résonnante, 282
  élastique, 9, 79, 80, 579, 580
  élastique (polarisation), 249
  élastique (Helmholtz), 93
Lippman-Schwinger (équation de), 55
Localisation
  longueur de, 304
Localisation (seuil de), 47
Localisation faible, 14, 21, 27, 140, 300, 316, 444
  collisions anisotropes, 340
  en champ magnétique, 306
  flux Aharonov-Bohm, 313, 316
  formalisme de Landauer, 335
Loi de diffusion contrainte, 266
Longueur magnétique L_B, 225
Longueur de diffusion a_s, 51
Longueur d'extrapolation z_0, 197, 200, 349, 370
Longueur magnétique L_B, 309
Longueur thermique, 442, 559
Lorentz (force de), 7, 221, 228, 262, 306

M

Magnétoconductance, 426, 445
Magnétoconductivité, 307
Magnétorésistance, 307
  négative, 306
  positive, 310, 578
Maki-Thomson, 517
Masse effective, 35
Matrice
  aléatoire, 17, 30, 401, 405
  aléatoire et flux Aharonov-Bohm, 424
  aléatoire gaussienne, 405, 409
  complexe hermitique, 406
  de transmission, 329
  densité, 318
  S, 54
  symétrique réelle, 405

Matthiessen (règle de), 92, 234, 295
Maxwell (équations de), 37, 187
Mellin (transformée de), 203
Mémoire (effet), 467
Mésoscopique
    régime, 14, 15, 17, 304, 426, 441
Mie
    diffusion de, 67, 254, 368
    théorie de, 13
Milieu complexe, 2, 14, 397
Milne (problème de), 196, 197, 200
Mode zéro, 173, 177, 229, 259, 264, 525
    et limite ergodique, 419, 421
    fil isolé, 179
Moment magnétique, 551, 553
MOSFET, 41

N

Neumann (conditions aux limites), 172, 173, 179, 442
Normalisation
    de la probabilité, 106, 108, 129, 138
Noyau de la chaleur, 165
Nyquist (bruit), 535

O

Ohm (loi d'), 15, 293
Ombre (terme d'), 53, 68
Opérateur
    de collision, 55, 70
    de Green, 82
    d'évolution, 81, 104
Opposition (effet d'), 374

P

Paradoxe d'extinction, 68
Paramètre de taille, 66
Parité du nombre d'électrons, 567
Partition (fonction de), 165
Pauli
    matrices de, 231, 586
    principe de, 501
Peierls (substitution de), 47
Phonons, 9, 41, 295, 301, 305, 543
Poiseuille, 395
Poisson
    distribution de, 16, 398, 404
    formule de sommation, 171, 228, 263, 554, 566
Polarisabilité, 66, 71
Polarisation
    circulaire, 73, 366
    densité de charges, 37
    du champ électrique, 37, 65, 70, 247, 366
Polarisation circulaire, 72
Polya (théorème), 170
Potentiel
    de diffusion δ, 59
    sphérique, 51
Probabilité
    de diffusion quantique, 17, 106
    de diffusion quantique (collisions anisotropes), 186, 290
    de diffusion quantique (équation intégrale), 113, 196
    de diffusion (transformée de Fourier $P(\boldsymbol{q}, t)$), 168
    de diffusion (transformée de Laplace P_γ), 167, 386
    de retour a lorigine apres m tours, 228
    de retour à l'origine, 18, 22, 120, 139, 208, 210
    de retour à l'origine en champ magnétique, 223, 224
    de retour à l'origine (spin-orbite), 278
    intégrée de retour à l'origine, 165, 202, 203
    intégrée de retour à l'origine dans la limite ergodique, 419
    intégrée de retour à l'origine (en champ magnétique), 307
    intégrée de retour à l'origine (flux Aharonov-Bohm), 227
    P_d à l'approximation du diffuson, 110, 116, 128, 129, 151
    P_c contribution du cooperon, 119, 129, 131
    $P(s)$ des écarts entre niveaux, 398, 402, 413
    $P(s)$ des écarts entre niveaux, 16

totale de diffusion $P(\boldsymbol{r}, \omega = 0)$
à $d = 3$, 184
totale de diffusion quantique, 129
Pseudo-potentiel, 60

Q

QELS (diffusion quasi-élastique), 383
Quantum
de conductance e^2/h, 15
de conductance e^2/h, 294
de conductance e^2/h, 20
de flux $\phi_0 = h/e$, 6
de flux $\phi_0 = h/e$, 225, 313
Quasi-cristal, 105
Quasiparticule, 519
Potentiel coulombien écranté, 545
temps de vie d'une, 520, 521, 548
Quaternions, 410

R

Raman (diffusion), 75
Rayleigh
diffusion, 42, 71, 247, 360
loi de, 484, 485
loi de (pour le coefficient de transmission), 24, 462, 484
loi de (pour l'intensité), 381, 491
Rayleigh-Gans (diffusion de), 67, 254, 360
Réciprocité, 61, 113, 220, 279
impuretés magnétiques, 233
polarisation, 248
spin-orbite, 233
Réflexion (coefficient de), 344
Réflexion (coefficient de), 194, 334, 469
Règle de somme f, 320
Renormalisation
de vertex, 297, 340, 428
Réponse impulsionnelle, 83
Répulsion (des niveaux d'énergie), 16, 398, 405, 406
Réseaux diffusifs, 208
Résolvante, 55
Rétrodiffusion cohérente, 10, 14, 344, 351
diffusion Rayleigh, 254, 362
Rigidité spectrale, 30, 411, 412, 421, 427

S

Sagnac (effet), 6
Schwartzshild, 13
Section efficace, 80
de diffusion résonnante, 77
de transport, 53, 151
différentielle, 52, 58, 345
différentielle de diffusion Rayleigh, 66, 72
différentielle de diffusion Rayleigh (résonnante), 75
différentielle pour le modèle d'Edwards, 57, 146
d'une barrière sphérique, 58
totale, 53, 54
totale (résonnante), 76
Self-énergie, 91, 502
Self-énergie
diffusion Rayleigh, 249
Self-énergie
spin-orbite et impuretés magnétiques, 234
Semi-groupe (loi de pour l'équation de diffusion), 166
Semiconducteurs, 41, 580
Sharvin-Sharvin (effet), 10, 27, 314, 315
Siegert (loi de), 382
σ-non linéaire (modèle), 401
Singularité triangulaire de l'albédo, 352, 364
Singulet (état), 242, 277, 279, 578
Sismiques (ondes), 41
Son (équation du), 40
Speckle, 2, 10, 26, 28, 346, 457, 458, 467, 469, 476
Spectre des noyaux lourds, 398
Spectroscopie
des ondes diffusées, 28, 29, 383, 476
Spin (dégénérescence), 290
Spin-orbite, 92, 231, 275, 295, 300, 306, 310, 448, 577
Spitzer (loi de) pour les enroulements, 266
Sunada (théorème de), 205
Supersymétrie, 401
Susceptibilité magnétique, 552

T

Tavelures, 2
Temps
brownien des diffuseurs τ_b, 255, 258
brownien des diffuseurs τ_b, 383, 387
de cohérence de phase, 260, 301, 498, 531, 535, 538, 541, 542, 544
de cohérence de phase (dépendance en température), 305
de collision élastique (Helmholtz), 255
de collision élastique (modèle d'Anderson), 81
de collision élastique moyen (Schrödinger), 146
de collision élastique (Schrödinger), 92
de collision spin-orbite τ_{so}, 92, 234, 276, 310
de diffusion atomique résonnante, 287
de diffusion magnétique τ_B, 225, 307
de récurrence τ_R, 166, 167, 301
de récurrence τ_R (anneau), 313
de récurrence τ_R (anneau), 177
de récurrence τ_R (diffusion libre), 170
de récurrence τ_R (fil connecté), 178
de récurrence τ_R (fil isolé), 180
de relaxation de l'énergie, 528
de retournement de spin τ_m, 311, 578
de retournement de spin τ_m, 92, 234, 278
de transport, 80, 146, 151, 297, 340
de vie d'un état, 79, 92
de vie électronique, 32, 502, 519
de vie électronique dans le régime diffusif, 524, 526, 527
de vol de la lumière, 255
Tenseur
de polarisabilité statique, 71
Théorème optique, 53, 54, 56
Thermodynamique (grand potentiel), 552, 555
Thomas-Fermi
approximation de, 499, 507, 548
vecteur d'onde de (κ), 499, 507
Thouless
énergie de, 19, 163, 172
temps de, 19, 172, 174
Trajectoires
conjuguées, 117
conjuguées (impuretés magnétiques), 279
conjuguées (polarisation des ondes), 247
conjuguées (spin-orbite), 276
de diffusion multiple, 12, 108, 346, 428
Transfert radiatif, 122, 343
équation de, 186, 188, 358
Transition GOE-GUE, 423
Transmission
coefficient de, 23, 194, 326, 336, 458
coefficient de (distribution), 484
coefficient de (fluctuations), 454
coefficient de (moyen), 327, 331, 333, 463
coefficient de (moyen) en dimension d, 332
fonction de corrélation angulaire du, 459, 465, 476
matrice de, 329
Triplet (état), 242, 277, 279, 578

V

Variance
de la conductance électrique, 425, 428
Variance $\Sigma^2(E)$, 403, 404, 412, 415, 525
dans la limite diffusive, 420
dans la limite ergodique, 419
Variance $\Sigma^2(E)$, 427
Variance $\Sigma^2(E)$, 30
Vertex élémentaire
spin-orbite et impuretés magnétiques, 237

Vertex élémentaire
d'interaction, 219
diffusion atomique résonnante, 282, 285
diffusion Rayleigh, 249
Vortex (supraconducteur), 316

W

Ward (identité de), 160, 290
Webb, 7, 10, 26, 315
Weyl (développement de), 205
Wiener-Hopf (méthode de), 197, 353
Wigner, 405
Wigner-Dyson (distribution de), 16
Wigner-Eckardt (théorème de), 74

Y

Young (trous d'), 5

Z

Zeta (fonction ζ), 202, 203

PHYSIQUE

Éric AKKERMANS - Gilles MONTAMBAUX

Physique mésoscopique des électrons et des photons

Cet ouvrage propose une présentation générale du problème de la propagation des ondes dans les milieux aléatoires, en considérant les phénomènes physiques pour lesquels les effets d'interférences quantiques jouent un rôle essentiel. Ces effets de cohérence de phase définissent le domaine communément appelé « physique quantique mésoscopique », qui décrit les échelles de longueur intermédiaires entre la physique atomique et celles du monde macroscopique. Par extension, cette dénomination couvre aussi les effets d'interférence liés à la propagation dans des milieux complexes des ondes de toute nature, en particulier de la lumière. On considère le cas des électrons dans les métaux et semi-conducteurs ainsi que celui des ondes électromagnétiques dans les suspensions de diffuseurs classiques comme des colloïdes, ou dans les gaz atomiques froids. Les aspects communs aux phénomènes optiques et électroniques sont mis en évidence, tout en montrant la variété des approches et des phénomènes observés.

Les outils théoriques sont développés en détails et illustrés par les expériences les plus importantes dans le domaine : localisation faible des électrons, rétrodiffusion cohérente de la lumière, fluctuations universelles de conductance ou de speckle, anomalies thermodynamiques, courants permanents... L'ensemble représente une solide introduction à la physique mésoscopique qui doit permettre au lecteur d'aborder les travaux les plus spécialisés et les plus récents. La progression est facilitée par de nombreux compléments et par une centaine d'exercices qui autorisent des niveaux de lecture multiples. L'ouvrage s'adresse essentiellement aux chercheurs ou aux étudiants du niveau d'un mastère ou d'une thèse.

Éric Akkermans *est professeur de Physique au Technion, Israel Institute of Technology à Haifa.* ***Gilles Montambaux*** *est directeur de recherche au CNRS, au Laboratoire de Physique des Solides de l'Université Paris-Sud à Orsay, et professeur chargé de cours à l'École Polytechnique. Leurs travaux de recherche portent sur la physique des électrons et des ondes dans les milieux désordonnés.*

Ces ouvrages, écrits par des chercheurs, reflètent des enseignements dispensés dans le cadre de la formation à la recherche. Ils s'adressent donc aux étudiants avancés, aux chercheurs désireux de perfectionner leurs connaissances ainsi qu'à tout lecteur passionné par la science contemporaine.

SAVOIRS ACTUELS

Collection dirigée par Michèle LEDUC

CNRS EDITIONS

www.cnrseditions.fr

EDP SCIENCES

www.edpsciences.com

9 782868 837127

ISBN 2 86883 712 3
ISBN 2 271 06263 2

© CNRS EDITIONS - EDP Sciences 2004