RÉSUMÉ DE LA THÈSE DE DOCTORAT

UNIVERSITÉ LOUIS PASTEUR - STRASBOURG

Discipline : Physique théorique

Présentée par : Sébastião CORREIA

Titre : Diffusion multiple dans les systèmes désordonnés composés de diffuseurs de taille finie et approche du groupe de renormalisation pour la description des systèmes d'électrons en interaction

Laboratoire : Physique Théorique

Directeur de Thèse : Monsieur Jean RICHERT
Directeur de Recherche au C.N.R.S.
Institut de Physique - Université Louis Pasteur

Le thème central de ce travail est l'étude des propriétés de diffusion d'ondes à travers les systèmes désordonnés. Cette thèse est composée de deux parties qui font appel à des techniques différentes pour traiter le désordre. La première partie aborde le désordre de façon perturbative et la seconde partie propose de nouvelles approches pour un traitement non perturbatif du désordre et de l'interaction entre électrons.

Dans la 1^{re} partie de la thèse, nous présentons une approche microscopique pour décrire la propagation d'une onde (acoustique, électromagnétique) ou d'une particule (électron, atome) dans les systèmes désordonnés constitués de diffuseurs de taille finie. La diffusion des ondes dans ce type de systèmes est peut-être le phénomène le plus courant dans la nature, les systèmes ordonnés sans défauts, sans impuretés représentant plutôt l'exception. La description de ce phénomène a donné lieu à une vaste littérature et touche plusieurs domaines de la physique.

L'étude de la propagation d'une onde dans les matériaux désordonnés permet d'évaluer diverses quantités comme la conductivité des systèmes électroniques, ou le coefficient de diffusion (ou de transmission) lorsque l'onde étudiée est électromagnétique ou acoustique. Une autre quantité importante est le libre parcours moyen élastique qui mesure la distance moyenne entre deux collisions successives. Le calcul de ces quantités nécessite l'introduction de moyennes d'ensemble, c.-à-d. de moyennes sur toutes les configurations possibles du désordre. Des théories de plus en plus raffinées ont permis d'effectuer ce type de moyenne, allant de la description macroscopique, à l'aide d'une équation de diffusion classique, à une description microscopique, avec l'équation de Schrödinger pour le cas quantique [3]. La description macroscopique n'est pas suffisante pour rendre compte de phénomènes ondulatoires essentiels comme la rétrodiffusion cohérente, qui est un doublement de l'intensité diffusée dans la direction opposée à la direction de l'onde incidente engendré par des interférences constructives, ou la localisation [2], qui est un régime dans lequel l'onde ne peut plus se propager. Le calcul microscopique permet de comprendre ces phénomènes, mais il utilise en général une modélisation du potentiel désordonné à l'aide de diffuseurs ponctuels [6]. Ce type de potentiel est très singulier et, bien qu'il simplifie les calculs, il engendre des problèmes aussi fondamentaux que la violation de la causalité [5].

Une approche de la diffusion d'une onde dans un système composé de diffuseurs de taille finie est donnée par le formalisme KKR couramment utilisé dans le domaine du chaos quantique [7]. Cette méthode permet une description exacte, elle a cependant l'inconvénient de ne pas être très appropriée au calcul de moyennes d'ensemble.

Notre travail prend pour point de départ un formalisme de type diffusion multiple, qui est un développement perturbatif dans lequel chaque terme représente une séquence de diffusion particulière. De ce fait, la quantité fondamentale entrant dans les calculs est la matrice de diffusion $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie associée à un diffuseur individuel. Nous utilisons notre approche dans l'étude de la diffusion d'un électron par un système désordonné, à 3 et à 2 dimensions, dont les diffuseurs sont modélisés par des potentiels de sphère dure et de disque dur respectivement. Pour ces types de potentiels, la matrice de diffusion $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie est déterminée de façon analytique et permet de calculer la contribution de chaque séquence de diffusion élémentaire qui intervient dans la fonction d'onde décrivant le comportement de l'électron.

Dans la limite où la portée du potentiel devient très petite devant la longueur d'onde de l'électron, nous calculons la moyenne d'ensemble du propagateur et l'énergie propre associée à ce propagateur à l'ordre 2 dans la densité des diffuseurs. Ce calcul permet de montrer un comportement des corrections au libre parcours moyen élastique très différent de celui obtenu avec l'approximation des diffuseurs ponctuels. De plus, nous montrons que les effets hors couche d'énergie apportent une correction dans l'énergie propre du même ordre de grandeur que les corrections dues aux ondes partielles d'ordre supérieur, indiquant que ces effets sont intrinsèquement liés à la finitude de la taille des diffuseurs.

La resommation exacte de toutes les séquences de diffusions non moyennées fournit une expression analytique compacte de la fonction d'onde qui rejoint l'approche KKR. Cette expression a l'avantage d'être non perturbative et de permettre une étude numérique complète de la diffusion multiple dans un système particulier, et ceci quelle que soit l'énergie de l'électron. Nous étudions le comportement de la section efficace de diffusion de systèmes comportant un grand nombre de diffuseurs lors de la transition entre le régime balistique (peu de diffusions) et diffusif (diffusions multiples). Nous constatons que la taille du potentiel joue un rôle important au niveau de la transition entre les deux régimes.

La 2^{e} partie de la thèse est consacrée au développement de méthodes de théorie des champs capables de traiter à la fois le désordre et l'interaction entre les électrons. Cette situation de compétition entre l'interaction des électrons avec le désordre et l'interaction de Coulomb semble jouer un rôle important dans la transition métal-isolant apparaissant dans des semi-conducteurs bidimensionnels [4]. En effet, sans l'interaction de Coulomb, la théorie prédit que ces systèmes ne possèdent pas de transition et restent toujours isolants [1]. Les approches de théorie des champs et du groupe de renormalisation sont des outils puissants pour l'étude de régimes non perturbatifs et en particulier des transitions. Les approches développées jusqu'ici se heurtent principalement à deux difficultés. La première concerne la façon d'effectuer la moyenne d'ensemble, la seconde concerne l'emploi du groupe de renormalisation pour les systèmes possédant une surface de Fermi non triviale.

Il existe actuellement trois façons de réaliser la moyenne d'ensemble : la méthode des répliques, la méthode supersymétrique et celle basée sur le formalisme de Keldysh. La première de ces méthodes semble donner de bons résultats dans certains cas, mais elle est invalidée dans d'autres cas et il n'est pas évident, voire impossible, de savoir *a priori* quand elle est valable. La deuxième approche n'a pas ce problème mais l'introduction de l'interaction de Coulomb pose des difficultés. Enfin, l'approche de Keldysh semble prometteuse car elle a l'avantage de la méthode des répliques, à savoir qu'elle peut intégrer l'interaction de Coulomb, sans avoir son inconvénient.

Cependant ces trois approches sont basées sur le même modèle, qui est un modèle « sigma non linéaire » faisant intervenir des champs matriciels bi-locaux en temps. Or les théories des champs non locales sont en général inutilisables et il est préférable de travailler avec une théorie locale, en particulier pour utiliser le groupe de renormalisation.

Nous construisons un modèle local tenant compte du désordre qui permet de calculer des moyennes d'ensemble d'une façon différente des trois méthodes précédentes. Le désordre y est modélisé par un champ de particules (impuretés) placées aléatoirement sur les sites d'un réseau et l'interaction entre les électrons et ces impuretés est locale. La moyenne est obtenue par intégration fonctionnelle sur le champ d'impuretés (ce qui revient à sommer sur toutes les configurations possibles des impuretés) et à l'aide d'un opérateur de projection sur le sous-espace contenant une densité constante d'impuretés. Dans cette première étape, le modèle ne tient pas compte de l'interaction entre électrons. L'absence de l'interaction de Coulomb permet de vérifier explicitement la correspondance entre le développement perturbatif de notre modèle et le modèle d'Edwards [3], qui est le modèle courant traitant du désordre en théorie des perturbations.

Dans le but d'intégrer l'interaction entre électrons dans le modèle précédent, nous présentons une nouvelle approche du groupe de renormalisation permettant de traiter l'interaction de Coulomb. L'approche traditionnelle du groupe de renormalisation intègre sur les degrés de liberté inessentiels et conserve les degrés de libertés effectifs décrivant la physique. La présence d'une surface de Fermi entraîne que les degrés de liberté effectifs sont encore infiniment nombreux après l'implémentation du groupe de renormalisation alors qu'un des buts du groupe de renormalisation traditionnel est justement de décrire la physique à l'aide de quelques degrés de liberté effectifs.

L'approche que nous proposons est locale et permet d'éviter les difficultés liées à la surface de Fermi. Nous la testons avec le modèle de gaz d'électrons en interaction en l'absence d'impuretés. La localité du modèle est conservée en introduisant un champ de photons pour rendre compte de l'interaction de Coulomb. Les équations de flot des constantes de couplage qui définissent le modèle sont dérivées de façon analytique. Contrairement à l'approche académique, elles ne sont pas obtenues par une intégration sur les degrés de liberté ordonnés selon leur impulsion, mais en faisant varier un paramètre interne au système. Ce paramètre est ici une masse pour le photon (qui sert aussi à pondérer l'énergie cinétique de l'électron) qui rend le modèle soluble en écrantant l'interaction de Coulomb lorsque la masse est infinie. La limite de masse infinie sert de condition initiale au système d'équations différentielles couplées décrivant le flot des constantes de couplage. Les équations de flot doivent être intégrées pour obtenir les constantes de couplage renormalisées du système physique qui correspondent à une masse nulle. Nous montrons ici aussi qu'un développement perturbatif (à l'ordre d'une boucle) permet de retrouver le modèle RPA qui décrit les gaz d'électrons dilués.

Références

[1] 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**:673–676, 1979.

[2] P. W. Anderson. « Absence of diffusion in certain random lattices ». *Phys. Rev.*, **109**:1492, 1958.

[3] S. F. Edwards. « A new method for the evaluation of electric conductivity in metals ». *Phil. Mag.*, **3**:1020–1031, 1958.

[4] S. V. Kravchenko, G. V. Kravchenko, J. E. Furneaux, V. M .Pudalov, et M. D'Iorio. « Possible metal-insulator transition at $B = 0$ in two dimensions ». *Phys. Rev.* ***B***, **50**:8039–8042, 1994.

[5] Y.-P. Pellegrini, D. B. Stout, et P. Thibaudeau. « Off-shell mean-field electromagnetic T-matrix of finite-size spheres and fuzzy scatterers ». *J. Phys.: Condens. Matter*, **9**:177–191, 1997.

[6] M. C. W. van Rossum et Th. Nieuwenhuizen. « Multiple scattering of classical waves: microscopy, mesoscopy, and diffusion ». *Rev. Mod. Phys.*, **71**:313–372, 1999.

[7] A. Wirzba. « Quantum mechanics and semiclassics of hyperbolic n-disk scattering systems ». *Phys. Rep.*, **309**:1–116, 1999.

Publication

S. Correia, D. Boosé et J. Richert, « Diffusion multiple dans les systèmes désordonnés composés de diffuseurs de taille finie », Résumé 0303, 7$^{\text{es}}$ Journées de la Matière Condensée, Poitiers, août 2000, p. 153.

Communications et posters

31 août 2000 Brève communication et poster aux *7es Journées de la Matière Condensée*, Poitiers.
« Diffusion multiple dans les systèmes désordonnés composés de diffuseurs de taille finie », S. Correia, D. Boosé et J. Richert.

23 juin 2000 Communication à l'atelier de travail *Renormalization group for fermionic systems*, Strasbourg.
« Functional Callan-Symanzik equations for non-relativistic interacting electrons », S. Correia, J. Polonyi et J. Richert.
`http://lpt1.u-strasbg.fr/worksh/sum.html`

7 avril 2000 Présentation d'un poster à l'atelier de travail *New directions in mesoscopic physics*, Strasbourg.
« Diffusion of particles through disordered media with finite size impurities », S. Correia, D. Boosé et J. Richert.

4 avril 2000 Brève communication et poster aux *Journées de l'École Doctorale de Physique et Chimie-Physique de Strasbourg*, Strasbourg.
« Diffusion d'une particule dans un système de disques durs », S. Correia, D. Boosé et J. Richert.

28 janvier 2000 Brève communication aux *Journées de Physiques Statistiques*, Paris.
« Diffusion multiple dans les systèmes de sphères dures réparties aléatoirement », S. Correia, D. Boosé et J. Richert.