1 Localisation et Transport : Conductance et Loi de Landauer

Dans cette section, nous analysons la conductance sans dimension g dans le modèle d'Anderson unidimensionnel (1D) et quasi-unidimensionnel (quasi-1D) à l'aide de la loi de Landauer, qui relie la conductance aux probabilités de transmission quantique. Nous dérivons rigoureusement la relation entre g et la longueur de localisation ξ, démontrons l'évolution de g en fonction de la taille du système L et de l'amplitude du désordre W, et explorons des extensions aux régimes balistique, diffusif, et aux dimensions supérieures.

1.1 Schéma du Système

Pour visualiser le système étudié, la figure 1 représente une chaîne 1D avec désordre, connectée à deux réservoirs. Les réservoirs injectent des électrons avec une onde entrante e^{ikn}, produisant une onde réfléchie re^{-ikn} à gauche et une onde transmise te^{ikn} à droite.

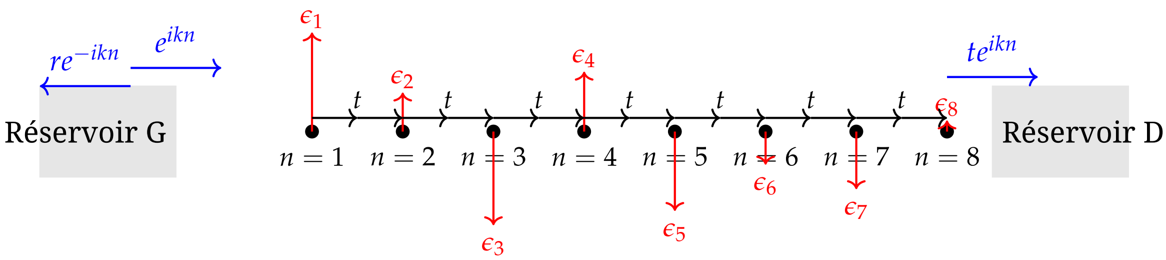

FIGURE 1 – Représentation schématique du système pour la loi de Landauer. Une chaîne 1D de N sites avec potentiels aléatoires $\epsilon_n \sim \mathcal{U}\left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right]$ est connectée à deux réservoirs. Une onde entrante e^{ikn} de la gauche produit une onde réfléchie re^{-ikn} et une onde transmise te^{ikn}.

Note pédagogique : Ce schéma illustre la configuration expérimentale implicite dans la loi de Landauer, où les réservoirs jouent le rôle de source et de drain pour le transport.

1.2 Définitions et Concepts Clés

Avant d'explorer la loi de Landauer, définissons les concepts fondamentaux nécessaires pour comprendre le transport électronique dans le modèle d'Anderson unidimensionnel (1D).

Conductance et conductance sans dimension (G, g). La conductance G mesure la capacité d'un système à transporter un courant électrique sous une différence de potentiel, exprimée en siemens (S). Dans les systèmes mésoscopiques, elle est normalisée par la conductance quantique, une constante universelle :

$$G_0 = \frac{2e^2}{h},$$

où e est la charge de l'électron et h est la constante de Planck. La conductance sans dimension est définie comme :

$$g = \frac{G}{G_0}.$$

Cette normalisation est motivée par trois aspects :

— *Quantification* : Dans un canal parfait, la conductance est un multiple de G_0, reflétant la nature quantique du transport.
— *Universalité* : g permet de comparer des systèmes indépendamment de leurs détails microscopiques.
— *Simplicité* : Comme nous le verrons, g est directement relié à la transmission quantique, facilitant l'analyse.

Transmission quantique (T, $T(E)$). La transmission T est la probabilité qu'un électron traverse un système d'un réservoir à un autre. Dans un système 1D, $T \in [0, 1]$. Plus précisément, la transmission énergétique $T(E)$ est la probabilité de transmission pour un électron d'énergie E. Sans désordre ($W = 0$), $T(E) \approx 1$ pour E dans la bande d'énergie ($|E| < 2t$). Avec désordre, la localisation d'Anderson réduit $T(E)$, qui décroît exponentiellement pour une taille de système L grande devant la longueur de localisation $\xi(E)$:

$$T(E) \sim e^{-2L/\xi(E)}.$$

Dans un système quasi-1D avec M canaux, la transmission totale est $T = \sum_{i=1}^{M} T_i$, où T_i est la transmission du i-ème canal. À l'énergie de Fermi E_F, $T(E_F)$ domine la conductance, comme détaillé ci-après.

Énergie de Fermi (E_F). L'énergie de Fermi est l'énergie du plus haut niveau électronique occupé à température nulle dans un système de fermions. Considérons une chaîne 1D sans désordre ($W = 0$) avec l'Hamiltonien :

$$H = -t \sum_n (|n\rangle\langle n+1| + |n+1\rangle\langle n|)\,.$$

L'équation de Schrödinger stationnaire donne des solutions sous forme d'ondes planes $\psi_n = e^{ikn}$, avec la relation de dispersion :

$$E(k) = -2t\cos(ka),$$

où a est l'espacement du réseau (posé à $a = 1$ pour simplifier). La densité d'électrons n_e (nombre d'électrons par site) est reliée au moment de Fermi k_F par l'occupation des états dans l'espace des moments (de $-\pi$ à π) :

$$n_e = \frac{1}{\pi}\int_{-k_F}^{k_F} dk = \frac{2k_F}{\pi}.$$

L'énergie de Fermi est alors :

$$E_F = E(k_F) = -2t\cos(k_F).$$

Pour une chaîne demi-remplie ($n_e = 1$), $k_F = \pi/2$, donc :

$$E_F = -2t\cos(\pi/2) = 0.$$

Dans un système désordonné ($W \neq 0$), E_F est ajustée pour maintenir n_e, mais reste souvent proche de $E = 0$ pour les calculs analytiques, car la localisation est maximale au centre de la bande.

Longueur de localisation (ξ). La longueur de localisation ξ caractérise l'extension spatiale des états propres localisés dans le modèle d'Anderson. Pour un désordre fort ($W \gg t$) et une énergie $E \approx 0$, elle est approximativement :

$$\xi \approx \frac{1}{\ln\left(\frac{W}{2t}\right)}.$$

Cette longueur dépend de l'énergie ($\xi(E)$), mais à $E = E_F \approx 0$, elle domine le comportement de la transmission.

Exposant de Lyapunov (γ). L'exposant de Lyapunov mesure la croissance exponentielle de la norme de la matrice de transfert avec la taille du système L. Il est relié à la longueur de localisation par :

$$\gamma = \frac{1}{\xi}.$$

Dans le modèle d'Anderson 1D, $\gamma \approx \ln\left(\frac{W}{2t}\right)$ pour $W \gg t$. **Régimes de transport.** Le transport électronique peut être classé en trois régimes :

— *Balistique* : Absence de diffusion ($L \ll l$, où l est le libre parcours moyen), avec $g \approx 1$.

— *Diffusif* : Diffusion multiple sans localisation ($l \ll L \ll \xi$), avec $g \propto 1/L$.

— *Localisé* : Localisation forte ($L \gg \xi$), avec $g \sim e^{-2L/\xi}$.

Note pédagogique : L'énergie de Fermi identifie les électrons actifs, la transmission quantifie leur passage, et la conductance sans dimension relie ces phénomènes à des observables physiques. La localisation, caractérisée par ξ et γ, supprime le transport dans le régime localisé, un effet capturé par la loi de Landauer.

1.3 Formulation de la Loi de Landauer

La loi de Landauer fournit un lien direct entre la conductance et la transmission quantique. Considérons un système mésoscopique connecté à deux réservoirs (gauche et droite) à température nulle, avec des potentiels chimiques μ_L et μ_R. Le courant électrique I traversant le système est donné par :

$$I = \frac{2e}{h} \int_{\mu_R}^{\mu_L} T(E)\, dE,$$

où le facteur 2 tient compte de la dégénérescence de spin, et $T(E)$ est la probabilité de transmission à l'énergie E. Pour une différence de potentiel $V = (\mu_L - \mu_R)/e$, et en supposant $T(E)$ constant près du niveau de Fermi E_F, le courant devient :

$$I = \frac{2e^2}{h} T(E_F) V.$$

La conductance est donc :

$$G = \frac{I}{V} = \frac{2e^2}{h} T(E_F).$$

En normalisant par $G_0 = \frac{2e^2}{h}$, la conductance sans dimension est :

$$g = T(E_F).$$

Dans le modèle d'Anderson 1D, la transmission $T(E)$ dépend de la taille L (nombre de sites) et du désordre W.

Note pédagogique : La loi de Landauer traduit le transport en termes de probabilité quantique, permettant de relier la localisation (qui réduit T) à la conductance observable.

1.4 Dérivation de la Relation entre Conductance et Longueur de Localisation

Nous dérivons ici la relation $g \sim e^{-2L/\xi}$ pour le modèle d'Anderson 1D dans le régime de localisation forte ($W \gg t$).

Étape 1 : Équation de Schrödinger stationnaire. L'équation pour les états propres $|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle$ avec énergie E est :

$$\epsilon_n \psi_n - t(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) = E\psi_n.$$

Réécrivons sous forme matricielle pour définir la matrice de transfert :

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E-\epsilon_n}{t} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} = M_n \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix}.$$

La matrice de transfert pour le site n est :

$$M_n = \begin{pmatrix} \frac{E-\epsilon_n}{t} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

Pour un système de L sites, la matrice totale est :

$$M = M_L \cdot M_{L-1} \cdot \ldots \cdot M_1.$$

Étape 2 : Calcul de la transmission. Considérons un électron incident de la gauche avec une onde plane e^{ikn}. Les amplitudes des ondes à gauche ($\psi_L = e^{ikn} + re^{-ikn}$) et à droite ($\psi_R = te^{ikn}$) sont reliées par M. La probabilité de transmission est :

$$T = |t|^2.$$

Pour une matrice de transfert $M = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix}$, la transmission est donnée par (en supposant des conditions aux limites appropriées) :

$$T = \frac{4}{|M_{11}|^2 + |M_{12}|^2 + |M_{21}|^2 + |M_{22}|^2}.$$

Dans le régime de localisation, la norme de M croît exponentiellement.
Étape 3 : Exposant de Lyapunov et localisation. L'exposant de Lyapunov γ caractérise la croissance de $\|M\|$:

$$\lim_{L\to\infty} \frac{1}{L} \ln \|M\| = \gamma.$$

Dans le modèle d'Anderson 1D, pour $W \gg t$ et $E \approx 0$, les ϵ_n dominent, et γ peut être approximé via une analyse statistique des matrices M_n. En moyenne, pour une distribution uniforme $\epsilon_n \sim \mathcal{U}\left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right]$, l'exposant est :

$$\gamma \approx \ln\left(\frac{W}{2t}\right).$$

La longueur de localisation est :

$$\xi = \frac{1}{\gamma} \approx \frac{1}{\ln\left(\frac{W}{2t}\right)}.$$

La fonction d'onde décroît comme $\psi_n \sim e^{-|n|/\xi}$, donc l'amplitude transmise après L sites est :

$$|t| \sim e^{-L/\xi}.$$

Puisque $T = |t|^2$, nous obtenons :

$$T \sim e^{-2L/\xi}.$$

Étape 4 : Conductance sans dimension. Puisque $g = T$, il s'ensuit :

$$g \sim e^{-2L/\xi}.$$

Note pédagogique : La localisation exponentielle des états propres supprime la conductance dans les systèmes longs,

Étape 5 : Cas quasi-1D. Pour un système quasi-1D avec M canaux, chaque canal contribue à la transmission. La conductance totale est :

$$g \approx \sum_{i=1}^{M} T_i \approx M e^{-2L/\xi_M},$$

où $\xi_M \propto M\xi$ est la longueur de localisation effective. Cette généralisation montre que la localisation persiste, mais avec une conductance initialement plus élevée due à M.

1.5 Démonstration de l'Évolution de la Conductance

Nous analysons l'évolution de g en fonction de L et W, en couvrant les régimes balistique, diffusif, et localisé.

Cas 1 : Dépendance en L. Pour un désordre fixe ($W = 4t$), supposons $t = 1$, $\hbar = 1$, et $E = 0$. La longueur de localisation est :

$$\xi \approx \frac{1}{\ln\left(\frac{4}{2}\right)} = \frac{1}{\ln 2} \approx 1.44.$$

La conductance suit :

$$g(L) \approx e^{-2L/\xi}.$$

Dans le régime balistique ($L \ll l$), $g \approx 1$. Dans le régime diffusif ($l \ll L \ll \xi$), $g \propto 1/L$. Dans le régime localisé ($L \gg \xi$), $g \sim e^{-2L/\xi}$. La figure 2 montre $\ln g$ en fonction de L.
Cas 2 : Dépendance en W. Pour une taille fixe ($L = 10$), la longueur de localisation varie avec W :

$$\xi(W) \approx \frac{1}{\ln\left(\frac{W}{2t}\right)}.$$

La conductance est :

$$g(W) \approx e^{-2L/\xi(W)} = e^{-2L\ln\left(\frac{W}{2t}\right)}.$$

La figure 3 montre $\ln g$ en fonction de W/t.
Note pédagogique : Ces figures montrent que la localisation devient plus prononcée avec l'augmentation de L ou W, supprimant le transport.

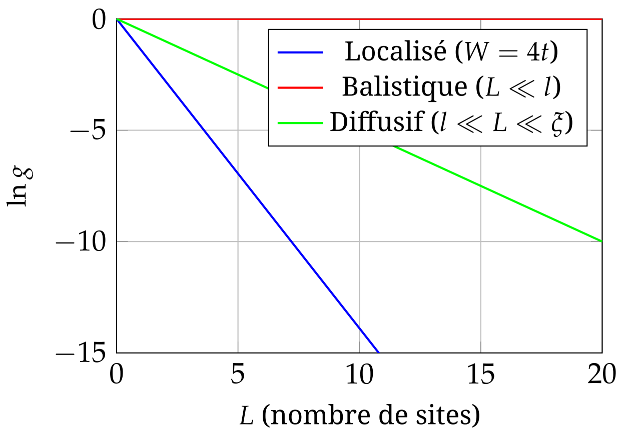

FIGURE 2 – Décroissance logarithmique de la conductance sans dimension $\ln g$ en fonction de L, pour $W = 4t$, $\xi \approx 1.44$. Les régimes balistique, diffusif et localisé sont illustrés.

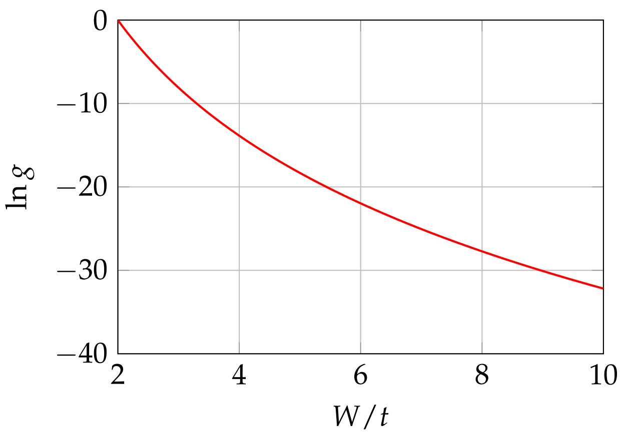

FIGURE 3 – Décroissance logarithmique de la conductance sans dimension $\ln g$ en fonction de W/t, pour $L = 10$.

1.6 Extensions et Concepts Avancés

Régime balistique. Dans un système sans désordre ($W = 0$) ou pour $L \ll l$, la transmission est $T \approx 1$, donc $g \approx 1$. L'équation de Schrödinger devient celle d'une particule libre, avec des ondes planes comme solutions.

Régime diffusif. Pour $W \ll t$ et $l \ll L \ll \xi$, la conductance suit la loi d'Ohm mésoscopique :

$$g \approx \frac{l}{L},$$

où $l \propto \frac{t^2}{W^2}$ est le libre parcours moyen. Cette relation découle d'une diffusion multiple sans localisation.

Conductance en 2D et 3D. En 2D, la localisation est logarithmique pour tout désordre ($g \sim e^{-L/\xi}$), mais des transitions métal-isolant peuvent apparaître dans des systèmes désordonnés faibles. En 3D, un seuil critique W_c existe, au-delà duquel les états sont localisés. La conductance suit :

$$g \sim \begin{cases} \text{constante}, & W < W_c \text{ (métallique)}, \\ e^{-2L/\xi}, & W > W_c \text{ (localisé)}. \end{cases}$$

Effet des interactions. Dans les systèmes réels, les interactions électron-électron peuvent modifier la localisation. Le modèle de Hubbard, par exemple, ajoute un terme d'interaction :

$$H_{\text{int}} = U \sum_n n_\uparrow n_\downarrow.$$

Pour $U \neq 0$, la localisation peut être renforcée ou atténuée, selon les paramètres.
Note pédagogique : La localisation et la conductance dépendent fortement de la dimensionnalité et des interactions.

1.7 Synthèse et Implications

La loi de Landauer offre un cadre puissant pour comprendre l'impact de la localisation d'Anderson sur le transport. La relation $g \sim e^{-2L/\xi}$ illustre la suppression exponentielle de la conductance dans le régime localisé, tandis que les régimes balistique et diffusif révèlent des comportements contrastés. Les schémas de $g(L)$ et $g(W)$ confirment ces tendances, et les extensions à d'autres dimensions ou interactions enrichissent l'analyse. Ces résultats sont cruciaux pour la physique des matériaux désordonnés, des conducteurs mésoscopiques aux isolants topologiques.

TABLE 1 – Résumé des régimes de transport dans le modèle d'Anderson 1D.

Régime	Condition	Conductance g
Balistique	$L \ll l$	$g \approx 1$
Diffusif	$l \ll L \ll \xi$	$g \propto 1/L$
Localisé	$L \gg \xi$	$g \sim e^{-2L/\xi}$

Note pédagogique : La conductance reflète la compétition entre ordre (termes de saut) et désordre (potentiel aléatoire), un thème unificateur en physique des systèmes désordonnés.