

Conductance et étalement d'une onde quantique dans un guide unidimensionnel : effet d'une force.

Cécile Crosnier de Bellaistre

▶ **To cite this version:**

Cécile Crosnier de Bellaistre. Conductance et étalement d'une onde quantique dans un guide unidimensionnel : effet d'une force.. Optique [physics.optics]. Université Paris Saclay (COmUE), 2017. Français. NNT : 2017SACLO009 . tel-01686775

HAL Id: tel-01686775
https://pastel.hal.science/tel-01686775

Submitted on 17 Jan 2018

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

NNT : 2017SACLO009

THESE DE DOCTORAT
DE L'UNIVERSITE PARIS-SACLAY

préparée à

L'INSTITUT D'OPTIQUE GRADUATE SCHOOL

ÉCOLE DOCTORALE N°572

Ondes et Matière (EDOM)

Spécialité de doctorat : Physique

par

Cécile CROSNIER DE BELLAISTRE

Conductance et étalement d'une onde quantique dans un guide unidimensionnel : effet d'une force.

Thèse présentée et soutenue à Palaiseau, le 8 novembre 2017

Composition du jury :

M. Nicolas PAVLOFF	Président	Université Paris-Sud
M. Philippe BOUYER	Rapporteur	Institut d'Optique d'Aquitaine
M. Jean-Claude GARREAU	Rapporteur	Université de Lille 1
Mme Juliette BILLY	Examinatrice	Université Toulouse III
M. Laurent SANCHEZ-PALENCIA	Directeur de thèse	École Polytechnique

Remerciements

Mes remerciements vont tout d'abord à mon directeur de thèse, Laurent Sanchez-Palencia, dont j'ai rejoint l'équipe de théoriciens au sein du groupe optique atomique de l'Institut d'Optique en janvier 2014, lors de mon stage de M2. Les qualités scientifiques et humaines de Laurent m'ont permis de réaliser les recherches présentées dans ce manuscrit dans un environnement de travail agréable et prolifique. Toujours disponible pour discuter, Laurent a, grâce à son recul et à une compréhension fine des phénomènes physiques, fourni des pistes de recherches pertinentes qui ont mené aux résultats que je suis heureuse de présenter ici.

J'ai mené mes recherches en collaboration avec Christian Trefzger, Antoine Georges et Alain Aspect. Christian a participé à mon encadrement lors de son séjour post-doctoral dans l'équipe de Laurent au début de mon doctorat, ce dont je le remercie vivement. J'ai beaucoup apprécié nos discussions, scientifiques comme amicales ! Plusieurs rencontres avec Antoine Georges et Alain Aspect ont permis de faire fortement avancer la compréhension des phénomènes physiques présentés dans ce manuscrit. Ces réunions ont toujours été très stimulantes d'un point de vue scientifique et très agréables grâce à la bienveillance de tous les membres impliqués, et je remercie donc très sincèrement Antoine et Alain pour ces interactions privilégiées.

Je remercie les membres de mon Jury de thèse : Jean-Claude Garreau, Philippe Bouyer, Nicolas Pavloff et Juliette Billy pour leur lecture attentive de ce manuscrit et pour les échanges que nous avons eus lors de ma soutenance.

J'ai eu la chance d'effectuer mon doctorat dans un cadre optimal à l'Institut d'Optique. Je remercie pour cela les membres de mon équipe : Laurent, Christian, Marie, qui, bien qu'ayant achevé son doctorat et quitté le groupe depuis quelques années, m'a fourni des ressources et une aide précieuse au début de mes recherches, Samuel, Guilhem, Lorenzo, Julien, Hepeng, Lih et Giuseppe. Je remercie de même tous les membres du groupe optique atomique pour les discussions scientifiques et amicales : Denis, Isabelle, Chris, Marc, David, Thomas, Vincent, Bess, Aisling, Maximilian, Quentin, Cécile, Hugo, Marco, Vincent, Mukhtar, Valentin, Lauriane, Amaudric, Guillaume, Steven, Anaïs, Clémence, Pierre, Maxime, Almaz, Jérémie, ...

J'ai pris beaucoup de plaisir à effectuer mon service d'enseignement au sein de l'IOGS et je suis reconnaissante envers Henri, Nathalie, Fabienne, Lionel et Karen pour les missions d'enseignement qui m'ont été confiées et pour le travail commun que nous avons mené autour de ces enseignements. Je souhaite également faire part de ma gratitude envers Thierry et Cédric pour leur gestion parfaite des travaux pratiques qui m'a permis de réaliser cette part importante de mon enseignement dans des conditions idéales.

Je remercie plus généralement tous les membres du LCF et de l'Institut d'Optique. Travailler à l'Institut a toujours été un plaisir grâce à eux. Je ne pourrai malheureusement pas citer individuellement tous les membres auxquels je pense au risque d'en oublier un. Je souhaite néanmoins mentionner ici Florence et Hélène. Par ailleurs, mon équipe de recherche a rejoint le laboratoire de physique théorique de l'École Polytechnique vers la fin de mon doctorat, et je remercie toutes les personnes du CPHT impliquées, dont notamment Jean-Luc pour son support technique informatique.

Une thèse ne se déroule pas seulement dans un laboratoire mais aussi au sein d'une école doctorale et d'une communauté scientifique internationale, et j'ai une pensée pour tous les membres de l'école doctorale onde et matière et tous les chercheurs que j'ai rencontrés lors de conférences ou de cours pendant mon doctorat.

Je suis reconnaissante envers l'École Normale Supérieure de Cachan pour mes années d'étude qui ont mené au doctorat et pour le financement qui m'a été accordé afin de pouvoir réaliser cette thèse. Je profite de ce paragraphe pour remercier mes amis cachanais qui ont soutenu leur thèse de physique en 2016-2017 pour tous les bons moments passés ensemble : Clément, Carmelo, Romain, Christopher, Thibaut et Matthieu.

Mes remerciements vont enfin à ma famille, dont la présence a toujours rendu le travail plus léger : Maman, Papa, Bénédicte, Nathan, Gabriel et Sarah, Christiane, Michel et Arnaud ...

Merci Aurélien pour toutes nos discussions sur nos sujets de recherche respectifs, depuis le stage à Calgary jusqu'au doctorat, pour ton implication dans mon travail, pour ton soutien permanent, et pour tout le reste. Merci enfin à toi Adèle, dont la présence a illuminé la rédaction du manuscrit, avant ta naissance puis après, lorsque tu dormais dans mes bras pendant que je terminais la rédaction de cette thèse.

Table des matières

Introduction **9**

1 Localisation d'Anderson **13**
1.1 Ondes en milieu désordonné . . . 13
1.1.1 Modèle de Drude . . . 13
1.1.2 Modèle de transport quantique . . . 16
1.2 Approches théoriques de la localisation d'Anderson . . . 23
1.2.1 Théorie d'échelle . . . 23
1.2.2 Approches microscopiques exactes en 1D . . . 26
1.2.3 Méthode auto-cohérente . . . 30
1.3 Observations expérimentales . . . 32
1.3.1 Étude avec des ondes classiques . . . 32
1.3.2 Observations de la localisation d'Anderson dans des systèmes d'atomes ultrafroids . . . 34
1.4 Recherches actuelles et position de notre travail . . . 42

2 Désordre blanc et force constante **45**
2.1 Diffusion quantique d'une particule . . . 46
2.1.1 Système . . . 46
2.1.2 Résumé de la méthode diagrammatique . . . 46
2.1.3 Résultat et discussion sur la localisation . . . 60
2.2 Transmission . . . 61
2.2.1 Système . . . 61
2.2.2 Résultat numérique . . . 63
2.2.3 Discussion sur la localisation . . . 65
2.3 Bilan . . . 65

3 Transmission dans un guide d'onde unidimensionnel **67**
3.1 Système . . . 67
3.1.1 Description . . . 67
3.1.2 Méthode numérique . . . 69
3.2 Méthode des matrices de transfert . . . 70
3.2.1 Introduction de la matrice de transfert dans un milieu inhomogène . . . 70
3.2.2 Évolution de T à partir du chaînage de matrices de transfert . . . 73
3.2.3 Calcul du coefficient de réflexion résultant d'un événement de rétrodiffusion unique . . . 75
3.3 Transmission analytique . . . 77
3.3.1 Distribution de la transmission . . . 78
3.3.2 Transmissions typique et moyenne . . . 79

3.4 Localisation algébrique . . . 81
3.5 Délocalisation . . . 84
3.5.1 Désordre corrélé . . . 84
3.5.2 Force croissante et désordre blanc . . . 85
3.5.3 Universalité . . . 87
3.6 Propositions d'expériences avec atomes ultrafroids . . . 87
3.6.1 Transmission dynamique . . . 88
3.6.2 Conductance à deux terminaux . . . 89
3.6.3 Conductance à quatre terminaux . . . 93

4 Approches complémentaires de la transmission 97
4.1 Exemple de désordre non gaussien : potentiel de tavelures . . . 97
4.1.1 Réalisation expérimentale . . . 97
4.1.2 Fonctions de corrélation du potentiel de tavelures . . . 98
4.1.3 Application à un éclairage uniforme du dépoli . . . 99
4.2 Formalisme de phase . . . 100
4.2.1 Principe . . . 100
4.2.2 Calcul . . . 101
4.2.3 Application au potentiel de tavelures . . . 103
4.2.4 Lien avec la transmission typique . . . 104
4.3 Méthode diagrammatique . . . 105
4.3.1 Expression du coefficient de transmission en termes de fonctions de Green 105
4.3.2 Lien avec le formalisme diagrammatique . . . 106
4.3.3 Calcul diagrammatique à l'ordre deux . . . 107
4.3.4 Calcul diagrammatique à l'ordre trois . . . 110
4.3.5 Lien avec le calcul du coefficient de réflexion . . . 114
4.3.6 Différence entre probabilité de diffusion quantique et transmission . . . 116

5 Étalement d'un paquet d'onde 117
5.1 Probabilité de transfert . . . 117
5.1.1 Adimensionnement et mise en équation . . . 118
5.1.2 Probabilité de transfert à temps infini . . . 120
5.1.3 Étude des moments à temps infini . . . 121
5.2 Étalement d'un paquet d'onde . . . 123
5.2.1 Du paquet d'onde à la particule idéale . . . 123
5.2.2 Méthode de résolution numérique . . . 124
5.2.3 Évolution temporelle du profil de densité du paquet d'onde . . . 126
5.3 Évolutions de la position moyenne et de sa variance . . . 129
5.3.1 Position moyenne . . . 130
5.3.2 Écart-type . . . 132
5.3.3 Influence du sens de la vitesse initiale sur la dynamique des moments de la position . . . 137
5.4 Effet des corrélations du désordre . . . 137
5.4.1 Étude numérique . . . 138
5.4.2 Interprétation physique . . . 140
5.4.3 Bilan . . . 141

Conclusion 143

A Compléments au modèle de Drude **147**
A.1 Hypothèses . . . 147
A.2 Durée moyenne entre deux collisions . . . 147
A.3 Évolution de la vitesse des électrons . . . 148

B Distribution log-normale tronquée **149**
B.1 Interprétation de la loi log-normale dans un système homogène . . . 149
B.2 Loi log-normale tronquée . . . 149
B.3 Bilan . . . 150

C Vertex d'ordre deux **151**

D Coefficient de transmission **153**
D.1 Normalisation de la distribution de probabilité du coefficient de transmission . . . 153
D.2 Valeur moyenne du logarithme du coefficient de transmission . . . 154
D.3 Valeur moyenne du coefficient de transmission . . . 156

E Propagation d'un paquet d'onde gaussien en présence d'une force **157**
E.1 État initial . . . 157
E.2 Évolution dans l'espace des impulsions . . . 157
E.3 Évolution dans l'espace réel . . . 158

Bibliographie **160**

Introduction

En 1958, Philip W. Anderson a montré que la diffusion d'électrons dans un cristal pouvait être stoppée en présence d'un désordre suffisamment fort au sein du matériau. Cette localisation forte, ou localisation d'Anderson, est un phénomène très général qui peut apparaître lorsqu'une onde se propage dans un milieu désordonné. En effet, il résulte d'interférences entre les différents chemins de diffusion de l'onde dans le milieu désordonné. Il s'applique ainsi aux ondes classiques, au moins scalaires (son, lumière, ...), comme aux ondes quantiques de matière (atomes froids, électrons, ...). La localisation d'Anderson est un problème difficile, dont la compréhension a beaucoup mûri depuis une soixantaine d'années. Des premières études analytiques ont permis de montrer que la dimension du système joue un rôle crucial dans la localisation forte. En effet, alors que des systèmes désordonnés unidimensionnels ou bidimensionnels sont toujours localisés, quelles que soient l'énergie de l'onde et la force du désordre, il existe en dimension trois une transition entre un régime localisé à basse énergie (comparée à la force du désordre) et un régime délocalisé à plus haute énergie. Des méthodes analytiques quasi-exactes ont permis par la suite de traiter la localisation d'Anderson en dimension un. En dimension supérieure cependant, un calcul analytique exact est trop complexe, et l'étude précise de la localisation nécessite d'effectuer des simulations numériques ou des expériences. Dès les années 1980, des expériences avec des ondes classiques (lumineuse ou sonore) ont ainsi cherché à mettre en évidence le phénomène de localisation d'Anderson. Les progrès dans les expériences d'atomes ultrafroids ont permis par la suite d'observer directement pour la première fois à partir de 2008 la localisation d'une onde quantique de matière en dimension un, puis en 2012 en dimension trois. L'utilisation d'atomes ultrafroids permet notamment une très bonne connaissance des caractéristiques du désordre et de l'onde quantique, et donne la possibilité de contrôler les interactions entre particules. Il a ainsi été possible d'étudier la localisation d'Anderson originelle, sans interactions entre particules. Ces systèmes d'atomes ultrafroids peuvent également servir de plates-formes d'étude de théories qui émergent actuellement autour de la localisation de particules en interaction (many-body localization).

L'une des manifestations les plus emblématiques de la localisation d'Anderson est la suppression de la conductance d'un matériau en présence d'un désordre fort. Cette conductance est définie comme la réponse linéaire en courant à une différence de potentiel, dans la limite où celle-ci est nulle. Dans une expérience réelle cependant, on fixe toujours une différence de potentiel finie et on mesure le courant produit. La question de l'effet d'une force finie (par exemple la force électrique induite par la différence de potentiel appliquée) sur la localisation d'Anderson s'est donc assez rapidement posée, en particulier dans les systèmes unidimensionnels qui sont fortement localisés en l'absence de force. Il s'agit là d'une question fondamentale. Alors que la localisation d'Anderson fait diminuer la conductance d'un fil de manière exponentielle avec sa longueur, ce qui transforme l'échantillon en isolant, une force finie pourrait favoriser le transport de particules, et réduire voire supprimer la localisation. Divers travaux théoriques effectués dans cette direction pour un désordre blanc s'accordent sur l'apparition d'une localisation algébrique, qui est donc plus faible que la localisation exponentielle existante en l'absence

de force. Cependant, les prédictions diffèrent suivant l'approche utilisée. Dans un système de mesure de la transmission d'une onde quantique à travers un fil désordonné de longueur L, un résultat numérique [1] montre une décroissance algébrique de la transmission typique (obtenue en moyennant le logarithme de la transmission) quelle que soit la force appliquée. Dans un problème d'étalement d'un paquet d'onde quantique dans un milieu désordonné infini en revanche, un calcul exact [2] prédit un régime de localisation pour une force faible comparée à la force du désordre, et une transition de délocalisation lorsque la force dépasse une valeur critique. De plus, la décroissance algébrique de la densité moyenne du paquet localisé à faible force diffère de la décroissance de la transmission typique obtenue numériquement. La différence de comportement entre les deux systèmes est intrigante par comparaison au cas sans force pour lequel la transmission moyenne à travers un fil et le profil de densité du paquet d'onde localisé ont le même comportement (une décroissance exponentielle identique). À ce stade, plusieurs raisons pourraient expliquer les résultats, apparemment contradictoires, de ces deux approches. D'une part, le désordre est borné dans l'espace dans le cas de la transmission et pas dans celui de l'étalement, d'autre part, le calcul numérique ne moyennait pas directement la transmission mais son logarithme, enfin le calcul numérique de la transmission a été effectué pour un désordre discret, alors que le modèle de désordre utilisé dans le calcul analytique de l'étalement est continu. Comprendre l'origine de la différence de comportement entre les deux systèmes en présence d'une force est une question non résolue à ce stade.

Motivés par cette question ouverte, et par la possibilité de réaliser les deux situations (transmission ou étalement) dans des expériences d'atomes ultrafroids de grande précision, nous avons étudié dans cette thèse l'effet d'une force sur la localisation d'Anderson dans un système unidimensionnel. Nous nous sommes intéressés d'une part à la transmission à travers un guide de longueur finie et d'autre part à l'étalement d'un paquet d'onde dans un milieu infini. La transmission typique n'ayant été étudiée que de manière numérique sur un modèle discret, comme mentionné précédemment, nous avons développé un calcul analytique de la transmission qui nous permet notamment d'obtenir la transmission moyenne dans l'espace continu, ainsi que la distribution complète de la transmission. Nous avons proposé des schémas expérimentaux permettant l'étude de la distribution de probabilité de la transmission, soit par propagation d'un paquet d'onde d'atomes ultrafroids dans un milieu désordonné fini, soit par mesure de conductance entre deux réservoirs de fermions, suivant un dispositif usuel en physique du solide. Ce deuxième type de système peut également être étudié avec des atomes ultrafroids, grâce au développement récent de mesures de transport entre réservoirs d'atomes ultrafroids qui s'inscrivent dans une volonté d'utilisation des atomes froids comme plate-forme d'étude pour comprendre les mécanismes fondamentaux de transport quantique qui interviennent en matière condensée. En ce qui concerne l'étalement d'un paquet d'onde, nous avons étudié par une approche numérique l'évolution temporelle du paquet d'onde, ce qui nous permet par exemple d'observer la localisation et de caractériser la délocalisation de la position moyenne du paquet d'onde et de sa largeur. Cette étude dynamique, qui n'avait pas été effectuée jusqu'à présent, est essentielle pour permettre des comparaisons avec des expériences qui ont lieu à temps fini. Au-delà de l'étude de la localisation en présence d'une force et d'un désordre blanc, nous nous sommes également attachés à décrire l'effet des corrélations spatiales du potentiel désordonné dans les deux systèmes étudiés (transmission et étalement). Cette question des corrélations du désordre, non résolue jusqu'à présent, est essentielle pour la comparaison avec des expériences réelles d'atomes ultrafroids par exemple. Nous verrons de plus dans ce manuscrit que les corrélations du potentiel désordonné jouent un rôle crucial en présence d'une force.

Le chapitre un de cette thèse constitue une introduction au phénomène de localisation d'Anderson en l'absence de force. Nous présentons d'abord son origine et ses conséquences sur

les grandeurs physiques qui nous intéressent telles que l'étalement d'un paquet d'onde ou la transmission à travers un guide. Nous exposons ensuite des approches théoriques du phénomène de localisation. Nous donnons notamment un aperçu de méthodes exactes à une dimension que nous avons étendues en présence d'une force tout au long de cette thèse, et que nous détaillons dans ce cadre dans les chapitres suivants. Nous présentons ensuite les différents types d'expériences utilisées pour mettre en évidence la localisation d'Anderson, et en particulier les résultats obtenus avec des atomes ultrafroids. Nous citons enfin quelques problématiques actuelles de recherche sur la localisation d'Anderson

Dans le chapitre deux, nous nous intéressons à l'effet d'une force constante sur la localisation d'Anderson en présence d'un désordre blanc. Nous présentons deux résultats existant sur cette problématique que nous avons mentionnés précédemment : le calcul analytique de l'étalement d'un paquet d'onde d'une part et le calcul numérique de la transmission typique à travers un guide d'autre part [1, 2]. Le premier indique en particulier qu'à faible force le paquet d'onde présente une décroissance algébrique de sa densité dans la direction de la force, $n(x) \sim x^{-\beta_{exp}}$, avec une loi de puissance $\beta_{exp} = 1 + (1-\alpha)^2/8\alpha$ qui dépend uniquement du rapport α de la force sur l'intensité du désordre. En revanche, au-delà d'une force critique, le paquet est entièrement délocalisé. Le second résultat, de nature numérique, est obtenu en discrétisant le système. Il montre que la transmission typique décroît algébriquement avec la longueur du système, $T^{typ} = \exp(\overline{\ln T}) \sim L^{-\beta_{tr}}$, avec $\beta_{tr} = 1/2\alpha$, pour toute valeur de la force considérée.

Au chapitre trois, nous présentons l'un des résultats de cette thèse. Il s'agit du calcul exact de la distribution de probabilité du coefficient de transmission. Nous utilisons une méthode de matrices de transfert que nous étendons au cas où une force (non nécessairement constante) est présente. Nous montrons que cette distribution de probabilité prend une forme universelle qui ne dépend que d'un paramètre contenant tous les détails du désordre et de la force. Ce résultat nous permet de calculer diverses quantités pertinentes telles que la transmission typique ou la transmission moyenne. En présence d'un désordre blanc et d'une force constante, nous retrouvons la décroissance algébrique obtenue dans le modèle numérique présenté au chapitre précédent, $T^{typ} \sim L^{-1/2\alpha}$, et nous obtenons une décroissance de la transmission moyenne $\overline{T} \sim L^{-1/8\alpha}$ différente de la décroissance de la densité dans un problème d'étalement. De plus, nous montrons que dans le cas d'un désordre réaliste, qui présente une longueur de corrélation spatiale finie, ou dans le cas d'une force croissante, la transmission tend vers une valeur finie, ce qui indique une délocalisation. Ce résultat est très différent du cas sans force pour lequel les corrélations du désordre renormalisent simplement la longueur de localisation, sans détruire la localisation exponentielle. Enfin, nous proposons des expériences à l'aide d'atomes ultrafroids permettant de mesurer la transmission.

Au chapitre quatre, nous complétons l'approche analytique précédente, qui nécessite un désordre faible, par des calculs à l'ordre supérieur dans le désordre. Pour cela, nous calculons d'une part la transmission typique à l'aide du formalisme de phase que nous généralisons à la présence d'une force. Nous calculons d'autre part la transmission moyenne à l'aide d'une méthode diagrammatique identique à celle utilisée pour le calcul de l'étalement d'un paquet d'onde. Les deux méthodes montrent que la transmission conserve sa dépendance universelle en l'unique paramètre qui contient tous les détails du désordre et de la force, mais que la valeur de ce paramètre est corrigée par la prise en compte de termes d'ordres supérieurs dans le désordre. Par ailleurs, l'utilisation de la méthode diagrammatique nous permet de mettre en évidence l'origine de la différence de comportement entre la transmission et l'étalement, qui est le caractère borné ou non de l'espace sur lequel le désordre s'étend.

Le chapitre cinq est consacré à l'étalement d'un paquet d'onde en présence d'une force constante. Nous nous intéressons à la dynamique de cet étalement. Pour cela, nous effectuons des simulations numériques d'étalement d'un paquet d'onde. Nous obtenons une croissance

algébrique des moments d'ordre $m \in \{1, 2\}$ de la position, $\overline{x^m} \sim t^{\beta_m}$, à partir d'une certaine valeur du rapport force sur désordre, $\alpha > \alpha_m$. Nous montrons que β_m atteint un régime stationnaire à grand temps, et nous proposons une méthode d'extrapolation, utile pour comparer les résultats théoriques à des expériences à temps fini. Enfin, nous étudions numériquement l'effet des corrélations du désordre. Nous observons une délocalisation de la position moyenne et de la largeur du paquet d'onde en présence d'un désordre corrélé, que nous interprétons par une approche empirique.

Chapitre 1

Localisation d'Anderson

1.1 Ondes en milieu désordonné

La propagation d'une onde dans un milieu désordonné est un sujet central dans de nombreux domaines de la physique : diffusion d'une onde lumineuse par un nuage, onde sismique dans l'écorce terrestre, échographie (onde sonore dans un milieu biologique), onde électronique dans un métal contenant des impuretés, etc. Dans un régime classique, on peut considérer la propagation de l'onde comme celle d'une particule qui rencontre différents sites diffuseurs, et subit ainsi des événements de diffusion multiple. Le modèle le plus simple décrivant cette physique est classique. Il s'agit du modèle de Drude dans lequel un électron est soumis à l'action d'un champ électrique et subit de nombreux chocs avec les particules constitutives du milieu. Bien qu'essentiellement phénoménologique, ce modèle a la vertu de donner une vision simple de la diffusion classique et permet d'introduire des notions essentielles, que nous retrouverons par la suite, telles que le libre parcours moyen, correspondant à la distance typique entre deux événements de diffusion. Ce modèle fait l'objet de la section 1.1.1. Cette approche, qui conduit à une dynamique diffusive, est néanmoins insuffisante pour décrire le mouvement d'une onde classique ou d'une particule quantique. Nous nous intéressons ici au second cas, traité à la section 1.1.2. Nous verrons que l'étude de la propagation d'une particule quantique dans un milieu désordonné permet d'une part de comprendre l'origine du libre parcours moyen, et fait d'autre part apparaître des effets d'interférences liés au caractère ondulatoire de la particule qui peuvent complètement modifier sa propagation et conduire à une diminution voire une suppression du transport. Nous détaillons ainsi l'exemple de la localisation faible d'une onde dans un milieu désordonné, correspondant à une diminution de la diffusion, à travers l'exemple de la rétrodiffusion cohérente. Ce phénomène décrit l'existence d'un pic de probabilité de rétrodiffusion d'une onde incidente sur un milieu désordonné, et on peut en voir une manifestation spectaculaire par l'apparition d'un spot lumineux [3] sur une photographie des anneaux de Saturne (voir Fig. 1.1) lorsque la sonde d'observation est placée dans la direction de rétrodiffusion de la lumière du soleil par les anneaux de Saturne qui constituent le milieu diffusant. Nous introduisons enfin la localisation forte, correspondant à une absence de diffusion, qui sera présentée plus en détail dans la section suivante.

1.1.1 Modèle de Drude

La conductivité d'un matériau caractérise son aptitude à produire un courant sous l'effet d'un champ électrique. Son étude est bien sûr au cœur de la physique du solide. Ainsi, trois ans seulement après la découverte des électrons par J. J. Thomson, particules chargées négativement dont on a dès lors soupçonné (à juste titre) que le mouvement explique la conduc-

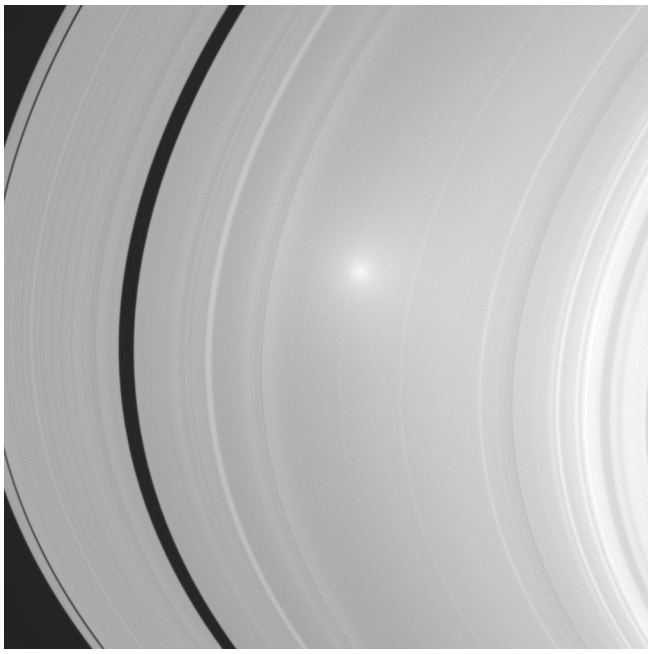


Fig 1.1 – Photographie des anneaux de Saturne prise par la sonde spatiale Cassini. Le spot lumineux apparaît lorsque le soleil est situé derrière la sonde, et s'explique principalement par un phénomène de rétrodiffusion cohérente de la lumière. La lumière provenant du soleil situé dans le dos de l'observateur diffuse dans les anneaux et revient de manière exacerbée dans la direction du soleil par un effet d'interférences constructives (voir paragraphe *Localisation faible et rétrodiffusion cohérente* page 21). Crédits : NASA/JPL/Space Science Institute, https://saturn.jpl.nasa.gov/resources/3237.

tivité métallique, P. Drude a proposé en 1900 la première théorie microscopique permettant de rendre compte de la résistance des métaux [4, 5].

Le modèle de Drude s'inspire de la théorie cinétique des gaz, appliquée aux électrons du métal. Afin d'assurer la neutralité du métal, Drude émet l'hypothèse que ce dernier est constitué d'électrons mobiles et de charges positives plus massives, supposées fixes. Nous pouvons aujourd'hui assimiler ces charges fixes aux ions du réseau cristallin constituant le métal sur lesquels les électrons de valence se déplacent. Dans son modèle, Drude néglige les interactions entre électrons. En revanche, il considère que les électrons diffusent sur les ions lors d'événements de collision. La probabilité de collision pendant une durée élémentaire $\mathrm{d}t$ est supposée constante, égale à $\mathrm{d}t/\tau_e$, où τ_e, appelé temps de libre parcours moyen, est égal à la durée moyenne entre deux collisions (cf. annexe A). À l'issue d'une collision, la vitesse $\boldsymbol{v_0}$ d'un électron est supposée indépendante de sa vitesse avant la collision, et distribuée de façon isotrope. En particulier, Drude suppose que les collisions permettent d'assurer un équilibre thermodynamique local, de sorte que la norme de la vitesse après collision est uniquement fixée par la température extérieure T grâce au théorème d'équipartition de l'énergie : $m\boldsymbol{v_0}^2 = 3k_BT$, où m désigne la masse d'un électron. On obtient ainsi $v_0 \sim 10^5$ m.s^{-1} à température ambiante. En présence d'un champ électrique extérieur $\boldsymbol{E}$, la vitesse des électrons augmente entre deux événements de collision. Une dissipation d'énergie apparaît donc lors des collisions pour permettre le retour de la norme de la vitesse des électrons à v_0. On peut ainsi montrer (voir annexe A.3) que la vitesse moyenne des électrons $\boldsymbol{v_{moy}}(t)$ subit une force dissipative égale à $-m\boldsymbol{v_{moy}}(t)/\tau_e$. On en déduit

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v_{moy}}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{\boldsymbol{v_{moy}}(t)}{\tau_e} + \frac{q_e\boldsymbol{E}}{m}, \tag{1.1}$$

où $q_e < 0$ désigne la charge d'un électron. En régime stationnaire, la vitesse moyenne des

	n_e (10^{22} cm^{-3})	σ (10^7 S.m^{-1})	τ_e (10^{-14} s)
Cu	8.47	6.4	2.7
Ag	5.86	6.62	4.0
Au	5.90	4.9	3.0
Fe	17	1.12	0.24
Al	18.1	4.08	0.8

TABLE 1.1 – Densité électronique, conductivité à 273 K et temps de libre parcours moyen de quelques métaux. La densité électronique a été obtenue en multipliant la densité atomique par un nombre d'électrons de valence choisi égal à 2 pour le fer, 3 pour l'aluminium, et 1 pour les autres éléments chimiques. Le temps de libre parcours moyen est obtenu grâce à la relation (1.5).

électrons est donc donnée par

$$\boldsymbol{v_{moy}} = \tau_e q_e \boldsymbol{E}/m. \tag{1.2}$$

La densité volumique de courant, égale à $\boldsymbol{j} = q_e n_e \boldsymbol{v_{moy}}$, où n_e représente la densité électronique, est donc, suivant ce modèle, proportionnelle au champ électrique appliqué, $\boldsymbol{j} = \sigma \boldsymbol{E}$. Le coefficient de proportionnalité est appelé conductivité, et s'exprime sous la forme

$$\sigma = \frac{q_e^2 n_e \tau_e}{m}. \tag{1.3}$$

Le modèle de Drude fournit une description microscopique simple permettant d'expliquer des résultats expérimentaux majeurs, comme par exemple la loi d'Ohm, selon laquelle le courant I dans un matériau soumis à une différence de potentiel U est donné par $I = GU$, où la conductance G est indépendante de la différence de potentiel appliquée. En effet, considérons un fil de section transverse S et de longueur L, soumis à une différence de potentiel électrique U. Le champ électrique au sein du fil, $E_x = U/L$, génère ainsi un courant $I = j_x S = \sigma S U/L$. La conductance G vaut donc

$$G = \sigma \frac{S}{L}. \tag{1.4}$$

On en déduit en particulier que la résistance, égale à l'inverse de la conductance, est proportionnelle à la longueur du fil, et que la conductance est proportionnelle à la section du fil. On retrouve ainsi les propriétés bien connues d'addition des résistances en série et d'addition des conductances en parallèle.

Le temps de libre parcours moyen peut être obtenu à partir de mesures expérimentales de la conductivité. En effet, en utilisant (1.3), on obtient

$$\tau_e \simeq 3.5 \times 10^{-14} \times \left(\frac{10^{22}\ \text{cm}^{-3}}{n_e} \right) \left(\frac{\sigma}{10^7\ \text{S.m}^{-1}} \right), \tag{1.5}$$

ce qui donne un temps typique $\tau_e \sim 10^{-14}$ s pour de nombreux matériaux (voir table 1.1).

Le libre parcours moyen des électrons, ℓ_e, correspondant à la distance entre deux événements de collision, peut être déduit du temps de libre parcours moyen par $\ell_e = v_0 \tau_e$, ce qui donne $\ell_e \sim 10$ Å. On trouve ainsi un ordre de grandeur cohérent avec la distance typique inter-ions, de l'ordre de l'angström. Ceci semble soutenir l'hypothèse de Drude d'une diffusion des électrons sur les ions du réseau. On sait cependant aujourd'hui que cette hypothèse est fausse, la propagation des électrons de conduction dans un réseau parfait étant analogue à une propagation libre. De plus, la vitesse typique des électrons qui participent à la conduction est donnée par la vitesse de Fermi, $v_F \sim 10^6$ m.s^{-1}, d'où un libre parcours moyen à température ambiante $\ell_e = v_F \tau_e \sim 100$ Å, très grand devant la distance inter-atomique. Les conclusions

du modèle de Drude, et en particulier la relation entre la conductivité et le temps de libre parcours moyen (1.3), sont néanmoins valides dans un régime de conduction dit classique. Le temps de libre parcours moyen doit alors être associé à une autre origine physique. À température ambiante, le temps de libre parcours moyen provient des interactions dissipatives entre les électrons et les modes de vibration du réseau (phonons). Cette contribution est gelée à très basse température, ce qui permet une augmentation du temps de libre parcours moyen. Celui-ci est alors limité par les inévitables imperfections du cristal : absence d'ion sur un site cristallin (lacune), ion interstitiel, ion substitué, etc. La diffusion élastique sur ces impuretés est ainsi responsable de l'apparition d'un temps de libre parcours moyen fini, dont la valeur augmente lorsque la concentration d'impuretés diminue. Dans des échantillons soigneusement préparés, il est ainsi possible à basse température d'atteindre des temps de libres parcours moyen $\tau_e \sim 10^{-8}$ s, conduisant à des libres parcours moyens centimétriques [6]. Il est en fait nécessaire pour comprendre la conductivité de se placer dans un cadre quantique. L'électron est alors décrit par une onde qui peut être délocalisée sur l'ensemble du cristal parfaitement périodique (ondes de Bloch), mais qui diffuse sur les impuretés du matériau qui forment un milieu désordonné.

1.1.2 Modèle de transport quantique

Afin d'introduire le transport d'une onde de matière quantique dans un milieu désordonné, nous considérons de façon très générale une propagation de particules dont nous négligeons les interactions dans l'espace libre (absence de réseau), en présence d'un potentiel désordonné $V(\boldsymbol{r})$. Le hamiltonien du système, $\hat{H}$, est ainsi la somme du hamiltonien libre $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m$ et du potentiel désordonné $V(\hat{\boldsymbol{r}})$. Ce problème permet par exemple de traiter le cas d'atomes ultrafroids soumis à un potentiel lumineux désordonné, dans un régime où les interactions entres ces atomes sont négligeables (voir section 1.3.2). Il s'applique également aux électrons dans un métal à basse température en présence d'impuretés, en modélisant les ondes de Bloch par des ondes planes. En particulier, l'expression du hamiltonien libre $\hat{H}_0 = \hat{p}^2/2m$ peut être utilisée à basse énergie en remplaçant la masse m par une masse effective m^* qui tient compte de la présence du réseau. Une renormalisation de cette masse effective permet éventuellement d'inclure dans une première approche les interactions entre électrons, qui sont alors considérés comme des particules indépendantes (théorie des liquides de Fermi [7]).

Particule libre

La fonction d'onde $|\psi\rangle$ de la particule libre (i.e. en l'absence de désordre) est solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t |\psi\rangle = \hat{H}_0 |\psi\rangle \tag{1.6}$$

et évolue donc sous la forme $|\psi(t)\rangle = \hat{U}_0(t)|\psi(0)\rangle$, où l'on a défini l'opérateur d'évolution $\hat{U}_0(t) = \mathrm{e}^{-i\hat{H}_0 t/\hbar}$. La dynamique du système, ici contenue dans l'opérateur d'évolution libre $\hat{U}_0(t)$, est également entièrement incluse dans la fonction de Green libre retardée, proportionnelle à la transformée de Fourier temporelle [1] à la fréquence $E/2\pi\hbar$ de l'opérateur d'évolution [2],

$$G_0^R(E) = \frac{1}{i\hbar}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\, \hat{U}_0(t)\Theta(t)\,\mathrm{e}^{iEt/\hbar} = \frac{1}{E - \hat{H}_0 + i0^+}. \tag{1.7}$$

1. On définit dans ce manuscrit la transformée de Fourier temporelle par $\hat{f}(\omega) = \int \mathrm{d}t\, f(t)\,\mathrm{e}^{i\omega t}$.
2. La notation Θ désigne la fonction de Heaviside.

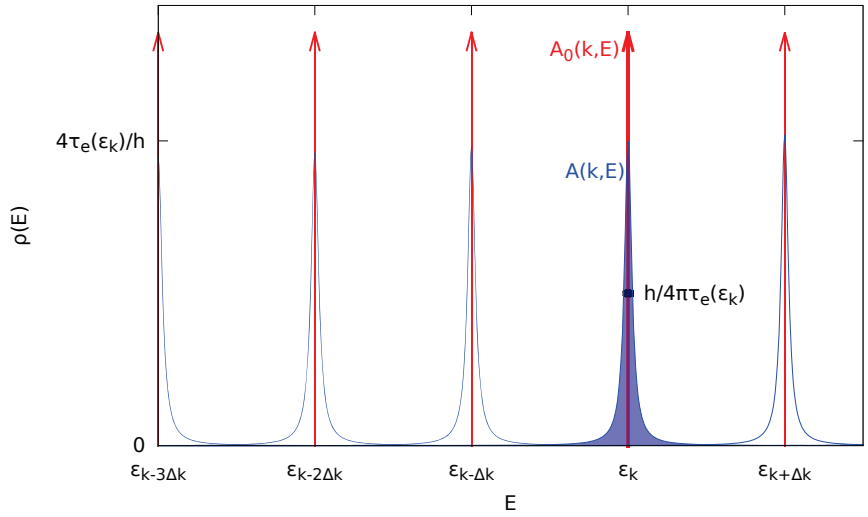


Fig 1.2 – Densité d'états pour une particule libre (rouge), correspondant à des pics de Dirac aux énergies des ondes planes états propres du système. Densité d'états en présence de désordre (bleu), conduisant à un élargissement des pics correspondant aux ondes planes. Afin de pouvoir représenter un ensemble discret d'états propres, nous considérons un système unidimensionnel de taille finie L, de sorte que Δk est fini, égal à $2\pi/L$.

Dans la base propre des ondes planes de vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$, cette fonction de Green fait apparaître des pôles aux énergies propres du système $\epsilon_{\boldsymbol{k}} = \hbar^2\boldsymbol{k}^2/2m$,

$$G_0^R(E) = \int \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{(2\pi)^d} \frac{|\boldsymbol{k}\rangle\langle\boldsymbol{k}|}{E - \epsilon_{\boldsymbol{k}} + i0^+}, \tag{1.8}$$

où d désigne la dimension du système. La partie imaginaire de la fonction de Green permet de définir la fonction spectrale $A_0(\boldsymbol{k}, E)$ par [3]

$$\langle\boldsymbol{k}|\frac{\mathrm{Im}\, G_0^R(E)}{-\pi}|\boldsymbol{k}'\rangle = (2\pi)^d\delta(\boldsymbol{k} - \boldsymbol{k}')A_0(\boldsymbol{k}, E), \tag{1.9}$$

de sorte que la densité d'états par unité de volume est donnée par

$$\rho_0(E) = \int \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{(2\pi)^d} A_0(\boldsymbol{k}, E). \tag{1.10}$$

Ici, la fonction spectrale $A_0(\boldsymbol{k}, E)$ en fonction de l'énergie E est un pic de Dirac à l'énergie de l'onde plane $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$. On peut ainsi représenter la densité d'états par unité de volume comme un ensemble de pics de Dirac sur la figure 1.2 (en rouge).

Temps de libre parcours moyen τ_e

Nous considérons à présent l'effet du potentiel désordonné, dans un régime de faible désordre correspondant à la condition $k\ell_e \gg 1$, où k est la norme du vecteur d'onde associé au quasi-état propre considéré et où ℓ_e est le libre parcours moyen. La condition de désordre faible correspond ainsi à un libre parcours moyen grand devant la longueur d'onde des particules. De plus, nous supposons sans restriction que la valeur moyenne du potentiel désordonné est nulle (une moyenne non nulle pouvant être traitée à l'aide d'un simple décalage de l'énergie).

3. La notation Im désigne la partie imaginaire d'un nombre complexe.

Le hamiltonien du système, $\hat{H} = \hat{H}_0 + V(\hat{\boldsymbol{r}})$, conduit à une fonction de Green moyennée sur le désordre de la forme [4] [8]

$$\overline{G^R(E)} = \overline{\frac{1}{E - \hat{H} + i0^+}} = \int \frac{\mathrm{d}\boldsymbol{k}}{(2\pi)^d} \frac{|\boldsymbol{k}\rangle\langle\boldsymbol{k}|}{E - \epsilon_{\boldsymbol{k}} + \frac{i\hbar}{2\tau_e(E)}}. \tag{1.11}$$

En définissant, pour un système invariant par translation spatiale, une fonction spectrale $A(\boldsymbol{k}, E)$ de façon analogue au cas libre [Éq. (1.9) en remplaçant H_0 par H], on constate un élargissement du pic de la fonction spectrale autour de l'énergie $\epsilon_{\boldsymbol{k}}$ pour chaque onde plane de vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$. Plus précisément, la fonction spectrale prend la forme d'une lorentzienne de largeur $\hbar/2\tau_e$, comme représenté sur la figure 1.2. Cet élargissement des niveaux est associé à une durée de vie finie τ_e des ondes planes qui ne sont plus des états propres du système, mais s'atténuent sous l'action de l'opérateur d'évolution, $\hat{U}(t)\,|\boldsymbol{k}\rangle = \mathrm{e}^{-i\epsilon_{\boldsymbol{k}}t/\hbar}\,\mathrm{e}^{-t/2\tau_e(\epsilon_{\boldsymbol{k}})}\,|\boldsymbol{k}\rangle$. La probabilité $\mathcal{N}_{\boldsymbol{k}}(t) = \langle\boldsymbol{k}|\hat{U}^\dagger(t)\hat{U}(t)|\boldsymbol{k}\rangle$ que la particule soit restée dans l'état $|\boldsymbol{k}\rangle$ au bout d'un temps t décroît ainsi exponentiellement, $\partial_t\mathcal{N}_{\boldsymbol{k}} = -\mathcal{N}_{\boldsymbol{k}}/\tau_e$. Le temps τ_e s'identifie au temps de libre parcours moyen des électrons en présence d'impuretés, défini dans le cadre du modèle de Drude. Pour un désordre continu, on peut l'exprimer au premier ordre à partir de la densité d'états par unité de volume, $\rho(E)$, et de la transformée de Fourier [5] de la fonction de corrélation à deux points du potentiel désordonné $C_2(\boldsymbol{r}) = \overline{V(\boldsymbol{r}')V(\boldsymbol{r}'+\boldsymbol{r})}$, sous la forme [8]

$$\frac{1}{\tau_e} = \frac{2\pi}{\hbar}\rho(E)\tilde{C}_2(2k_E), \tag{1.12}$$

où $k_E = \sqrt{2mE}/\hbar$ est le vecteur d'onde associé à l'énergie E. On considère ici une diffusion isotrope, de sorte que $\tilde{C}_2(\boldsymbol{k})$ ne dépend que de la norme du vecteur d'onde $\boldsymbol{k}$. On remarque en particulier que le libre parcours moyen est inversement proportionnel à l'intensité du désordre, qui intervient via la fonction de corrélation à deux points du potentiel désordonné $\tilde{C}_2(2k_E)$. De plus, ce libre parcours moyen dépend de l'énergie de la particule, à travers la densité d'états et l'intensité du désordre ressenti.

Transport quantique

La plupart des quantités permettant de caractériser la propagation d'une onde quantique dans un milieu désordonné ne font pas intervenir la moyenne de la fonction de Green mais plutôt la moyenne du produit d'une fonction de Green retardée par une fonction de Green avancée G^A, définie comme le complexe conjugué de G^R. Ceci provient du fait que la fonction de Green G^R permet de traiter l'évolution de la fonction d'onde, alors que les quantités qui nous intéressent font plutôt intervenir le module carré de la fonction d'onde. Afin de traiter la propagation de la particule entre différentes positions $\boldsymbol{r}$ et $\boldsymbol{r}'$, il est nécessaire d'introduire les éléments de matrice des fonctions de Green retardée et avancée,

$$G^{R/A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'|E) = \langle\boldsymbol{r}|G^{R/A}(E)|\boldsymbol{r}'\rangle = \langle\boldsymbol{r}|\frac{1}{E - \hat{H} \pm i0^+}|\boldsymbol{r}'\rangle. \tag{1.13}$$

On peut alors construire différentes quantités à partir de ces dernières. Par exemple, la transformée de Fourier temporelle de la probabilité de diffusion d'une particule d'énergie E de la position $\boldsymbol{r}' = \boldsymbol{0}$ à la position $\boldsymbol{r}$ est proportionnelle à [6]

$$\hat{p}(\boldsymbol{r}, \omega|E) \propto \overline{G^A(\boldsymbol{0}, \boldsymbol{r}|E)G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{0}|E + \hbar\omega)} \tag{1.14}$$

4. La barre au-dessus du texte désigne la moyenne sur l'ensemble des réalisations du désordre.

5. La transformée de Fourier dans l'espace réel est définie dans ce manuscrit par $\tilde{f}(\boldsymbol{k}) = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}\, f(\boldsymbol{r})\,\mathrm{e}^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{r}}$.

6. Un tel état d'énergie et de position fixées n'existe pas en mécanique quantique. On suppose ici, plus précisément, qu'il s'agit d'un paquet d'onde de largeur en énergie négligeable devant son énergie moyenne, et

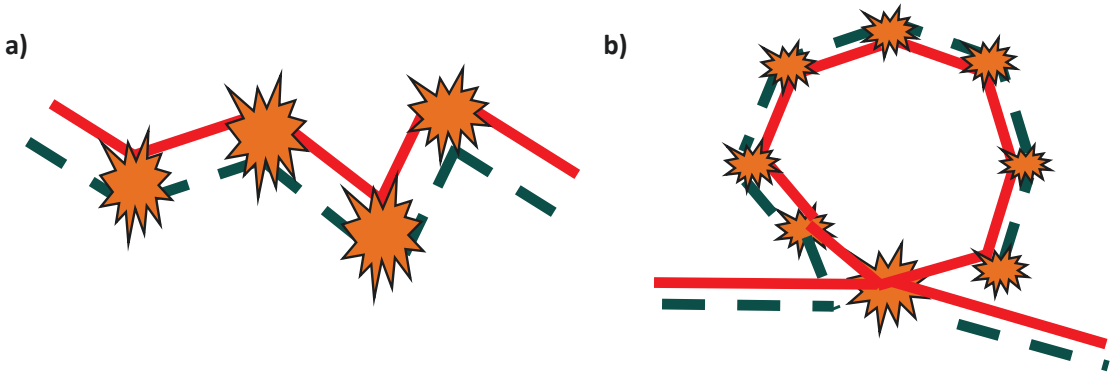


Fig 1.3 – Chemins de diffusion dans le milieu désordonné, représentés en traits plein et pointillé, qui diffusent élastiquement sur des impuretés symbolisées par des étoiles oranges. (a) Diffuson : les deux chemins diffusent sur des impuretés identiques dans le même ordre. (b) Cooperon : croisement des deux chemins de diffusion, qui forment une boucle parcourue en sens opposé pour chacun des chemins.

[voir Chap. 2, en particulier Éq. (2.13)]. On remarque que la dynamique temporelle se manifeste à travers un décalage de l'énergie à laquelle les deux fonctions de Green sont évaluées. De même, la conductivité à basse température dans un régime de réponse linéaire à un champ électrique de fréquence ω dirigé suivant l'axe x est proportionnelle au produit des dérivées spatiales des fonctions de Green [7] [voir Éq. (7.198) de la Réf [8]]

$$\sigma(\omega) \propto \int \mathrm{d}\boldsymbol{r} \int \mathrm{d}\boldsymbol{r}' \ \mathrm{Re}\, \overline{\partial_x G^A(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}|E_F) \partial_{x'} G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}'|E_F + \hbar\omega)}, \tag{1.15}$$

où E_F désigne l'énergie de Fermi des fermions considérés. On retrouve ainsi un produit de fonctions de Green avancée et retardée. Les dérivées spatiales proviennent du fait que la conductivité fait intervenir un corrélateur de courants de particules.

Mentionnons enfin que dans un régime stationnaire l'expression de la conductance d'un fil de longueur L est proportionnelle au coefficient de transmission $\overline{T}$ à travers ce fil (voir Éq. (3.112) et (4.56)),

$$G \propto \overline{T} \propto \overline{G^A(0, L|E_F) G^R(L, 0|E_F)}. \tag{1.16}$$

Les fonctions de Green en présence du potentiel désordonné V vérifient le développement

$$G^{R/A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') = G_0^{R/A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') + \int \mathrm{d}\boldsymbol{r_1} G_0^{R/A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r_1}) V(\boldsymbol{r_1}) G^{R/A}(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r}') \tag{1.17}$$

$$= G_0^{R/A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}') + \int \mathrm{d}\boldsymbol{r_1}\, G_0^{R/A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r_1}) V(\boldsymbol{r_1}) G_0^{R/A}(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r}') + \iint \mathrm{d}\boldsymbol{r_1}\, \mathrm{d}\boldsymbol{r_2}\, G_0^{R/A}(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r_2}) V(\boldsymbol{r_2}) G_0^{R/A}(\boldsymbol{r_2}, \boldsymbol{r_1}) V(\boldsymbol{r_1}) G_0^{R/A}(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r}') + \ldots \tag{1.18}$$

On voit ainsi que le terme $G^R(\boldsymbol{r}, \boldsymbol{r}')$, qui caractérise l'évolution entre deux points, peut se décomposer comme une somme de chemins constitués d'évolutions libres déterminées par $G_0^R(\boldsymbol{r_1}, \boldsymbol{r_2})$ entre différents points $\boldsymbol{r_1}$ et $\boldsymbol{r_2}$ où la particule interagit avec le désordre.

d'extension spatiale petite devant les longueurs qui nous intéressent [8]. De plus, cette probabilité de diffusion permet de décrire par une approche semi-classique la dynamique d'un paquet d'onde de largeurs en énergie et en position initiales non négligeables, en lui associant une distribution de probabilité initiale en position et énergie, voir section 5.2.1, Éq. (5.31).

7. La notation Re désigne la partie réelle d'un nombre complexe.

Cette considération nous permet de donner une image simple des phénomènes physiques qui se manifestent lors du transport quantique. Dans une approche élémentaire, nous considérons un désordre constitué d'impuretés ponctuelles, et nous nous plaçons en régime stationnaire. Nous assimilons alors la fonction de Green $G^R(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ à une somme sur tous les chemins possibles $\{i\}$ menant de $\boldsymbol{r}'$ à $\boldsymbol{r}$, d'amplitude $A_i(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$, de sorte que $G^R(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \sim A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \sum_i A_i(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$. Les quantités qui nous intéressent faisant intervenir le produit de deux fonctions de Green avancée et retardée complexes conjuguées l'une de l'autre, nous les modélisons par une intensité $I(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = |A(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')|^2$. Les raisonnements que nous effectuerons sur l'expression de cette intensité peuvent ainsi être reproduits lors de calculs rigoureux de la probabilité de diffusion, la conductivité, ou la conductance. L'intensité $I(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')$ s'écrit alors

$$I(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') = \left| \sum_{chemins\ i} A_i(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') \right|^2 \tag{1.19}$$

$$= \sum_i |A_i(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}')|^2 + \sum_{i\neq j} A_i(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}') A_j^*(\boldsymbol{r},\boldsymbol{r}'). \tag{1.20}$$

Le premier terme de cette somme correspond au terme classique qui consiste à sommer les intensités des différents chemins. L'amplitude du chemin A_i est ainsi multipliée par l'amplitude du chemin complexe conjugué A_i^*, et, ces deux chemins étant identiques, ils interagissent par l'intermédiaire du désordre au niveau des mêmes impuretés. Une contribution de ce type, appelée diffuson, est représentée sur la figure 1.3 (a). La prise en compte uniquement du terme classique conduit par exemple dans le calcul de la conductivité en régime continu ($\omega = 0$) à retrouver le résultat du modèle de Drude [voir Éq. (7.16) de la Réf. [8]], $\sigma(0) = n_e q_e^2 \tau_e/m$. On retrouve de même un résultat classique dans le calcul de la probabilité de diffusion en utilisant uniquement le terme classique de la somme, et en se plaçant dans l'approximation de diffusion correspondant à $t \gg \tau_e$, $|\boldsymbol{r}| \gg \ell_e$ (i.e. après un grand nombre de collisions). On obtient en effet que la probabilité de diffusion est solution de l'équation de diffusion [voir Éq. (4.38) de la Réf. [8]]

$$\left(\frac{\partial}{\partial t} - D_B \Delta\right) p(\boldsymbol{r},t) = \delta(t)\delta(\boldsymbol{r}), \tag{1.21}$$

où la constante de diffusion D_B est reliée au libre parcours moyen ℓ_e via la vitesse v de la particule et la dimension d du système par

$$D_B = \frac{v\ell_e}{d}. \tag{1.22}$$

Il est intéressant de noter que, dans ce régime classique, conductivité et coefficient de diffusion sont ainsi directement reliés par la relation d'Einstein

$$\sigma(0) = 2_s q_e^2 \rho(E_F) D_B, \tag{1.23}$$

où la notation 2_s désigne le facteur 2 dû au spin électronique. Celui-ci peut se généraliser à $2S+1$ pour des fermions de spin S quelconque. Pour obtenir la relation d'Einstein, on a utilisé le lien entre la densité électronique et la densité d'états à l'énergie de Fermi [8],

$$n_e = 2_s \frac{2E_F \rho(E_F)}{d}. \tag{1.24}$$

8. La relation (1.24) s'obtient à partir de $n_e = 2_s \int_0^{E_F} \rho(E)\,\mathrm{d}E$ valable à température nulle.

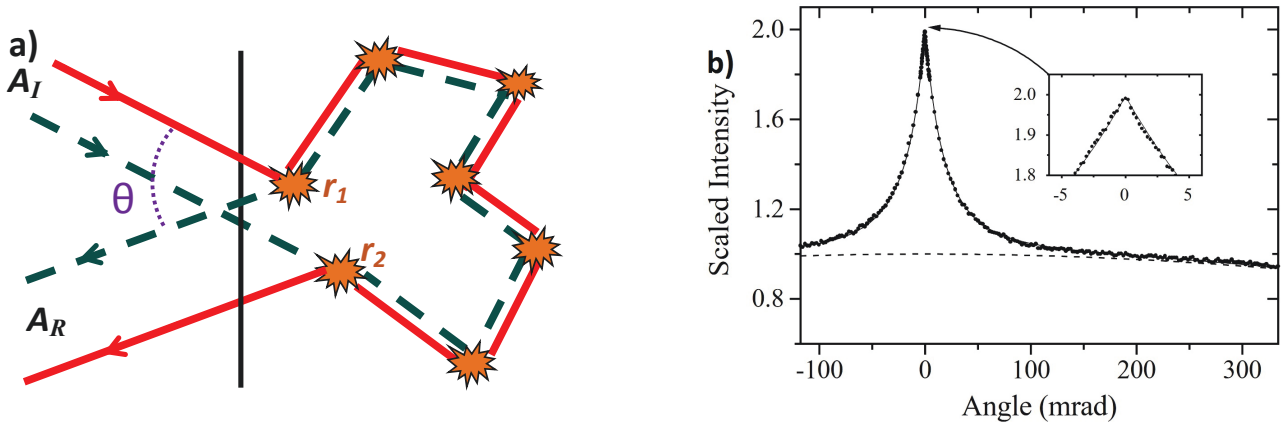


Fig 1.4 – Rétrodiffusion cohérente. (a) Schéma d'un chemin de diffusion dans le milieu désordonné formant une boucle (cooperon), et conduisant au pic de rétrodiffusion cohérente lorsque l'angle θ entre les faisceaux incident et réfléchi est au voisinage de 0. (b) Intensité réfléchie en fonction de l'angle θ. Le milieu diffusant est constitué d'une poudre de ZnO et est éclairé par un faisceau laser. Extrait de la référence [9].

Localisation faible et rétrodiffusion cohérente

Le second terme de l'équation (1.20) est en revanche un terme d'interférences entre différents chemins. On pourrait naïvement s'attendre à ce que le désordre tue ce type d'interférences s'il est suffisamment important. En effet, le déphasage subi par l'onde sur un chemin i est a priori indépendant de celui subi par l'onde sur un chemin j différent, ce qui conduit en sommant sur toutes les paires de chemins $\{i \neq j\}$ à une contribution totale nulle. Cependant, en considérant de façon plus approfondie les chemins possibles, on constate qu'il existe certains types de chemins différents qui n'ont pas un déphasage arbitraire. Ce cas apparaît par exemple lorsque les deux chemins se croisent et forme une boucle qu'ils parcourent en interagissant sur les mêmes impuretés qu'ils rencontrent dans un ordre opposé, voir figure 1.3 (b). Ce type de chemins est appelé cooperon. Sous réserve que le système soit invariant par renversement du temps, les phases des deux chemins parcourus en sens opposés sont alors identiques. Une conséquence immédiate est que l'intensité de retour au point initial $I(\boldsymbol{r}', \boldsymbol{r}')$ bénéficie ainsi de termes d'interférences constructives (déphasage nul) correspondant au cas des boucles parcourues en sens opposés. La probabilité de retour au point initial est ainsi augmentée, ce qui se produit nécessairement au détriment de la probabilité de s'en éloigner. De façon plus générale, la prise en compte de ce type de chemins conduit à une diminution de la probabilité de transfert entre deux points éloignés. On désigne cet effet sous le nom de localisation faible. La localisation faible conduit notamment à une diminution de la conductivité d'un matériau, ou encore à une diminution du coefficient de diffusion (cf. section 1.2.3).

Afin d'illustrer de façon plus concrète le phénomène de localisation faible, nous détaillons ci-dessous un exemple d'application appelé rétrodiffusion cohérente. Ce phénomène apparaît par exemple lorsqu'un milieu diffusant est éclairé par une source de lumière cohérente, et se manifeste par un pic de l'intensité diffusée par le milieu dans la direction opposée à sa direction d'éclairage. Ce phénomène a été fortement étudié dès les années 1980, à la fois d'un point de vue expérimental [10–12], et théorique [13–15]. Plus récemment, il a été suggéré que l'observation astrophysique d'une augmentation de l'intensité réfléchie par un objet tel que les anneaux de Saturne par exemple (cf. Fig. 1.1), lorsque l'observateur est situé entre le soleil et cet objet, pouvait être une manifestation du phénomène de rétrodiffusion cohérente [16]. Par la suite, la rétrodiffusion cohérente a été observée dans d'autres types de système : rétrodiffusion cohérente

de la lumière par un gaz d'atomes ultrafroids [17], rétrodiffusion cohérente d'une onde ultrasonore par des cylindres d'acier [18], rétrodiffusion cohérente d'une onde de matière quantique d'atomes ultrafroids par un potentiel désordonné d'origine lumineuse [19]. Nous présentons ci-dessous une interprétation du pic de rétrodiffusion à partir du phénomène de localisation faible.

La situation qui nous intéresse est celle d'un milieu semi-infini contenant des diffuseurs, éclairé par un faisceau laser que nous modélisons par une onde plane scalaire de vecteur d'onde $\boldsymbol{k_i}$, d'amplitude $A_I(\boldsymbol{r}) = A_I\, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k_i}\cdot\boldsymbol{r}}$, et d'intensité $I_I = |A_I|^2$, voir Fig. 1.4 (a). On s'intéresse à l'intensité I_R de l'onde diffusée par le milieu semi-infini dans une direction donnée par un vecteur d'onde $\boldsymbol{k_r}$, d'angle θ par rapport à la direction de l'onde incidente. Cette onde diffusée est ainsi modélisée par une onde plane d'amplitude $A_R(\boldsymbol{r}) = A_R\, \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k_r}\cdot\boldsymbol{r}}$. Notons $\boldsymbol{r_1}$ la position du premier diffuseur rencontré par l'onde dans le milieu désordonné, et $\boldsymbol{r_2}$ celle du dernier. L'amplitude de l'onde au point $\boldsymbol{r_2}$ est alors égale à celle de l'onde au point $\boldsymbol{r_1}$, multipliée par une amplitude de propagation entre les deux diffuseurs, égale à la somme sur tous les chemins $\{i\}$ menant de $\boldsymbol{r_1}$ à $\boldsymbol{r_2}$ des amplitudes de propagation $A_i(\boldsymbol{r_2}, \boldsymbol{r_1})$. On obtient ainsi

$$A_R = A_I \sum_{\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2}} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k_i}\cdot\boldsymbol{r_1} - i\boldsymbol{k_r}\cdot\boldsymbol{r_2}} \sum_{chemins\ i} A_i(\boldsymbol{r_2}, \boldsymbol{r_1}). \tag{1.25}$$

L'intensité de l'onde diffusée dans la direction du vecteur d'onde $\boldsymbol{k_r}$ est alors donnée par

$$\begin{aligned} I_R &= |A_R|^2 && (1.26)\\ &= I_I \sum_{\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2},\boldsymbol{r_1'},\boldsymbol{r_2'}} \mathrm{e}^{i\boldsymbol{k_i}\cdot(\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_1'}) - i\boldsymbol{k_r}\cdot(\boldsymbol{r_2}-\boldsymbol{r_2'})} \sum_{chemins\ i} A_i(\boldsymbol{r_2}, \boldsymbol{r_1}) \sum_{chemins\ i'} A^*_{i'}(\boldsymbol{r_2'}, \boldsymbol{r_1'}). && (1.27) \end{aligned}$$

Le terme classique, correspondant aux chemins identiques $i = i'$ (pour lesquels on a en particulier $r_1' = r_1$ et $r_2' = r_2$), est un terme de type diffuson entre $\boldsymbol{r_1}$ et $\boldsymbol{r_2}$, comme celui représenté sur la figure 1.3 (a). Il donne la contribution

$$I_R^{\mathrm{diff}} = I_I \sum_{\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2}} \sum_{chemins\ i} |A_i(\boldsymbol{r_2}, \boldsymbol{r_1})|^2. \tag{1.28}$$

Le terme de localisation faible, qui provient du choix de deux chemins parcourant une boucle en sens opposés, voir Fig. 1.3 (b), correspond à deux chemins i et i' dont l'un se déduit de l'autre par symétrie de renversement temporel. En particulier, on a $r_1' = r_2$ et $r_2' = r_1$. Cette situation est représentée sur la figure 1.4 (a). Les deux amplitudes de propagation $A_{i'}(\boldsymbol{r_2'}, \boldsymbol{r_1'})$ et $A_i(\boldsymbol{r_2}, \boldsymbol{r_1})$ étant égales (car les deux chemins sont identiques, à l'exception de leur sens de parcours), on obtient la contribution supplémentaire

$$I_R^{\mathrm{coop}} = I_I \sum_{\boldsymbol{r_1},\boldsymbol{r_2}} \mathrm{e}^{i(\boldsymbol{k_i}+\boldsymbol{k_r})\cdot(\boldsymbol{r_1}-\boldsymbol{r_2})} \sum_{chemins\ i} |A_i(\boldsymbol{r_2}, \boldsymbol{r_1})|^2. \tag{1.29}$$

Lorsque l'angle θ entre $-\boldsymbol{k_i}$ et $\boldsymbol{k_r}$ est grand, la phase $(\boldsymbol{k_i} + \boldsymbol{k_r}) \cdot (\boldsymbol{r_1} - \boldsymbol{r_2})$ est élevée et conduit en sommant sur l'ensemble des positions $\boldsymbol{r_1}$ et $\boldsymbol{r_2}$ des premier et dernier diffuseurs à une contribution nulle du terme I_R^{coop}, d'où une intensité diffusée égale à I_R^{diff}. En revanche, lorsque $\theta = 0$, ce qui correspond à $\boldsymbol{k_r} = -\boldsymbol{k_i}$, on a $I_R^{\mathrm{coop}} = I_R^{\mathrm{diff}}$, et l'intensité réfléchie est donc deux fois plus grande que le terme classique. Ces considérations théoriques ont été vérifiées expérimentalement, par exemple en étudiant l'intensité diffusée lorsqu'une poudre de ZnO est éclairée par un faisceau laser. Sur la Fig. 1.4 (b), le résultat expérimental présente ainsi un pic de rétrodiffusion correspondant à un doublement de l'intensité diffusée à l'angle $\theta = 0$, en accord avec la théorie. Par ailleurs, la largeur du pic est donnée par la condition

$(\boldsymbol{k_i} + \boldsymbol{k_r}) \cdot (\boldsymbol{r_1} - \boldsymbol{r_2}) \lesssim 1$. La distance minimale $|\boldsymbol{r_1} - \boldsymbol{r_2}|$ typique correspond au libre parcours moyen ℓ_e, et conduit pour un pic de largeur $\Delta\theta \ll 1$ à $\Delta\theta \sim k\ell_e$.

Localisation d'Anderson : premier aperçu

La prise en compte du terme d'interférences a ainsi permis de mettre en évidence un premier phénomène de localisation faible, provenant de chemins de diffusion formant des boucles parcourues en sens opposés. On peut cependant envisager des chemins plus complexes, constitués par exemple d'empilements de boucles. La prise en compte de l'ensemble des chemins possibles peut alors mener à une annulation de la conductivité ou du coefficient de diffusion d'ondes dans un milieu désordonné. On parle alors de localisation forte ou localisation d'Anderson. Ce phénomène a été découvert par P. W. Anderson en 1958 [20], alors qu'il s'intéressait à la propagation d'électrons dans un réseau en présence d'impuretés. Les phénomènes d'interférences et de localisation associés étaient alors inconnus, et Anderson s'est posé la question de savoir si un désordre suffisamment fort pouvait mener à une disparition du transport des électrons. Pour cela, il utilise une approche de type liaison forte, selon laquelle la fonction d'onde de l'électron est localisée sur un site donné du réseau périodique constituant le cristal. L'électron peut alors sauter d'un site à son voisin, avec une énergie de couplage qu'Anderson suppose constante. Sur chaque site en revanche, il considère que l'énergie de l'électron est une quantité aléatoire (statique dans le temps) de distribution de probabilité uniforme sur un intervalle de largeur W. À partir d'un électron initialement positionné sur un site, Anderson calcule l'amplitude de la fonction d'onde en fonction de la distance au point d'origine. Il prédit alors une disparition du transport lorsque l'amplitude du désordre devient suffisamment forte comparée à l'énergie de couplage entre sites. La fonction d'onde reste en effet localisée autour du point initial, avec une amplitude finie sur ce point et une décroissance exponentielle avec la distance. Le phénomène de localisation d'Anderson a par la suite été très étudié, à la fois théoriquement (cf. section 1.2) et expérimentalement (cf. section 1.3). Il continue de faire l'objet de nombreuses études (cf. section 1.4).

1.2 Quelques approches théoriques de la localisation d'Anderson

Suite à la prédiction théorique d'Anderson, de nombreuses approches analytiques ont été développées pour étudier plus précisément la localisation forte. Nous présentons dans cette partie quelques-unes de ces méthodes, dont plusieurs nous serons utiles par la suite.

1.2.1 Théorie d'échelle

La théorie d'échelle, développée en 1979 par E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello et T. V. Ramakrishnan, décrit la localisation d'Anderson par une approche macroscopique [21]. Il s'agit d'une théorie universelle qui permet de comprendre le comportement général en fonction de la dimension d. Elle repose sur l'étude de l'évolution d'une grandeur caractéristique du système en fonction de sa taille, en s'inspirant des techniques de renormalisation. La grandeur pertinente que l'on considère dans cette théorie est la conductance adimensionnée,

$$g(L) = G(L) \times \frac{2\pi\hbar}{q_e^2}, \tag{1.30}$$

où L désigne la taille du système, un hypercube de volume L^d, et G sa conductance. La conductance G est ici divisée par deux fois le quantum de conductance $q_e^2/\pi\hbar$ (qui quantifie par exemple la conductance d'un point quantique à très basse température [22]) pour former une quantité sans dimension. Dans cette section, la particule quantique qui nous intéresse est un électron de charge q_e et de spin 2, que nous notons 2_s, mais les mêmes raisonnements peuvent être appliqués à n'importe quelle particule quantique, par exemple à un atome neutre de spin S, en remplaçant la conductance électrique G par une conductance atomique $G_{at} = G(2S+1)/2_s q_e^2$. La conductance est un paramètre pertinent pour distinguer un régime diffusif, où la conductance est finie, d'un régime localisé, où elle décroît exponentiellement avec la longueur du système (cf. en 1D le formalisme de phase, section 1.2.2).

Le paramètre g peut se ré-exprimer sous la forme du rapport de deux temps caractéristiques. Le premier, appelé temps de Thouless, correspond au temps typique pour qu'une particule atteigne les bords du système par diffusion :

$$\tau_{\mathrm{Th}} = \frac{L^2}{D_B}, \tag{1.31}$$

où D_B désigne la constante de diffusion définie dans l'équation (1.21). Le second, appelé temps de Heisenberg, est la durée typique nécessaire pour que la résolution en énergie du système soit suffisamment grande pour permettre de distinguer les différents niveaux d'énergie du système. Le temps de Heisenberg s'exprime ainsi comme le rapport de la constante de Planck sur l'espacement entre niveaux d'énergie, ce qui conduit à

$$\tau_{\mathrm{H}} = 2\pi\hbar 2_s \rho(E) L^d. \tag{1.32}$$

À partir de la relation d'Einstein (1.23) reliant la conductivité σ et la constante de diffusion D_B, pour $E = E_F$, et du lien entre conductance et conductivité $G = \sigma L^{d-2}$ [cf. Éq. (1.4)], la conductance adimensionnée se réécrit sous la forme

$$g = \frac{\sigma L^{d-2}}{q_e^2/2\pi\hbar} = \frac{\tau_{\mathrm{H}}}{\tau_{\mathrm{Th}}}. \tag{1.33}$$

Si le temps d'Heisenberg est grand devant le temps de Thouless, $\tau_{\mathrm{H}} \gg \tau_{\mathrm{Th}}$, l'onde atteint les bords du système sans avoir eu le temps de ressentir le caractère discret des niveaux d'énergie, ce qui conduit à un régime diffusif classique. En revanche, si le temps d'Heisenberg devient plus court que le temps de Thouless, les états de niveaux d'énergie discrets sont déconnectés entre deux systèmes de taille L, ce qui conduit à l'apparition de phénomènes de localisation. La valeur du paramètre g permet ainsi de distinguer un régime classique pour $g \gg 1$ d'un régime localisé.

La théorie d'échelle appliquée à la localisation d'Anderson repose sur l'hypothèse que toute la physique du système se réduit au seul paramètre g. On suppose par exemple que la fonction d'échelle

$$\beta = \frac{\mathrm{d}\ln g}{\mathrm{d}\ln L}, \tag{1.34}$$

qui donne l'évolution de la conductance en fonction de la taille du système, est une fonction $\beta(g)$ dépendant uniquement du paramètre g lui-même. L'état localisé ou diffusif du système peut être étudié à partir de cette fonction d'échelle.

Dans un régime diffusif classique, qui apparaît pour $g \gg 1$, la conductance adimensionnée est égale à (cf. Éq. (1.33)) $g = g_0 (L/\ell_e)^{d-2}$, où $g_0 = 2\pi\hbar\sigma\ell_e^{d-2}/q_e^2$ est une constante (σ correspond alors à la conductivité classique (1.3)). On en déduit immédiatement la valeur de la fonction d'échelle dans ce régime, $\beta = d-2$. En dimension trois, $\beta > 0$, donc la conductance g augmente

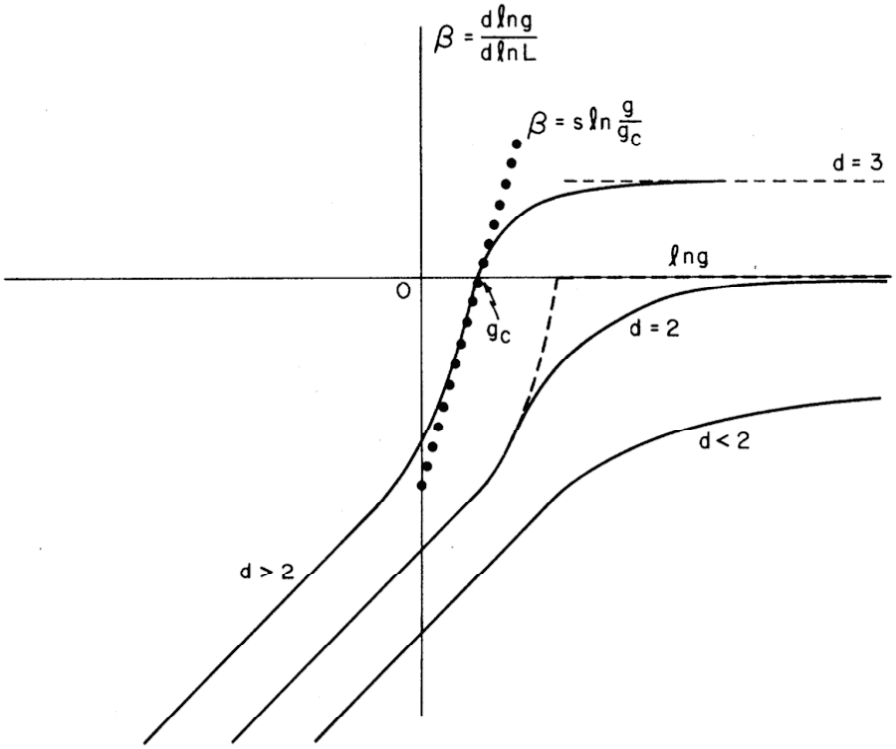


Fig 1.5 – Flot de renormalisation de la conductance adimensionnée. Fonction d'échelle β (dérivée logarithmique de la conductance adimensionnée par le logarithme de la taille du système) en fonction du logarithme de la conductance adimensionnée, pour différentes dimensions. Extrait de l'article original [21].

avec la taille du système, tandis qu'en dimension un on a $\beta < 0$ et la conductance diminue lorsque la taille du système augmente. Le cas de la dimension deux, pour lequel $\beta = 0$, nécessite de prendre en compte la correction de localisation faible pour déterminer β plus précisément et connaître son signe. La localisation faible diminue la conductivité de la façon suivante en dimension deux (cf. Éq. (7.56) de la Réf. [8])

$$g = g_0 - \frac{2_s}{\pi} \ln\left(\frac{L}{\ell_e}\right), \tag{1.35}$$

d'où l'on déduit $\beta = -2_s/\pi g < 0$ et donc que la conductance diminue lorsque la taille du système augmente.

Dans un régime localisé, correspondant à une conductance $g \ll 1$, la conductance décroît exponentiellement avec la taille du système (cf. le résultat en 1D section 1.2.2) sur une longueur de localisation ℓ_{loc}, $g = g_a \exp(-L/\ell_{loc})$, où g_a est une constante de l'ordre de l'unité. On en déduit $\beta = \ln(g/g_a) < 0$. Cela traduit le fait que quelle que soit la dimension du système, la conductance diminue lorsque la taille du système augmente dans un régime localisé.

Entre ses deux régimes extrêmes diffusif ($g \gg 1$) et localisé exponentiellement ($g \ll 1$), le comportement de β en fonction de $\ln(g)$ est extrapolé par continuité par Abrahams *et al.*, comme représenté sur la figure 1.5. Sur ce graphe, le régime localisé apparaît à gauche, et le régime diffusif à droite. On a alors accès par ces courbes au flot de renormalisation de la conductance avec la longueur. En effet, partant d'une valeur initiale de conductance (correspondant à fixer $\ln g$) pour un système de taille fixée L, on peut lire sur le graphe si la conductance croît ou décroît lorsque la taille du système L augmente, suivant le signe de β.

En dimension un, on constate sur le graphe 1.5 que pour toute valeur initiale de la conductance, β est négatif. On en déduit donc que la conductance diminue lorsque L augmente. Le flot

de renormalisation correspond alors à parcourir la courbe représentant β en fonction de $\ln g$ vers les valeurs décroissantes de $\ln g$ (vers la gauche) lorsque L augmente. Pour $L \to \infty$, on atteint donc toujours, en dimension un, un régime localisé. Cela signifie que les particules libres mises en présence d'un potentiel désordonné sont toujours localisées dans un milieu unidimensionnel.

En dimension deux, on a de même une valeur négative de β pour toute valeur initiale de la conductance, et le même raisonnement qu'en dimension un s'applique. On remarque cependant que la très faible valeur absolue de β pour une conductance initiale grande signifie que la conductance évolue lentement avec la taille du système. On en déduit que la localisation peut être très lente à apparaître en dimension deux (cela nécessite par exemple un système très grand pour qu'elle soit visible).

En dimension trois, le graphe de β croise la ligne $\beta = 0$ pour une valeur critique de conductance $g = g_c$, et deux régimes sont donc possibles suivant la valeur initiale de g. Si la valeur initiale de la conductance est inférieure à g_c, le système évolue vers un régime localisé exponentiellement dans la limite $L \to \infty$. En revanche, si la conductance initiale est plus élevée que g_c, β est positif, et le flot de renormalisation est alors dirigé vers les valeurs croissantes de $\ln g$ (vers la droite). Par conséquent, un régime diffusif est atteint à la limite $L \to \infty$. Une transition entre un régime localisé et un régime diffusif existe donc en dimension trois.

1.2.2 Approches microscopiques exactes en 1D

L'étude de la localisation d'Anderson dans un système unidimensionnel est particulièrement intéressante, d'une part parce que c'est là où elle est la plus forte (voir section précédente), et d'autre part parce qu'on peut, en dimension un, réaliser des calculs exacts de la localisation. Suivant le problème considéré, différentes approches sont possibles. Nous présentons ici trois méthodes analytiques qui seront développées dans la suite de ce manuscrit dans un cadre plus général (présence d'un biais). Nous donnons ici les résultats que l'on obtient traditionnellement (i.e. en l'absence de biais) avec ces méthodes, sans détailler les calculs qui permettent d'arriver à ces résultats. On trouvera ces calculs dans les chapitres suivants.

On s'intéresse à une particule quantique de masse m et d'énergie E se propageant dans un potentiel désordonné $V(x)$. Le hamiltonien du système est alors de la forme

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\partial_x^2 + V(x). \tag{1.36}$$

Nous imposons une valeur moyenne du potentiel désordonné nulle, $\overline{V(x)} = 0$. Le désordre est de plus supposé invariant par translation, i.e. ses propriétés statistiques sont identiques en tout point de l'espace. Il est ainsi caractérisé à l'ordre le plus bas par sa fonction de corrélation à deux points $C_2(x) = \overline{V(x')V(x'+x)}$ indépendante de x'.

Méthode diagrammatique

Une première approche pour étudier la localisation consiste à s'intéresser à l'étalement d'un paquet d'onde dans le milieu désordonné. Nous verrons dans la section 1.3.2 que cette approche a été utilisée expérimentalement pour étudier la localisation d'Anderson d'atomes ultrafroids par exemple. La description théorique de l'étalement nécessite de connaître la probabilité de diffusion d'une particule idéale d'énergie E d'une position initiale $x' = 0$ à la position x après un temps t. Comme nous l'avons mentionné précédemment, cette probabilité de diffusion est proportionnelle à la moyenne du produit de deux fonctions de Green [voir Éq. (1.14)]. Le développement possible des fonctions de Green en une somme de « chemins » rend possible une approche diagrammatique pour effectuer des calculs. Les termes de diffuson et de cooperon sont

des exemples célèbres de représentations diagrammatiques de chemins qui sont utilisées dans des calculs perturbatifs à faible désordre ($\ell_e \gg \lambda$), en dimension quelconque.

En dimension un, une approche diagrammatique originale, non perturbative, introduite par V. L. Berezinskii en 1973 [23], permet de calculer de manière exacte la probabilité de diffusion à temps infini, pour un désordre blanc. Elle a ensuite été étendue au cas d'un désordre corrélé par A. A. Gogolin *et al.* en 1976 [24, 25]. C'est à cette méthode exacte, spécifique à la dimension un, que nous nous référerons par la suite dans ce manuscrit lorsque nous parlerons de méthode diagrammatique. Nous la présenterons dans un contexte plus général, à savoir en présence d'une force constante, dans la Sec. 2.1 du Chap. 2. La probabilité de diffusion à temps infini de la particule obtenue par cette approche en l'absence de force vaut [25]

$$p_\infty(x|E) = \frac{\pi^2}{16\ell_-}\exp\left(-\frac{|x|}{4\ell_-}\right) \times \int_0^\infty \lambda\,\mathrm{sh}(\pi\lambda)\frac{(1+\lambda^2)^2}{[\mathrm{ch}(\pi\lambda)+1]^2}\exp\left(-\frac{|x|\lambda^2}{4\ell_-}\right)\mathrm{d}\lambda, \tag{1.37}$$

où la longueur ℓ_- est reliée pour un désordre gaussien à l'intensité du désordre via la transformée de Fourier de la fonction de corrélation à deux points du potentiel désordonné :

$$\ell_- = \frac{2E\hbar^2}{m\tilde{C}_2(2k_E)}, \tag{1.38}$$

où $k_E = \sqrt{2mE}/\hbar$ est le vecteur d'onde associé à l'énergie E. Sachant qu'à 1D, la densité d'états par unité de volume vaut

$$\rho_{1D}(E) = \frac{1}{\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}}, \tag{1.39}$$

et $\ell_e = v\tau_e = \sqrt{2E/m}\tau_e$, on peut montrer à partir de (1.12) que la longueur ℓ_- est égale à un facteur deux près au libre parcours moyen de la particule défini précédemment, $\ell_- = 2\ell_e$. Sauf mention contraire, le libre parcours moyen désignera par convention la longueur ℓ_- dans la suite de ce manuscrit.

À grande distance, $|x| \gg \ell_-$, le résultat exact (1.37) permet de montrer que la décroissance de la probabilité de diffusion est essentiellement exponentielle,

$$p_\infty(x|E) \sim \exp\left(-\frac{|x|}{4\ell_-}\right), \tag{1.40}$$

sur une longueur typique donnée par le libre parcours moyen, proportionnelle à l'énergie de la particule et inversement proportionnelle à l'intensité du désordre. Cette décroissance exponentielle à grande distance de la probabilité de diffusion montre qu'à temps infini, la particule reste très fortement localisée (de façon exponentielle), sur une longueur de localisation de l'ordre du libre parcours moyen, autour de sa position initiale. Il s'agit là d'une signature de la localisation d'Anderson.

Les résultats expérimentaux obtenus avec des atomes ultrafroids n'ayant pas permis d'observer le profil du paquet d'onde à grande distance du fait de contraintes expérimentales sur la taille maximale du système, le résultat exact (1.37) est nécessaire pour comparer quantitativement la prédiction théorique aux données expérimentales (voir section 1.3.2). En particulier, le terme correctif que constitue l'intégrale présente dans l'équation (1.37) conduit à une décroissance exponentielle au voisinage du centre du paquet d'onde en $\exp(-|x|/\ell_-)$, plus rapide que la décroissance en $\exp(-|x|/4\ell_-)$ obtenue à grande distance. C'est cette décroissance plus rapide qui est observée dans les expériences [26].

Formalisme de phase

Une autre approche de la localisation d'Anderson consiste à étudier le comportement d'une fonction d'onde, état propre du système d'énergie donnée E. Pour cela, on peut utiliser une méthode analytique appelée formalisme de phase. Nous la détaillerons dans un contexte plus général dans la Sec. 4.2 du Chap. 4. Elle consiste à réécrire la fonction d'onde et sa dérivée à l'aide d'une amplitude $r(x)$ et d'une phase $\theta(x)$. En l'absence de désordre, l'amplitude est constante et la phase vaut $k_E x$, avec $k_E = \sqrt{2mE}/\hbar$ (voir chapitre 4, section 4.2). En présence du potentiel désordonné, on constate en injectant l'ansatz choisi pour la fonction d'onde dans l'équation de Schrödinger que l'on peut calculer la phase de manière perturbative. Ce développement perturbatif de la phase est cohérent avec l'apparition des quasi-ondes planes en présence de désordre (cf. Sec. 1.1.2) : ces quasi-ondes planes sont proches de l'onde plane, mais ont une phase qui fluctue par rapport à celle-ci. Une telle description est analogue aux trains d'onde de durée finie en optique.

On montre avec le formalisme de phase que le développement perturbatif de la phase permet ensuite le calcul de la valeur moyenne du logarithme de l'amplitude de la fonction d'onde. En ayant fixé une valeur initiale de la fonction d'onde et de sa dérivée au point d'abscisse $x = 0$, on obtient en $x > 0$ le résultat suivant :

$$\overline{\ln \frac{r(x)}{r(0)}} = \frac{x}{2\ell_-}. \tag{1.41}$$

On observe ainsi une augmentation linéaire du logarithme de l'amplitude de la fonction d'onde, qui indique une augmentation exponentielle de l'amplitude de la fonction d'onde à partir du point initial. Cette augmentation rapide de l'amplitude justifie que le développement perturbatif ne puisse pas être appliqué directement sur la fonction d'onde, mais nécessite d'être effectué sur la phase seule, qui est faiblement perturbée localement. Cela se répercute ensuite sur l'amplitude qui varie lentement à l'échelle des variations de la phase. De plus, il est particulièrement intéressant de calculer la valeur moyenne du logarithme de l'amplitude car cette quantité est auto-moyennante, c'est-à-dire que son incertitude relative (rapport de l'écart-type sur la valeur moyenne) diminue avec la longueur du système (voir les résultats sur le coefficient de transmission, qui a un comportement analogue à celui de l'amplitude, au chapitre 3, section 3.3.2).

On déduit du résultat (1.41) que les états propres sont localisés de manière exponentielle. En effet, le système étant invariant par symétrie de renversement de l'axe des abscisses, la solution que nous trouvons avec le formalisme de phase, qui correspond à une augmentation de la fonction d'onde à partir du point $x = 0$, ou la solution obtenue en renversant l'axe des abscisses, qui correspond à une décroissance de la fonction d'onde à partir du point initial, sont toutes les deux valides. En ayant fixé arbitrairement l'énergie ainsi que la valeur de la fonction d'onde et de sa dérivée en un point ($x = 0$), on observe la solution croissante qui domine la solution décroissante à grande distance. Si on considère à présent un état propre du système, pour que celui-ci soit normalisé, seule la solution d'une amplitude exponentiellement décroissante est acceptable en $x \to \infty$. Les états propres normalisés sont ainsi ceux qui pour une réalisation du désordre donnée ont la bonne valeur du rapport de la dérivée de la fonction d'onde sur la fonction d'onde en $x = 0$ pour permettre une décroissance exponentielle à grande distance ($x \to -\infty$ et $x \to \infty$).

Le calcul que l'on effectue avec le formalisme de phase permet également de déduire le comportement du logarithme du coefficient de transmission T d'un fil de longueur L. En effet, ce dernier évolue comme (cf. chapitre 4, section 4.2)

$$\overline{\ln T(L)} = -2\overline{\ln \frac{r(L)}{r(0)}} = -\frac{L}{\ell_-}. \tag{1.42}$$

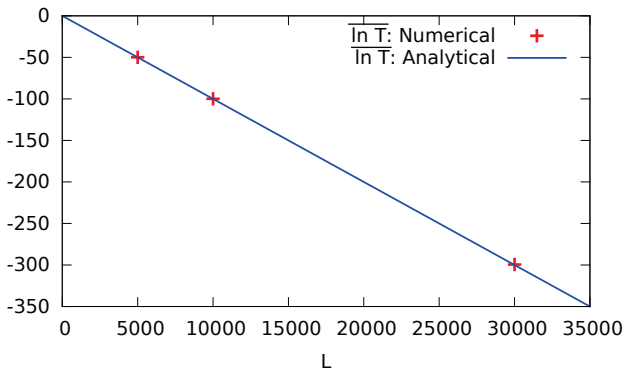


Fig 1.6 – Valeurs moyennes du logarithme du coefficient de transmission d'un fil de longueur L en fonction de L, pour un désordre blanc. Les résultats analytiques (lignes vertes) sont confirmés par les résultats numériques (points rouges).

Le coefficient de transmission d'un système désordonné unidimensionnel décroît donc exponentiellement avec sa longueur, comme représenté sur la figure 1.6. La décroissance exponentielle de la transmission du fil avec sa longueur est un indicateur de la localisation d'Anderson.

Sachant enfin que le coefficient de transmission et la conductance du fil sont proportionnels à température nulle (cf. Éq. (3.112)), la localisation d'Anderson se signale par une décroissance exponentielle de la conductance, comme supposé dans la théorie d'échelle.

Matrices de transfert

Une approche analytique différente, appelée méthode des matrices de transfert [27], permet également de calculer la transmission à travers un fil de longueur L. Nous la présenterons de manière détaillée dans un contexte plus général dans la Sec. 3.2 du Chap. 3. Dans cette méthode, on introduit une matrice de transfert qui relie les flux de particules incident et réfléchi en entrée du fil ($x = 0$) et en sortie ($x = L$). En découpant le fil de longueur L en cellules élémentaires, la matrice de transfert à travers le fil est égale au produit des matrices de transfert de chacune des matrices élémentaires. Les matrices de transfert élémentaires sont toutes différentes à cause de la présence du potentiel désordonné. Ceci conduit à une évolution aléatoire de la matrice de transfert totale au fur et à mesure que l'on chaîne les matrices élémentaires. Le coefficient de transmission du système, qui intervient dans l'expression de la matrice de transfert, subit à son tour une évolution stochastique lors du chaînage. La mise en équation de cette évolution conduit à une équation de Fokker-Planck de la distribution de probabilité complète du coefficient de transmission en fonction de la longueur L du système. Cette équation est analogue à l'équation de Fokker-Planck sur la distribution de probabilité de présence d'une particule brownienne en fonction du temps. Elle permet d'accéder à l'expression de la distribution de probabilité du coefficient de transmission. On retrouve à partir de cette distribution une décroissance linéaire de la valeur moyenne du logarithme de la transmission, $\overline{\ln T(L)} = -L/\ell_-$. De plus, on obtient une décroissance essentiellement exponentielle de la transmission moyenne, $\overline{T} \sim \exp(-L/4\ell_-)$. La différence de comportement entre les deux quantités $\overline{T}$ et $\exp(\overline{\ln T})$ s'explique par l'importante largeur de la distribution de probabilité de la transmission.

Dans la limite d'un fil très long devant le libre parcours moyen, la distribution de probabilité du logarithme de la transmission est très proche d'une loi normale [28]. Cela s'interprète par le fait que l'on a multiplié des matrices de transfert élémentaires aléatoires, et donc sommé les logarithmes de ces matrices. En assimilant matrice de transfert et transmission, le logarithme de la transmission est la somme d'un grand nombre de quantités aléatoires de distributions iden-

tiques. D'après le théorème central limite, ceci conduit à une distribution normale du logarithme de la transmission. On parle alors de distribution log-normale du coefficient de transmission. Il est de plus intéressant de mentionner que l'écart-type du logarithme de la transmission que l'on obtient est proportionnel à $|\overline{\ln T}|^{1/2}$, ce qui rend le logarithme de la transmission auto-moyennant. En effet, sachant que $\overline{\ln T} \to \infty$ lorsque $L \to \infty$, les fluctuations relatives de $\ln T$ autour de sa valeur moyenne diminuent avec la longueur du système. En revanche les fluctuations relatives de la transmission autour de sa valeur moyenne divergent quant à elles [voir Éq. (3.82) Sec. 3.3.2]. Pour un fil long, la valeur typique de la transmission que l'on obtient pour une réalisation du désordre est alors donnée par

$$T^{typ} = \exp(\overline{\ln T}), \tag{1.43}$$

tandis qu'il est nécessaire de moyenner les valeurs obtenues sur un nombre très élevé de mesures avec des échantillons différents pour obtenir la valeur moyenne de la transmission.

1.2.3 Méthode auto-cohérente

En dimension supérieure à un, les calculs exacts deviennent impossibles, ce qui rend en particulier l'étude analytique de la transition de localisation à 3D délicate, et justifie de lourds calculs numériques. Nous présentons ici une méthode microscopique approchée qui permet néanmoins de rendre compte de la localisation d'Anderson en dimension quelconque, appelée méthode auto-cohérente [29, 30].

Dans un régime classique, la probabilité de diffusion $p(\boldsymbol{r}, t)$ est solution de l'équation de diffusion classique (1.21), $(\partial_t - D_B\Delta)p(\boldsymbol{r}, t) = \delta(\boldsymbol{r})\delta(t)$, de coefficient de diffusion D_B. Cela permet d'exprimer la transformée de Fourier spatiale et temporelle de $p(\boldsymbol{r}, t)$ sous la forme

$$\tilde{p}(\boldsymbol{q}, \omega) = \frac{1}{-i\omega + D_B\boldsymbol{q}^2}. \tag{1.44}$$

Par transformation de Fourier inverse, on obtient alors la probabilité de diffusion

$$p(\boldsymbol{r}, t) = \frac{1}{(4\pi D_B t)^{d/2}}\, \mathrm{e}^{-\boldsymbol{r}^2/4D_B t}, \tag{1.45}$$

où d est à la dimension du système. On retrouve ainsi le résultat bien connu selon lequel la probabilité de diffusion en $\boldsymbol{r}$ de la particule est une gaussienne, dont l'écart-type augmente comme la racine carrée du temps.

La localisation faible, obtenue en prenant en compte les chemins de diffusion formant des boucles parcourues en sens opposés (termes de cooperon, voir sec. 1.1.2), conduit à une diminution du coefficient de diffusion dans le matériau. De plus, celui-ci dépend alors de la fréquence ω, de sorte que l'on a

$$\tilde{p}(\boldsymbol{q}, \omega) = \frac{1}{-i\omega + D(\omega)\boldsymbol{q}^2}. \tag{1.46}$$

Dans le régime de localisation faible, le coefficient de diffusion dynamique $D(\omega)$ s'exprime sous la forme [31]

$$\frac{1}{D(\omega)} = \frac{1}{D_B}\left(1 + \frac{\hbar}{\pi m k_E^{d-2}} \int_0^{q_{max}} \frac{\mathrm{d}q\; q^{d-1}}{-i\omega + D_B q^2}\right), \tag{1.47}$$

où m désigne la masse de la particule et $k_E = \sqrt{2mE}/\hbar$ le vecteur d'onde associé à son énergie. Une fréquence spatiale de coupure q_{max} est introduite en dimensions deux et trois pour

régulariser l'intégrale. À partir de considérations physiques, on choisit $q_{max} = 1/\ell_e$, la diffusion n'ayant de sens que sur des échelles de distance grandes devant le libre parcours moyen.

Afin de prendre en compte des effets d'interférence d'ordres plus élevés que le cooperon, la méthode auto-cohérente consiste à réinjecter le coefficient de diffusion dynamique $D(\omega)$ à la place du coefficient de diffusion de Boltzmann D_B dans l'intégrale de l'Éq. (1.47),

$$\frac{1}{D(\omega)} = \frac{1}{D_B}\left(1 + \frac{\hbar}{\pi m k_E^{d-2}} \int_0^{q_{max}} \frac{\mathrm{d}q\, q^{d-1}}{-i\omega + D(\omega) q^2}\right). \tag{1.48}$$

Ce protocole est équivalent à prendre en compte les diagrammes où des boucles s'empilent. On obtient alors différentes solutions en fonction de la dimension du système, qui conduisent à des régimes dynamiques différents à temps infinis ($\omega \to 0$).

En dimension un, l'équation (1.48) conduit pour $\omega \to 0$ à [32]

$$D(\omega) \simeq -i\omega \ell_{loc}^2, \tag{1.49}$$

avec $\ell_{loc} \sim \ell_e$. On a alors

$$\tilde{p}(q,\omega) \simeq \frac{1}{-i\omega} \times \frac{1}{1 + q^2 \ell_{loc}^2}. \tag{1.50}$$

La dépendance en $1/-i\omega$ indique une convergence vers une limite stationnaire indépendante de t à temps infini (cf. Éq. (2.87)). La transformée de Fourier de la partie spatiale, ici une lorentzienne, donne quant à elle une décroissance exponentielle de la probabilité de diffusion dans l'espace réel :

$$p(x,t) = \frac{1}{2\ell_{loc}} \mathrm{e}^{-|x|/\ell_{loc}}. \tag{1.51}$$

La longueur ℓ_{loc} s'identifie ainsi à la longueur de localisation du paquet d'onde, qui est de l'ordre du libre parcours moyen, en accord avec les résultats exacts présentés section 1.2.2.

En dimension deux, on trouve de même [32] $D(\omega) = -i\omega\ell_{loc}^2$ pour $\omega \to 0$, ce qui indique une décroissance essentiellement exponentielle de la probabilité de transfert à temps infini et à grande distance, sur une longueur de localisation ℓ_{loc}. L'expression de ℓ_{loc} est donnée par [32]

$$\ell_{loc} \simeq \ell_e (\mathrm{e}^{\pi k_E \ell_e} - 1)^{1/2}. \tag{1.52}$$

Cette longueur de localisation augmente donc exponentiellement avec le paramètre $k_E\ell_e$, ce qui indique que plus l'énergie de la particule est grande, plus la localisation a lieu sur des échelles de longueur et de temps élevées (voir également la discussion sur la théorie d'échelle en dimension deux, section 1.2.1).

En dimension trois, trois régimes apparaissent [32] suivant la valeur de $k_E\ell_e$ comparée à une valeur critique $(k_E\ell_e)_c \sim 1$. Lorsque $k_E\ell_e < (k_E\ell_e)_c$, on retrouve un régime de localisation exponentielle avec $D(\omega) = -i\omega\ell_{loc}^2$ pour $\omega \to 0$. Au voisinage du point critique, cette longueur de localisation diverge en

$$\ell_{loc} \sim \frac{1}{[(k_E\ell_e)_c - k_E\ell_e]^\nu} \qquad \text{avec} \qquad \nu = 1. \tag{1.53}$$

Lorsque $k_E\ell_e > (k_E\ell_e)_c$, on obtient en revanche que $D(\omega)$ tend vers une constante réelle à $\omega \to 0$, ce qui indique un régime diffusif. Enfin, le régime critique lorsque $k_E\ell_e = (k_E\ell_e)_c$ se caractérise par $D(\omega) \sim (-i\omega)^{1/3}$ qui conduit à un régime sous-diffusif. Ces résultats font ainsi apparaître une transition de phase entre un régime localisé et un régime délocalisé en dimension trois, en fonction de la valeur du paramètre $k_E\ell_e$. On retrouve en particulier le critère de Ioffe-Regel [33], selon lequel la localisation apparaît lorsque la longueur d'onde devient de l'ordre du (ou supérieure au) libre parcours moyen.

La méthode auto-cohérente permet ainsi de confirmer les prédictions de la théorie d'échelle concernant l'influence de la dimension sur la localisation. Il est d'ailleurs possible [31] à partir des résultats de la méthode auto-cohérente de tracer une courbe du flot de renormalisation de la conductance en accord avec celle la théorie d'échelle (Fig. 1.5). Elle permet également d'aller plus loin dans la description des différents régimes. Elle montre ainsi qu'une localisation exponentielle apparaît quelle que soit l'énergie de la particule en dimensions un et deux. De plus, la longueur de localisation est uniquement donnée par la valeur du libre parcours moyen en dimension un, alors qu'elle croît exponentiellement avec la valeur du paramètre $k_E\ell_e$ en dimension deux, ce qui indique une localisation très lente. En dimension trois, la théorie d'échelle prédit l'existence d'une transition de délocalisation pour $k_E\ell_e \sim 1$, qui se manifeste par le passage d'un régime exponentiellement localisé à basse énergie à un régime diffusif à haute énergie. Enfin, une divergence de la longueur de localisation à la transition avec un exposant critique universel ν est mise en évidence.

La méthode auto-cohérente est cependant une méthode approchée. En effet, parmi tous les diagrammes de chemins possibles, on n'utilise que ceux qui contribuent à la localisation faible (cooperon : premier terme correctif au régime classique), pour effectuer des calculs à n'importe quel ordre. Ce choix de diagrammes est éclairé, et permet d'offrir la meilleure théorie dont on dispose analytiquement en dimension trois, mais on ne contrôle pas l'erreur effectuée en négligeant d'autres diagrammes qui participent certainement au phénomène de localisation. En particulier, l'exposant critique obtenu par la méthode auto-cohérente est incorrect. Il est alors nécessaire pour étudier plus précisément la transition d'Anderson en dimension trois d'effectuer des calculs numériques. De tels calculs [34] ont par exemple permis d'obtenir une valeur précise de l'exposant critique : $\nu \simeq 1.58$.

1.3 Observations expérimentales

Si Anderson a montré la possibilité d'une localisation à partir d'une onde électronique dans un métal désordonné, l'étude expérimentale de la localisation en matière condensée se révèle très difficile. En effet, les expériences étant réalisées à température non nulle, les vibrations du réseau cristallin (phonons) font apparaître des effets de décohérence qui nuisent aux interférences essentielles au phénomène de localisation. Le désordre dans de tels systèmes est très difficile à contrôler, et les électrons interagissent fortement entre eux, ce qui n'est pas pris en compte dans le modèle d'Anderson. Enfin, il n'est pas possible de mesurer directement les fonctions d'onde électroniques, et les signatures éventuelles de la localisation doivent être recherchées dans des quantités globales comme la conductance, ce qui rend notamment compliquée l'observation de la transition à 3D. Heureusement, la localisation d'Anderson étant un phénomène ondulatoire universel, on peut l'étudier pour différents types d'ondes [35]. Bien qu'il ait fallu attendre de nombreuses années après la prédiction d'Anderson, la localisation a ainsi pu être observée avec des ondes classiques et quantiques. Dans les sections suivantes, nous décrivons quelques-unes des expériences ayant permis d'observer la localisation ou de s'en approcher. Nous donnons un aperçu des études effectuées avec des ondes classiques puis nous détaillons davantage les expériences sur les atomes ultrafroids, ces derniers formant le cadre de notre travail.

1.3.1 Étude avec des ondes classiques

L'universalité de la théorie d'échelle, qui peut être appliquée à différents types d'ondes, a motivé la recherche de la localisation forte d'ondes classiques (son, lumière). Des travaux théoriques dans les années 1980 ont donné des prédictions sur les conditions sous lesquelles

la localisation d'Anderson d'une onde classique peut être observée dans un milieu désordonné tridimensionnel [36–38], et notamment la fréquence de l'onde (qui joue le rôle de l'énergie de la particule quantique) autour de laquelle la transition de localisation est attendue. L'utilisation d'onde classique offre l'avantage de s'affranchir des interactions entre particules et la possibilité de travailler à température ambiante. Cependant, des effets parasites de diffusion Rayleigh à basse fréquence (lorsque la longueur d'onde est supérieure à la taille des diffuseurs) ou d'absorption de l'onde peuvent détruire la localisation.

Une première approche pour déterminer si une onde classique est localisée consiste à étudier le comportement de la transmission en fonction de la longueur du système (analogue au comportement de la conductance dans la théorie d'échelle). La localisation d'Anderson se manifeste alors par une décroissance exponentielle de la transmission avec la longueur du système. D'autres approches spécifiques aux ondes classiques sont également possibles, telles que des mesures de distributions statistiques d'intensité par exemple.

Localisation de la lumière à 3D

De nombreux milieux diffusent la lumière (nuage, lait, ...). Cependant, la localisation d'Anderson de la lumière nécessite une force de diffusion très élevée comparée à celle des diffuseurs que l'on trouve dans la nature. Le libre parcours moyen ℓ doit en effet être suffisamment faible pour obtenir $k\ell \sim 1$, où k est correspond au vecteur d'onde de l'onde que l'on souhaite localiser. Il est donc nécessaire d'utiliser des milieux diffusants synthétiques pour étudier la localisation forte. De tels milieux sont obtenus par exemple en réduisant des matériaux en poudres très fines (taille inférieure au micromètre), en plaçant des micro-sphères en suspension dans des liquides, ou encore en creusant des pores dans des solides. Les libres parcours moyens les plus courts que l'on obtient sont de l'ordre de la centaine de nanomètres [39].

En éclairant par une onde lumineuse infrarouge ($\lambda = 1064$ nm) une poudre de semiconducteur $GaAl$ en suspension dans du méthanol [40], une décroissance exponentielle de la transmission d'une onde dans un régime de désordre fort est bien observée, en accord avec le phénomène de localisation d'Anderson.

Cependant, la décroissance exponentielle de la transmission pourrait également être attribuée à un processus d'absorption au sein du matériau [41], qui détruit de plus le phénomène de la localisation forte. De façon plus générale, de nombreux phénomènes, tels que la fluorescence et les effets de champ proche, compliquent la physique du système et conduisent à une remise en cause des signatures de la localisation de la lumière reportées auparavant [42]. L'observation univoque de la localisation d'Anderson à 3D de la lumière reste donc un défi expérimental à relever.

Micro-ondes

Dans le domaine des micro-ondes (longueur d'onde de l'ordre du millimètre), il est possible de manufacturer des éléments de fort pouvoir diffusant, par exemple des sphères métalliques. Ces sphères sont disposées aléatoirement dans un guide dont la dimension transverse est de l'ordre du libre parcours moyen (quelques centimètres), ce qui permet d'étudier la localisation dans un régime quasi-unidimensionnel. Des calculs théoriques de type matrice de transfert prédisent le comportement statistique du coefficient de transmission dans un tel système [43]. Expérimentalement, l'étude statistique de la conductance d'un guide quasi-unidimensionnel ou tridimensionnel en 2000 a permis de démontrer la localisation dans le guide quasi-1D et son absence dans le guide 3D, en présence d'absorption [44].

Localisation transverse

En dimension inférieure ou égale à deux, de très belles expériences de *localisation transverse* mettent en évidence la localisation de la lumière dans un schéma équivalent à celui de l'étalement d'un paquet d'onde quantique [45]. Un faisceau lumineux éclaire une portion de la face d'entrée d'un cristal photonique désordonné, voir Fig. 1.7 (a). La propagation du faisceau dans le cristal suivant l'axe z est alors régie par une équation analogue à celle de Schrödinger

$$i\frac{\partial\psi}{\partial z} = \left[-\frac{1}{2k}\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2}+\frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) - \frac{k}{n_0}\Delta n(x,y,z)\right]\psi, \tag{1.54}$$

où ψ représente l'enveloppe lentement variable du champ électrique $E(\boldsymbol{r},t) = \mathrm{Re}\left[\psi(x,y,z)\,\mathrm{e}^{i(kz-\omega t)}\right]$. La coordonnée z remplace le temps, et la variation locale de l'indice de réfraction joue le rôle du potentiel désordonné de l'équation de Schrödinger. Le potentiel désordonné devant être stationnaire pour observer la localisation d'Anderson, il est nécessaire que la variation d'indice ne dépende pas de z. L'intensité en sortie du cristal est mesurée, et l'expérience est réalisée une centaine de fois avec un désordre différent afin d'obtenir une moyenne d'ensemble sur les réalisations du désordre.

On peut observer en sortie du cristal de longueur fixée le passage d'un régime balistique à un régime diffusif, puis localisé, en augmentant la quantité de désordre [46], voir Fig 1.7.

Onde ultrasonore

L'utilisation d'une onde ultrasonore permet d'étudier la localisation d'Anderson dans des régimes dynamiques, grâce à un contrôle de l'énergie de la source sur des durées importantes. En 2008, la localisation d'Anderson d'un onde ultrasonore dans un verre tridimensionnel de perles d'aluminium [47] a été observée. Le matériau est excité par une source ponctuelle d'énergie ultrasonore de fréquence de l'ordre du mégahertz, correspondant à une longueur d'onde de l'ordre de la taille des billes, et l'étalement dynamique de l'intensité élastique dans la dimension transverse est mesuré. Cette étude a permis de montrer la localisation d'Anderson 3D des ultrasons à certaines fréquences.

1.3.2 Observations de la localisation d'Anderson dans des systèmes d'atomes ultrafroids

Les progrès dans le refroidissement d'atomes et leur manipulation, effectués dans les années 1990, ont rendu accessible l'observation de la localisation d'Anderson d'une onde quantique de matière, par une observation directe de l'étalement d'un paquet d'onde d'atomes ultrafroids dans un potentiel lumineux désordonné, ou quasi-désordonné. Contrairement aux systèmes électroniques, l'un des intérêts majeurs des atomes ultrafroids est la possibilité de se placer dans un régime où les interactions entre particules sont négligeables (en utilisant les résonances Feshbach ou par dilution). De plus, une excellente isolation vis-à-vis du bain thermique extérieur est possible, et les caractéristiques du potentiel désordonné peuvent être connues grâce à l'utilisation de méthodes optiques (champ de tavelures notamment) [48].

Une expérience-type, proposée dans les Réf. [49, 50] consiste à former un condensat de Bose-Einstein des atomes dans un piège harmonique. Un potentiel désordonné est alors créé en utilisant un faisceau lumineux d'intensité spatialement aléatoire et de désaccord important par rapport à une transition atomique. Après ouverture du piège, les atomes sont libres de s'étaler. Cet étalement se produit dans une géométrie de dimension contrôlable grâce à l'utilisation d'éventuels confinements transverses. Une observation directe du paquet d'onde après

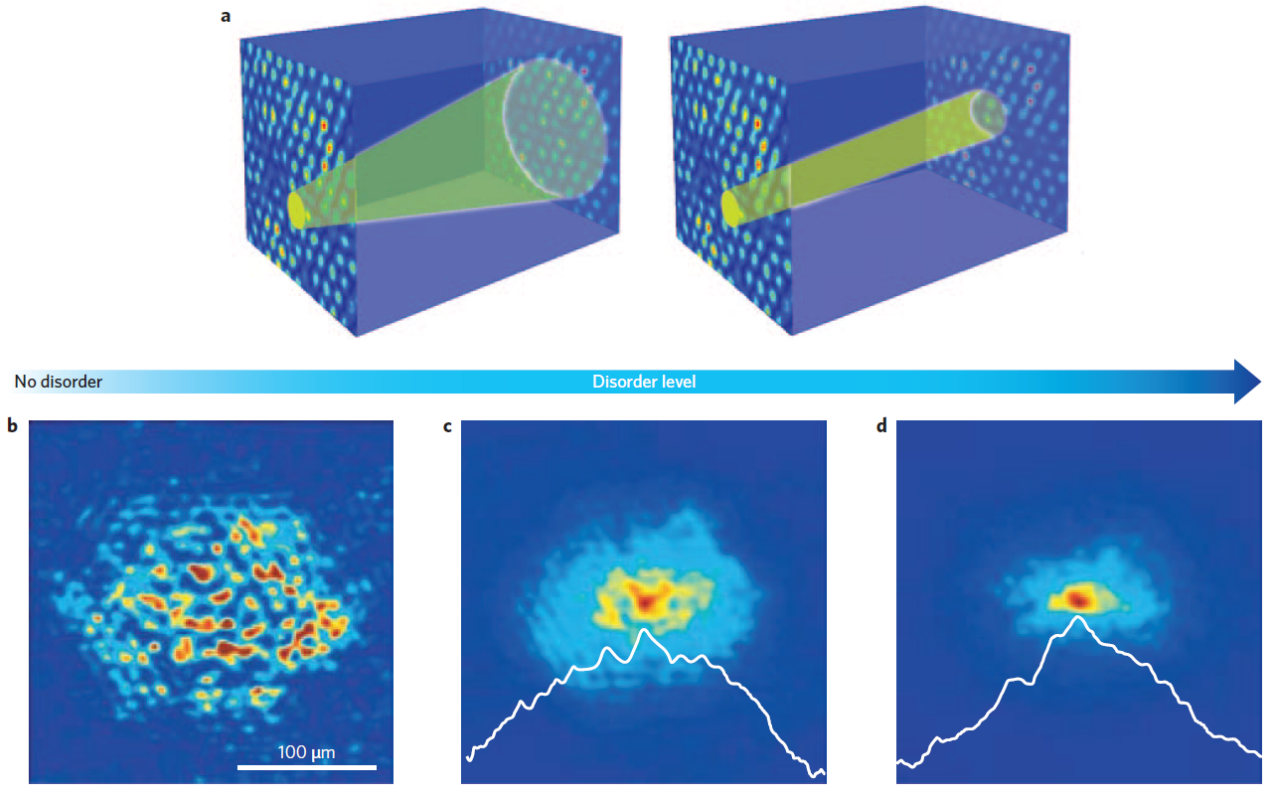


Fig 1.7 – Expérience de localisation transverse de la lumière. (a) Propagation d'un faisceau lumineux dans un cristal photonique désordonné, dont on contrôle l'intensité du désordre. À gauche : absence de désordre, propagation balistique du faisceau, caractérisée par une augmentation linéaire de sa largeur. À droite : désordre fort, localisation exponentielle du faisceau dans le plan transverse, le faisceau ne s'élargit pas au cours de la propagation. (b)-(d) Intensité en sortie du cristal, moyennée sur un ensemble de réalisations. On observe la transition d'un régime balistique (b) qui conserve la symétrie du réseau, à un régime diffusif de profil d'intensité gaussien, tracé en échelle log (c), puis à un régime localisé, de profil d'intensité exponentiellement décroissant (d), en augmentant la quantité de désordre. Extrait de la référence [45].

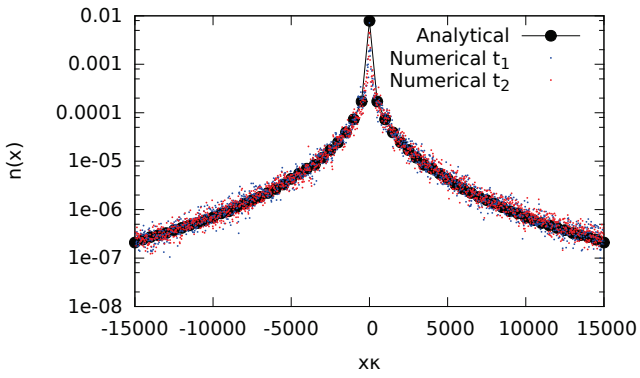


Fig 1.8 – Étalement d'un paquet d'onde initialement gaussien, d'impulsion moyenne nulle et de largeur en impulsion $\hbar\kappa$, dans un désordre blanc d'intensité $U_{\mathrm{R}} = 0.01\left(\frac{\hbar^2}{2m}\right)^2\kappa^3$. La densité $n(x)$ est tracée en fonction de $x\kappa$. Le résultat analytique à temps infini, obtenu à partir de (1.55), est tracé en noir. Les résultats aux temps $t_1 = 22500\frac{2m}{\hbar\kappa^2}$ et $t_2 = 25000\frac{2m}{\hbar\kappa^2}$ d'une simulation numérique de l'étalement du paquet d'onde dans une réalisation du désordre, effectuée à l'aide d'un algorithme de Crank-Nicolson [52], sont tracés après un lissage sur cent points.

interaction avec le désordre est possible par imagerie d'absorption ou de fluorescence. Le paquet d'onde initialement localisé autour du point $\boldsymbol{r_0} = \boldsymbol{0}$ ayant une distribution en énergie $\mathcal{P}(E)$, de largeur non nulle, son comportement peut être approximé en sommant les probabilités de diffusion $p(\boldsymbol{r}, t|E)$ au point $\boldsymbol{r}$ à l'instant t de chaque composante d'énergie [50],

$$n(\boldsymbol{r}, t) = \int \mathrm{d}E\, \mathcal{P}(E) p(\boldsymbol{r}, t|E). \tag{1.55}$$

La distribution en énergie est obtenue à partir de la distribution en impulsion du paquet initiale $|\psi_0(\boldsymbol{k})|^2$ élargie par la fonction spectrale $A(k, E)$, sous la forme [26, 51]

$$\mathcal{P}(E) = \int \frac{\mathrm{d}\,\boldsymbol{k}}{(2\pi)^d} |\psi_0(\boldsymbol{k})|^2 A(\boldsymbol{k}, E). \tag{1.56}$$

Sur la figure 1.8, on compare la densité obtenue à partir de la formule analytique (1.55) au résultat numérique d'une simulation d'étalement d'un paquet d'onde, en dimension $d = 1$, dans un désordre blanc de fonction de corrélation à deux points $\tilde{C}_2(x) = U_{\mathrm{R}}\delta(x)$. Le paquet d'onde initial est pris gaussien d'impulsion moyenne nulle,

$$|\psi_0(k)|^2 = \frac{\sqrt{2\pi}}{\kappa}\, \mathrm{e}^{-k^2/2\kappa^2}\,. \tag{1.57}$$

La largeur en énergie $\sim \hbar^2\kappa^2/2m$ du paquet d'onde étant non négligeable devant son énergie moyenne (qui est nulle), il est absolument nécessaire d'intégrer sur les différentes composantes en énergie du paquet d'onde la probabilité de diffusion pour connaître l'évolution de la densité. Le résultat analytique à temps infini (courbe rouge) est obtenu à partir des Éq. (1.55) et (1.56) présentées ci-dessus. La fonction spectrale et la probabilité de diffusion à temps infini sont respectivement données par les équations (5.34) et (1.37). Deux résultats numériques à des temps différents sont présentés. Ils sont identiques, ce qui indique que le paquet est localisé (i.e. il n'évolue plus) sur la portion d'espace observée. De plus, on observe que le profil localisé obtenu numériquement est en accord avec la prédiction analytique à temps infini. Les résultats de simulations numériques présentés sur la figure 1.8 valident ainsi la formule semi-classique (1.55).

Peu de temps après les premières propositions théoriques [50, 51, 53, 54], la localisation d'Anderson d'un paquet d'atomes ultrafroids a été observée, d'abord en dimension un en 2008 [55, 56], puis en dimension trois à partir de 2011 [57–59].

Localisation unidimensionnelle dans un potentiel de tavelures

À l'Institut d'Optique Graduate School (IOGS), un condensat de $10^4 - 10^5$ atomes de Rubidium 87, de potentiel chimique $\mu_{in}/(2\pi\hbar) \in [200 - 600]$ Hz, initialement piégé dans un potentiel de confinement harmonique, est libéré dans un guide d'onde créé par un faisceau laser attractif (voir Fig. 1.9 (a)). Pendant une première phase d'étalement, l'énergie d'interaction est convertie en énergie cinétique, et la densité du condensat devient suffisamment faible pour que les interactions puissent être négligées. Un potentiel lumineux de tavelures (*speckle*) est également appliqué [9] [60]. La figure de tavelures, constituée de grains d'intensité lumineuse et de disposition aléatoires, est obtenue lors du passage de la lumière d'un laser à travers une surface dépolie. Elle résulte des interférences entre les ondes diffusées par les grains du verre dépoli éclairés. La longueur de corrélation σ_{R} du désordre (la taille typique des *grains*) et son intensité sont ajustables en contrôlant la surface de dépoli éclairée et l'intensité du faisceau laser. La longueur de corrélation est ainsi choisie égale à 0.26 µm, et l'amplitude du désordre est de l'ordre de 0.1 μ_{in}. Après environ 500 ms, l'étalement du paquet d'onde cesse sous l'effet de la localisation.

Le profil localisé résulte de la somme des profils localisés de toutes les composantes d'énergie du paquet d'onde. Le profil localisé de chaque composante de vecteur d'onde k_E décroît exponentiellement [10] en $\exp[-2|z|/L_{loc}(k_E)]$ où la longueur de localisation est inversement proportionnelle à la puissance spectrale du potentiel désordonné $\tilde{C}_2(2k_E)$ [50] :

$$L_{loc} = \frac{2\hbar^4 k_E^2}{m\tilde{C}_2(2k_E)}. \tag{1.58}$$

Or le potentiel de tavelures utilisé ici présente la particularité d'une annulation de sa puissance spectrale $\tilde{C}_2(2k_E)$ lorsque $k_E\sigma_{\mathrm{R}} > 1$. Cette annulation conduit à une augmentation de plusieurs ordres de grandeurs de la longueur de localisation, qui peut être calculée en prenant en compte des fonctions de corrélation du potentiel désordonné d'ordre supérieur [61]. Un seuil de mobilité effective existe ainsi : les composantes d'énergie telles que $k_E\sigma_{\mathrm{R}} < 1$ sont localisées exponentiellement, tandis que les composantes d'énergie telles que $k_E\sigma_{\mathrm{R}} \geqslant 1$ sont délocalisées à l'échelle de l'expérience (la longueur de localisation devient très grande devant la longueur longitudinale de l'expérience).

Deux régimes différents apparaissent alors selon la valeur du vecteur d'onde k_{max} associée à la composante d'énergie maximale du condensat peuplée.

Lorsque $k_{max}\sigma_{\mathrm{R}} < 1$, toutes les composantes d'énergie du paquet d'onde sont localisées exponentiellement, et la somme de toutes leurs contributions conduit à une localisation exponentielle du paquet d'onde, en $\exp[-2|z|/L_{loc}(k_{max})]$. Cette décroissance exponentielle est en accord avec les résultats expérimentaux. Sur la figure 1.9 (b), la longueur de localisation théorique $L_{loc}(k_{max})$ (1.58) tracée en tirets, est comparée aux valeurs expérimentales de la longueur de localisation obtenues par un ajustement exponentiel du profil localisé. En prenant en compte les incertitudes expérimentales sur les estimations de k_{max} et σ_{R} (zone colorée), on observe un très bon accord quantitatif entre les résultats expérimentaux et la prédiction théorique, sans paramètre ajustable. Des écarts entre la théorie et les valeurs expérimentales apparaissent pour un potentiel désordonné fort ($V_{\mathrm{R}}/2\pi\hbar \gtrsim 60$ Hz), et peuvent s'expliquer par le fait que l'on a uniquement pris en compte le premier terme du calcul perturbatif de la longueur de localisation à faible désordre, ce qui n'est plus suffisant lorsque le désordre devient plus fort.

9. Voir aussi Chap. 4, section 4.1 pour une description plus détaillée du potentiel de tavelures.

10. Cette décroissance exponentielle en $\exp[-2|z|/L_{loc}(k_E)]$ est valide dans un régime de courte distance $|z| \ll L_{loc}$, à grande distance la décroissance asymptotique est de la forme $\exp[-|z|/2L_{loc}(k_E)]$. Ces deux résultats sont présentés au sein du paragraphe *Méthode diagrammatique*, section 1.2.2, où l'on identifie $L_{loc} = 2\ell_-$. Dans les expériences réalisées seul le comportement de courte distance est visible.

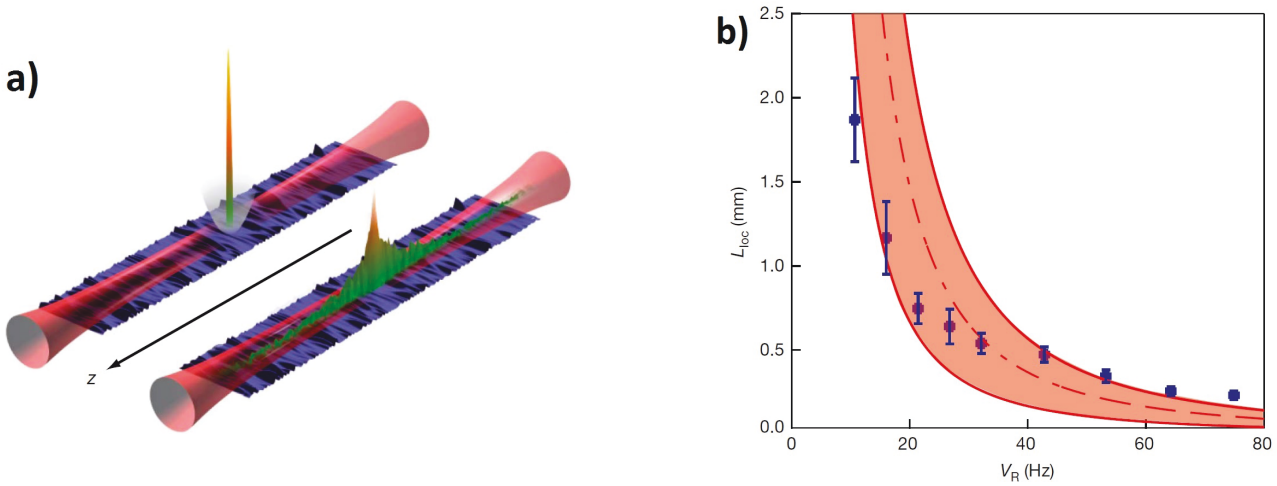


Fig 1.9 – Expérience de localisation d'Anderson à 1D d'un paquet d'onde d'atomes ultrafroids, réalisée à l'IOGS. (a) Le paquet d'atomes froids, initialement dans un piège dipolaire, est libéré en présence d'un potentiel de tavelures dans un guide 1D. Le profil du paquet d'onde après étalement présente une décroissance exponentielle de la densité atomique dans les ailes du paquet d'onde. (b) Longueur de localisation en fonction de l'amplitude du désordre. La longueur de localisation est obtenue par un ajustement exponentiel des ailes du paquet d'onde. Extraits de la référence [55].

Lorsque $k_{max}\sigma_R > 1$, l'augmentation très forte de la longueur de localisation pour les composantes d'énergie $k_E > 1/\sigma_R$ ne permet pas d'observer leur localisation sur la longueur de l'expérience. Seules les composantes d'énergies telles que $k_E\sigma_R < 1$ contribuent au profil localisé. L'intégration des contributions de ces composantes d'énergies localisées conduit à une décroissance algébrique du paquet d'onde localisé, en $1/|x|^2$ [50]. Ce comportement théorique est en accord avec les résultats expérimentaux [55].

Localisation unidimensionnelle dans un potentiel quasi-désordonné

Une autre stratégie a été adoptée par une équipe du LENS (European Laboratory for Non-Linear Spectroscopy) à Florence pour observer la localisation d'Anderson. Un condensat de Bose-Einstein d'atomes de Potassium 39 est produit et les interactions entre particules sont rendues négligeables en utilisant une résonance de Feshbash, par action d'un champ magnétique. Un premier réseau optique périodique unidimensionnel est créé en superposant deux faisceaux laser contra-propageants. L'amplitude de ce réseau est assez importante pour que le système puisse être décrit à l'aide des états localisés sur sites (fonctions de Wannier), couplés uniquement entre plus proches voisins par effet tunnel. Un second réseau optique, d'amplitude plus faible et de fréquence incommensurable avec celle du premier réseau, lui est superposé. Il en résulte un réseau quasi-périodique, toujours décrit par des états sur sites couplés avec une énergie de saut entre plus proches voisins approximativement constante, mais dont l'énergie sur site est quasi-aléatoire. Le hamiltonien du système est ainsi de la forme

$$\hat{H} = -J\sum_m \left(|w_m\rangle\langle w_{m+1}| + |w_{m+1}\rangle\langle w_m| \right) + \Delta\sum_m \cos(2\pi\beta m + \phi)\, |w_m\rangle\langle w_m| \,, \qquad (1.59)$$

où $|w_m\rangle$ est un état de Wannier localisé sur le site m, $\beta = k_2/k_1$ est le rapport des vecteurs d'onde des deux réseaux, et ϕ est une phase qui dépend de l'origine spatiale choisie. Ce modèle de quasi-désordre unidimensionnel, introduit par S. Aubry et G. André en 1980 [62], présente pour $\beta = (\sqrt{5}-2)/2$ une transition de localisation lorsque le rapport de l'énergie du quasi-désordre Δ sur celle du terme de saut J dépasse la valeur critique $\Delta/J = 2$. Cette transition

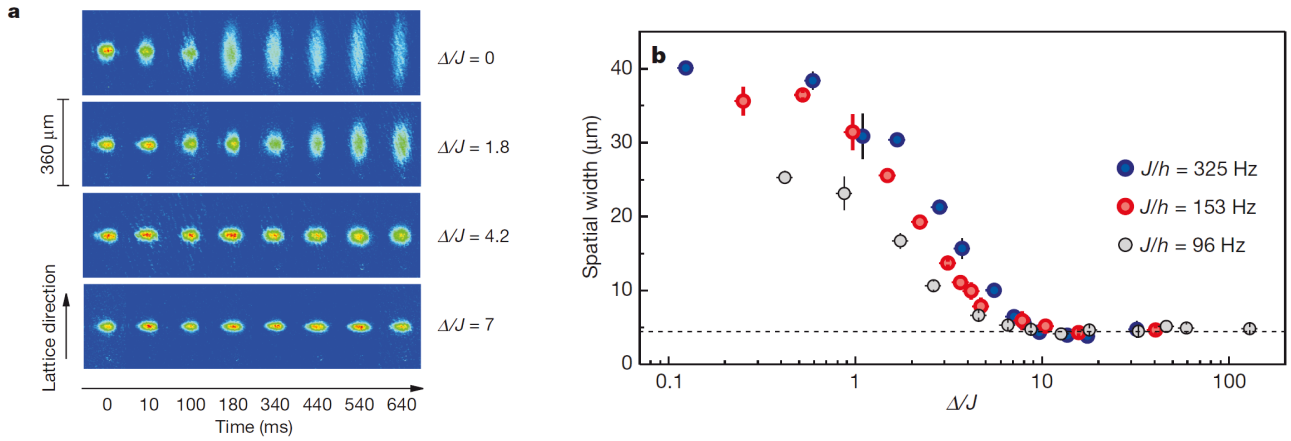


Fig 1.10 – Observation de la localisation d'Anderson à 1D d'un paquet d'onde d'atomes ultrafroids dans un réseau quasi-désordonné à travers une mesure d'étalement, réalisée au LENS. (a) Images du condensat de Bose-Einstein qui s'étale, pour différentes valeurs du rapport de l'énergie du désordre Δ sur l'énergie de saut J. (b) Largeur du paquet d'onde à 750 ms en fonction du rapport Δ/J, pour trois valeurs différentes de J. La ligne en pointillés indique la largeur initiale du condensat. Extrait de la référence [56]

est observée expérimentalement en réalisant un condensat de Bose-Einstein sans interactions dans un piège harmonique, auquel le réseau bichromatique est superposé. Le piège est ensuite éteint et les atomes sont libres de s'étaler suivant la direction du réseau bichromatique. La distribution spatiale des atomes à différents temps d'évolution peut être observée par imagerie d'absorption (voir Fig. 1.10 (a)). Lorsque Δ/J est nul, i.e. dans un réseau simple, les états propres du système sont des ondes de Bloch étendues, et on observe un étalement balistique du paquet d'onde. Lorsque Δ/J augmente, on observe un étalement de plus en plus lent, jusqu'à atteindre un régime de localisation pour un désordre fort $\Delta/J \sim 7$. Dans ce régime, l'étalement est supprimé car les états propres sont localisés sur des distances inférieures à la largeur initiale du condensat. Sur la Fig. 1.10 (b), la largeur du paquet d'onde après 750 ms d'étalement est tracée en fonction de Δ/J. On observe lorsque Δ/J est élevé le régime localisé, caractérisé par une largeur du paquet d'onde égale à sa largeur initiale, tandis que lorsqu'on réduit le désordre la largeur du paquet d'onde augmente, ce qui indique un étalement de plus en plus rapide. L'expérience est réalisée pour trois valeurs différentes de J. Les données des trois situations suivent la même courbe, en accord avec un comportement universel de localisation qui ne dépend que de Δ/J. Le régime localisé apparaît en particulier dans les trois situations pour $\Delta/J > 7$. Cette étude a été complétée par des mesures de densité du paquet d'onde dans l'espace réel et dans l'espace des impulsions. Les résultats obtenus sont en accord avec ceux de l'expérience d'étalement, et mettent en évidence une localisation exponentielle des états dans le régime localisé.

Localisation tridimensionnelle dans un potentiel de tavelures

Quelques années plus tard, les premières observations de la localisation d'Anderson tridimensionnelle d'un paquet d'onde d'atomes ultrafroids ont été réalisées, en suivant un protocole similaire au cas unidimensionnel.

Nous présentons ici les résultats de l'expérience réalisée à l'IOGS en 2012, qui ont été comparés à un calcul analytique basé sur la théorie auto-cohérente [58]. Un condensat de Bose-Einstein dilué de 10^4 atomes de ^{87}Rb est initialement créé dans un piège étroit. À l'extinction du piège, les atomes s'étalent dans l'espace libre (en dimension trois, la présence de la pesanteur

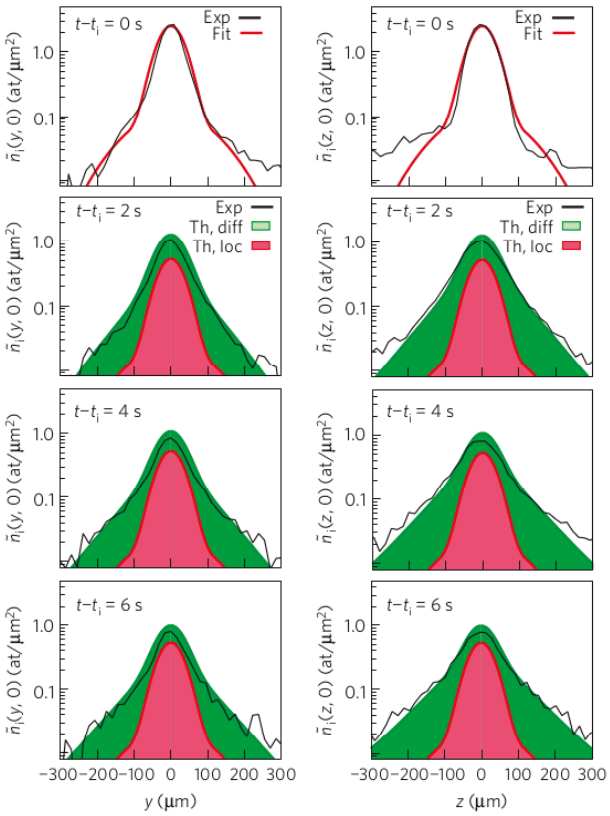


Fig 1.11 – Évolution du profil de densité dans un désordre fort ($V_R/2\pi\hbar = 680$ Hz) : densités colonnes (intégrées suivant x) le long des axes y et z, à différents temps après l'allumage du potentiel désordonné. Les résultats expérimentaux sont tracés en noir, la courbe rouge correspond au profil du paquet d'onde initial multiplié par la fraction d'atomes localisés (la longueur de localisation étant, à l'exception d'une petite plage d'énergie au voisinage de l'énergie critique E_c, inférieure à la largeur initiale en énergie du paquet d'onde). Les profils verts sont obtenus en ajoutant la partie diffusive théorique. Extrait de la référence [58].

dans la direction verticale rend nécessaire l'utilisation d'un gradient de champ magnétique pour compenser la force de gravité). Après 50 ms, un potentiel désordonné de tavelures anisotrope est appliqué. Le condensat est alors suffisamment dilué pour que les interactions entre particules puissent être négligées devant l'amplitude du désordre. Le potentiel désordonné utilisé à une amplitude contrôlable $V_{\mathrm{R}}/(2\pi\hbar) \in [0, 1.1]$ kHz, et la taille typique des grains (obtenue par une moyenne géométrique des tailles des grains mesurées dans les trois directions de l'espace) est de l'ordre de $\sigma_{\mathrm{R}} \simeq 0.13$ µm.

La densité colonne des atomes à l'instant t, $n(y, z, t)$, correspondant à la densité intégrée suivant la direction x, est obtenue par imagerie de fluorescence. Différents régimes sont observés suivant l'amplitude du potentiel désordonné. Lorsque l'amplitude du désordre est faible, $V_{\mathrm{R}}/2\pi\hbar = 135$ Hz, on observe un étalement diffusif du paquet d'onde, caractérisé par une augmentation linéaire de la valeur moyenne du carré de sa position. Pour un désordre plus fort $V_{\mathrm{R}}/2\pi\hbar = 680$ Hz, cette évolution diffusive est plus lente, et une fraction du condensat reste localisée au niveau de sa position initiale, à des temps très longs ($t \sim 6$ s), comme on peut le voir sur le figure 1.11.

Ces observations s'interprètent par le fait qu'à trois dimensions, pour un désordre donné, il existe un énergie critique E_c de transition entre des états de basse énergie localisés et des états de haute énergie délocalisés (voir section 1.2.1). Par conséquent, les composantes de basse énergie du paquet d'onde sont localisées exponentiellement, avec une longueur de localisation

$L_{loc}(E)$, tandis que celles d'énergie supérieure à E_c ont un mouvement diffusif. Les observations expérimentales sont ainsi décomposées empiriquement comme la somme d'un profil localisé et statique et d'un profil diffusif dépendant du temps. La fraction d'atomes localisés est déterminée expérimentalement à partir du rapport de la densité au centre du condensat à grand temps sur cette densité à l'instant initial. La longueur de localisation des atomes localisés prédite par la théorie étant inférieure à la largeur initiale du condensat, le profil localisé est approximé en multipliant le profil initial par la fraction d'atomes localisés. Sur la Fig. 1.11, les profils expérimentaux dans les directions y et z à différents temps sont tracés en noir. Le profil initial multiplié par la fraction d'atomes localisés est tracé en rouge.

Ces données expérimentales sont comparées à un calcul analytique. La densité atomique s'exprime sous la forme

$$n(\boldsymbol{r},t) = \int \mathrm{d}\boldsymbol{r_0}\,\mathrm{d}E\;\mathcal{D}_0(\boldsymbol{r_0},E)p(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r_0},t|E), \tag{1.60}$$

où $\mathcal{D}_0(\boldsymbol{r_0},E)$ est la distribution initiale en énergie et en position du paquet d'onde, et $p(\boldsymbol{r}-\boldsymbol{r_0},t|E)$ la probabilité de diffusion quantique du point $\boldsymbol{r_0}$ au point $\boldsymbol{r}$ après un temps t. La distribution initiale en énergie et position peut être approximée par le produit du profil de densité initial, bien connu analytiquement, et de la distribution initiale en énergie, qui peut être calculée numériquement (elle prend notamment en compte l'élargissement spectral dû au potentiel de tavelures). Le calcul de la probabilité de diffusion est effectué par une méthode auto-cohérente [54, 63, 64]. Deux régimes apparaissent suivant la valeur de l'énergie E. Pour $E < E_c$, la probabilité de diffusion décroît exponentiellement avec la position à temps infini, tandis que pour $E > E_c$, elle prend la forme d'une fonction de diffusion. Le résultat analytique que l'on obtient en intégrant l'équation (1.60) permet de reproduire les résultats expérimentaux, à condition d'introduire un décalage en énergie entre la distribution initiale en énergie et la probabilité de diffusion. Sur la figure 1.11, la valeur de ce décalage est déterminée de façon heuristique afin de faire correspondre la fraction localisée calculée théoriquement, en intégrant la contribution des énergies inférieures à E_c dans le calcul de la densité [Éq. (1.60)], à la fraction localisée mesurée expérimentalement. En ajoutant au profil localisé la densité de la partie diffusive calculée avec le même décalage en énergie que pour la fraction localisée, on observe que la densité totale est en accord avec les résultats expérimentaux. Ce décalage en énergie provient d'un décalage en énergie des quasi-ondes planes en présence du potentiel désordonné par rapport à l'énergie des ondes planes dans l'espace libre, qui avait été négligé dans le calcul analytique de la probabilité de diffusion [54].

Par la suite, la réalisation expérimentale de paquets d'onde étroits en énergie permettrait une étude quantitative de la transition d'Anderson. Ainsi, l'énergie critique en fonction de la force du désordre pour un potentiel de tavelures de longueur de corrélation fixée a déjà été mesurée en 2015 [59] et est en accord qualitatif avec les calculs théoriques, mais cette détermination reste encore imparfaite. Une largeur en énergie encore plus étroite pourrait permettre d'affiner ce résultat et d'obtenir des mesures des exposants critiques du coefficient de diffusion et de la longueur de localisation à la transition.

Kicked-rotor

Bien que nous n'y reviendrons pas par la suite, il est utile de mentionner un développement parallèle qui a permis des avancées significatives dans l'étude expérimentale de la localisation d'Anderson, à savoir le système appelé *kicked-rotor*. Il s'agit dans ce système d'observer la localisation d'Anderson d'atomes froids dans l'espace des impulsions. L'expérience consiste à appliquer pendant une durée brève à fréquence temporelle fixée un réseau optique sur un

système libre unidimensionnel d'atomes froids. Chaque atome est ainsi soumis régulièrement à une impulsion dépendant de sa position, qui introduit donc un pseudo-désordre. Dans l'espace des impulsions, un tel système est équivalent à un modèle de localisation d'Anderson unidimensionnel d'une particule d'énergie fixée. Ce système ne nécessitant pas de refroidir les atomes à ultra basse température, il a permis dès 1995 d'observer la localisation d'Anderson à 1D [65]. De plus, en rendant l'excitation quasi-périodique, le système réalise cette fois un modèle d'Anderson en dimension trois, ce qui permet une étude précise de la transition d'Anderson, l'énergie du système étant bien définie. En particulier, l'exposant critique associé à la longueur de localisation a pu être mesuré expérimentalement [66, 67] et est en accord avec des calculs numériques [68]. Une des principales limites de ce système est la décohérence associée aux collisions entre atomes, à l'émission spontanée et au fait que le réseau n'est pas exactement horizontal.

1.4 Recherches actuelles et position de notre travail

Soixante ans après la prédiction par Anderson d'une localisation en présence de désordre, et grâce à des développements analytiques, numériques et expérimentaux, la localisation forte est aujourd'hui relativement bien comprise. Les résultats diffèrent selon la dimension du système.

En dimension un, où la localisation est toujours présente quelque soit la force du désordre et l'énergie de l'onde, les résultats analytiques et expérimentaux obtenus avec différents systèmes sont en accord quantitatif. Un seuil de mobilité effective a également pu être observé et caractérisé dans le cas de l'étalement unidimensionnel d'un paquet d'onde d'atomes ultrafroids en présence d'un potentiel de tavelures.

En dimension trois, la localisation à basse énergie (devant l'intensité du désordre) et la diffusion pour une énergie plus grande ont été observées. L'énergie critique de localisation E_c commence à être mesurée dans différents systèmes. L'utilisation de la méthode auto-cohérente permet de comprendre les résultats expérimentaux de manière semi-quantitative, en introduisant un décalage sur l'énergie des états propres qui provient du potentiel désordonné et qui est calculable dans un désordre très faible. Enfin, des calculs numériques permettent une étude plus précise de la localisation.

En dimension deux, la théorie auto-cohérente prédit une localisation avec une longueur de localisation qui croit exponentiellement avec la taille du système. Cela rend l'observation de la localisation d'Anderson à deux dimensions difficile. Cette localisation a pu être observée avec le système du kicked-rotor [69].

Si la localisation d'Anderson est décrite dans le cadre de particules sans interactions, il est essentiel dans le cas des métaux par exemple de prendre en compte les interactions entre électrons dans un régime de localisation d'Anderson. L'effet combiné des interactions et du désordre ouvre ainsi un nouveau champ de physique très intéressant à explorer, comme le faisait remarquer Anderson dans sa conférence Nobel [70]. Cette problématique a motivé de nombreuses études passées et présentes. Les résultats obtenus diffèrent fortement suivant le système considéré, sa dimension, le caractère fermionique ou bosonique des particules, la périodicité éventuelle de l'espace (modèle sur réseau ou continu), le signe des interactions (attractives ou répulsives), leur force, leur forme. En présence d'interaction, la localisation peut ainsi affecter les excitations collectives du système [71, 72]. De nouvelles phases de la matière peuvent également apparaître suivant l'intensité du désordre et des interactions. Prenons l'exemple de bosons en interaction répulsive dans un réseau unidimensionnel [73]. Lorsque les interactions sont nulles, le système est en présence de désordre dans une phase isolante

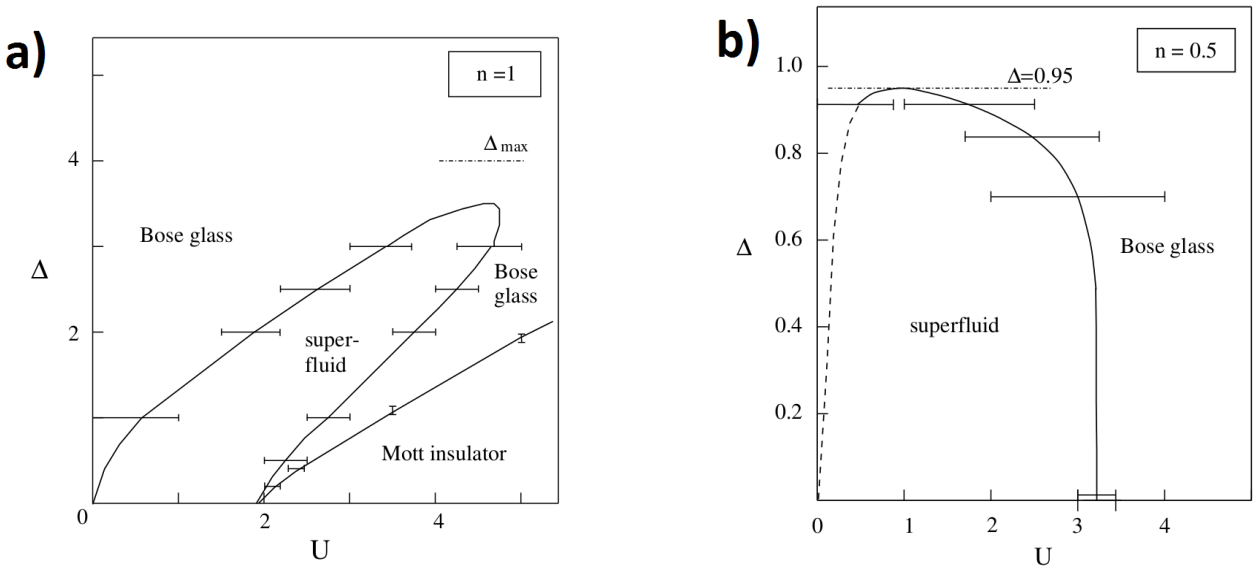


Fig 1.12 – Diagrammes de phase d'un gaz 1D de bosons sur réseau (modèle de Bose-Hubbard), en fonction de l'intensité du désordre sur site Δ, et de l'énergie d'interaction sur site U, obtenus par simulations numériques (DMRG). (a) Remplissage entier du réseau. (b) Remplissage demi-entier. Extrait de la référence [73].

due à la localisation forte, appelée verre de Bose. En l'absence de désordre, une transition entre une phase délocalisée superfluide, et une phase localisée sous l'effet des interactions, appelée isolant de Mott, existe pour un remplissage entier du réseau. Le diagramme de phase lorsqu'on combine le désordre et les interactions est alors représenté sur la figure 1.12 (a). Pour un remplissage demi-entier, l'isolant de Mott n'existe plus (Fig. 1.12 (b)). Un autre exemple illustrant la richesse de cette nouvelle physique est la remise en cause de la loi d'échelle en présence d'interaction, et la modification de la nature de la transition en dimension trois [74]. Enfin, mentionnons l'émergence de la théorie sur la localisation à N-corps, qui pose la question de savoir si un système désordonné en interaction est ergodique, i.e. si partant d'un état initial quelconque il évolue vers un état d'équilibre [75].

Une autre manière de sonder la localisation peut être l'étude de la réponse d'un système désordonné à une force extérieure, au-delà du régime de réponse linéaire. Cette problématique a suscité plusieurs travaux analytiques [76–83] et numériques [1, 78, 79, 81], dont les résultats diffèrent. La possibilité de tester expérimentalement l'effet d'une force dans des systèmes d'atomes ultrafroids à l'aide d'un gradient de champ magnétique tel que celui traditionnellement utilisé pour compenser la force de gravité rend particulièrement intéressante une étude plus approfondie de l'effet d'une force sur la localisation d'Anderson. En particulier, nous avons mentionné précédemment l'importance de la dimension du système sur la localisation, et différentes géométries (1D, quasi-1D, 2D, 3D) sont accessibles expérimentalement. Il est également possible de travailler dans l'espace libre ou sur réseau. Enfin, l'effet des interactions en présence d'une force pourrait être étudié par la suite, dans des modèles plus évolués visant à traiter la présence de désordre, d'une force, et d'interactions entre particules.

Chapitre 2

Ondes en présence d'un désordre blanc et d'une force constante

Dans un métal tridimensionnel, une importante concentration d'impuretés mène au phénomène de localisation d'Anderson, qui se caractérise par une décroissance exponentielle de la conductance du matériau avec sa longueur, sur une longueur de localisation ℓ_{loc} (voir section 1.2). L'échantillon devient ainsi isolant dès que sa longueur est de l'ordre de grandeur de ℓ_{loc}. Ce phénomène est encore plus important en dimension inférieure ou égale à deux, puisqu'il se manifeste alors quelle que soit la concentration d'impuretés. Cette disparition de la conductance signale une annulation de la conductivité, c'est-à-dire que les électrons ne sont pas mis en mouvement lorsqu'on applique un champ électrique faible (dans un régime de réponse linéaire). On peut cependant s'interroger sur la réponse en courant du système lorsqu'un champ électrique plus fort est appliqué, au-delà du régime linéaire. On souhaite ainsi connaître l'effet d'une force finie (i.e. non nulle) sur la localisation d'Anderson : modifie-t-elle la localisation, existe-t-il des transitions de délocalisation ?

En ajoutant une force finie, la théorie de la localisation d'Anderson telle que présentée au chapitre précédent n'est plus valide, car on brise l'invariance par translation spatiale du système. Il est alors nécessaire d'adapter les méthodes d'étude de la localisation existantes à la présence d'un biais, et à l'inhomogénéité spatiale qui en découle.

L'effet d'une force constante sur la localisation d'Anderson en présence d'un désordre blanc a fait l'objet de quelques études analytiques ou numériques en dimension un [1, 2, 77, 78, 81, 82]. Quelques travaux ont également été publiés sur l'effet d'une force en dimension supérieure à un [80, 83], et sur l'effet d'une force en dimension un en présence d'un désordre corrélé [76].

Les résultats publiés sur le cas de la dimension un sont particulièrement intéressants, car ils font apparaître des régimes de localisation plus faibles, et d'éventuelles transitions de délocalisation qui dépendent de l'approche utilisée. Nous présentons ici deux de ces approches qui permettent de traiter deux problèmes différents : la diffusion quantique d'une particule d'une part [2], et la transmission à travers un système fini d'autre part [1], dans le cas le plus simple d'un bruit blanc. Nous verrons qu'elles mènent à des prédictions différentes. Les résultats de ces deux approches formeront la base de notre travail dans la suite du manuscrit : transmission dans les chapitres 3 et 4, probabilité de diffusion au chapitre 5. Nous étudierons ainsi dans les chapitres ultérieurs la transmission par des méthodes analytiques exactes, et nous traiterons les cas d'un désordre corrélé ou d'une force variable. Nous étendrons également l'étude de la diffusion quantique d'une particule à un régime dynamique, et à un désordre corrélé.

2.1 Diffusion quantique d'une particule

Une méthode diagrammatique exacte permet le calcul de la probabilité de diffusion d'une particule en présence d'un potentiel désordonné dans un milieu unidimensionnel homogène (i.e. en l'absence de force), en présence d'un désordre blanc [23], ou corrélé [24, 25], voir 1.2.2. En 1980, V. N. Prigodin a étendu cette méthode au cas où une force constante est présente, pour un désordre blanc [2]. Nous présentons ici ses résultats.

2.1.1 Système

Nous considérons une particule quantique de masse m et d'énergie E dans un guide unidimensionnel, située en $x' = 0$ à l'instant initial $t' = 0$ (voir la note de bas de page numéro 6 page 18). Nous souhaitons calculer la probabilité de diffusion en un point x à temps infini de cette particule en présence d'une force extérieure constante $\mathbf{F} = F\mathbf{u_x}$, $F \geqslant 0$, et d'un potentiel désordonné $V(x)$. Le hamiltonien du système est ainsi donné par

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + V(\hat{x}) - F\hat{x}, \tag{2.1}$$

où $\hat{x}$ et $\hat{p}$ sont les opérateurs conjugués position et impulsion. L'état de la particule à l'instant t, $|\psi(t)\rangle$, est solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t |\psi(t)\rangle = \hat{H} |\psi(t)\rangle . \tag{2.2}$$

Le potentiel désordonné est supposé de moyenne nulle, $\overline{V(x)} = 0$, où la barre au-dessus du texte correspond à la moyenne sur l'ensemble des réalisations du désordre. On considère de plus un potentiel gaussien [8]. Un tel potentiel est uniquement caractérisé par sa fonction de corrélation à deux points $\overline{V(x_1)V(x_2)}$. Les fonctions de corrélations d'ordres supérieurs peuvent quant à elles être évaluées à l'aide du théorème de Wick :

$$\overline{V(x_1)V(x_2)\dots V(x_n)} = 0 \qquad \text{si } n \text{ est impair} \tag{2.3}$$

$$= \sum_{\text{appariements}} \overline{V(x_{i_1})V(x_{i_2})} \times \cdots \times \overline{V(x_{i_{n-1}})V(x_{i_n})} \qquad \text{si } n \text{ est pair.} \tag{2.4}$$

Enfin, on suppose le désordre homogène. La fonction de corrélation à deux points $C_2(x_1 - x_2) = \overline{V(x_1)V(x_2)}$ ne dépend alors que de l'écart entre les deux points considérés.

On considérera un désordre blanc, i.e.

$$C_2(x) = U_{\text{R}}\delta(x), \tag{2.5}$$

où U_{R} caractérise l'intensité du désordre.

2.1.2 Résumé de la méthode diagrammatique

Expression de la probabilité de diffusion en terme de fonctions de Green

On souhaite calculer la probabilité que la particule soit en x à l'instant t, égale à $p(x,t|E) = \overline{|\langle x|\psi(t)\rangle|^2}$. Or la fonction de partition de l'état pur initial peut être approximée de manière semi-classique par le produit d'une distribution de Dirac en position, $\delta(\hat{x}) = |0\rangle\langle 0|$, et d'une distribution de Dirac en énergie, $\delta(E-\hat{H}) = |E\rangle\langle E|$, sous la forme $|\psi_0\rangle\langle\psi_0| \simeq \delta(\hat{x})\delta(E-\hat{H})/\mathcal{N}$,

où $\mathcal{N}$ est une constante de normalisation. La distribution de Dirac en énergie peut être exprimée en termes de fonctions de Green :

$$\delta(E-\hat{H}) = \frac{\mathrm{Im}\, G^A(E)}{\pi} = \frac{G^A(E)-G^R(E)}{2i\pi}. \tag{2.6}$$

On en déduit la valeur de la constante de normalisation

$$\mathcal{N} = \int \mathrm{d}x\, \overline{\langle x|\delta(\hat{x})\delta(E-\hat{H})|x\rangle} \tag{2.7}$$

$$= \int \mathrm{d}x\, \langle x|0\rangle\langle 0|\frac{\mathrm{Im}\,\overline{G^A(E)}}{\pi}|x\rangle \tag{2.8}$$

$$= \frac{\mathrm{Im}\,\overline{G^A(0,0|E)}}{\pi}. \tag{2.9}$$

En utilisant la relation $|\psi(t)\rangle = \hat{U}(t)\,|\psi_0\rangle$ où $\hat{U}(t) = \mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}$ désigne l'opérateur d'évolution (voir section 1.1.2), et la relation de transformée de Fourier entre $\hat{U}(t)$ et $G^R(E)$ [cf. Éq. (1.7)], on obtient

$$p(x,t|E) = \overline{\langle x|\hat{U}(t)|\psi_0\rangle\langle\psi_0|\hat{U}^\dagger(t)|x\rangle} \tag{2.10}$$

$$= \frac{i}{\mathcal{N}}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}E'}{2\pi}\overline{\langle x|G^R(E')|0\rangle\,\mathrm{e}^{-iE't/\hbar}\,\langle 0|\delta(E-\hat{H})\,\mathrm{e}^{i\hat{H}t/\hbar}\,|x\rangle} \tag{2.11}$$

$$= \frac{\hbar}{2}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\,\mathrm{e}^{-i\omega t}\,\frac{\overline{G^R(x,0|E+\hbar\omega)(G^A(0,x|E)-G^R(0,x|E))}}{\mathrm{Im}\,\overline{G^A(0,0|E)}}. \tag{2.12}$$

Le terme G^RG^R de l'Éq. (2.12) peut être négligé devant le terme croisé G^AG^R qui est résonant [2], conduisant à l'expression suivante de la transformée de Fourier temporelle de la probabilité de diffusion

$$\hat{p}(x,\omega|E) \simeq \frac{\hbar}{2}\frac{\overline{G^A(0,x|E)G^R(x,0|E+\hbar\omega)}}{\mathrm{Im}\,\overline{G^A(0,0|E)}}. \tag{2.13}$$

On a donc besoin pour connaître la probabilité de diffusion de calculer le produit de deux fonctions de Green :

$$\Gamma(x,0|E,\omega) = \overline{G^A(0,x|E)G^R(x,0|E+\hbar\omega)}. \tag{2.14}$$

Nous présentons ci-dessous les différentes étapes de calcul de cette quantité à l'aide d'une approche diagrammatique, afin de mettre en évidence les grandeurs physiques qui apparaissent, et les approximations nécessaires pour pouvoir résoudre le système d'équations différentielles obtenu.

Particule libre en présence d'une force constante

Nous commençons par présenter quelques propriétés du système en l'absence de désordre (particule libre). En présence d'une force constante, le hamiltonien libre à une particule est égal à [cf. Éq. (2.1) avec $V=0$]

$$\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - F\hat{x}. \tag{2.15}$$

Considérons un état propre $|\phi_E\rangle$ d'énergie E. Il est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire, qui s'exprime dans l'espace des impulsions sous la forme

$$\frac{p^2}{2m}\phi_E(p) - Fi\hbar\partial_p\phi_E(p) = E\phi_E(p). \tag{2.16}$$

La solution de cette équation différentielle se calcule de manière exacte

$$\phi_E(p) = \frac{1}{\sqrt{F\hbar}}\, \mathrm{e}^{\frac{i}{F\hbar}\left(Ep - \frac{p^3}{6m}\right)}. \tag{2.17}$$

La constante de normalisation provient du choix de conventions suivant :

$$|p\rangle = \frac{1}{\sqrt{\hbar}} \int \mathrm{d}x\ \mathrm{e}^{ipx/\hbar}\, |x\rangle, \tag{2.18}$$

$$\int \mathrm{d}E\ |\phi_E\rangle\langle\phi_E| = \mathbb{1}, \tag{2.19}$$

et s'obtient facilement en insérant la relation de fermeture (2.19) dans le membre de gauche de l'égalité $\langle p|p'\rangle = 2\pi\delta(p-p')$.

On en déduit une expression exacte des fonctions de Green libres [voir Éq. (1.7)] [2]

$$\langle p|G_0^{R/A}(E)|p'\rangle = \int \mathrm{d}E'\ \frac{\phi_{E'}(p)\phi^*_{E'}(p')}{E - E' \pm i0^+} \tag{2.20}$$

$$= \mp\frac{2i\pi}{F\hbar}\, \mathrm{e}^{\frac{i}{F\hbar}\left[E(p-p') - \frac{p^3-p'^3}{6m}\right]}\, \Theta[\pm(p-p')], \tag{2.21}$$

où Θ désigne la fonction d'Heaviside. Contrairement au cas sans force (1.9), cette fonction est non nulle pour $p \neq p'$, ce qui exprime le fait que les états d'impulsions p ne sont pas des états propres du système.

Cette non-conservation de l'impulsion implique également que l'énergie cinétique moyenne de la particule d'énergie E, $\langle\phi_E|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\phi_E\rangle$, n'est pas conservée. Elle dépend de la position moyenne de la particule $\langle\phi_E|\hat{x}|\phi_E\rangle$, suivant la relation $\langle\phi_E|\frac{\hat{p}^2}{2m}|\phi_E\rangle = E + F\langle\phi_E|\hat{x}|\phi_E\rangle$. Nous introduisons alors la fonction

$$K(x) = E + Fx, \tag{2.22}$$

qui correspond à l'énergie cinétique classique de la particule à la position x, et que nous désignerons sous le terme d'*énergie cinétique locale* de la particule. Cette énergie cinétique classique étant toujours positive, la particule classique rencontre vers la gauche un point de rebroussement classique qu'elle ne peut pas dépasser, correspondant à la position x_c telle $K(x_c) = 0$ (voir Fig. 2.1). On a ainsi

$$x_c = -\frac{E}{F}. \tag{2.23}$$

Dans le cas d'une particule quantique, l'amplitude de la fonction d'onde décroît exponentiellement à gauche du point de rebroussement classique x_c, et nous considérerons donc uniquement dans la suite des abscisses x correspondant à la région classiquement accessible $x > x_c$. En particulier, nous supposerons que la probabilité de diffusion $p(x,t|E)$ est nulle pour $x < x_c$.

Afin de simplifier les notations ultérieures, on verra qu'il est utile d'introduire un vecteur d'onde local $k(x)$, une vitesse locale $v(x)$ et une longueur d'onde locale $\lambda(x)$ associés à l'énergie cinétique locale $K(x)$, définis par

$$k(x) = \frac{\sqrt{2m}}{\hbar}\sqrt{E + Fx}, \tag{2.24}$$

$$v(x) = \sqrt{\frac{2}{m}}\sqrt{E + Fx}, \tag{2.25}$$

$$\lambda(x) = \frac{2\pi}{k(x)}. \tag{2.26}$$

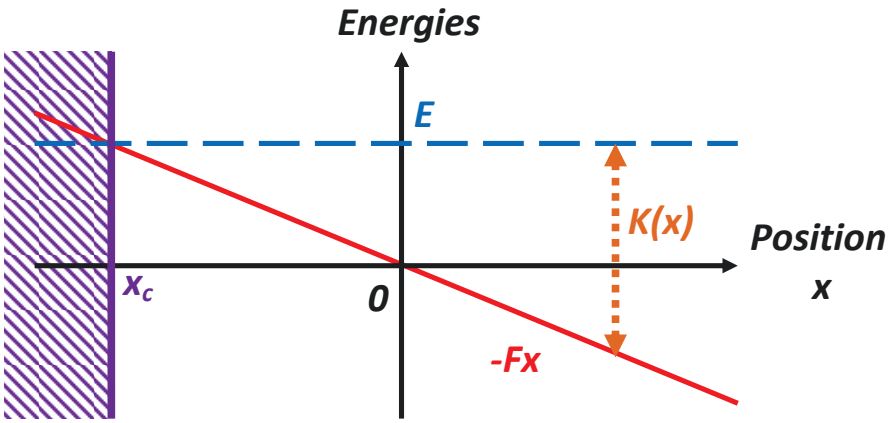


Fig 2.1 – Énergies mécanique E, potentielle $-Fx$ et cinétique $K(x)$ de la particule classique d'énergie E en présence d'une force F en fonction de sa position x. Le point de rebroussement classique x_c vérifie $K(x_c) = 0$. La zone à gauche du point de rebroussement classique est une zone interdite.

De plus, la fonction de Green retardée étant prise à l'énergie $E+\hbar\omega$ dans l'expression (2.14), nous définissons une deuxième énergie cinétique locale $\tilde{K}(x) = E+\hbar\omega+Fx$, à laquelle nous associons les grandeurs $\tilde{k}(x)$, $\tilde{v}(x)$ et $\tilde{\lambda}(x)$ en remplaçant $K(x)$ par $\tilde{K}(x)$ dans les équations (2.24), (2.25) et (2.26).

Dans l'espace réel, les fonctions de Green libres s'obtiennent en injectant (2.21) dans

$$G_0^{R/A}(x,x'|E) = \iint \frac{\mathrm{d}p}{2\pi}\frac{\mathrm{d}p'}{2\pi}\langle x|p\rangle\langle p'|x'\rangle\langle p|G_0^{R/A}(E)|p'\rangle\,. \tag{2.27}$$

Elles peuvent être calculées dans le régime où le vecteur d'onde local $k(x)$ varie peu à l'échelle de la longueur d'onde $\lambda(x)$,

$$\lambda(x)\partial_x k(x) \ll k(x). \tag{2.28}$$

Sachant que [cf. Éq. (2.24)]

$$\partial_x k(x) = \frac{mF}{\hbar^2 k(x)}, \tag{2.29}$$

la condition (2.28) correspond à

$$\frac{\hbar^2 k^3(x)}{Fm} \gg 1. \tag{2.30}$$

Cette hypothèse peut également être interprétée semi-classiquement par le fait que le travail de la force sur un déplacement de la particule égal à la longueur d'onde locale est négligeable devant l'énergie cinétique locale de la particule. Elle est par ailleurs toujours vérifiée suffisamment loin à droite du point de rebroussement classique, puisque $k(x)$ est une fonction croissante non bornée de x. On obtient [2, 80]

$$G_0^{R/A}(x,x'|E) \simeq \mp\frac{i}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{v(x)v(x')}}\left[\mathrm{e}^{\pm\frac{i\hbar^2}{3Fm}\left|k^3(x)-k^3(x')\right|} \mp i\,\mathrm{e}^{\pm\frac{i\hbar^2}{3Fm}\left|k^3(x)+k^3(x')\right|}\right]. \tag{2.31}$$

On notera que le terme de phase $\mathrm{e}^{\frac{i\hbar^2k^3(x)}{3Fm}}$ peut être assimilé à une onde plane locale, de vecteur d'onde $k(x)$, car [cf. Éq. (2.29)]

$$\frac{\hbar}{i}\partial_x\left[\mathrm{e}^{\frac{i\hbar^2k^3(x)}{3Fm}}\right] = \hbar k(x)\,\mathrm{e}^{\frac{i\hbar^2k^3(x)}{3Fm}}\,. \tag{2.32}$$

La première étape de l'approche diagrammatique consiste à représenter les fonctions de Green libres (2.31) en termes de diagrammes. On reprend pour cela la convention introduite par Berezinskii [23], qui consiste lorsque deux positions x_1 et x_2 sont reliées par une ligne à fixer la convention que l'abscisse la plus grande entre les deux correspond au point le plus à droite. Cette convention n'est pas triviale car nous verrons que deux points x_1 et x_2 qui apparaissent dans l'approche diagrammatique font intervenir dans l'expression mathématique associée au diagramme des intégrales de type $\int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_2 f(\dots)$ [cf. Éq. (1.18)]. En utilisant

$$1 = \Theta(x_1 - x_2) + \Theta(x_2 - x_1), \tag{2.33}$$

l'intégrale sur les positions x_1 et x_2 se décompose en deux termes :

$$\int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_2 \, f(\dots) = \int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_2 \, f(\dots)\Theta(x_2 - x_1) + \int \mathrm{d}x_1 \int \mathrm{d}x_2 \, f(\dots)\Theta(x_1 - x_2). \tag{2.34}$$

Si les points x_1 et x_2 sont liés par une ligne, on représente les deux termes de (2.34) par deux diagrammes différents. Le premier terme correspond au cas $x_2 > x_1$ et est représenté par un diagramme dans lequel x_2 est à droite de x_1. Le second correspond à l'inverse à $x_1 > x_2$ et est représenté par un diagramme où x_1 est à droite de x_2. Notons de plus que cette convention n'est pas utilisée dans les approches diagrammatiques perturbatives usuelles (où l'on introduit un diffuson et un cooperon, voir Chap. 1) : dans ces méthodes, on intègre sur toutes les positions des points x_i sans se préoccuper de leurs positions relatives.

Cette convention étant fixée, on peut attribuer deux valeurs différentes à un point x à partir duquel une ligne part vers la gauche, ou vers la droite. On introduit ainsi les diagrammes élémentaires représentés sur la figure 2.2, dont l'assemblement permettra de construire les fonctions de Green libres.

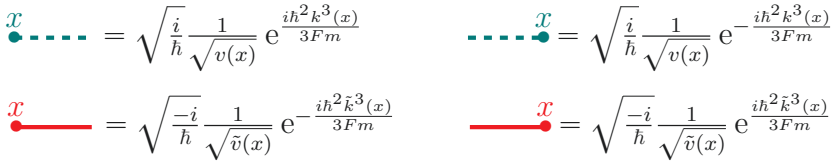


Fig 2.2 – Diagrammes élémentaires associés aux fonctions de Green libres. Les diagrammes en tirets bleus sont associés à la fonction de Green avancée, et ceux en traits pleins rouges à la fonction de Green retardée.

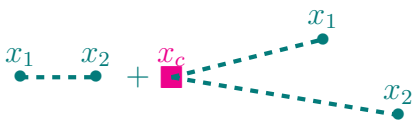
On les complète par les diagrammes de la figure 2.3 au point de rebroussement classique x_c.



Fig 2.3 – Diagrammes élémentaires au point de rebroussement classique x_c, associés aux fonctions de Green libres avancée (tirets bleus) ou retardée (trait plein rouge).

Pour tout couple $\{x_1, x_2\}$ tel que $x_c \leqslant x_1 \leqslant x_2$, les fonctions de Green libres peuvent alors être représentées sous la forme diagrammatique donnée dans la figure 2.4 d'après l'équation (2.31). Le premier terme de la somme dans la figure 2.4 correspond à une propagation directe du point x_1 au point x_2 (ou bien l'inverse), tandis que le second correspond à une propagation du point x_1 au point de réflexion classique x_c, suivie d'une réflexion puis d'une propagation directe du point x_c au point x_2 (ou le même processus en inversant x_1 et x_2). On remarque que la convention utilisée sur les positions relatives de deux points reliés par une ligne a permis de s'affranchir des valeurs absolues de l'expression (2.31) (si on représente x_1 à gauche de x_2 par exemple, on a $|k(x_1) - k(x_2)| = k(x_2) - k(x_1)$).

$$G_0^A(x_1,x_2|E) = G_0^A(x_2,x_1|E) =$$



$$G_0^R(x_1,x_2|E+\hbar\omega) = G_0^R(x_2,x_1|E+\hbar\omega) =$$

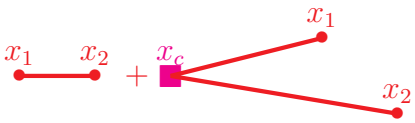


Fig 2.4 – Représentation diagrammatique des fonctions de Green libres avancée et retardée. Chaque fonction de Green est la somme d'un terme de propagation direct et d'un terme contenant une réflexion sur le point de rebroussement classique x_c.

Mise en diagramme en présence de désordre

On ajoute à présent le potentiel désordonné V. Les fonctions de Green en présence du potentiel désordonné V peuvent être développées, cf. Éq. (1.18). On a par exemple

$$G^A(0,x) = G_0^A(0,x) + \int \mathrm{d}x_1\; G_0^A(0,x_1)V(x_1)G_0^A(x_1,x) + \iint \mathrm{d}x_1\,\mathrm{d}x_2\; G_0^A(0,x_1)V(x_1)G_0^A(x_1,x_2)V(x_2)G_0^A(x_2,x) + \dots \tag{2.35}$$

Le premier terme correspond à une propagation du point $x' = 0$ au point x sans rencontrer le potentiel désordonné, le second à une rencontre du potentiel désordonné en chemin, …, le $(N+1)$-ème à N rencontres du potentiel désordonné.

La quantité que l'on souhaite calculer, $\Gamma(x,0|E,\omega) = \overline{G^A(0,x|E)G^R(x,0|E+\hbar\omega)}$, est donc une somme de termes de la forme

$$\Gamma^{N,N'} = \int\cdots\int \mathrm{d}x_1\dots\mathrm{d}x_N\,\mathrm{d}x'_1\dots\mathrm{d}x'_N G_0^A(0,x_1)\dots G_0^A(x_N,x)G_0^R(x,x'_1)\dots G_0^R(x'_{N'},0) \times \overline{V(x_1)\dots V(x_N)V(x'_1)\dots V(x'_{N'})}. \tag{2.36}$$

L'intégrande de $\Gamma^{N,N'}$ est le produit des sommes suivantes :

1. Chaque terme $G_0^{R/A}$ est la somme d'un terme de propagation direct et d'un terme de propagation via une réflexion sur le point de rebroussement classique (voir Fig. 2.4).
2. Pour chaque paire $\{x_i, x_{i+1}\}$ (ou $\{x'_i, x'_{i+1}\}$) on peut injecter dans l'intégrale (2.36) $1 = [\Theta(x_i - x_{i+1}) + \Theta(x_{i+1} - x_i)]$, ce qui fait apparaître une nouvelle somme.
3. En utilisant le théorème de Wick [Éq. (2.4)], la moyenne du produit des V est la somme sur tous les appariements possibles du produit des moyennes des paires $\overline{V_{x_i}V_{x_j}}$, $\overline{V_{x'_i}V_{x_j}}$ et $\overline{V_{x'_i}V_{x'_j}}$.

En développant le produit de toutes ces sommes, on décompose donc $\Gamma^{N,N'}$ en une somme de termes. Chacun de ces termes est représenté par un diagramme différent. Un exemple de tel diagramme est donné sur la figure 2.5.

Ces diagrammes se composent de deux lignes continues provenant des fonctions de Green retardée (traits pleins rouges) et avancée (traits pointillés bleus). La ligne de la fonction de Green avancée est parcourue de $x' = 0$ à x, et rencontre successivement le potentiel désordonné $V(x)$ en $x = x_1, x_2, \cdots, x_N$, $N \in \mathbb{N}$. La ligne de la fonction de Green retardée est parcourue de x à $x' = 0$, et rencontre successivement le potentiel désordonné $V(x)$ en $x = x'_1, x'_2, \cdots, x'_{N'}$, $N' \in \mathbb{N}$. Chaque point x_i indique une intégrale sur tout l'espace classiquement accessible $\int_{x_c}^{\infty} \mathrm{d}x_i$

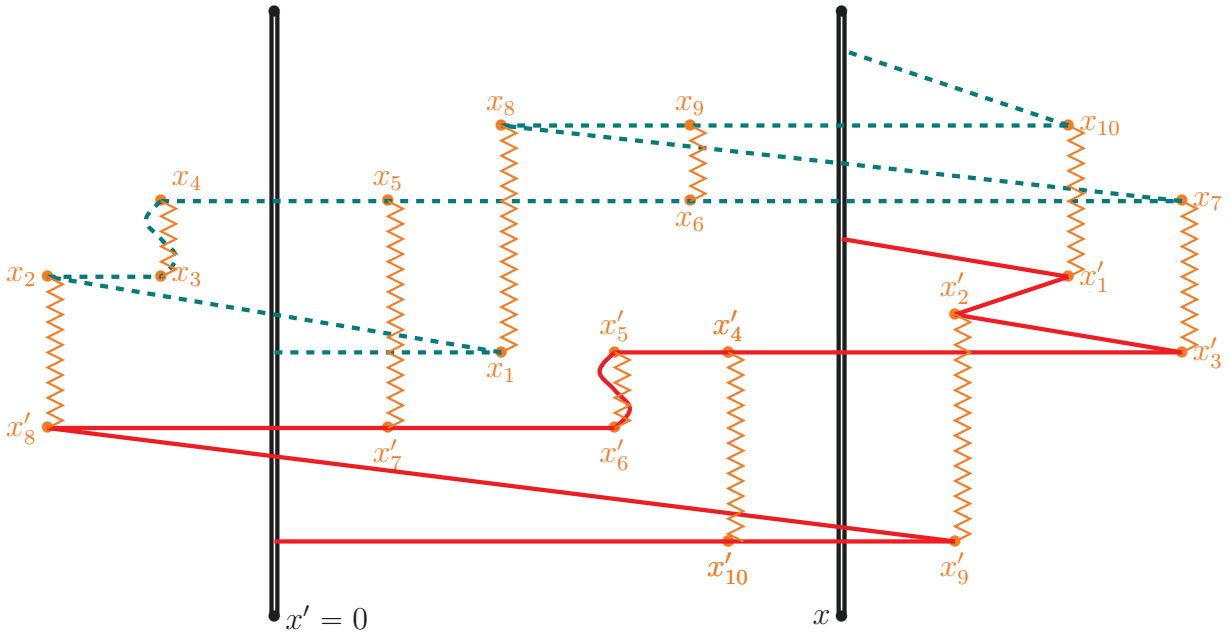


Fig 2.5 – Exemple de diagramme. Tous les diagrammes ont une forme de ce type, avec éventuellement en plus des vertex de réflexion sur le point de rebroussement classique x_c. Ce diagramme contient tous les vertex d'interaction importants. On constate que le nombre de lignes retardées est égal au nombre de lignes avancées pour toute abscisse.

et la présence du terme $V(x_i)$ (et de même en remplaçant x_i par x'_i). Des contraintes entre les positions relatives des x_i successifs (ou x'_j) sont de plus fixées : si x_i est à gauche de x_{i+1} sur le diagramme, on intègre avec la contrainte $x_i < x_{i+1}$, et réciproquement. Les moyennes $\overline{V(X_i)V(X_j)}$, où $X_i \in \{x_i, x'_i\}$ et $X_j \in \{x_j, x'_j\}$ sont symbolisées par la ligne en zigzag orange. Cette représentation diagrammatique autorise à relier deux positions $x_i \neq x_j$ par une ligne en zigzag, et ne suppose donc pas a priori un désordre blanc (2.5). En revanche, on interdira par la suite les croisements entre lignes en zigzag. Sachant que d'une part pour un désordre corrélé sur une longueur σ_{R}, l'écart relatif entre deux points X_i et X_j doit être typiquement inférieur à σ_{R} pour que $\overline{V(X_i)V(X_j)}$ soit non négligeable, et d'autre part l'espacement typique entre deux points de rencontre du désordre successifs est de l'ordre du libre parcours moyen ℓ_-, interdire les croisements de lignes en zigzag correspond à imposer

$$\sigma_{\mathrm{R}} \ll \ell_-. \tag{2.37}$$

En utilisant les diagrammes élémentaires des figures 2.2 et 2.3, on remarque que la valeur d'un diagramme s'obtient en multipliant les valeurs des trois types de vertex qui apparaissent dans ce diagramme, et qui sont énumérés ci-dessous :

1. des vertex de fermeture aux points $x' = 0$ et x, voir Fig. 2.9,
2. des vertex de réflexion au point de rebroussement classique,
3. des vertex d'interaction avec le potentiel désordonné, voir Fig. 2.7 et annexe C.

Chaque vertex d'interaction contribue à la valeur du diagramme par un terme du type

$$\iint \mathrm{d}X_i \, \mathrm{d}X_j \overline{V(X_i) V(X_j)} f(X_i, X_j), \tag{2.38}$$

où $f(X_i, X_j)$ est une fonction qui dépend du vertex considéré, et provient des diagrammes élémentaires (Fig 2.2). On effectue un changement de variables, en définissant la position

moyenne du vertex d'interaction $x = \frac{X_i+X_j}{2}$, et la position relative des deux points reliés, $y = X_i - X_j$, de sorte que le vertex (2.38) peut de réécrire sous la forme

$$\int \mathrm{d}x\, \mathcal{V}(x), \tag{2.39}$$

avec

$$\mathcal{V}(x) = \int \mathrm{d}y\; C_2(y) f(x+y/2, x-y/2), \tag{2.40}$$

où $C_2(y) = \overline{V(x)V(x+y)}$ est la fonction de corrélation à deux points du potentiel désordonné. On appellera valeur du vertex d'interaction la quantité $\mathcal{V}(x)$.

Il reste à calculer les valeurs des différents vertex. Étant intéressés par le régime de temps infini, i.e. $\omega \to 0$, on effectue l'hypothèse suivante

$$\hbar\omega \ll E + Fx, \tag{2.41}$$

qui permet d'approximer $\tilde{v}(x)$ par $v(x)$ dans l'expression des membres élémentaires associés à la fonction de Green retardée (Fig. 2.2), ce qui donne ainsi le résultat de la figure 2.6 où on a introduit

$$\omega\Delta(x) = \frac{\hbar^2 k^3(x)}{3Fm}\left[\left(1+\frac{\hbar\omega}{E+Fx}\right)^{3/2} - 1\right]. \tag{2.42}$$



Fig 2.6 – Diagrammes élémentaires associés à la fonction de Green retardée, dans le régime $\omega \to 0$.

En effectuant un développement limité en $\hbar\omega/K(x)$, où $K(x) = E+Fx$ (2.22), et en utilisant la relation (2.24), on a

$$\omega\Delta(x) = \frac{\omega\hbar k(x)}{F} + O\left(\frac{\omega^2 m}{Fk(x)}\right). \tag{2.43}$$

Si l'on effectue l'hypothèse supplémentaire que

$$\frac{\omega^2 m}{Fk(x)} \ll 1, \tag{2.44}$$

valide pour $\omega \to 0$, on peut conserver uniquement le premier terme du développement limité de $\omega\Delta(x)$ dans la phase de l'exponentielle complexe qui apparaît dans la Fig. 2.6. On a ainsi

$$\Delta(x) \simeq \frac{\hbar k(x)}{F}. \tag{2.45}$$

On peut alors calculer tous les vertex d'interaction. Ces vertex contiennent quatre diagrammes élémentaires (voir Fig. 2.2 pour les diagrammes élémentaires associés à la fonction de Green avancée, et Fig. 2.6 pour ceux associés à la fonction de Green retardée). Certains vertex que l'on obtient comportent une phase qui oscille rapidement, proportionnelle à $\hbar^2k^3(x)/3Fm$: ils sont non-résonants et peuvent être négligés. Les vertex restants ont soit une phase nulle, soit une phase en $\omega\Delta(x)$, et n'oscillent donc pas dans la limite $\omega \to 0$: ils sont résonants. Les valeurs de tous les vertex résonants sont données dans l'annexe C, et ces vertex apparaissent tous sur la figure 2.5. On remarque que les vertex résonants conservent la différence entre le nombre de lignes retardées et avancées lorsqu'on les traverse. Cela conduit à ce que le nombre de lignes



Fig 2.7 – Exemple de vertex d'interaction résonant.

retardées qui traversent un point x' quelconque soit toujours égal au nombre de lignes avancées qui traversent ce même point, comme on peut le voir sur le diagramme 2.5. Un exemple de vertex d'interaction résonant est donné sur la figure 2.7.

La longueur $\ell_-(x)$ qui apparaît dans la Fig. 2.7 vérifie

$$\frac{1}{\ell_-(x)} = \frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y \frac{C_2(y)}{v(x+y/2)v(x-y/2)}\, \mathrm{e}^{\frac{2i\hbar^2}{3Fm}\left[k^3(x+y/2)-k^3(x-y/2)\right]}. \tag{2.46}$$

La fonction de corrélation $C_2(y)$ est maximale en $y = 0$ et décroît sur la longueur de corrélation σ_{R}. En utilisant le développement limité de $k(x)$ au voisinage de x,

$$k(x+\varepsilon) \underset{\varepsilon\to 0}{=} k(x)\left[1 + \frac{F}{2K(x)}\varepsilon + O\left(\frac{F^2}{K^2(x)}\varepsilon^2\right)\right], \tag{2.47}$$

et sachant que $v(x)$ est proportionnel à $k(x)$, on peut remplacer $v(x \pm y/2)$ par $v(x)$ dans l'équation (2.46) sous l'hypothèse que le travail de la force sur la longueur de corrélation du désordre est négligeable devant l'énergie cinétique locale de la particule,

$$\sigma_{\mathrm{R}} F \ll K(x). \tag{2.48}$$

On déduit de (2.47) le développement suivant du terme de phase de (2.46) :

$$\frac{2\hbar^2}{3Fm}\left[k^3(x+y/2) - k^3(x-y/2)\right] = 2k(x)y + O\left(\frac{mF}{\hbar^2 k(x)}y^2\right). \tag{2.49}$$

Sous l'hypothèse

$$\frac{mF\sigma_{\mathrm{R}}^2}{\hbar^2 k(x)} \ll 1, \tag{2.50}$$

on peut donc conserver uniquement le premier terme $2k(x)y$ dans la phase de l'exponentielle complexe. Lorsque les deux hypothèses (2.48) et (2.50) sont vérifiées, ce qui est toujours le cas pour x suffisamment grand, l'expression (2.46) se simplifie en

$$\frac{1}{\ell_-(x)} \simeq \frac{1}{\hbar^2 v^2(x)}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, C_2(y)\, \mathrm{e}^{2ik(x)y} = \frac{\tilde{C}_2[2k(x)]m}{2\hbar^2 K(x)}. \tag{2.51}$$

On reconnaît pour $\ell_-(x)$ l'expression du libre parcours moyen d'une particule d'énergie $K(x)$ en l'absence de force, voir Éq. (1.38). La longueur $\ell_-(x)$ correspond ainsi à un *libre parcours moyen local* de la particule, qui dépend de son *énergie cinétique locale* $K(x)$.

Combinatoire sur les diagrammes

Les diagrammes définis sont similaires à ceux introduits par Berezinskii [23] en l'absence de force, et diffèrent simplement par la valeur associée aux différents vertex. La méthode de sommation des diagrammes que l'on va utiliser est donc identique au cas sans force.

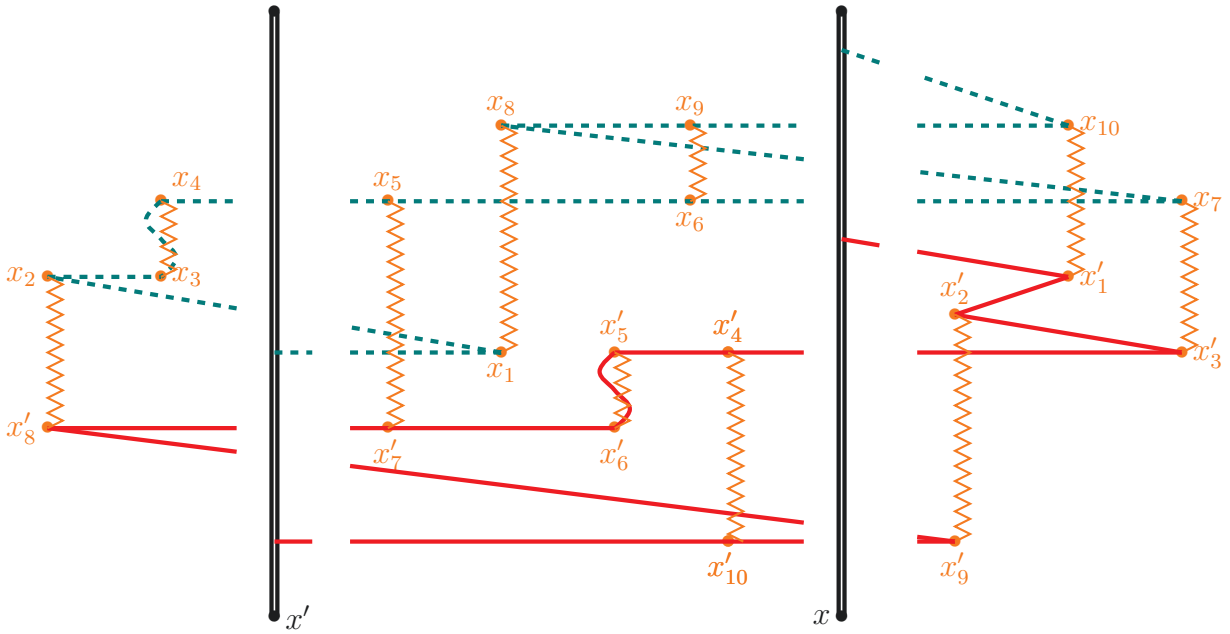


Fig 2.8 – Exemple de diagramme, séparé en trois sous-diagrammes et deux vertex de fermeture. Les trois sous-diagrammes sont respectivement situés à gauche de la première ligne x', entre les lignes x' et x, et à droite de la ligne x. Le sous-diagramme de gauche comporte ici deux pattes externes (i.e. deux lignes avancées et deux lignes retardées à gauche de la ligne x'), celui de droite quatre pattes externes (i.e. quatre lignes avancées et quatre lignes retardées à droite de la ligne x), et celui du milieu comporte trois pattes externes à gauche (i.e. trois lignes avancées et trois lignes retardées à droite de la ligne $x' = 0$) et trois pattes externes à droite (i.e. trois lignes avancées et trois lignes retardées à gauche de la ligne x). Les vertex de fermeture sont ici $\mathcal{F}_d(x')$ et $\mathcal{F}_d(x)$ (cf. Fig. 2.9).

On supposera dans la suite $x > x'$. La première étape du traitement diagrammatique consiste à séparer chaque diagramme $\mathcal{D}$ en trois sous-diagrammes : le premier sous-diagramme, correspond à la partie de $\mathcal{D}$ située à gauche du point x', le second à la partie de $\mathcal{D}$ située entre le point x' et le point x, et le dernier à la partie de $\mathcal{D}$ située à droite du point x. Le diagramme $\mathcal{D}$ est constitué de ces trois sous-diagrammes, et de deux vertex de fermeture sur les lignes $x' = 0$ et x, comme on peut le voir qur la figure 2.8. Les vertex de fermeture peuvent être de deux types, $\mathcal{F}_g$ et $\mathcal{F}_d$, représentés sur la figure 2.9.



Fig 2.9 – Vertex de fermeture au point $X \in \{0, x\}$.

On note $\mathcal{D}_L$ l'ensemble de tous les sous-diagrammes situés à gauche du point x' possibles, $\mathcal{D}_Z$ l'ensemble de tous les sous-diagrammes situés entre les points x' et x possibles, et $\mathcal{D}_R$ l'ensemble de tous les sous-diagrammes situés à droite du point x possibles. On définit de plus les pattes externes d'un sous-diagramme comme le nombre de lignes retardées (égal au nombre de lignes avancées) qui sont ouvertes à l'extrémité de ce sous-diagramme (cf. Fig. 2.8).

Pour qu'un diagramme de $\mathcal{D}_L$ (resp. $\mathcal{D}_R$) et un diagramme de $\mathcal{D}_Z$ puissent être connectés, il faut que le nombre de pattes externes du diagramme de gauche (resp. droite) soit compatible avec le nombre de pattes externes de gauche (resp. droite) du diagramme central, et avec le vertex de fermeture présent sur la ligne x' (resp. x).

En considérant la forme générale de tous les diagrammes possibles, on constate que le sous-diagramme de gauche (resp. droite) présente toujours un nombre pair $2n'$ (resp. $2n$) de pattes externes, tandis que celui du milieu présente un nombre impair $2m' + 1$ de pattes externes à gauche et un nombre impair $2m + 1$ de pattes externes à droite. On définit la somme de tous les sous-diagrammes de $\mathcal{D}_L$ [resp. $\mathcal{D}_R$] comportant $2n'$ (resp. $2n$) pattes externes, que l'on note $L_{n'}(x')$ [resp. $R_n(x)$], et la somme de tous les sous-diagrammes entre x' et x comprenant $2m'+1$ pattes externes à gauche et $2m+1$ pattes externes à droite, que l'on note $Z_{m',m}(x', x)$. On rappelle que la somme totale de tous les diagrammes possibles correspond au terme Γ (2.14) que l'on veut calculer. Ce dernier se décompose donc en une somme sur toutes les valeurs possibles de n, n', m et m' du produit $L_{n'}(x')Z_{m',m}(x', x)R_n(x)$ multiplié par les vertex de fermeture qui sont compatibles. Cela conduit à l'expression

$$\Gamma(x, 0|E, \omega) = \sum_{n',n} \left[\mathcal{F}_g(0)L_{n'+1}(0) + \mathcal{F}_d(0)L_{n'}(0)\right] Z_{n',n}(0, x) \left[\mathcal{F}_d(x)R_{n+1}(x) + \mathcal{F}_g(x)R_n(x)\right]. \tag{2.52}$$

On peut établir des équations différentielles sur les sommes de sous-diagrammes $L_{n'}(x')$, $R_n(x)$ et $Z_{m',m}(x', x)$ par des considérations diagrammatiques [2]. Nous présentons le raisonnement que l'on doit suivre pour la somme des sous-diagrammes centraux, le même type de raisonnement pouvant être appliqué aux sous-diagrammes latéraux. On fixe m' et x' à des valeurs quelconques, et on introduit la notation simplifiée $Z_m(x) = Z_{m',m}(x', x)$ qui désigne la somme de tous les sous-diagrammes situés entre x' et possédant $2m' + 1$ pattes externes à gauche et $2m + 1$ pattes externes à droite.

Soit un sous-diagramme central $d_z(x, m)$ entre les points x' et x possédant $2m + 1$ pattes externes en x. Notons X la position du premier vertex d'interaction de $d_z(x, m)$ situé à gauche du point x, et $\mathcal{V}(x)$ sa valeur. La nature du vertex $\mathcal{V}$ (voir annexe C) permet de connaître le nombre $2m_{\mathcal{V}} + 1$ de pattes externes en X du sous-diagramme situé entre x' et X. On en déduit que la somme de tous les sous-diagrammes centraux est la somme sur toutes les valeurs et positions possibles du diagramme $\mathcal{V}$ de la valeur de $\mathcal{V}$ multipliée par la somme de tous les

sous-diagrammes centraux situés entre x' et X qui possèdent $2m'+1$ pattes externes à gauche et $2m_{\mathcal{V}}+1$ pattes externes à droite, et par le nombre de façon de relier le sous-diagramme situé entre x' et X et celui situé entre X et x, que l'on note $N_{\mathcal{V}}(m)$. On a ainsi :

$$Z_m(x) = \sum_{\mathcal{V}} \int_{x'}^{x} \mathrm{d}X\ \mathcal{V}(X) N_{\mathcal{V}}(m) Z_{m_{\mathcal{V}}}(X), \tag{2.53}$$

dont on déduit l'équation différentielle

$$\frac{\mathrm{d}\, Z_m(x)}{\mathrm{d}x} = \sum_{\mathcal{V}} \mathcal{V}(x) N_{\mathcal{V}}(m) Z_{m_{\mathcal{V}}}(x). \tag{2.54}$$

Un calcul de combinatoire sur le nombre de façon de relier deux diagrammes avec un vertex donné permet d'établir les valeurs des nombres $N_{\mathcal{V}}(m)$.

En raisonnant de même sur les diagrammes latéraux, on obtient les équations différentielles suivantes sur les sommes de diagrammes [2]

$$\frac{\mathrm{d}\, L_n}{\mathrm{d}x'} = \frac{n^2}{\ell_-(x')} \left(-2L_n + L_{n-1}\, \mathrm{e}^{-2i\omega\Delta(x')} + L_{n+1}\, \mathrm{e}^{2i\omega\Delta(x')} \right), \tag{2.55}$$

$$\frac{\mathrm{d}\, R_n}{\mathrm{d}x} = \frac{n^2}{\ell_-(x)} \left(2R_n - R_{n-1}\, \mathrm{e}^{2i\omega\Delta(x)} - R_{n+1}\, \mathrm{e}^{-2i\omega\Delta(x)} \right), \tag{2.56}$$

$$\frac{\mathrm{d}\, Z_m}{\mathrm{d}x} = -\frac{2m^2+2m+1}{\ell_-(x)} Z_m + \frac{1}{\ell_-(x)} \left[(m+1)^2\, \mathrm{e}^{2i\omega\Delta(x)}\, Z_{m+1} + m^2\, \mathrm{e}^{-2i\omega\Delta(x)}\, Z_{m-1} \right]. \tag{2.57}$$

Les conditions initiales suivantes s'obtiennent à partir de considérations diagrammatiques [2] :

$$L_n(x_c) = 1, \tag{2.58}$$

$$R_n(x_c) = 1, \tag{2.59}$$

$$Z_m(x') = \delta_{m',m}. \tag{2.60}$$

On rappelle ici que les valeurs de x' et m' sont quelconques et ont été fixées, et que l'on note $Z_m(x) \equiv Z_{m',m}(x',x)$.

Renormalisation de la position

Les équations (2.55), (2.56) et (2.57) font toutes intervenir le libre parcours moyen local $\ell_-(x)$. En effectuant le changement de variable $x \to s$, avec s la grandeur adimensionnée vérifiant

$$\frac{\mathrm{d}s}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{\ell_-(x)}, \tag{2.61}$$

et $s=0$ en $x=0$, on fait disparaître la dépendance explicite en $\ell_-(x)$ des équations (2.55), (2.56) et (2.57). Le paramètre s renormalise la distance parcourue par la particule en présence d'une force, et nous le retrouverons dans l'ensemble des méthodes analytiques présentées dans ce manuscrit.

Afin de faire disparaître la phase $\Delta(x)$ des équations (2.55), (2.56) et (2.57), on introduit de nouvelles quantités $\hat{L}_n(s') = L_n(x')\, \mathrm{e}^{2i\omega\Delta(x')n}$, $\hat{R}_n(s) = R_n(x)\, \mathrm{e}^{-2i\omega\Delta(x)n}$ et $\hat{Z}_{m',m}(s',s) = Z_{m',m}(x',x)\, \mathrm{e}^{2i\omega\Delta(x)(m+1/2)}\, \mathrm{e}^{-2i\omega\Delta(x')(m'+1/2)}$. On obtient alors le système

d'équations différentielles

$$\frac{\mathrm{d}\,\hat{L}_n}{\mathrm{d}s'} = i\nu(s')n\hat{L}_n(s') + n^2(-2\hat{L}_n + \hat{L}_{n-1} + \hat{L}_{n+1}), \tag{2.62}$$

$$\frac{\mathrm{d}\,\hat{R}_n}{\mathrm{d}s} = -i\nu(s)n\hat{R}_n(s) + n^2(2\hat{R}_n - \hat{R}_{n-1} - \hat{R}_{n+1}), \tag{2.63}$$

$$\frac{\mathrm{d}\,\hat{Z}_m}{\mathrm{d}s} = i\nu(s)(m+1/2)\hat{Z}_m - (2m^2+2m+1)\hat{Z}_m + \left[(m+1)^2\hat{Z}_{m+1} + m^2\hat{Z}_{m-1}\right], \tag{2.64}$$

où

$$\nu(s) = 2\omega\ell_-(x)\frac{\mathrm{d}\,\Delta(x)}{\mathrm{d}x}. \tag{2.65}$$

Les conditions initiales (2.60) se ré-expriment sous la forme

$$\hat{L}_n(x_c) = 1, \tag{2.66}$$

$$\hat{R}_n(x_c) = 1, \tag{2.67}$$

$$\hat{Z}_m(x') = \delta_{m',m}. \tag{2.68}$$

Pour un potentiel désordonné arbitraire, le terme $\nu(s)$ a une dépendance en s compliquée [cf. Éq. (2.51) et (2.45)]. Celle-ci devient en revanche simple dans le cas d'un bruit blanc. En effet, le libre parcours moyen local est alors égal à [cf. Éq. (2.51) avec $\tilde{C}_2[2k(x)] = U_\mathrm{R}$]

$$\ell_-(x) = \frac{2\hbar^2K(x)}{U_\mathrm{R}m} \tag{2.69}$$

d'où

$$s = \int_0^x \frac{\mathrm{d}x'}{\ell_-(x')} = \frac{1}{2\alpha}\ln\left(1+\frac{Fx}{E}\right), \tag{2.70}$$

où

$$\alpha = \frac{\hbar^2F}{mU_\mathrm{R}}. \tag{2.71}$$

On déduit de (2.70) que $K(x) = K(0)\,\mathrm{e}^{2\alpha s}$ d'où $k(x) = k(0)\,\mathrm{e}^{\alpha s}$. En utilisant l'expression de $\Delta(x)$ (2.45), l'Éq. (2.65) devient

$$\nu(s) = 2\omega\frac{\hbar k(0)}{F}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}s}\,\mathrm{e}^{\alpha s}, \tag{2.72}$$

qu'on peut réécrire sous la forme

$$\nu(s) = 2\omega\tau_-(0)\,\mathrm{e}^{\alpha s}. \tag{2.73}$$

avec $\tau_-(0) = \frac{\ell_-(0)}{v(0)}$ le temps de libre parcours moyen local en $x' = 0$ de la particule.

Résolution des équations différentielles

Il nous reste à calculer $\Gamma(x,0|E,\omega)$ (2.52) en utilisant les équations différentielles sur les sommes de diagrammes, Éq. (2.62), (2.63) et (2.64). On introduit pour cela les fonctions génératrices

$$R(\rho,s) = \sum_{n=1}^{\infty}\hat{R}_n(s)\rho^{n-1} \tag{2.74}$$

$$Q(r,s',s) = \sum_{n=0}^{\infty}\left\{\sum_{n'=0}^{\infty}\frac{\hat{L}_{n'+1}(s') + \hat{L}_{n'}(s')}{2}\hat{Z}_{n',n}(s',s)\right\}r^n \tag{2.75}$$

où $\rho \in [0,1]$ et $r \in [0,1]$. On peut montrer à partir de l'expression (2.52) que $\Gamma(x,0|E,\omega)$ se réécrit sous la forme [2, 84]

$$\Gamma(x,0|E,\omega) = \frac{1}{\pi\hbar^2 v(0)v(x)} \int_0^{2\pi} \mathrm{d}\varphi \; Q(\mathrm{e}^{-i\varphi},0,s)\left[1+(1+\mathrm{e}^{i\varphi})R(\mathrm{e}^{i\varphi},s)\right]. \tag{2.76}$$

Les équations différentielles (2.62), (2.63) et (2.64) permettent d'obtenir des équations différentielles pour $R(\rho,s)$ et $Q(r,0,s)$ qui font intervenir uniquement la fonction $\nu(s)$ [2]. Considérons un bruit blanc, dans la limite $\nu(s) \ll 1$, équivalente à [cf. Éq. (2.73)]

$$\omega \ll \frac{1}{\tau_-(0)}\,\mathrm{e}^{-\alpha s}, \tag{2.77}$$

et valide pour tout s à temps infini ($\omega \to 0$). Les équations établies précédemment peuvent alors être résolues, au terme de longs calculs, lorsque $\alpha < 1$ [2]. Les calculs font apparaître une singularité en $\alpha = 1$ et n'ont pas été résolus pour $\alpha > 1$. Pour $\alpha < 1$ et $x > 0$, on obtient [2]

$$\Gamma(x,0|E,\omega) \;=\; \frac{i\pi\sin(\pi\alpha)\,\mathrm{e}^{-(1-\alpha)^2 s/4}}{4\hbar^2 v(x)v(0)\nu(s)\alpha} \int_0^{\infty} \mathrm{d}\lambda \quad \lambda\,\mathrm{sh}(\pi\lambda)\,\mathrm{e}^{-\lambda^2 s/4}\,\frac{(1+\alpha^2+\lambda^2)^2-4\alpha^2}{[\mathrm{ch}(\pi\lambda)+\cos(\pi\alpha)]^2}. \tag{2.78}$$

Pour obtenir la valeur de $\hat{p}(x,\omega|E) = \hbar\Gamma(x,0|E,\omega)/2\,\mathrm{Im}\,\overline{G^A(0,0|E)}$ (2.13), il reste alors à évaluer $\mathrm{Im}\,\overline{G^A(0,0|E)}$. En utilisant uniquement les vertex d'interactions résonants (Fig. C.1) qui ne font intervenir que la fonction de Green avancée, on constate que l'on a $\overline{G^A(0,0|E)} = G_0^A(0,0|E)$. Sous l'hypothèse

$$\frac{\hbar^2 k^3(0)}{Fm} \gg 1, \tag{2.79}$$

correspondant à l'hypothèse (2.30) en $x' = 0$, on obtient à partir de (2.31) :

$$\mathrm{Im}\,G_0^A(0,0|E) = \frac{1}{\hbar v(0)}\left[1+\sin\left(\frac{2\hbar^2 k^3(0)}{3Fm}\right)\right]. \tag{2.80}$$

Le deuxième terme oscille rapidement avec la valeur de l'énergie de la particule $E = \hbar^2 k^2(0)/2m$. Or la largeur en énergie d'une particule initialement localisée en $x' = 0$ est nécessairement finie. Par conséquent le terme oscillant de (2.80) se moyenne à zéro sur la largeur en énergie de la particule, et doit être négligé. On a donc

$$\mathrm{Im}\,\overline{G^A(0,0|E)} = \frac{1}{\hbar v(0)}. \tag{2.81}$$

La seule dépendance en ω de $\hat{p}(x,\omega)$ apparaît à travers le terme $\nu(s) \sim \omega$ (2.73) au dénominateur de (2.78). Dans la limite $\omega \to 0$ que l'on a considérée dans tous les calculs précédents, on a donc une probabilité de diffusion dans l'espace fréquentiel de la forme

$$\hat{p}(x,\omega) = \frac{A}{-i\omega}. \tag{2.82}$$

On en déduit dans la limite $t \to \infty$,

$$\lim_{t\to\infty} p(x,t) = \lim_{t\to\infty} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\,\hat{p}(x,\omega)\,\mathrm{e}^{-i\omega t} \tag{2.83}$$

$$\simeq \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\left[\lim_{\omega\to 0}\hat{p}(x,\omega)\right]\mathrm{e}^{-i\omega t} \tag{2.84}$$

$$= A\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\,\frac{\mathrm{e}^{-i\omega t}}{-i\omega+0^+} \tag{2.85}$$

$$= A\theta(t) \tag{2.86}$$

$$= A. \tag{2.87}$$

La probabilité de diffusion $p(x,t)$ tend ainsi vers une valeur finie à temps infini, égale à $\lim_{\omega\to 0} -i\omega\hat{p}(x,\omega)$, où $\hat{p}(x,\omega)$ s'obtient à partir des équations (2.13), (2.14), (2.78) et (2.81) pour $x > 0$. Le cas $x < 0$ s'obtient à partir de [2]

$$p_F(x,0) = p_{-F}(-x,0). \tag{2.88}$$

2.1.3 Résultat et discussion sur la localisation

La probabilité de diffusion de la particule d'énergie E initialement située en $x' = 0$ est supposée nulle dans la région classiquement inaccessible $x < x_c$ (2.23). D'après les résultats présentés dans la section précédente, la probabilité de diffusion à temps infini à droite du point de rebroussement classique vaut pour $x < 0$:

$$p_\infty(x|E) = \frac{\pi \sin(\pi\alpha)\, \mathrm{e}^{-(1+\alpha)^2|s|/4}}{16\ell_-(x)\alpha} \int_0^\infty \mathrm{d}\lambda \quad \lambda \,\mathrm{sh}(\pi\lambda)\, \mathrm{e}^{-\lambda^2|s|/4} \frac{(1+\alpha^2+\lambda^2)^2 - 4\alpha^2}{[\mathrm{ch}(\pi\lambda)+\cos(\pi\alpha)]^2}, \tag{2.89}$$

et pour $x \geqslant 0$

$$p_\infty(x|E) = \frac{\pi \sin(\pi\alpha)\, \mathrm{e}^{-(1-\alpha)^2 s/4}}{16\ell_-(x)\alpha} \int_0^\infty \mathrm{d}\lambda \quad \lambda \,\mathrm{sh}(\pi\lambda)\, \mathrm{e}^{-\lambda^2 s/4} \frac{(1+\alpha^2+\lambda^2)^2 - 4\alpha^2}{[\mathrm{ch}(\pi\lambda)+\cos(\pi\alpha)]^2}, \tag{2.90}$$

où les paramètres $\ell_-(x)$, s et α sont définis par les équations (2.69), (2.70) et (2.71). On observe une asymétrie de la probabilité de transfert de part et d'autre du point initial. Elle s'explique par la présence d'une force qui rend le système inhomogène, et qui favorise la propagation dans la direction de la force. Notons que l'on retrouve un résultat symétrique lorsque la force tend vers 0. En effet, le passage à la limite $F, \alpha \to 0$, avec $F/\alpha = mU_\mathrm{R}/\hbar^2$, dans les expressions (2.89) et (2.90), conduit à une unique expression

$$p_\infty^{F=0}(x|E) = \frac{\pi^2\, \mathrm{e}^{-s/4}}{16\ell_-} \int_0^\infty \mathrm{d}\lambda\, \lambda \,\mathrm{sh}(\pi\lambda)\, \mathrm{e}^{-\lambda^2 s/4} \frac{(1+\lambda^2)^2}{[\mathrm{ch}(\pi\lambda)+1]^2}, \tag{2.91}$$

avec $\ell_- = 2\hbar^2 E/mU_\mathrm{R}$ et $s = x/\ell_-$. On retrouve ainsi le résultat établi originellement en l'absence de force [cf. Éq. (1.37) et Éq. 5 de la Réf. [25]].

Dans la direction de la force, à grande distance $x \to \infty$, le paramètre s diverge vers $+\infty$. La probabilité de transfert peut alors être approximée en remplaçant dans l'intégrande présente dans l'équation (2.90), de la forme $f(\lambda)\, \mathrm{e}^{-\lambda^2 s/4}$, la fonction $f(\lambda)$ par le premier terme de son développement limité au voisinage de $\lambda = 0$. On obtient [2]

$$p_\infty(x|E) \simeq \frac{E}{F} \frac{2\sqrt{2\alpha\pi}}{(1+Fx/E)^{\beta_{exp}}} \frac{\pi^2 \sin[\pi\alpha]}{16\alpha} \frac{(1-\alpha^2)^2}{(1+\cos[\pi\alpha])^2} \left[\ln\left(1+Fx/E\right)\right]^{-3/2}, \tag{2.92}$$

avec

$$\beta_{exp} = 1 + \frac{(1-\alpha)^2}{8\alpha}. \tag{2.93}$$

On observe ainsi pour $\alpha < 1$ une décroissance essentiellement algébrique de la probabilité de diffusion dans la direction de la force à grande distance (à une correction logarithmique près), avec une loi de puissance β_{exp} qui dépend de la valeur du paramètre α. À partir de (2.93), on montre que β_{exp} est une fonction décroissante de $\alpha \in [0,1[$, ce qui indique que la décroissance algébrique de la probabilité de diffusion est d'autant plus lente que α est élevé, c'est-à-dire que la force est importante, à désordre fixé [voir Éq. (2.71)].

En l'absence de force, la décroissance exponentielle de la probabilité de diffusion à grande distance (1.40) entraîne que tous les moments de position de la particule, définis comme

$$\overline{x^m} = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\; p_\infty(x|E) x^m, \tag{2.94}$$

sont finis. En présence d'une force, la décroissance algébrique de la probabilité de diffusion dans la direction de la force rend possible une divergence de l'intégrale (2.94) au voisinage de $+\infty$ si la décroissance algébrique est trop lente (voir Chap. 5, Sec. 5.1.3). On peut alors parler de délocalisation du moment de la position $\overline{x^m}$ correspondant.

On peut montrer (voir section 5.1.3) que la position moyenne de la particule, $\overline{x}$, est finie si, et seulement si $\alpha \leqslant \alpha_1$, avec $\alpha_1 = 5 - 2\sqrt{6} \simeq 0.10$. De même, les moments d'ordres supérieurs divergent tous à partir d'une certaine valeur de $\alpha = \alpha_m$, qui dépend du moment considéré. On peut ainsi associer à chaque moment d'ordre m une longueur de localisation ℓ_m qui peut être finie, ou bien diverger, selon la valeur de α. Cette longueur de localisation peut par exemple être définie par [2]

$$\ell_m = \left[\int \mathrm{d}x\; (x - \overline{x})^m p_\infty(x|E) \right]^{1/m}. \tag{2.95}$$

Différentes transitions de délocalisation de la particule en fonction de α apparaissent donc selon le choix de la longueur de localisation ℓ_m que l'on considère.

De plus, lorsque $\alpha \to 1$, la décroissance en $1/x$ de la probabilité de diffusion entraîne une divergence de tous les moments d'ordre $n > 0$, et donc de toutes les longueurs de localisation. Cela semble indiquer une délocalisation totale de la particule lorsque $\alpha > 1$, i.e. lorsque la force devient trop grande comparée à l'intensité du désordre.

2.2 Transmission

La prédiction théorique de Prigodin [2] que nous avons présentée dans la section précédente n'a pas été par le passé confrontée à une étude numérique exacte de la diffusion quantique d'une particule (voir Chap. 5 pour une telle étude). En revanche, un calcul numérique exact du coefficient de transmission dans le modèle de Kronig-Penney [85] en présence d'une force a été effectué par C. M. Soukoulis, J. V. José, E. N. Economou et P. Sheng en 1983 [1]. Nous présentons ici leurs résultats.

2.2.1 Système

On s'intéresse au coefficient de transmission d'un guide unidimensionnel de longueur L en présence d'une force constante $\boldsymbol{F} = F\boldsymbol{u_x}$, et d'un potentiel désordonné $V(x)$.

Le modèle de désordre considéré est un désordre sur sites, qui correspond au modèle de Kronig-Penney [85], à savoir des barrières de potentiel désordonnées (la hauteur des barrières est aléatoire) sur les sites d'un réseau 1D (cf. Fig. 2.10). On considère ainsi que le désordre se compose de barrières de potentiel ponctuelles espacées par une distance pas a définissant le pas du réseau. Sur le site d'abscisse $x = na$, l'intensité de la barrière de potentiel (définie comme $\int_{x-a/2}^{x+a/2} V(x')\,\mathrm{d}x'$) est notée b_n. On a ainsi

$$V(x) = \sum_{n=1}^{L/a} b_n \delta(x - na). \tag{2.96}$$

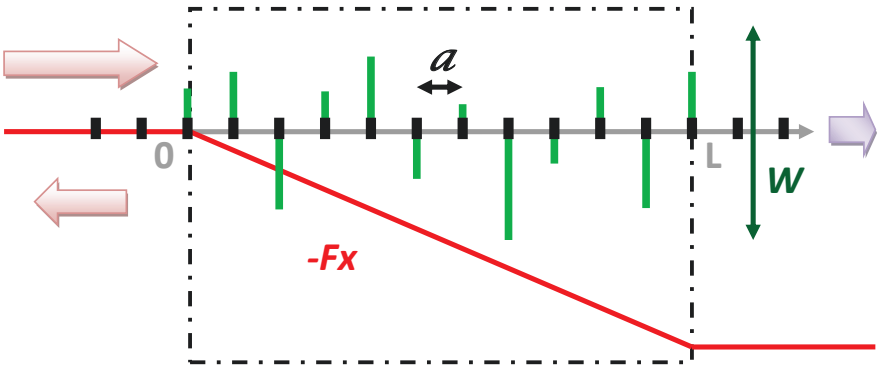


Fig 2.10 – Schéma du système considéré par Soukoulis *et al.*. Un guide 1D de longueur L est soumis à un potentiel linéaire $-Fx$ qui engendre une force F, et à un désordre sur sites espacés de a, distribué sur une largeur W. Une onde plane en entrée est partiellement réfléchie, et partiellement transmise avec un coefficient de transmission T.

On suppose que les intensités des différentes barrières sont indépendantes (désordre blanc), et que chacune est distribuée de façon uniforme dans l'intervalle $[-W/2, W/2]$. Ce désordre correspond à la discrétisation d'un désordre blanc continu de fonction de corrélation à deux points que l'on définit et calcule ci-dessous :

$$C_2(x) = \frac{1}{a}\int_{-a/2}^{a/2} \mathrm{d}x' \, \overline{V(x')V(x'+x)} \tag{2.97}$$

$$= \frac{\overline{b_n^2}}{a}\delta(x). \tag{2.98}$$

L'intensité du désordre U_R, définie par $C_2(x) = U_\mathrm{R}\delta(x)$, est donc donnée par

$$U_\mathrm{R} = \frac{\overline{b_n^2}}{a} = \frac{W^2}{12a}. \tag{2.99}$$

Le coefficient de transmission dépend a priori de l'énergie E de la particule que l'on cherche à transmettre. Il peut être directement exprimé à partir des valeurs aux extrémités du guide de la fonction d'onde associée à un état stationnaire d'énergie E [voir Éq. (3.17) par exemple]. On cherche donc à calculer numériquement la fonction d'onde $\psi(x)$ d'un état stationnaire d'énergie E. Elle est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + \sum_{n=1}^{L/a} b_n\delta(x-na) - Fx\right]\psi(x) = E\psi(x), \tag{2.100}$$

où m désigne la masse de la particule.

Afin de résoudre numériquement cette équation, les auteurs utilisent une équivalence entre l'équation de Schrödinger continue et une équation de récurrence linéaire d'ordre deux entre les valeurs $\psi_n = \psi(x = na)$ de la fonction d'onde sur les sites du réseau [1, 86]. Pour établir cette correspondance, ils ont de plus besoin d'effectuer l'approximation que le potentiel $-Fx$ peut être remplacé par une fonction en escalier entre les sites du réseau. En fixant les valeurs de la fonction d'onde sur deux sites voisins en sortie du guide ($x = L$) de sorte à correspondre à une onde plane sortante, la résolution numérique de l'équation de récurrence d'ordre deux permet

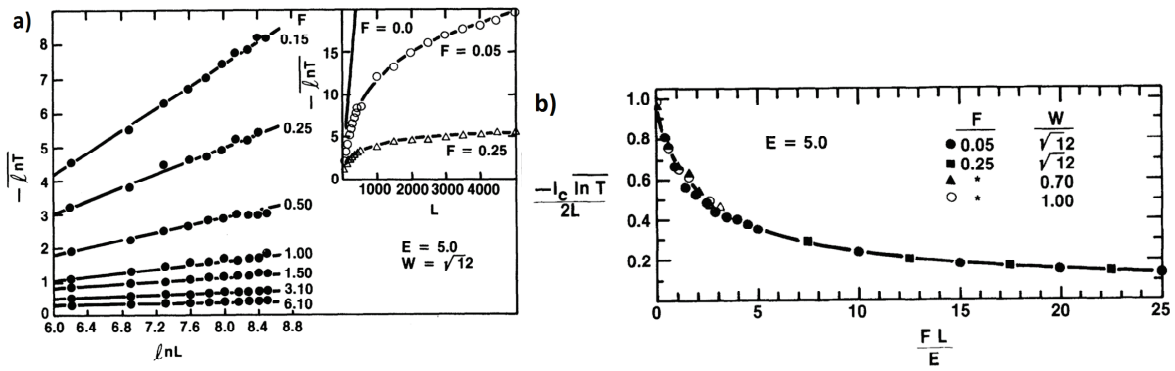


Fig 2.11 – Résultats numériques de Soukoulis *et al.* [1] sur la valeur moyenne du logarithme du coefficient de transmission $\overline{\ln T}$ d'un guide unidimensionnel de longueur L, dans le modèle de Kronig-Penney en présence d'un bruit blanc d'amplitude W et d'une force constante F. (a) Tracé de $-\overline{\ln T}$ en fonction de $\ln L$. Les différentes courbes correspondent à différentes valeurs de F. Encart : tracé de $-\overline{\ln T}$ en fonction de L. (b) Résultats numériques de $-\frac{\ell_c}{2L}\overline{\ln T}$ en fonction de FL/E, pour différentes valeurs de L, F et W, et comparaison avec la fonction $\ln(1+x)/x$ (courbe en trait plein).

de calculer la fonction d'onde en entrée du guide, et d'en déduire la valeur du coefficient de transmission.

Pour chaque réalisation du désordre, le coefficient de transmission obtenu diffère. En effectuant mille réalisations du désordre, les auteurs calculent une valeur moyenne du logarithme du coefficient de transmission $\overline{\ln T}$. Le choix de moyenner le logarithme du coefficient de transmission $\ln T$, et non le coefficient de transmission T, provient de la considération que la quantité $\ln T$ est auto-moyennante, c'est-à-dire que l'incertitude relative sur $\ln T$ (rapport de l'écart-type sur la moyenne) diminue avec la longueur du système (cf. section 1.2.2).

2.2.2 Résultat numérique

Dans l'encart de la figure 2.11 (a), les résultats numériques donnant l'opposé de la valeur moyenne du logarithme de la transmission, $-\overline{\ln T}$, en fonction de la longueur du guide L, sont tracés pour différentes valeurs de force. Pour une force nulle, le logarithme du coefficient de transmission décroît linéairement avec la longueur du guide,

$$\overline{\ln T} = \frac{-2L}{\ell_c}, \tag{2.101}$$

sur une longueur de localisation donnée par

$$\ell_c = \frac{48E\hbar^2 a}{mW^2}. \tag{2.102}$$

Remarquons qu'en utilisant la relation (2.99), on peut réécrire cette longueur sous la forme

$$\ell_c = \frac{4E\hbar^2}{mU_{\mathrm{R}}}, \tag{2.103}$$

ce qui donne $\ell_c = 2\ell_-$, où ℓ_- correspond au libre parcours moyen (1.38). On retrouve donc la décroissance du logarithme du coefficient de transmission prédite par le formalisme de phase (1.42). Pour une force non nulle, on observe en revanche que la décroissance du logarithme de la transmission en fonction de la longueur L du fil n'est plus linéaire, mais présente une pente locale qui diminue lorsque L augmente.

Sur la figure 2.11 (a), la quantité $-\overline{\ln T}$ est tracée en fonction de $\ln L$ pour des valeurs de L élevées par rapport au pas a du réseau, pour différentes valeurs de force non nulles. On observe une augmentation linéaire de $-\overline{\ln T}$, de pente d'autant plus faible que la force est élevée. Cela indique que le coefficient de transmission décroît algébriquement en fonction de la longueur du guide, d'autant plus lentement que la force est grande. Dans le problème de transmission, la présence d'une force modifie ainsi la localisation exponentielle usuelle en une localisation algébrique.

Les auteurs proposent alors de tracer la quantité $-\frac{\ell_c}{2L}\overline{\ln T}$ en fonction de FL/E, pour l'ensemble des résultats numériques qu'ils ont obtenus avec différentes valeurs de la force, de l'amplitude du désordre et de la longueur du système. Ils observent que tous les résultats suivent sur une courbe universelle

$$-\frac{\ell_c}{2L}\overline{\ln T} = \frac{1}{x}\ln(1+x), \tag{2.104}$$

où $x = FL/E$, comme représenté sur la figure 2.11 (b).

Afin d'interpréter ce résultat, ils proposent un argument empirique que l'on présente ci-dessous. En l'absence de force, le logarithme de la transmission décroît linéairement avec la longueur du fil, $\ln T = -2L/\ell_c$, sur une longueur de localisation ℓ_c donnée par l'équation (2.102). En présence d'une force, on peut supposer que la décroissance du logarithme de la transmission, $\partial_L \ln T$, est localement donnée par une longueur de localisation $\ell_c(x)$ qui dépend de la position x de la particule, et s'obtient en remplaçant l'énergie E par l'énergie $E + Fx$ dans l'équation (2.102), i.e.

$$\ell_c(x) = \ell_c \times \left(1 + \frac{Fx}{E}\right). \tag{2.105}$$

On obtient alors

$$\ln T(L) = \int_0^L \mathrm{d}x\ \partial_x \ln T \tag{2.106}$$

$$= -\int_0^L \frac{2\,\mathrm{d}x}{\ell_c(x)} \tag{2.107}$$

$$= -\frac{2L}{\ell_c} \times \frac{E}{FL} \ln\left(1 + \frac{FL}{E}\right), . \tag{2.108}$$

qui permet de retrouver le résultat universel (2.104).

On déduit de (2.108) la valeur de la transmission typique (1.43), $T^{typ} \equiv \exp(\overline{\ln T})$,

$$T^{typ} = \left(1 + \frac{FL}{E}\right)^{-1/2\alpha}, \tag{2.109}$$

avec [1]

$$\alpha = \frac{F\ell_c}{4E} = \frac{\hbar^2 F}{mU_{\mathrm{R}}}. \tag{2.110}$$

À grande distance $L \gg E/F$, la transmission typique décroît donc algébriquement, $T^{typ} \sim L^{-1/2\alpha}$, et la loi de puissance de cette décroissance est uniquement donnée par la valeur du paramètre α qui caractérise le rapport de la force sur l'intensité du désordre.

1. Dans un soucis de cohérence avec le reste du manuscrit, nous ne définissons pas le paramètre α de la même façon que dans l'article [1] .

2.2.3 Discussion sur la localisation

Le résultat universel (2.108) trouvé par Soukoulis *et al.* met en évidence une décroissance algébrique du coefficient de transmission typique T^{typ} (2.109), quelle que soit la valeur de α, i.e. quelle que soit la valeur de la force appliquée. On ne voit donc pas apparaître de valeur critique de α où le comportement de la transmission change, comme on pouvait s'y attendre d'après la prédiction théorique sur la probabilité de diffusion d'une délocalisation totale lorsque $\alpha > 1$ (voir Sec. 2.1.3).

On a vu dans la section 2.1.3 que la décroissance algébrique de la probabilité de diffusion à grande distance est d'autant plus lente que la force est grande (α élevé), ce qui permet de définir différentes transitions de délocalisation selon la quantité que l'on étudie (2.95). On observe de même ici que la transmission décroît d'autant plus lentement que α est élevé. On peut donc rechercher des critères de localisation qui font apparaître des transitions de délocalisation lorsque la décroissance devient trop lente, c'est-à-dire à grande force. Les auteurs proposent ainsi différentes définitions d'une force critique. En voici deux exemples, et les valeurs de α critique correspondantes. Une première force critique peut être donnée par la condition que la conductivité σ est indépendante de la longueur L. Or on a [voir Éq. (1.4) et (3.112)] $\sigma \sim GL \sim TL$. En prenant pour T la transmission typique $T^{typ} \sim L^{-1/2\alpha}$, ce premier critère de localisation conduit à une valeur critique de α qui vaut $\alpha_{c,1} = 0.5$. Une seconde force critique peut être établie à partir de la condition que $|\psi(L)|^2$ est normalisable en $L \to \infty$, i.e. décroît au moins en $1/L$. Sachant que $T \sim L^{1/2}|\psi(L)|^2$ [cf. Éq. (4.44) avec $k(L) \sim L^{1/2}$], on obtient en remplaçant T par la transmission typique une nouvelle valeur critique $\alpha_{c,2} = 1$.

2.3 Bilan

Dans ce chapitre, nous avons présenté deux résultats obtenus sur la probabilité de diffusion $p_\infty(x|E)$ d'une particule quantique d'énergie E de la position $x' = 0$ à la position x à temps infini d'une part, et le coefficient de transmission $T^{typ}(L)$ à travers un guide de longueur L d'autre part, en présence d'une force constante et d'un désordre blanc.

En l'absence de force, ces deux quantités décroissent exponentiellement à grande distance, sur une longueur typique de l'ordre du libre parcours moyen ℓ_- (voir section 1.2.2). Ce libre parcours moyen est proportionnel au rapport entre l'énergie de la particule et l'intensité du désordre (1.38).

En présence d'une force, on constate que ces deux quantités ne décroissent plus qu'algébriquement à grande distance, avec une loi de puissance qui ne dépend que du paramètre α caractérisant l'amplitude de la force sur celle du désordre. Les dépendances en α des lois de puissance des décroissances algébriques obtenues dans les deux situations sont cependant très différentes : $p_\infty(x|E) \sim x^{-1-(1-\alpha)^2/8\alpha}$ (pour $\alpha < 1$) et $T(L) \sim L^{-1/2\alpha}$ quel que soit α. Dans le cas de la diffusion quantique, on prédit une transition de délocalisation totale à $\alpha = 1$, correspondant à une divergence de tous les moments de position de la particule. Cette nette transition de délocalisation n'apparaît pas sur la transmission, qui présente un comportement régulier pour tout α.

Afin de vérifier et de comprendre la différence de comportements qui semble apparaître entre la diffusion quantique et la transmission en présence d'une force, nous étudierons ces deux systèmes dans les chapitres suivants. En particulier, nous calculerons la transmission de manière exacte dans le cas d'un désordre continu afin de compléter les résultats numériques présentés dans ce chapitre, et nous effectuerons des simulations numériques de diffusion quantique d'une particule que l'on pourra confronter à la prédiction théorique.

Chapitre 3

Transmission dans un guide d'onde unidimensionnel

D'après des calculs numériques effectués par Soukoulis *et al.* [1] dans un modèle discret de type Kronig-Penney, la transmission typique à travers un guide unidimensionnel en présence d'un désordre blanc et d'une force constante décroît algébriquement avec la longueur du guide, quelle que soit la force appliquée (cf. Chap. 2 Sec. 2.2). Ce résultat diffère fortement du comportement analytique prédit par Prigodin [2] concernant l'étalement d'un paquet d'onde dans un milieu continu unidimensionnel en présence d'un désordre blanc et d'une force constante, notamment par l'apparition d'une transition de délocalisation du paquet d'onde à grande force (cf. Chap. 2 Sec. 2.1).

Dans ce chapitre, nous nous intéressons au calcul analytique de la transmission à travers un guide unidimensionnel en présence d'une force dans un milieu continu. Pour cela, nous étendons une méthode de matrices de transfert à la présence d'une force qui rend le milieu inhomogène. Ce calcul nous permet d'établir la distribution exacte du coefficient de transmission du guide, dont nous montrons qu'elle présente une forme universelle et ne dépend que d'une métrique s correspondant à la longueur du guide renormalisée par le libre parcours moyen local [87]. À partir de cette distribution, nous calculons les transmissions typique et moyenne. Nous étudions alors ces transmissions pour différentes forces et différents désordres. Alors que l'on retrouve bien la décroissance exponentielle de la transmission avec la longueur du guide dans un milieu homogène, on trouve pour un désordre blanc et une force constante la décroissance algébrique obtenue par Soukoulis pour la transmission typique, et nous montrons que la transmission moyenne présente elle aussi une décroissance algébrique. De plus, nous étudions des cas plus réalistes de désordres spatialement corrélés, particulièrement pertinents dans les expériences avec des atomes ultra-froids. Nous considérons également le cas d'une force variable. Nous mettons ainsi en évidence l'apparition d'une délocalisation dans de tels systèmes, caractérisée par une saturation de la transmission à une valeur finie non nulle. Enfin, nous proposons des implémentations expérimentales de mesure de transmission, applicables à des systèmes d'atomes ultrafroids.

3.1 Système

3.1.1 Description

Le système que nous étudions est un guide d'onde unidimensionnel de longueur L, au sein duquel une force $F(x)$ et un potentiel désordonné $V(x)$ sont appliqués.

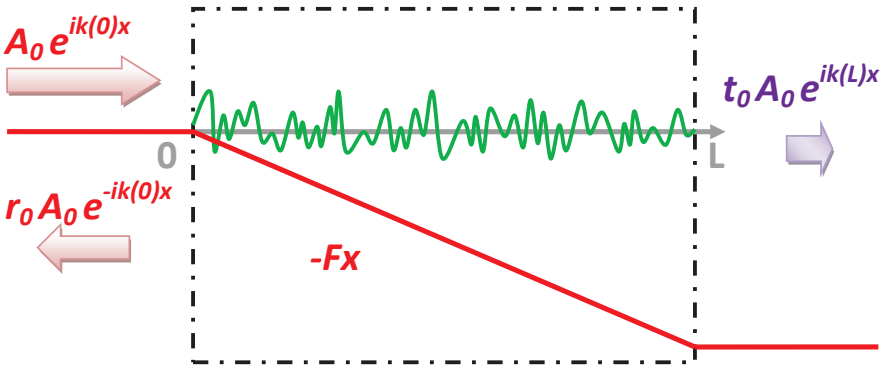


Fig 3.1 – Schéma du système en transmission, dans le cas d'une force constante. Une onde plane incidente $A_0\,\mathrm{e}^{ik(0)x}$ est partiellement réfléchie en entrée du guide ($x = 0$) sous la forme $r_0 A_0\,\mathrm{e}^{-ik(0)x}$, et partiellement transmise en sortie du guide ($x = L$) sous la forme $t_0 A_0\,\mathrm{e}^{ik(L)x}$. À l'intérieur du guide d'onde, un potentiel désordonné (en vert), et un potentiel linéaire $-Fx$ (en rouge) sont appliqués.

Nous considérons sans restriction (choix du zéro d'énergie) que le potentiel désordonné est de moyenne nulle, $\overline{V(x)} = 0$, et nous le supposons homogène et gaussien (voir section 2.1.1). Le potentiel désordonné est sous ces hypothèses entièrement caractérisé par sa fonction de corrélation à deux points $C_2(x_2 - x_1) = \overline{V(x_2)V(x_1)}$. La fonction de corrélation $C_2(x)$ décroît de façon générale sur une longueur typique σ_{R} appelée longueur de corrélation du potentiel désordonné. On définit l'intensité du potentiel désordonné par

$$U_{\mathrm{R}} = \int C_2(x)\,\mathrm{d}x = \tilde{C}_2(0). \tag{3.1}$$

Pour une particule classique, la force exerce entre 0 et x un travail $W_F(x) = \int_0^x \mathrm{d}x' F(x')$, que nous supposerons positif en tout point du guide, et qui correspond à une énergie potentielle $-W_F(x)$.

On souhaite calculer le coefficient de transmission d'une particule quantique de masse m et d'énergie E à travers le guide. La fonction d'onde $\psi(x)$ de cette particule est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x) + V(x)\psi(x) - W_F(x)\psi(x) = E\psi(x). \tag{3.2}$$

Le potentiel désordonné $V(x)$ et la force $F(x)$ étant supposés nuls à l'extérieur du guide, on a à gauche du guide ($x < 0$) :

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x) = E\psi(x), \tag{3.3}$$

de sorte que la fonction d'onde est une combinaison linéaire de deux ondes planes dirigées vers la droite et la gauche de vecteurs d'onde $\pm k(0)$, avec

$$E = \frac{\hbar^2 k^2(0)}{2m}. \tag{3.4}$$

À droite du guide, on a de même

$$\frac{-\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x) - W_F(L)\psi(x) = E\psi(x), \tag{3.5}$$

de sorte que la fonction d'onde est une combinaison linéaire de deux ondes planes de vecteurs d'onde $\pm k(L)$, avec

$$E = \frac{\hbar^2 k^2(L)}{2m} - W_F(L). \tag{3.6}$$

Les vecteurs d'onde à gauche et à droite du guide sont ainsi reliés par la relation

$$\frac{\hbar^2 k^2(L)}{2m} = \frac{\hbar^2 k^2(0)}{2m} + W_F(L), \tag{3.7}$$

qui traduit la conservation de l'énergie de la particule accélérée par la force.

On souhaite définir les coefficients de transmission et de réflexion à travers le guide. Le système est schématisé sur la figure 3.1. On envoie à partir de la gauche une onde plane de vecteur d'onde $k(0)$ et d'amplitude $A_{inc}(x) = A_0\,\mathrm{e}^{ik(0)x}$. Elle est partiellement réfléchie en entrée du guide d'onde ($x = 0$) avec un coefficient de réflexion en amplitude r_0, sous la forme $A_{refl}(x) = r_0 A_0\,\mathrm{e}^{-ik(0)x}$. En sortie du guide ($x = L$), elle est partiellement transmise avec un coefficient de transmission en amplitude t_0 sous la forme $A_{transm}(x) = t_0 A_0\,\mathrm{e}^{ik(L)x}$.

Le coefficient de transmission du système est défini comme le rapport du flux de particules transmises $j_{transm} = \frac{\hbar k(L)}{m}|A_{transm}(x)|^2$ sur le flux de particules incidentes $j_{inc} = \frac{\hbar k(0)}{m}|A_{inc}(x)|^2$, et vaut donc

$$T = \frac{j_{transm}}{j_{inc}} = \frac{k(L)}{k(0)}|t_0|^2. \tag{3.8}$$

Le coefficient de réflexion correspond à la valeur absolue du rapport du flux de particules réfléchies $j_{refl} = -\frac{\hbar k(0)}{m}|A_{refl}(x)|^2$ sur le flux de particules incidentes, et vaut

$$R = \frac{|j_{refl}|}{j_{inc}} = |r_0|^2. \tag{3.9}$$

La conservation du flux de particules impose que la somme des valeurs absolues des flux de particules transmises et réfléchies soit égale au flux de particules incidentes, de sorte que

$$T + R = \frac{j_{transm} + |j_{refl}|}{j_{inc}} = 1. \tag{3.10}$$

La fonction d'onde du système que l'on considère est égale à gauche du guide à la somme des ondes planes incidente et réfléchie :

$$\psi(x) = A_{inc}(x) + A_{refl}(x) = A_0\,\mathrm{e}^{ik(0)x} + r_0 A_0\,\mathrm{e}^{-ik(0)x} \qquad \text{si } x < 0. \tag{3.11}$$

En sortie du guide, elle correspond à l'onde plane transmise

$$\psi(x) = A_{transm}(x) = t_0 A_0\,\mathrm{e}^{ik(L)x} \qquad \text{si } x > L. \tag{3.12}$$

3.1.2 Méthode numérique

Dans ce chapitre, nous présenterons des résultats numériques de calcul du coefficient de transmission. Pour déterminer les coefficients de réflexion et de transmission numériquement il est utile de les exprimer en termes de la fonction d'onde et sa dérivée. D'après l'Éq. (3.11), on a

$$\begin{cases} ik(0)\psi(0) + \partial_x\psi(0) = 2ik(0)A_0 \\ ik(0)\psi(0) - \partial_x\psi(0) = 2ik(0)A_0 r_0 \end{cases} \tag{3.13}$$

d'où

$$r_0 = \frac{ik(0)\psi(0) - \partial_x\psi(0)}{ik(0)\psi(0) + \partial_x\psi(0)}. \tag{3.14}$$

De même, en utilisant l'Éq. (3.12), on a

$$\psi(L) = t_0 A_0 \, \mathrm{e}^{ik(L)L} \tag{3.15}$$

d'où

$$t_0 = \frac{2ik(0)\psi(L) \, \mathrm{e}^{-ik(L)\psi(L)}}{ik(0)\psi(0) + \partial_x\psi(0)}. \tag{3.16}$$

En injectant l'Éq. (3.14) dans l'Éq. (3.9) qui relie les coefficients de réflexion en amplitude et en intensité, et l'Éq. (3.16) dans l'Éq. (3.8) qui relie les coefficients de transmission en amplitude et en intensité, on obtient

$$T = \frac{4k(0)k(L)|\psi(L)|^2}{|ik(0)\psi(0) + \partial_x\psi(0)|^2}, \tag{3.17}$$

$$R = \frac{|ik(0)\psi(0) - \partial_x\psi(0)|^2}{|ik(0)\psi(0) + \partial_x\psi(0)|^2}. \tag{3.18}$$

Afin de calculer T (3.17) et R (3.18), il est donc suffisant de connaître les valeurs de la fonction d'onde et de sa dérivée en entrée et en sortie du guide.

Dans le système décrit précédemment (cf. Fig. 3.1), la fonction d'onde en sortie du guide est connue : il s'agit d'une onde plane de vecteur d'onde $k(L)$. Si l'on fixe sans restriction $\psi(L) = 1$, on a ainsi $\partial_x\psi(L) = ik(L)$.

L'équation de Schrödinger stationnaire (3.2) est une équation différentielle linéaire d'ordre deux. Étant donné que l'on connaît les valeurs de la fonction d'onde et de sa dérivée en sortie du guide, $[\psi(L), \partial_x\psi(L)]$, on peut à l'aide d'un algorithme de Runge-Kutta d'ordre 4 [52] (algorithme de type méthode d'Euler améliorée) calculer numériquement les valeurs de $[\psi(x), \partial_x\psi(x)]$ en tout point x en résolvant l'équation de Schrödinger. On obtient en particulier le couple $[\psi(0), \partial_x\psi(0)]$, grâce auquel on accède aux valeurs des coefficients de réflexion et de transmission.

3.2 Méthode des matrices de transfert

Afin de calculer analytiquement le coefficient de transmission, nous utilisons l'approche des matrices de transfert. Il s'agit d'une méthode traditionnelle de calcul du coefficient de transmission dans les systèmes désordonnés homogènes [27, 88], cf. Chap. 1, Sec. 1.2.2. Nous présentons ici une généralisation que nous avons établie dans le cas d'un système rendu inhomogène par la présence du biais $F(x)$.

3.2.1 Introduction de la matrice de transfert dans un milieu inhomogène

Nous verrons qu'il est utile de définir dans le système inhomogène considéré une *énergie cinétique locale*

$$K(x) \equiv E + W_F(x), \tag{3.19}$$

qui correspond à l'énergie cinétique classique de la particule en l'absence de désordre. Nous associons à cette énergie cinétique locale un *vecteur d'onde local*

$$k(x) \equiv \sqrt{2mK(x)}/\hbar, \tag{3.20}$$

une *vitesse locale*

$$v(x) = \sqrt{2K(x)/m}, \tag{3.21}$$

une *longueur d'onde locale*

$$\lambda(x) = 2\pi/k(x), \tag{3.22}$$

ainsi qu'un *libre parcours moyen local* obtenu à partir de l'Éq. (2.51) donnant le libre parcours moyen en milieu homogène,

$$\ell_-(x) = \frac{2\hbar^2 K(x)}{m\tilde{C}_2[2k(x)]}. \tag{3.23}$$

Les équations (3.19) à (3.23) généralisent les expressions (2.22), (2.24), (2.25), (2.26) et (2.51) utilisées dans le chapitre précédent au cas d'un biais dépendant de la position.

En tout point x, la fonction d'onde et sa dérivée peuvent être écrites sous la forme

$$\begin{pmatrix} \psi(x) \\ \partial_x\psi(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{ik(x)x} & \mathrm{e}^{-ik(x)x} \\ ik(x)e^{ik(x)x} & -ik(x)e^{-ik(x)x} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_+(x) \\ \psi_-(x) \end{pmatrix}. \tag{3.24}$$

Nous avons ainsi établi une généralisation du cas homogène pour lequel le vecteur d'onde $k(x)$ et les fonctions $\psi_+(x)$ et $\psi_-(x)$ sont des constantes. Le déterminant du système d'équations (3.24) est égal à $-2ik(x)$, de sorte que ce système possède une unique solution $[\psi_+(x), \psi_-(x)]$ si $k(x) \neq 0$. On décompose ainsi formellement la fonction d'onde $\psi(x)$ en une somme de deux ondes planes de vecteur d'onde $\pm k(x)$ et d'amplitudes $\psi_+(x)$ et $\psi_-(x)$. On peut alors montrer que le flux de particules [89],

$$j(x) = \frac{\hbar}{2mi}\left[\psi^*(x)\partial_x\psi(x) - \psi(x)\partial_x\psi^*(x)\right], \tag{3.25}$$

s'exprime sous la forme

$$j(x) = j_+(x) + j_-(x) \qquad \text{avec} \qquad j_\pm(x) = \pm\frac{\hbar k(x)}{m}|\psi_\pm(x)|^2. \tag{3.26}$$

À titre d'illustration, considérons le cas décrit précédemment (cf. Fig. 3.1) d'une onde plane incidente $A_0\,\mathrm{e}^{ik(0)x}$ à gauche du guide partiellement réfléchie ($r_0A_0\,\mathrm{e}^{-ik(0)x}$) et partiellement transmise ($t_0A_0\,\mathrm{e}^{ik(L)x}$). À partir de (3.11), on identifie $k(x) = k(0)$, $\psi_+(x) = A_0$ et $\psi_-(x) = r_0A_0$ à gauche du guide. À partir de (3.12), on identifie $k(x) = k(L)$, $\psi_+(x) = t_0A_0$ et $\psi_-(x) = 0$ à droite du guide. On a ainsi [cf. Éq. (3.26)] $j_+(0) = \frac{\hbar k(0)}{m}|\psi_+(0)|^2 = j_{inc}$, $j_-(0) = \frac{-\hbar k(0)}{m}|\psi_-(0)|^2 = j_{refl}$, $j_+(L) = \frac{\hbar k(L)}{m}|\psi_+(L)|^2 = j_{transm}$, et $j_-(L) = 0$. Le coefficient de transmission du fil de longueur L dans cette situation particulière $j_-(L) = 0$ (absence d'onde incidente depuis la droite) est donc donné par

$$T = \frac{j_+(L)}{j_+(0)} = \frac{k(L)}{k(0)}\frac{|\psi_+(L)|^2}{|\psi_+(0)|^2}. \tag{3.27}$$

Sur un intervalle $[x_1, x_2]$ au sein du guide, $0 \leqslant x_1 \leqslant x_2 \leqslant L$, on a a priori deux flux de particules entrants dans la boîte, $j_+(x_1)$ et $j_-(x_2)$, qui sont partiellement transmis et réfléchis de sorte à former deux flux sortants $j_-(x_1)$ et $j_+(x_2)$. On ne peut alors pas définir le coefficient

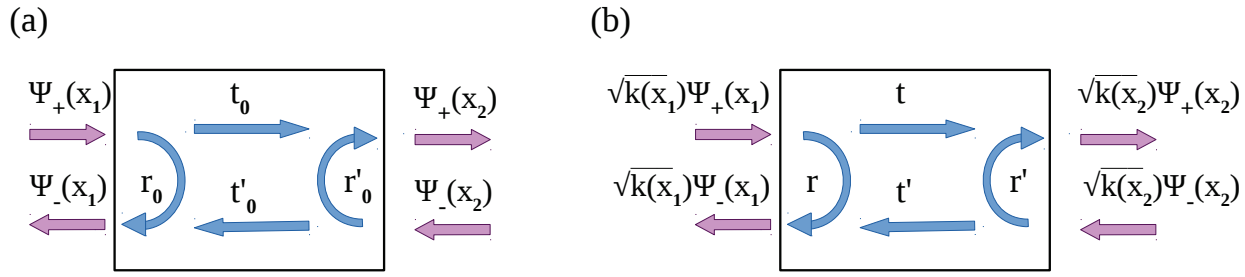


Fig 3.2 – Schémas des ondes incidentes et sortantes sur une portion de guide.

de transmission directement à partir du rapport de $j_+(x_2)$ sur $j_+(x_1)$ car le flux sortant en x_2 $[j_+(x_2)]$ provient non seulement de la transmission du flux entrant en x_1 $[j_+(x_1)]$ mais également de la réflexion du flux entrant en x_2 $[j_-(x_2)]$. On utilise alors les coefficients de transmission et de réflexion en amplitude t_0, t'_0, r_0 et r'_0 pour relier les fonctions d'onde sortantes aux fonctions d'onde entrantes [voir schéma 3.2 (a)] :

$$\begin{cases} \psi_-(x_1) = r_0\psi_+(x_1) + t'_0\psi_-(x_2) \\ \psi_+(x_2) = t_0\psi_+(x_1) + r'_0\psi_-(x_2) \end{cases} \tag{3.28}$$

Le coefficient de transmission qui nous intéresse est $T = \frac{k(x_2)}{k(x_1)}|t_0|^2$ (3.8), et celui de réflexion $R = |r_0|^2$ (3.9).

Afin de s'affranchir du rapport $\frac{k(x_2)}{k(x_1)}$ qui apparaît dans l'expression du coefficient de transmission, nous introduisons les coefficients $t = \sqrt{\frac{k(x_2)}{k(x_1)}}t_0$ et $t' = \sqrt{\frac{k(x_1)}{k(x_2)}}t'_0$. De plus, nous simplifions la notation r_0 en r, et r'_0 en r' [voir schéma 3.2 (b)]. Le système d'équations (3.28) se réécrit alors sous la forme

$$\begin{pmatrix} \sqrt{k(x_1)}\psi_-(x_1) \\ \sqrt{k(x_2)}\psi_+(x_2) \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} \sqrt{k(x_1)}\psi_+(x_1) \\ \sqrt{k(x_2)}\psi_-(x_2) \end{pmatrix}, \tag{3.29}$$

avec

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} r & t' \\ t & r' \end{pmatrix}. \tag{3.30}$$

La matrice $\mathbf{S}$, qui permet de passer des ondes entrantes aux ondes sortantes, est appelée matrice de diffusion (*scattering matrix*).

Nous rappelons ici quelques propriétés usuelles de la matrice de diffusion. Introduisons les notations

$$|\mathbf{\Psi}_{sortant}\rangle = \begin{pmatrix} \sqrt{k(x_1)}\psi_-(x_1) \\ \sqrt{k(x_2)}\psi_+(x_2) \end{pmatrix} \quad \text{et} \quad |\mathbf{\Psi}_{entrant}\rangle = \begin{pmatrix} \sqrt{k(x_1)}\psi_+(x_1) \\ \sqrt{k(x_2)}\psi_-(x_2) \end{pmatrix}. \tag{3.31}$$

Le flux de particules entrantes, $j_{entrant} = j_+(x_1) + |j_-(x_2)|$, et le flux de particules sortantes, $j_{sortant} = |j_-(x_1)| + j_+(x_2)$, valent (3.26)

$$j_{entrant} = \frac{\hbar}{m}\langle \mathbf{\Psi}_{entrant}|\mathbf{\Psi}_{entrant}\rangle, \tag{3.32}$$

$$j_{sortant} = \frac{\hbar}{m}\langle \mathbf{\Psi}_{sortant}|\mathbf{\Psi}_{sortant}\rangle. \tag{3.33}$$

Or on a $|\mathbf{\Psi}_{sortant}\rangle = \mathbf{S}\,|\mathbf{\Psi}_{entrant}\rangle$ d'après (3.29), d'où

$$j_{sortant} = \frac{\hbar}{m}\langle \mathbf{\Psi}_{entrant}|\mathbf{S}^\dagger\mathbf{S}|\mathbf{\Psi}_{entrant}\rangle\,. \tag{3.34}$$

Par conservation du flux de particules, $j_{sortant} = j_{entrant}$, donc la matrice de diffusion $\mathbf{S}$ est unitaire,

$$\mathbf{S}^\dagger\mathbf{S} = \mathbb{1}. \tag{3.35}$$

En appliquant la symétrie de renversement temporel, $|\mathbf{\Psi}_{entrant}\rangle$ et $|\mathbf{\Psi}_{sortant}\rangle$ sont inversés, et $\mathbf{S}$ devient $\mathbf{S}^*$, où la notation * désigne le complexe conjugué. On en déduit $|\mathbf{\Psi}_{entrant}\rangle = \mathbf{S}^*\,|\mathbf{\Psi}_{sortant}\rangle$, d'où $\mathbf{S}^* = \mathbf{S}^{-1}$. Or $\mathbf{S}$ est unitaire, donc $\mathbf{S}^{-1} = \mathbf{S}^\dagger = ({}^t\mathbf{S})^*$, où la notation ${}^t\mathbf{S}$ désigne la transposée de $\mathbf{S}$. On en déduit que la matrice $\mathbf{S}$ est symétrique :

$${}^t\mathbf{S} = \mathbf{S}. \tag{3.36}$$

La relation (3.36) impose

$$t' = t. \tag{3.37}$$

L'unitarité de $\mathbf{S}$ (3.35) conduit à

$$\begin{cases} |r|^2 + |t|^2 = |r'|^2 + |t|^2 = 1 \\ t^*r' + r^*t = 0. \end{cases} \tag{3.38}$$

On a donc

$$T = |t|^2 = |t'|^2 \qquad , \qquad R = |r|^2 = |r'|^2 \qquad \text{et} \qquad R + T = 1. \tag{3.39}$$

On définit à présent une matrice de transfert $\mathbf{T}(x_2, x_1)$ qui relie les ondes entrante et sortante à gauche de la portion de guide considérée aux ondes entrante et sortante à droite de cette portion de guide :

$$\begin{pmatrix} \sqrt{k(x_2)}\psi_+(x_2) \\ \sqrt{k(x_2)}\psi_-(x_2) \end{pmatrix} = \mathbf{T}(x_2, x_1) \begin{pmatrix} \sqrt{k(x_1)}\psi_+(x_1) \\ \sqrt{k(x_1)}\psi_-(x_1) \end{pmatrix}. \tag{3.40}$$

À partir de (3.29), (3.30), (3.38) et (3.39), on peut exprimer la matrice de transfert sous la forme

$$\mathbf{T} = \begin{pmatrix} 1/t^* & r'/t \\ -r/t & 1/t \end{pmatrix}. \tag{3.41}$$

Les matrices de transfert sont particulièrement intéressantes en ce qu'elles peuvent être chaînées

$$\mathbf{T}(x_n, x_1) = \mathbf{T}(x_n, x_{n-1})\mathbf{T}(x_{n-1}, x_{n-2})...\mathbf{T}(x_2, x_1). \tag{3.42}$$

L'introduction des fonctions $\psi_+(x)$ et $\psi_-(x)$ nous a ainsi permis de définir des coefficients de réflexion et de transmission en amplitude et en intensité ainsi que des matrices de diffusion et de transfert similaires au cas homogène.

3.2.2 Évolution de T à partir du chaînage de matrices de transfert

Notons $T(x)$ et $R(x)$ les coefficients de transmission et de réflexion du guide sur l'intervalle $[0, x]$, et $T_{\Delta x}(x)$ et $R_{\Delta x}(x)$ ceux de la portion de guide $[x, x + \Delta x]$. La relation de chaînage des matrices de transfert $\mathbf{T}(x + \Delta x, 0) = \mathbf{T}(x + \Delta x, x)\mathbf{T}(x, 0)$ permet d'établir à partir de (3.39) et (3.41)

$$T(x + \Delta x) = \frac{T(x)T_{\Delta x}(x)}{|1 - \sqrt{R(x)R_{\Delta x}(x)}\,\mathrm{e}^{i\theta_{\Delta x}(x)}\,|^2}, \tag{3.43}$$

où $\theta_{\Delta x}(x)$ est la phase accumulée pendant une réflexion interne totale au point x, définie par $r'(x)r_{\Delta x}(x) = |r'(x)r_{\Delta x}(x)|\,\mathrm{e}^{i\theta_{\Delta x}(x)}$.

Nous faisons l'hypothèse [1] d'un désordre faible, correspondant à un libre parcours moyen local grand devant la longueur d'onde locale et la longueur de corrélation du potentiel désordonné, $\ell_-(x) \gg \lambda(x), \sigma_{\mathrm{R}}$. On peut alors choisir une longueur Δx telle que

$$\lambda(x), \sigma_{\mathrm{R}} \ll \Delta x \ll \ell_-(x). \tag{3.44}$$

La longueur de la portion de guide d'onde Δx étant petite devant le libre parcours moyen, la valeur du coefficient de réflexion s'obtient à partir d'un unique événement de rétrodiffusion sur le potentiel désordonné. La probabilité d'un tel événement par unité de longueur Δx peut être calculée en utilisant la règle d'or de Fermi. On trouve alors (voir section 3.2.3 pour la démonstration de ce résultat et les hypothèses nécessaires)

$$\overline{R_{\Delta x}(x)} = \frac{\Delta x}{\ell_-(x)}. \tag{3.45}$$

En utilisant les relations $R(x) = 1 - T(x)$ et $R_{\Delta x}(x) = 1 - T_{\Delta x}(x)$, l'équation (3.43) devient

$$T(x + \Delta x) = \frac{T(x)\,[1 - R_{\Delta x}(x)]}{\left|1 - \sqrt{1 - T(x)}\,[R_{\Delta x}(x)]^{1/2}\,\mathrm{e}^{i\theta_{\Delta x}(x)}\right|^2}. \tag{3.46}$$

Sachant que $R_{\Delta x}(x) \sim \Delta x/\ell_-(x)$ [cf. Éq. (3.45)], d'après l'hypothèse (3.44), on a $R_{\Delta x}(x) \ll 1$. Un développement limité de l'équation (3.46) en $R_{\Delta x}(x)$ permet d'exprimer la variation du coefficient de transmission T lorsqu'on ajoute au guide de longueur L la cellule élémentaire de largeur Δx, $\Delta T(x) \equiv T(x + \Delta x) - T(x)$. On trouve

$$\begin{aligned}\Delta T(x) = T(x)\big\{&2\sqrt{1 - T(x)}\,[R_{\Delta x}(x)]^{1/2}\cos\theta_{\Delta x}(x) \\ &+ R_{\Delta x}(x)\left[T(x) - 2 + 4(1 - T(x))\cos^2\theta_{\Delta x}(x)\right]\big\} + O([R_{\Delta x}(x)]^{3/2})\end{aligned} \tag{3.47}$$

La phase $\theta_{\Delta x}(x)$ et le coefficient de réflexion $R_{\Delta x}(x)$ sur la portion de guide $[x, x + \Delta x]$ sont des quantités aléatoires en présence du potentiel désordonné. Par conséquent, le coefficient de transmission subit une évolution stochastique dans l'espace $[0, 1]$ lorsqu'on augmente la longueur du guide. Ce processus est analogue au mouvement brownien d'une particule dont la position y effectue des sauts aléatoires Δy à chaque pas de temps Δt. De même que pour une telle particule on peut définir une probabilité $W(y, t)$ d'être en y à l'instant t, on définit ici la probabilité $P(T, x)$ que le coefficient de transmission soit égal à T lorsque le guide a pour longueur x.

Cette probabilité peut être obtenue à l'aide du développement de Kramers-Moyal [90],

$$\frac{\partial P(T, x)}{\partial x} = \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{(-1)^n}{n!}\frac{\partial^n}{\partial T^n}\left[M_n(T)P(T, x)\right] \tag{3.48}$$

où le moment $M_n(T)$ est égal à

$$M_n(T) = \left.\frac{\overline{[\Delta T(x)]^n}}{\Delta x}\right|_{\Delta x \to 0}. \tag{3.49}$$

1. La même hypothèse de désordre faible a été effectuée dans le calcul analytique de la probabilité de diffusion au chapitre précédent (section 2.1). En effet, on a supposé $\ell_-(x) \gg \sigma_{\mathrm{R}}$ (2.37) afin d'interdire les croisements entre vertex d'interactions, et on remarque que la condition $\ell_-(x) \gg \lambda(x)$ est équivalente à $\alpha \times \frac{\hbar^2 k^3(x)}{Fm} \gg 1$, ce qui rappelle l'hypothèse (2.30).

La moyenne sur l'ensemble des réalisations du désordre se traduit par une moyenne sur le coefficient de réflexion $R_{\Delta x}(x)$ et une moyenne sur la phase $\theta_{\Delta x}(x)$, que l'on suppose indépendantes. La longueur d'onde $\lambda(x)$ étant petite comparée à la taille de la cellule Δx (3.44), on suppose que la phase $\theta_{\Delta x}(x)$ est uniformément distribuée sur $[0, 2\pi[$.

On calcule alors à partir de (3.45) et (3.47) les différents moments du développement de Kramers-Moyal,

$$M_1 = -\frac{T^2(x)}{\ell_-(x)} \qquad M_2 = \frac{2T^2(x)[1-T(x)]}{\ell_-(x)} \qquad M_n = 0 \text{ for } n \geqslant 3. \tag{3.50}$$

On remarque que seuls les deux premiers moments sont non nuls. Le développement de Kramers-Moyal (3.48) se réduit alors à une équation de Fokker-Planck sur $P(T, x)$,

$$\ell_-(x)\frac{\partial P(T,x)}{\partial x} = \frac{\partial}{\partial T}\Big[T^2 P(T,x)\Big] + \frac{\partial^2}{\partial T^2}\Big[T^2(1-T)P(T,x)\Big], \tag{3.51}$$

vérifiant la condition initiale $P(T, 0) = \delta(T-1)$ (la transmission d'un guide de longueur nulle vaut 1).

La démarche que nous avons suivie pour établir l'équation de Fokker-Planck (3.51) reproduit celle utilisée dans la méthode des matrices de transfert usuelle (milieu désordonné homogène). Nous aboutissons à une équation de Fokker-Planck formellement identique à celle obtenue dans un système homogène [cf. Éq. (146) dans la réf. [27], où $T = (1+\lambda)^{-1}$], mais dans laquelle le libre parcours moyen, constant dans un milieu homogène, est remplacé par un libre parcours moyen local $\ell_-(x)$ qui dépend de l'énergie cinétique locale $K(x)$ de la particule.

On définit alors une variable adimensionnée $s(x)$ correspondant à la longueur du guide renormalisée par ce libre parcours moyen

$$s(x) = \int_0^x \frac{\mathrm{d}x'}{\ell_-(x')}, \tag{3.52}$$

de sorte à vérifier

$$\frac{\mathrm{d}\, s(x)}{\mathrm{d}x} = \frac{1}{\ell_-(x)}. \tag{3.53}$$

L'équation (3.51) conduit alors à une équation de Fokker-Planck sur la distribution de probabilité du coefficient de transmission en $s = s(x)$, $\check{P}(T, s(x)) = P(T, x)$:

$$\frac{\partial \check{P}(T,s)}{\partial s} = \frac{\partial}{\partial T}\Big(T^2\check{P}(T,s)\Big) + \frac{\partial^2}{\partial T^2}\Big(T^2(1-T)\check{P}(T,s)\Big). \tag{3.54}$$

La distribution de probabilité $\check{P}(T, s)$ vérifie la condition initiale $\check{P}(T, 0) = \delta(T-1)$ (car le guide a une longueur nulle pour $s = 0$).

L'équation de Fokker-Planck (3.54) sur $\check{P}(T, s)$ ne fait plus intervenir le libre parcours moyen local $\ell_-(x)$. L'introduction de la métrique s nous a ainsi permis d'obtenir une équation de Fokker-Planck universelle, c'est-à-dire valide quelle que soit la fonction de corrélation d'ordre deux du potentiel désordonné, et pour toute force $F(x)$. Les effets de la force et de la forme du potentiel désordonné sont alors entièrement inclus dans la valeur de la métrique s.

3.2.3 Calcul du coefficient de réflexion résultant d'un événement de rétrodiffusion unique

Nous établissons dans cette section le résultat (3.45) qui donne le lien entre le coefficient de réflexion $\overline{R_{\Delta x}(x)}$ et le libre parcours moyen local $\ell_-(x)$. Sur la longueur Δx, on souhaite calculer le coefficient de réflexion résultant d'un unique événement de rétrodiffusion.

Une première méthode que nous présentons ici consiste à utiliser la règle d'or de Fermi. Nous commençons par présenter le résultat dans le cas d'un système homogène ($F(x) = 0$). Le coefficient de réflexion donne la probabilité qu'une onde plane incidente de vecteur d'onde k soit réfléchie en une onde plane de vecteur d'onde $-k$ par le désordre présent dans la cellule élémentaire de largeur Δx.

En utilisant la règle d'or de Fermi, la probabilité par unité de temps de rétrodiffusion de l'état initial $|i\rangle$ correspondant à une onde plane de vecteur d'onde k, en un état final $|f\rangle$ correspondant à une onde plane de vecteur d'onde $-k$, est donnée par

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar}\overline{|\langle f|\hat{V}|i\rangle|^2}\mathcal{N}(E), \tag{3.55}$$

où $\mathcal{N}(E)$ est la densité d'états autour de l'état final $|f\rangle$ d'énergie $E = \hbar^2k^2/2m$. Ainsi, on a pour un système 1D de longueur L,

$$\mathcal{N}(E)dE = \mathcal{N}(E)\frac{\hbar^2 k}{m}\,\mathrm{d}k = \frac{L\,\mathrm{d}k}{2\pi}, \tag{3.56}$$

soit

$$\mathcal{N}(E) = \frac{L}{2\pi\hbar}\sqrt{\frac{m}{2E}} = \frac{L\rho(E)}{2}, \tag{3.57}$$

où $\rho(E)$ désigne la densité d'états par unité de volume (1.39). On remarque que la densité d'états autour de l'état final de vecteur d'onde négatif diffère de la densité d'états totale $L\rho(E)$ par un facteur deux, car cette densité d'états totale prend en compte les états de vecteurs d'onde positifs et négatifs. Sachant que $\langle x|i\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}\,\mathrm{e}^{ikx}$ et $\langle x|f\rangle = \frac{1}{\sqrt{L}}\,\mathrm{e}^{-ikx}$, on obtient

$$\Gamma = \frac{2\pi}{\hbar}\mathcal{N}(E)\overline{\langle f|\hat{V}|i\rangle\langle i|\hat{V}|f\rangle} \tag{3.58}$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar}\mathcal{N}(E)\int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x' \langle f|x\rangle\langle x|i\rangle\langle i|x'\rangle\langle x'|f\rangle\,\overline{V(x)V(x')} \tag{3.59}$$

$$= \frac{2\pi}{\hbar}\frac{\mathcal{N}(E)}{L^2}\int \mathrm{d}x \int \mathrm{d}x'\,\mathrm{e}^{2ikx}\,C_2(x-x') \tag{3.60}$$

$$= \frac{\tilde{C}_2(2k)}{\hbar^2}\sqrt{\frac{m}{2E}}. \tag{3.61}$$

La probabilité de réflexion par unité de longueur est alors égale à Γ/v où $v = \sqrt{2E/m}$ est la vitesse de la particule. On en déduit que le coefficient de réflexion de la portion de guide de longueur Δx vaut

$$\overline{R_{\Delta x}(x)} = \Delta x\frac{\Gamma}{v} = \Delta x\frac{\tilde{C}_2(2k)m}{2\hbar^2 E}. \tag{3.62}$$

En présence d'une force $F(x)$, le raisonnement précédent peut être appliqué s'il est possible d'identifier localement sur la portion de guide Δx des ondes quasi-planes dirigées vers la gauche et vers la droite. Nous verrons au chapitre 4, section 4.3.1, qu'une telle identification est possible dans le cas d'une force constante. Nous nous plaçons dans l'hypothèse où la force varie peu sur la cellule élémentaire,

$$\partial_x[F(x)]\Delta x \ll F(x), \tag{3.63}$$

de sorte à pouvoir appliquer les résultats obtenus pour une force constante. On peut montrer que sous l'hypothèse où la variation relative du vecteur d'onde local $k(x)$ à l'échelle de la longueur d'onde locale $\lambda(x)$ est négligeable,

$$\frac{\hbar^2 k^3(x)}{F(x)m} \gg 1, \tag{3.64}$$

un état stationnaire d'énergie E est la somme de deux ondes de la forme

$$\phi^{\pm}(x) \sim \frac{1}{\sqrt{k(x)}}\, \mathrm{e}^{\pm i \frac{\hbar^2 k^3(x)}{3mF}}\,. \tag{3.65}$$

Afin de pouvoir assimiler ces ondes à des ondes planes de vecteur d'onde $k(x)$ constant sur la cellule de largeur Δx, les deux conditions suivantes doivent être vérifiées.

1. On veut d'une part que $k(x)$ varie peu sur la largeur Δx. Cette condition correspond à $k(x+\varepsilon) \simeq k(x)$ pour $0 < \varepsilon < \Delta x$, i.e. $\partial_x[k(x)] \times \Delta x \ll k(x)$, ce qui donne

$$\frac{F(x)\Delta x}{K(x)} \ll 1. \tag{3.66}$$

   Sachant que $\lambda(x) \ll \Delta x$, on retrouve l'hypothèse (3.64) en remplaçant Δx par $\lambda(x)$ dans (3.66). De plus, à partir de $\sigma_{\mathrm{R}} \ll \Delta x$, on obtient en remplaçant Δx par σ_{R} dans (3.66) la condition de validité supplémentaire

$$\sigma_{\mathrm{R}} F(x) \ll K(x). \tag{3.67}$$

   Cette hypothèse correspond à supposer que le travail de la force sur la longueur de corrélation du désordre est négligeable devant l'énergie cinétique locale de la particule.

2. On veut d'autre part approximer la phase $\hbar^2 k^3(x+\varepsilon)/3mF$ par la phase d'une onde plane $k(x)\varepsilon$ pour $0 < \varepsilon < \Delta x$. En utilisant le développement limité (2.49), on déduit la condition de validité de cette approximation :

$$\frac{mF(x)(\Delta x)^2}{\hbar^2 k(x)} \ll 1. \tag{3.68}$$

   On obtient à nouveau l'hypothèse (3.64) en remplaçant Δx par $\lambda(x)$ dans (3.68). En remplaçant Δx par σ_{R} dans (3.68), une dernière condition de validité apparaît

$$\frac{mF(x)\sigma_{\mathrm{R}}^2}{\hbar^2 k(x)} \ll 1. \tag{3.69}$$

Il est intéressant de remarquer que les conditions de validité du calcul que nous avons établies ici [Éq. (3.64), (3.67) et (3.69)] sont toutes vraies suffisamment loin dans le guide pour une force constante positive parce que l'énergie cinétique locale $K(x)$ est alors croissante non bornée. De plus, ces mêmes hypothèses ont été effectuées dans l'approche diagrammatique développée au chapitre précédent pour le calcul de la probabilité de diffusion de la particule [Éq. (2.30), (2.48) et (2.50)]. Le coefficient de réflexion s'obtient si les conditions énumérées précédemment sont vérifiées en remplaçant k par $k(x)$, et E par $K(x)$ dans l'équation (3.62), soit

$$\overline{R_{\Delta x}(x)} = \frac{\Delta x}{\ell_-(x)} \qquad \text{où} \qquad \ell_-(x) = \frac{2\hbar^2 K(x)}{m\tilde{C}_2[2k(x)]}. \tag{3.70}$$

Au chapitre 4, section 4.3.5, nous présenterons un autre calcul du coefficient de réflexion pour une force constante, à l'aide de la méthode diagrammatique. Nous étendrons également son calcul à un ordre supérieur dans le potentiel désordonné.

3.3 Transmission analytique

Il nous reste à résoudre l'équation de Fokker-Planck universelle (3.54) afin de déterminer la distribution de probabilité du coefficient de transmission et d'en déduire notamment les valeurs typique et moyenne du coefficient de transmission.

3.3.1 Distribution de la transmission

L'équation de Fokker-Planck (3.54) a été résolue par A. A. Abrikosov en 1980 [91] et conduit à

$$\check{P}(T,s) = \frac{2\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}T^2}\int_{\operatorname{argch}\sqrt{1/T}}^{\infty}\mathrm{d}y\frac{y\ \mathrm{e}^{-y^2/s}}{\sqrt{\operatorname{ch}^2 y - 1/T}}. \tag{3.71}$$

On notera que cette distribution est bien normalisée pour $T \in [0,1]$ [voir annexe D, section D.1].

La distribution de probabilité du coefficient de transmission d'un guide de longueur L est donc donnée par $P(T,L) = \check{P}[T,s(L)]$, où la métrique $s(L)$ vaut

$$s(L) = \int_0^L \mathrm{d}x\ \frac{m\tilde{C}_2[2k(x)]}{2\hbar^2 K(x)}, \tag{3.72}$$

et les fonctions $K(x)$ et $k(x)$ désignent respectivement l'énergie cinétique locale (3.19) et le vecteur d'onde local (3.20) de la particule.

Nous verrons par la suite que dans la limite d'un guide très long $L \to +\infty$, la métrique $s(L)$ tend vers $+\infty$ en l'absence de force (cf. section 3.3.2) ou encore en présence d'une force constante et d'un désordre blanc (cf. section 3.4). Il est donc intéressant d'étudier le comportement de la distribution de probabilité du coefficient de transmission $\check{P}(T,s)$ dans la limite $s \to +\infty$.

En utilisant la forme asymptotique de $\check{P}(T,s)$ en $s \to +\infty$, donnée dans les références [91, 92], on trouve que la distribution du logarithme du coefficient de transmission,

$$P_0(\ln T, s) = \check{P}(T,s)\left|\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}\ln T}\right| = T\check{P}(T,s), \tag{3.73}$$

vaut pour $s \to \infty$

$$P_0(\ln T, s) \simeq \frac{1}{2\sqrt{\pi s}}\exp\left[-\frac{(\ln T + s)^2}{4s}\right] \times K(\ln T, s), \tag{3.74}$$

avec

$$K(\ln T, s) = \frac{-\ln T}{s}\left[\Gamma\left(\frac{-\ln T}{2s}+\frac{1}{2}\right)\right]^2\left[\Gamma\left(\frac{-\ln T}{s}+1\right)\right]^{-1}. \tag{3.75}$$

La première partie de l'expression (3.74),

$$G_0(\ln T, s) = \frac{1}{2\sqrt{\pi s}}\exp\left[-\frac{(\ln T + s)^2}{4s}\right], \tag{3.76}$$

est une distribution gaussienne (loi normale) de $\ln T$ de moyenne $-s$ et de variance $2s$. La distribution $P_0(\ln T, s)$ diffère de la loi normale $G_0(\ln T, s)$ par la présence d'un terme correctif $K(\ln T, s)$. Néanmoins, lorsque $\ln T$ est proche de la moyenne $-s$ de la distribution gaussienne $G_0(\ln T, s)$, à une distance inférieure à quelques écarts-types $|\ln T + s| < M\sqrt{2s}$, avec M réel fini, le terme correctif $K(\ln T, s)$ tend vers $[\Gamma(1)]^2[\Gamma(2)]^{-1} = 1$ dans la limite $s \to \infty$. Par conséquent, pour $s \to \infty$, la distribution du logarithme du coefficient de transmission est donnée par une loi normale. On parle de distribution log-normale de la transmission. De plus, la moyenne et la variance de la loi normale obtenue ne dépendent que de s et valent respectivement $-s$ et $2s$.

Sur la figure 3.3, on représente des histogrammes des valeurs de $\ln T$ obtenues à partir de simulations numériques (cf. section 3.1.2), avec cent mille réalisations du désordre pour chaque histogramme. Différentes forces et différents modèles de désordre sont utilisés, et la valeur théorique de s est calculée dans chacune des situations considérées : pour une force nulle et

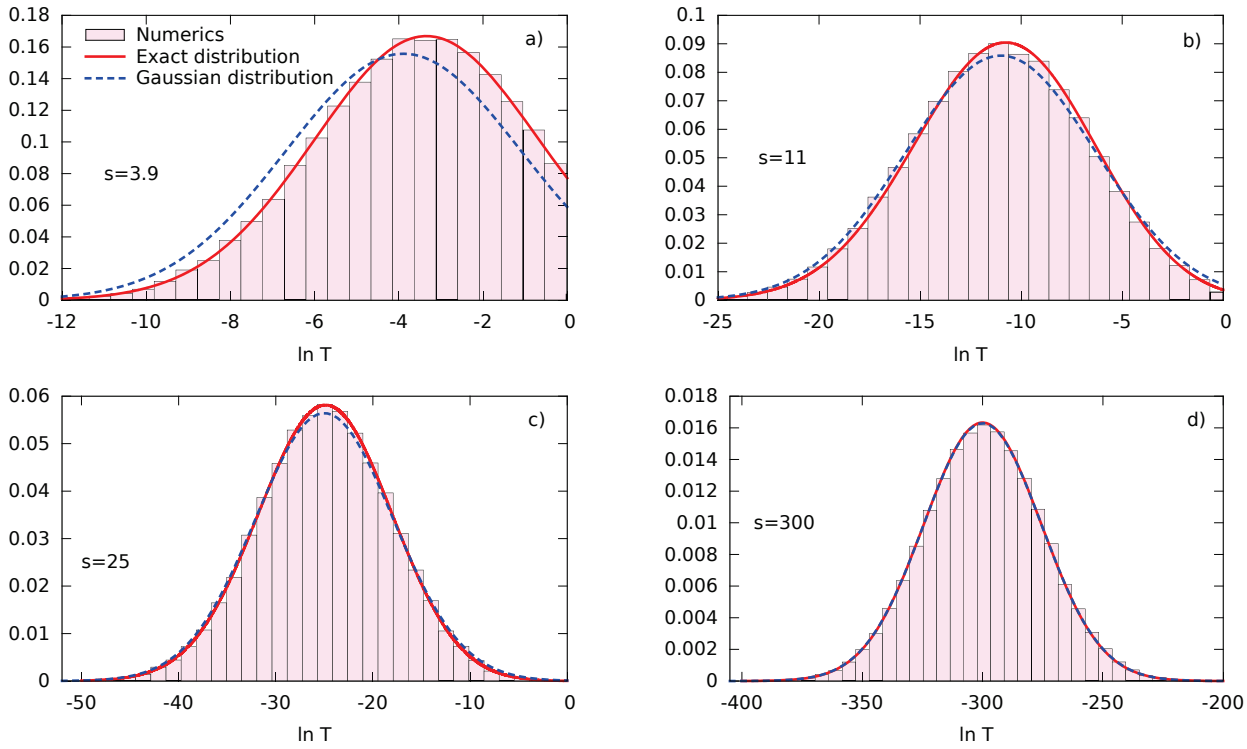


Fig 3.3 – Distribution de probabilité du logarithme de la transmission, pour différentes valeurs de la métrique s. Les histogrammes sont obtenus à partir de simulations numériques. La distribution analytique exacte est tracée en trait plein rouge. La distribution log-normale tronquée est tracée en tirets bleus. (a) Force constante et désordre de corrélations spatiales gaussiennes. (b) Force croissante et désordre blanc. (c) Force constante et désordre blanc. (d) Force nulle.

un désordre blanc (3.83), pour une force constante et un désordre blanc (3.88), pour une force constante et un désordre de fonction de corrélation à deux points gaussienne (3.98), et pour une force croissante et un désordre blanc (3.102). Connaissant $s(L)$, on trace la distribution de probabilité théorique du logarithme de la transmission $P_0(\ln T, s)$ (courbes rouge en traits pleins). On observe que cette courbe est en excellent accord avec les histogrammes. À titre de comparaison, on trace en tirets bleus la distribution obtenue en utilisant la loi log-normale tronquée, c'est-à-dire une distribution gaussienne de $\ln T$ de moyenne $-s$ et de variance $2s$ tronquée sur $]-\infty, 0]$ et renormalisée. On observe que la distribution exacte se rapproche de la distribution gaussienne à grand s sur la zone tracée, c'est-à-dire au voisinage du pic de la distribution. Les ailes de la distribution (non visibles sur la figure) sont cependant mal prises en compte en utilisant la loi log-normale tronquée, et il est donc nécessaire d'utiliser la distribution exacte pour obtenir des résultats précis sur la transmission. Davantage de détails sur la loi log-normale sont donnés en annexe B.

3.3.2 Transmissions typique et moyenne

La distribution exacte de la transmission $\check{P}(T, s)$ permet de calculer les valeurs moyennes de la transmission et de son logarithme notamment. Pour la valeur moyenne du logarithme de la transmission (cf. annexe D, on obtient section D.2) :

$$\overline{\ln T} = \int_0^1 \mathrm{d}T\ \check{P}(T, s) \ln T = -s. \tag{3.77}$$

La valeur absolue de la valeur moyenne du logarithme de la transmission est donc simplement donnée par la valeur de la métrique s.

On obtient également la moyenne du coefficient de transmission (cf. annexe D, section D.3) :

$$\overline{T} = \frac{4\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}} \int_0^\infty \mathrm{d}y\ \frac{y^2\,\mathrm{e}^{-y^2/s}}{\mathrm{ch}(y)}. \tag{3.78}$$

Le comportement de $\overline{T}$ dans la limite $s \to +\infty$ s'obtient à partir de (3.78) en remplaçant $\mathrm{e}^{-y^2/s}$ par sa limite $\mathrm{e}^{-y^2/s} \simeq 1$ à $s \to +\infty$. Sachant que [93]

$$\int_0^\infty \mathrm{d}y\ \frac{y^2}{\mathrm{ch}\,y} = \frac{\pi^3}{8}, \tag{3.79}$$

on obtient pour $s \to +\infty$

$$\overline{T} \simeq \frac{\pi^{5/2}}{2s^{3/2}}\,\mathrm{e}^{-s/4}\,. \tag{3.80}$$

La valeur moyenne du coefficient de transmission décroît donc essentiellement exponentiellement avec s dans la limite $s \to +\infty$. Une correction algébrique à la décroissance exponentielle, en $s^{-3/2}$, est présente.

Dans le régime $s \gg 1$, l'incertitude sur le logarithme de la transmission est donnée par [91]

$$\frac{\sqrt{\overline{(\ln T)^2} - \overline{\ln T}^2}}{\overline{\ln T}} \simeq \sqrt{\frac{2}{s(L)}}. \tag{3.81}$$

Le rapport de l'écart-type sur la valeur moyenne du logarithme coefficient de transmission dans la limite $s \to +\infty$ tend donc vers 0. Le logarithme de la transmission est ainsi auto-moyennant à grande distance dans un système pour lequel la métrique s tend vers $+\infty$ à grande distance. Dans ce même régime $s \gg 1$, l'incertitude sur la transmission moyenne vaut [91]

$$\frac{\sqrt{\overline{T^2} - \overline{T}^2}}{\overline{T}} \simeq \frac{s(L)^{3/4}}{\sqrt{2}\pi^{5/2}}\,\mathrm{e}^{s(L)/8}\,. \tag{3.82}$$

Le rapport de l'écart-type sur la valeur moyenne du coefficient de transmission dans la limite $s \to +\infty$ augmente donc exponentiellement avec s. Ces très larges fluctuations du coefficient de transmission à grand s sont à l'origine de la différence de comportement entre les transmissions typique T^{typ} et moyenne $\overline{T}$. Elles indiquent de plus que contrairement à son logarithme, le coefficient de transmission n'est pas auto-moyennant dans un système tel que $s \to +\infty$ à grande distance.

Commençons par appliquer les résultats précédents au cas usuel de la localisation d'Anderson dans un système homogène [$F(x) = 0$]. Le libre parcours moyen ℓ_- est alors indépendant de la position de la particule. La métrique s (3.52),

$$s(L) = \int_0^L \frac{\mathrm{d}x}{\ell_-} = \frac{L}{\ell_-}, \tag{3.83}$$

est donc simplement égale à la longueur du guide en unité du libre parcours moyen. On en déduit en utilisant l'Éq. (3.77) que la transmission typique,

$$T^{typ}(L) = \exp\left[\overline{\ln T(L)}\right] = \exp[-s(L)] = \exp\left(\frac{-L}{\ell_-}\right), \tag{3.84}$$

décroît exponentiellement avec la longueur du guide, $T^{typ} = \mathrm{e}^{-L/\ell_{loc}}$, sur une longueur de localisation ℓ_{loc} égale au libre parcours moyen ℓ_-.
Dans la limite d'un guide de longueur grande devant le libre parcours moyen ($L \gg \ell_-$), la transmission moyenne est égale à (3.80)

$$\overline{T} \simeq \frac{\pi^{5/2}\ell_-^{3/2}}{2L^{3/2}} \exp\left(\frac{-L}{4\ell_-}\right). \tag{3.85}$$

La transmission moyenne décroît donc exponentiellement avec la longueur du système, $\overline{T} \sim \mathrm{e}^{-L/\ell_{loc}}$, sur une longueur de localisation ℓ_{loc} égale à quatre fois le libre parcours moyen.

3.4 Localisation algébrique en présence d'une force constante et d'un désordre blanc

On souhaite à présent appliquer le résultat universel sur la distribution de probabilité [Éq. (3.71)] au cas d'un système inhomogène. Nous nous intéressons dans cette section au cas le plus simple d'une force constante F et d'un désordre blanc, de fonction de corrélation à deux points $C_2(x) = U_{\mathrm{R}}\delta(x)$, pour lesquels des résultats numériques dans le modèle de Kronig-Penney ont été présentés au chapitre 2.

Analyse dimensionnelle

Pour une force constante et un désordre blanc, toute grandeur moyennée sur l'ensemble des réalisations du désordre dépend uniquement du système de paramètres $S_1 = \{E, F, U_{\mathrm{R}}, L, \hbar^2/2m\}$. Ce système de paramètres S_1 est équivalent au système $S_2 = \{FL/E, \alpha, \varepsilon, \hbar^2/2m, E\}$, avec

$$\varepsilon = \frac{\hbar F}{\sqrt{2m}E^{3/2}}. \tag{3.86}$$

Les trois premiers paramètres du système S_2 sont sans dimension, et les deux derniers ont des dimensions indépendantes. Par conséquent, les grandeurs adimensionnées telles que la métrique s ou la transmission (T^{typ} et $\overline{T}$ par exemple) ne dépendent que des trois premiers paramètres : $\{FL/E, \alpha, \varepsilon\}$.

De plus, les résultats analytiques que nous avons obtenus à l'aide de la méthode des matrices de transfert sont valides sous les hypothèses $\sigma_{\mathrm{R}}F \ll E + Fx$ (3.67), $\frac{mF\sigma_{\mathrm{R}}^2}{\hbar^2 k(x)} \ll 1$ (3.69) et $\frac{\hbar^2 k^3(x)}{Fm} \gg 1$ (3.64). Les deux premières hypothèses sont vérifiées pour un désordre blanc ($\sigma_{\mathrm{R}} = 0$). La dernière est valide pour tout $x > 0$ si elle est vérifiée en $x = 0$ (car $k(x)$ est une fonction croissante de x). Or on a $\frac{\hbar^2 k^3(0)}{Fm} = 2/\varepsilon$. On en déduit que l'hypothèse (3.64) est valide pour tout x si $\varepsilon \ll 1$.

Résultats analytiques

L'énergie cinétique locale en présence d'une force constante vaut $K(x) = E + Fx$, de sorte que le libre parcours moyen local (3.23) vaut

$$\ell_-(x) = \frac{2\hbar^2(E + Fx)}{mU_{\mathrm{R}}}. \tag{3.87}$$

On en déduit la valeur de la métrique $s(L)$:

$$s(L) = \int_0^L \frac{\mathrm{d}x}{\ell_-(x)} = \frac{mU_{\mathrm{R}}}{2\hbar^2}\int_0^L \frac{\mathrm{d}x}{E + Fx} = \frac{1}{2\alpha}\ln\left(1 + \frac{FL}{E}\right). \tag{3.88}$$

La métrique $s(L)$ augmente donc de manière logarithmique avec la longueur du guide L lorsqu'une force constante et un bruit blanc sont appliqués au système. On remarque que la métrique $s(L)$ que l'on obtient ici ne dépend que de α et FL/E et est indépendante de $\varepsilon \ll 1$.

La valeur moyenne du logarithme de la transmission

$$\overline{\ln T(L)} = -s(L) = -\frac{1}{2\alpha} \ln\left(1 + \frac{FL}{E}\right), \tag{3.89}$$

est en accord avec le résultat numérique (2.104) obtenu dans le modèle de Kronig-Penney [1]. Notons que nous établissons ici de manière analytique l'expression de la valeur moyenne du coefficient de transmission, alors que cette expression est obtenue de façon heuristique dans la Réf. [1]. La valeur moyenne du logarithme du coefficient de transmission conduit à une transmission typique

$$T^{typ} = \exp(\overline{\ln T}) = \frac{1}{(1 + FL/E)^{1/2\alpha}}. \tag{3.90}$$

Dans la limite d'un guide long ($L \gg E/F$), on obtient une décroissance algébrique de la transmission typique,

$$T^{typ} \sim L^{-1/2\alpha}, \tag{3.91}$$

dont la loi de puissance vaut $-1/2\alpha$.

La valeur moyenne du coefficient de transmission vaut (3.78)

$$\overline{T} = \frac{8\sqrt{2}\alpha^{3/2}}{\sqrt{\pi}(1 + FL/E)^{1/8\alpha}} \left[\ln(1 + FL/E)\right]^{-3/2} \int_0^\infty \mathrm{d}y \, \frac{y^2 \, \mathrm{e}^{-2y^2\alpha/\ln(1+FL/E)}}{\mathrm{ch}(y)}. \tag{3.92}$$

Dans le régime asymptotique $s(L) \gg 1$, atteint pour $L \gg \frac{E}{F}\,\mathrm{e}^{2\alpha}$, la valeur moyenne de la transmission a une expression approchée plus simple (3.80)

$$\overline{T} \simeq \frac{\sqrt{2}\alpha^{3/2}\pi^{5/2}}{(1 + FL/E)^{1/8\alpha}} \left[\ln(1 + FL/E)\right]^{-3/2}. \tag{3.93}$$

Si de plus $L \gg E/F$, on obtient

$$\overline{T} \sim (\ln L)^{-3/2} L^{-1/8\alpha}. \tag{3.94}$$

La transmission moyenne décroît donc essentiellement algébriquement avec la longueur du guide, avec une loi de puissance égale à $-1/8\alpha$. On retrouve ainsi la loi de puissance de la décroissance de la transmission typique divisée par un facteur quatre. Ce facteur quatre a la même origine qu'en l'absence de force. Cependant, en l'absence de force il entraîne simplement un changement d'échelle d'un facteur quatre de la longueur de localisation entre les transmissions typique et moyenne [cf. Éq. (3.84) et (3.85)]. Ici, en revanche, il conduit à une décroissance très différente de ces deux quantités car l'exposant de la décroissance algébrique est divisé par quatre. À la décroissance algébrique de la transmission moyenne s'ajoute en outre une correction logarithmique en $(\ln L)^{-3/2}$.

Il est intéressant de remarquer que la décroissance algébrique asymptotique des transmissions typique et moyenne est indépendante de l'énergie E de la particule. Cela provient du fait que l'énergie qui intervient dans le libre parcours moyen local (3.23) est l'énergie cinétique locale de la particule, $K(x) = E + Fx$. À grande distance, l'énergie cinétique locale $K(x)$ est dominée par le travail de la force Fx et l'énergie cinétique E en entrée du guide devient négligeable.

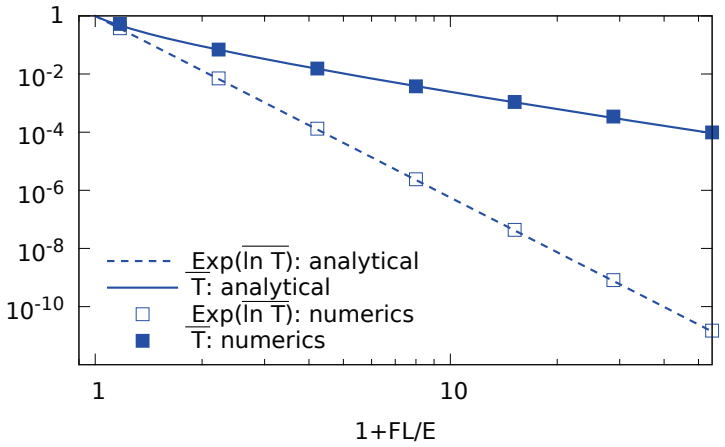


Fig 3.4 – Transmissions typique et moyenne d'un guide de longueur L, en fonction de $1 + FL/E$, tracées en échelle log-log. Les courbes en tirets et trait plein correspondent respectivement aux valeurs analytiques des transmissions typique (3.90) et moyenne (3.78). Les transmissions typiques (carrés vides) et moyennes (carrés pleins) numériques sont calculées en moyennant sur cent mille réalisations du désordre les valeurs de $\ln T$ et T obtenues, pour différentes longueurs du guide.

Résultats numériques

Sur la figure 3.4, nous présentons les transmissions typique et moyenne issues de simulations numériques (cf. section 3.1.2) en fonction de $1 + FL/E$. On a fixé ici $\alpha = 0.08$ et $\varepsilon = 0.01$. Les résultats sont en excellent accord avec les valeurs exactes théoriques de T^{typ} (3.90) et $\overline{T}$ (3.78).

La décroissance asymptotique algébrique des transmissions typique et moyenne est mise en évidence en traçant T^{typ} et $\overline{T}$ en fonction de $1 + FL/E$ en échelle log-log : on obtient ainsi une droite pour T^{typ}, et pour $\overline{T}$ à grand L.

Bilan

En présence d'un désordre blanc, l'ajout d'une force constante dans un guide modifie fortement le comportement de la transmission à travers ce guide. En effet, la décroissance exponentielle caractéristique de la localisation d'Anderson dans un milieu homogène devient une décroissance plus lente, algébrique. La loi de puissance de cette décroissance ne dépend que du paramètre $\alpha = \hbar^2 F/mU_{\mathrm{R}}$ qui caractérise le rapport entre la force et l'intensité du potentiel désordonné.

En outre, alors que la transmission moyenne $\overline{T}$ présente la même localisation exponentielle que la densité moyenne $\overline{n}(x)$ d'un paquet d'onde localisé en l'absence de force, l'ajout d'une force conduit à un comportement différent entre $\overline{T}$ et $\overline{n}(x)$. En effet, la transmission $\overline{T}$ décroît algébriquement quelle que soit la valeur de la force appliquée, alors que le paquet d'onde n'est localisé que pour une force faible devant l'intensité du désordre ($\alpha < 1$). De plus, l'exposant de la décroissance algébrique de la densité est alors égal à $1 + (1 - \alpha)^2/8\alpha$ [cf. Éq. (2.93)] et est donc très différent de celui de la transmission moyenne, égal à $1/8\alpha$. Nous interpréterons ces différences dans la Sec. 4.3.6 du Chap. 4.

3.5 Délocalisation

3.5.1 Désordre corrélé

Le modèle de désordre blanc est intéressant d'un point de vue théorique et est souvent utilisé en physique du solide pour comprendre le comportement de matériaux au sein desquels les caractéristiques du potentiel désordonné sont inconnues. Cette approximation d'un désordre blanc se justifie dans le cas où la longueur de corrélation du désordre σ_{R} est très petite devant la longueur d'onde des particules. Dans les expériences de localisation d'Anderson avec des atomes ultrafroids en revanche, le potentiel désordonné peut être connu de manière précise et il peut présenter une longueur de corrélation non négligeable devant la longueur d'onde des particules. C'est le cas d'un potentiel de tavelures par exemple. Il est donc nécessaire de prendre en compte la fonction de corrélation du désordre pour rendre compte des résultats expérimentaux de localisation d'Anderson d'atomes ultrafroids. Alors que dans un système homogène les corrélations spatiales du potentiel désordonné conduisent à une simple renormalisation de la longueur de localisation, nous verrons qu'en présence d'une force leur effet est beaucoup plus spectaculaire car elles mènent à une délocalisation. On s'attend a priori à ce que les corrélations du potentiel désordonné jouent effectivement un rôle plus important en présence d'une force étant donné que les particules accélérées par la force voient leur longueur d'onde locale diminuer, ce qui les rend sensibles à la longueur de corrélation du désordre à grande distance.

Cas général

Dans le cas d'un désordre corrélé et d'une force constante, la métrique adimensionnée $s(L)$ est donnée par

$$s(L) = \int_0^L \mathrm{d}x \frac{m\tilde{C}_2[2k(x)]}{2\hbar^2(E+Fx)} = \frac{m}{F\hbar^2}\int_{k(0)}^{k(L)} \mathrm{d}k \frac{\tilde{C}_2(2k)}{k}. \tag{3.95}$$

Or pour tout type de désordre réaliste, de fonction de corrélation $C_2(x)$ bornée, la fonction $\tilde{C}_2(k)$ est sommable. Par conséquent, lorsque la longueur du guide tend vers l'infini et donc $k(L) \to \infty$, l'intégrale de $\frac{\tilde{C}_2(2k)}{k}$ converge vers une valeur finie. Cette saturation de $s(L)$ à une valeur maximale $s(+\infty)$ entraîne une saturation de la transmission vers une valeur minimale non nulle. La localisation définie comme l'annulation de la transmission dans un guide infiniment long est donc détruite en présence d'une force pour tout désordre de longueur de corrélation finie.

Tant que $k(x)$ varie peu entre $x = 0$ et $x = L$ comparé à l'échelle de variation σ_{R}^{-1} de la fonction $\tilde{C}_2(k)$, on s'attend à retrouver la localisation algébrique correspondant au cas où $\tilde{C}_2(k)$ est constant. À l'inverse, une transition de saturation (plus précisément un *crossover*) apparaît lorsqu'on atteint $\Delta k \times \sigma_{\mathrm{R}} \sim 1$, avec $\Delta k \equiv k(L) - k(0) \simeq \partial_x k(0) \times L$. On obtient ainsi une longueur typique de transition de saturation

$$L^* \sim \frac{\hbar\sqrt{2E}}{\sqrt{m}F\sigma_{\mathrm{R}}}. \tag{3.96}$$

Notons enfin que pour un désordre corrélé de type donné, caractérisé uniquement par U_{R} et σ_{R}, la métrique s dépend à présent également d'un nouveau paramètre adimensionné, $k(0)\sigma_{\mathrm{R}}$.

Afin de vérifier ces idées générales sur des simulations numériques, nous étudions dans les sections suivantes deux types de potentiel désordonné corrélé.

Exemple 1 : désordre corrélé de fonction de corrélation gaussienne

Nous considérons un potentiel désordonné dont la fonction de corrélation à deux points est gaussienne :

$$C_2(x) = \frac{U_{\rm R}}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\rm R}} \exp\left(\frac{-x^2}{2\sigma_{\rm R}^2}\right) \qquad \text{d'où} \qquad \tilde{C}_2(k) = U_{\rm R} \exp\left(\frac{-k^2\sigma_{\rm R}^2}{2}\right). \tag{3.97}$$

Ce type de fonction de corrélation est pertinent pour décrire à l'ordre deux dans le potentiel désordonné un potentiel de tavelures (voir Sec. 4.1) obtenu en éclairant une surface de dépoli par un faisceau laser gaussien moins large que le dépoli [94]. La métrique adimensionnée en présence d'un tel potentiel désordonné est égale à [2]

$$s(L) = \frac{1}{2\alpha}\left[-\operatorname{Ei}(-2k^2(0)\sigma_{\rm R}^2) + \operatorname{Ei}(-2k^2(L)\sigma_{\rm R}^2)\right]. \tag{3.98}$$

Sachant que $k^2(L) = k^2(0) \times (1 + FL/E)$, on remarque que cette métrique ne dépend que de α, FL/E et $k(0)\sigma_{\rm R}$. Elle sature à $s(+\infty) = -\operatorname{Ei}(-2k^2(0)\sigma_{\rm R}^2)/2\alpha$.

Sur la figure 3.5 en magenta, les valeurs analytiques des transmissions typique et moyenne pour $\alpha = 0.08$, $\varepsilon = 0.01$ et $k(0)\sigma_{\rm R} = 0.3$ sont comparées à des résultats de simulations numériques à différentes valeurs de FL/E. On observe un premier régime de décroissance algébrique des transmissions, suivi d'une saturation. La valeur de L^* prédite par l'équation (3.96) repère bien la transition de saturation à la position $1 + FL^*/E = 1 + 2/[\sigma_{\rm R}k(0)] \simeq 7.67$.

Exemple 2 : désordre corrélé de fonction de corrélation lorentzienne

Nous étudions à présent le cas d'un désordre présentant des corrélations longues portées, de fonction de corrélation lorentzienne

$$C_2(x) = \frac{U_{\rm R}\sigma_{\rm R}/\pi}{x^2 + \sigma_{\rm R}^2} \qquad \text{d'où} \qquad \tilde{C}_2(k) = U_{\rm R}\, \mathrm{e}^{-|k|\sigma_{\rm R}}. \tag{3.99}$$

La métrique vaut alors

$$s(L) = \frac{1}{\alpha}\left[-\operatorname{Ei}(-2k(0)\sigma_{\rm R}) + \operatorname{Ei}(-2k(L)\sigma_{\rm R})\right]. \tag{3.100}$$

Nous traçons les transmissions typique et moyenne et les comparons à des résultats numériques, pour $\alpha = 0.08$, $k(0)\sigma_{\rm R} = 0.25$ et $\varepsilon = 0.0016$, sur la figure 3.5 en vert. Comme pour le désordre de corrélations gaussiennes, on observe un premier régime de décroissance algébrique suivi d'une saturation et la transition est bien repérée par L^*. Les prédictions théoriques sont donc bien vérifiées également dans ce cas d'un désordre longue portée.

3.5.2 Force croissante et désordre blanc

Nous avons vu dans la section précédente qu'un désordre corrélé détruit la localisation algébrique en présence d'une force constante. La métrique s, de la forme

$$s(L) = \int_0^L \mathrm{d}x \frac{m\tilde{C}_2[2k(x)]}{2\hbar^2[E + W_F(x)]}, \tag{3.101}$$

2. La notation Ei désigne la fonction exponentielle intégrale

$$Ei(x) = \int_{-\infty}^{x} \frac{\mathrm{e}^t}{t}\,\mathrm{d}t.$$

Cette fonction diminue de 0 à -1 sur l'intervalle $]-\infty, 0]$.

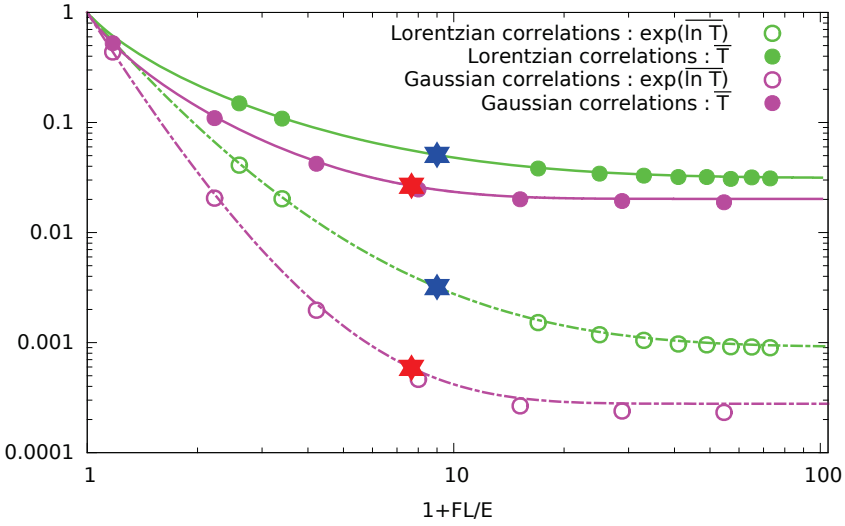


Fig 3.5 – Transmissions typique (courbe analytique en tirets et résultats numériques en cercles) et moyenne (courbe analytique en trait plein et résultats numériques en disques) en fonction de $1+FL/E$, en échelle log-log, pour deux types de désordres corrélés (corrélations gaussiennes en magenta, et corrélations lorentziennes en vert). Les transmissions aux valeurs de L^* sont repérées par des étoiles. Les résultats numériques sont obtenus en moyennant sur cent mille réalisations du désordre.

converge alors à grand L à cause de la décroissance rapide de $\tilde{C}_2[2k(x)]$ avec la position x. Pour un désordre blanc, $\tilde{C}_2[k(x)] = U_{\mathrm{R}}$ est constant, mais la métrique s peut néanmoins converger à grand L vers une valeur finie si le travail de la force $W_F(x)$ augmente suffisamment vite avec la position x. Ainsi, si à grand x on a $F(x) \sim x^\eta$ avec $\eta > 0$, alors $W_F(x) \sim x^{\eta+1}$ et la métrique s converge vers une valeur finie.

Nous nous sommes intéressés au cas d'une force qui augmente linéairement avec la position, correspondant par exemple à un potentiel dipolaire répulsif que l'on pourrait appliquer à un système d'atomes froids, $F(x) = F + m\omega^2 x$. La métrique (3.101) vaut alors

$$s(L) = \frac{1}{2\alpha c} \ln\left(\frac{1 + FL(1+c)/2E}{1 + FL(1-c)/2E}\right), \tag{3.102}$$

où $c = \sqrt{1 - 2mE\omega^2/F^2}$. Elle sature bien vers une valeur finie pour $L \to \infty$, $s(\infty) = \frac{1}{2\alpha c} \ln\left(\frac{1+c}{1-c}\right)$. Nous comparons les transmissions théoriques à des résultats de simulations numériques sur la figure 3.6, pour $\alpha = 0.08$, $\varepsilon = 0.01$ et $2m\omega^2 E/F^2 = 0.98$. On constate un bon accord entre les deux et la saturation des transmissions est observée.

Les deux exemples du désordre corrélé et de la force croissante ont mis en évidence le fait que la localisation algébrique est très fragile et spécifique au cas d'une force constante et d'un désordre blanc. En traitant l'effet d'une force au-delà du cas idéal d'une force constante et d'un désordre blanc, nous avons ainsi démontré dans notre étude un effet de délocalisation fondamental qui change la physique du système. En particulier, l'effet des corrélations du potentiel désordonné est radicalement différent en présence d'une force par rapport au cas homogène. Sachant que tout désordre réel est corrélé sur une certaine longueur, les résultats que nous avons obtenus sont fondamentaux pour toute étude expérimentale, qu'il s'agisse d'atomes froids, d'électrons, de micro-ondes ...

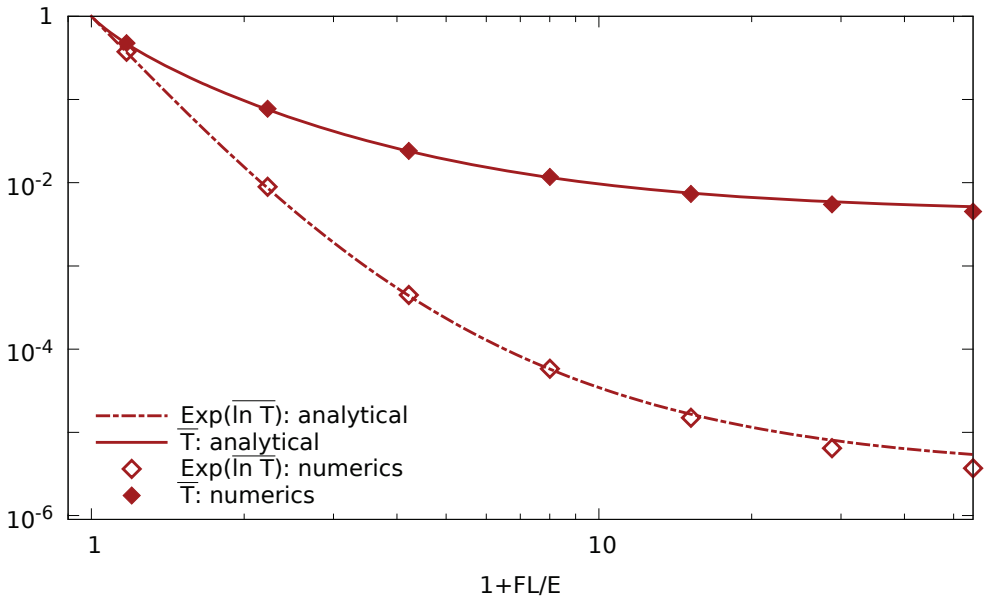


Fig 3.6 – Transmissions typique et moyenne en fonction de $1 + FL/E$, pour un désordre blanc et une force croissant linéairement avec la position. Les courbes correspondent aux résultats analytiques, et les losanges aux résultats numériques obtenus en moyennant sur cent mille réalisations du désordre.

3.5.3 Universalité

Les résultats précédents montrent que le comportement de la transmission en présence de désordre peut fortement varier sous l'application d'une force. Alors qu'en l'absence de biais on observe toujours une localisation exponentielle, en présence d'une force cette localisation devient algébrique dans le cas particulier d'un désordre blanc et d'une force constante, et des corrélations du désordre ou une force qui augmente trop rapidement détruisent la localisation. Cependant, le comportement de la transmission est dans tous les cas uniquement dicté par la valeur de la métrique s. Il est donc intéressant si on connaît la statistique du potentiel désordonné et la forme précise du biais de calculer la valeur de cette métrique, et de tracer l'évolution de la transmission en fonction de s, notamment d'un point de vue expérimental afin d'observer des résultats universels. Sur la figure 3.7, les résultats numériques présentés précédemment pour les trois cas d'un désordre blanc et d'une force constante, d'une force constante et d'un désordre avec corrélations gaussiennes, et d'un désordre blanc avec une force augmentant linéairement, sont représentés en fonction de la valeur théorique de s. Le cas de la localisation algébrique reproduit le tracé de la transmission en fonction de $1 + FL/E$ en échelle log car dans ce cas $s \propto \ln(1 + FL/E)$. Les deux autres exemples, qui mènent à une saturation de la transmission, permettent d'explorer le début des courbes universelles. La délocalisation est visible de manière spectaculaire par l'accumulation des points au voisinage de l'abscisse maximale $s(+\infty)$ lorsqu'on augmente la longueur du système.

3.6 Proposition d'expériences avec des atomes ultrafroids

Les résultats obtenus dans un système en transmission étant différents de ceux prédits pour un système en étalement en présence d'une force, il est nécessaire d'utiliser une approche expérimentale différente de l'étalement d'un condensat si l'on souhaite étudier la transmis-

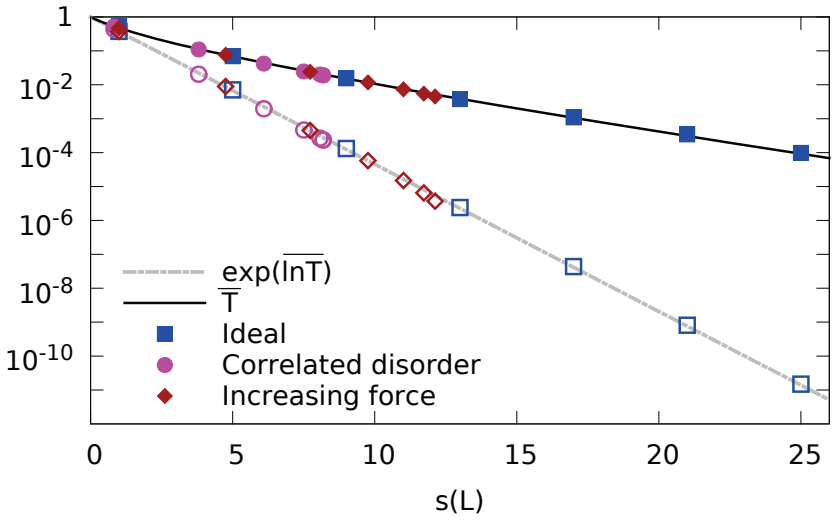


Fig 3.7 – Transmissions typique et moyenne en fonction de s, dans une échelle log-lin. Les résultats numériques pour le cas idéal d'un désordre blanc et d'une force constante (carrés bleus), pour un désordre corrélé et une force constante (ronds magenta) et pour un désordre blanc et une force croissante (losanges marrons) sont en accord avec les deux courbes universelles analytiques.

sion avec des atomes ultrafroids. Nous proposons donc deux approches expérimentales qui permettent une mesure de la transmission. La première consiste à étudier une transmission dynamique obtenue en envoyant un paquet d'atomes sur le guide dont on souhaite connaître la transmission. La seconde reproduit un dispositif usuel en matière condensée de mesure de la conductance d'un échantillon compris entre deux réservoirs de fermions. En effet, celle-ci peut être directement proportionnelle au coefficient de transmission.

3.6.1 Transmission dynamique

Une première expérience possible consiste à envoyer un paquet d'onde sur le guide de longueur L, et à mesurer la fraction d'atomes transmis, égale au coefficient de transmission. Le potentiel désordonné et la force sont appliqués uniquement sur la longueur L.

Le paquet d'onde présentant une certaine largeur en impulsion κ, il est nécessaire que cette largeur soit étroite si l'on veut mesurer un coefficient de transmission à une énergie donnée. Il faut ainsi que la métrique varie peu sur κ, i.e. $\kappa\partial_k s \ll 1$. Pour un désordre blanc, cette condition correspond à

$$\frac{\hbar\sqrt{E}\kappa}{\alpha\sqrt{2m}FL} \ll 1. \tag{3.103}$$

Par ailleurs, différents niveaux longitudinaux du guide sont peuplés à cause de la largeur en impulsion du paquet d'onde. Leur nombre est de l'ordre de κL. On peut émettre l'hypothèse que ces différents niveaux voient un désordre légèrement différent. Par conséquent, si $\kappa L \gg 1$, et que la condition (3.103) est vérifiée, ce qui est toujours le cas pour un guide suffisamment long, on s'attend à mesurer un coefficient de transmission égal au coefficient de transmission moyen $\overline{T}$, à l'énergie moyenne E du paquet d'onde.

En revanche, pour une longueur L fixée du guide, en choisissant un paquet d'onde de largeur en impulsion suffisamment étroite pour n'avoir que très peu de niveaux longitudinaux peuplés, $\kappa L \lesssim 1$, tout en vérifiant la condition (3.103), on effectue une mesure de la transmission sur une réalisation du désordre. Sa valeur typique est alors donnée par T^{typ}. En répétant cette expérience, on peut effectuer un histogramme de la distribution de la transmission.

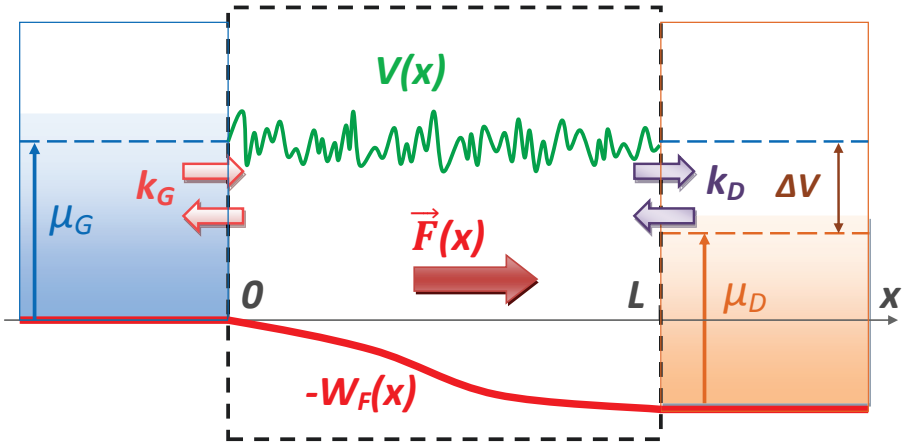


Fig 3.8 – Schéma du dispositif à deux terminaux. Deux réservoirs de fermions, de potentiels chimiques μ_G et μ_D, sont connectés par un guide au sein duquel une force $F(x)$ dérivant d'un potentiel $-W_F(x)$ (en rouge) et un potentiel désordonné $V(x)$ (en vert) sont appliqués. Les particules de vecteur d'onde positif k_G peuplant le réservoir de gauche sont transmises dans le réservoir de droite (leur vecteur d'onde est alors k_D) avec une probabilité $T(K_G)$.

3.6.2 Conductance à deux terminaux

Formalisme de Landauer

On s'intéresse à la conductance d'un fluide de fermions, de facteur de dégénérescence de spin $\mathcal{S}$, entre deux réservoirs reliés par un guide unidimensionnel. Au sein du guide, les particules sont soumises à une force $F(x)$ et un potentiel désordonné $V(x)$. Une différence de potentiel $W_F(\mathrm{L})$ est ainsi créée par la force entre le réservoir de gauche (désigné par l'indice G) et celui de droite (désigné par l'indice D).

On suppose que chaque réservoir est à l'équilibre thermodynamique, avec un potentiel chimique $\mu_{G/D}$ fixé, ainsi qu'une température donnée par $\beta_{G/D}$, où la notation β désigne $1/k_B\theta$, avec k_B la constante de Boltzmann et θ la température. Le taux d'occupation des états d'énergie cinétique K est ainsi donné par la distribution de Fermi

$$f_G(K) = \frac{1}{e^{\beta_G(K-\mu_G)}+1} \qquad \text{et} \qquad f_D(K) = f_G\big[(K+\mu_G-\mu_D)\beta_D/\beta_G\big]. \tag{3.104}$$

Un schéma du système est présenté sur la figure 3.8.

Le courant de particules à travers le guide peut être calculé à l'aide de l'approche semi-classique de Landauer à deux terminaux [95]. Nous appliquons ici ce formalisme à notre système. Le courant total est considéré comme la somme de deux courants indépendants, chacun issu d'un réservoir. Pour calculer le courant de particules issues du réservoir de gauche, on suppose que chaque état d'impulsion positive k_G peuplé dans le réservoir de gauche a une probabilité $T(K_G)$ d'être émis dans le guide puis est absorbé par le réservoir de droite en sortie du guide. La densité de particules par unité d'énergie d'impulsion positive au sein du réservoir de gauche est égale à $\mathcal{S}\rho(K_G)f_G(K_G)/2$, où $\rho(K) = \frac{1}{\pi\hbar}\sqrt{m/2K} = m/2\pi\hbar^2 k$ est la densité d'états par unité de volume à l'énergie $K = \frac{\hbar^2k^2}{2m}$. Le courant produit par les particules issues du réservoir de gauche vaut ainsi

$$I_{\rightarrow} = \mathcal{S}\int \mathrm{d}K_G\ \frac{\rho(K_G)}{2} f_G(K_G)\frac{\hbar k_G}{m}T(K_G) \tag{3.105}$$

$$= \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}K_G\ f_G(K_G)T(K_G). \tag{3.106}$$

Le courant produit par les particules issues du réservoir de droite est calculé à partir des mêmes hypothèses. La densité de particules par unité d'énergie d'impulsion négative au sein du réservoir de droite est égale à $\mathcal{S}\rho(K_D)f_D(K_D)/2$. Le coefficient de transmission dans le guide est identique que l'on considère une onde plane initiale à gauche du guide d'énergie cinétique K_G (produisant une onde plane à droite en sortie d'énergie cinétique $K_D = K_G + W_F(L)$), ou une onde plane en entrée à droite du guide dont l'énergie vaut K_D (qui produit une onde plane à gauche en sortie d'énergie cinétique K_G). Le coefficient de transmission à associer aux particules d'énergie cinétique K_D dans le réservoir de droite est donc égal à $T[K_G = K_D - W_F(L)]$. Le courant produit par les particules issues du réservoir de droite vaut alors

$$I_{\leftarrow} = -\frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}K_D\; f_D(K_D)T[K_D - W_F(L)] \tag{3.107}$$

$$= -\frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}\int \mathrm{d}K_G\; f_G\big[(K_G + W_F(L) + \mu_G - \mu_D)\beta_D/\beta_G\big]T(K_G). \tag{3.108}$$

Le courant total est ainsi égal à

$$I = \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}\int_0^\infty \mathrm{d}K_G\; T(K_G)\left\{f_G(K_G) - f_G\big[(K_G + W_F(L) + \mu_G - \mu_D)\beta_D/\beta_G\big]\right\}. \tag{3.109}$$

À température nulle, la distribution de Fermi est une marche $f_G(K) = 1-\Theta(K-\mu_G)$. Pour $\mu_G + W_F(L) > \mu_D$, l'expression du courant se simplifie en

$$I_0 = \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}\int_{\max(0,\mu_D - W_F(L))}^{\mu_G} \mathrm{d}K_G\; T(K_G), \tag{3.110}$$

et dans le cas opposé

$$I_0 = -\frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}\int_{\mu_G}^{\mu_D - W_F(L)} \mathrm{d}K_G\; T(K_G). \tag{3.111}$$

Les courants issus des deux réservoirs se compensent sur leur zone de remplissage commune et le courant résultant provient du décalage en remplissage des deux réservoirs.

On définit la conductance[3] G comme le rapport du courant de particules I sur la différence de potentiel totale $\Delta V = \mu_G + W_F(L) - \mu_D$ dans la limite $\Delta V \to 0$. À température nulle, la conductance vaut alors

$$G_0 = \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}T(\mu_G) \tag{3.112}$$

et est directement proportionnelle au coefficient de transmission du guide. On peut ainsi accéder expérimentalement au coefficient de transmission par une mesure de conductance.

Pour une température non nulle, identique dans les deux réservoirs, $\beta_G = \beta_D = \beta \gg \mu_G$, un développement de Sommerfeld donne

$$G(\beta) = \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}\left[T(\mu_G) + \frac{\pi^2\partial_K^2 T(\mu_G)}{6\beta^2}\right]. \tag{3.113}$$

Nous avons ici écrit la transmission T comme une fonction de l'énergie cinétique à gauche du guide $K_G = \mu_G$. Sachant que T est une fonction universelle de la métrique s, il est utile de ré-exprimer la conductance en termes de la fonction $T(s)$ et de ses dérivées. On a ainsi besoin de calculer

$$\partial_K^2 T = \partial_K(\partial_K s)\partial_s T + (\partial_K s)^2\partial_s^2 T. \tag{3.114}$$

3. La conductance G_{met} d'un métal, définie comme le rapport du courant électrique sur la différence de potentiel électrique, est reliée à G par $G_{met} = q_e^2 G$, où q_e est la charge d'un électron.

En utilisant la définition de la métrique, $s = \int_0^L \frac{\mathrm{d}x}{\ell_-(x)}$, et sachant que le libre parcours moyen $\ell_-(x)$ est une fonction de $K_G + W_F(x)$ [cf. Éq. (3.19) et (3.23)], avec $\partial_x W_F(x) = F(x)$, on a

$$\partial_K s = \int_0^L \mathrm{d}x \, \frac{1}{F(x)} \partial_x \left[\frac{1}{\ell_-(x)} \right]. \tag{3.115}$$

Dans le cas d'une force constante, cette expression se simplifie en $\partial_K s = \frac{1}{F}\left[\frac{1}{\ell_-(L)} - \frac{1}{\ell_-(0)}\right]$ et l'expression de la conductance à basse température devant le potentiel chimique est alors donnée par

$$G = \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar} \left[T(s) + \frac{\pi^2}{6\beta^2} A \right], \tag{3.116}$$

avec

$$A = \frac{\partial_s T(s)}{F} \partial_K \left[\frac{1}{\ell_-(L)} - \frac{1}{\ell_-(0)} \right] + \frac{\partial_s^2 T(s)}{F^2} \left[\frac{1}{\ell_-(L)} - \frac{1}{\ell_-(0)} \right]^2. \tag{3.117}$$

On note que contrairement au coefficient de transmission, la conductance n'est pas une fonction universelle de s à température finie. En revanche, on constate que si l'on étudie la transmission en fonction de la longueur du système, en ayant fixé tous les autres paramètres, celle-ci ne dépend que de $s(L)$ à grande distance telle que $\ell_-(L) \gg \ell_-(0)$. On suppose ici que $\Delta V \to 0$ est maintenu constant lorsqu'on augmente la longueur du guide grâce à une augmentation du potentiel chimique dans le réservoir de droite, $\mu_D = \mu_G + \Delta V + FL$.

Perspectives de mise en œuvre expérimentale

Les résultats précédents montrent que l'on peut accéder expérimentalement au coefficient de transmission par une mesure de conductance à température nulle. Depuis quelques années, des expériences de conduction avec des atomes ultrafroids ont été développées, notamment à l'ETH de Zurich [96–99]. Un gaz de fermions (atomes de ^6Li) est refroidi et piégé dans une géométrie en cigare allongé. Il est ensuite partagé en deux parties, qui forment les deux réservoirs de gauche et de droite, reliées par un canal [cf. Fig. 3.9 (a)]. Les deux réservoirs présentent une différence de potentiel chimique résultant de l'application d'un gradient de champ magnétique pendant la phase de refroidissement. La décharge des atomes du réservoir le plus peuplé vers le réservoir le moins peuplé à travers le canal a lieu avec une constante de temps égale à une compressibilité effective des deux réservoirs divisée par la conductance du canal. La compressibilité effective pouvant être mesurée indépendamment, on peut alors déduire de l'expérience une mesure de la conductance du guide. Dans un régime balistique, la quantification de la conductance à deux terminaux prédite par le modèle de Landauer a ainsi pu être observée [cf. Fig. 3.9 (b)]. L'effet du désordre sur le transport a également pu être étudié sur ce type de système [99] : la conductance d'un gaz de bosons (molécules de $^6Li_2$) en interaction forte dans un canal quasi-2D sur lequel un potentiel de tavelures est appliqué a ainsi permis d'observer une disparition de la superfluidité en présence d'un désordre fort, suggérant l'apparition d'une phase de verre de Bose.

L'implémentation d'un potentiel désordonné et d'une force sur ce type d'expérience de mesure de transport d'un gaz d'atomes ultrafroids entre deux réservoirs pourrait permettre d'observer le comportement de la conductance à deux terminaux prédit par les calculs précédents. La saturation de la transmission en présence d'un désordre corrélé pourrait par exemple être mis en évidence. En effet, pour une température de Fermi typique au sein des réservoirs $\theta_\mathrm{F} \sim 500$ nK, un potentiel désordonné de corrélations gaussiennes avec $\sigma_\mathrm{R} \sim 0.5$ µm et une force $F \sim 10^{-25}$ N (ordre de grandeur d'une force résultant de la gravitation sur des atomes de Lithium 6), on prédit une transition de saturation pour une longueur de guide $L^* \sim 80$ µm a priori accessible

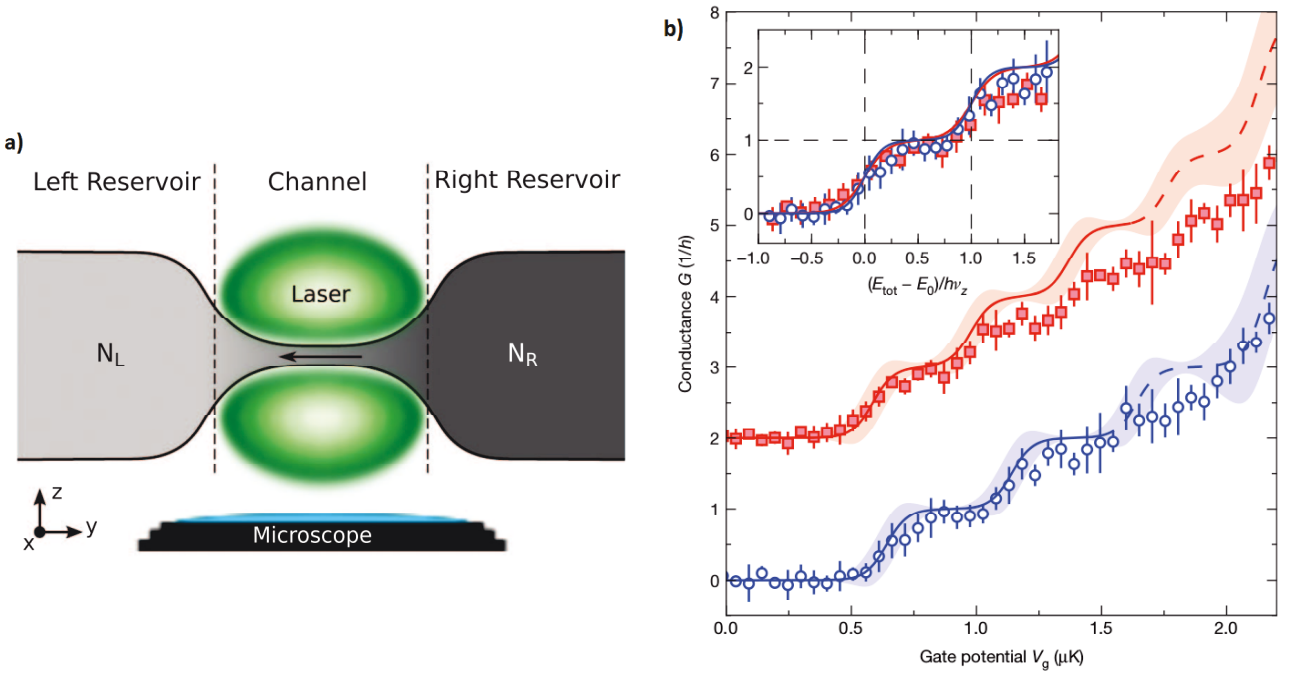


Fig 3.9 – Expériences de conduction à l'ETH (Zurich) (a) Dispositif expérimental. Un nuage d'atomes de Lithium est séparé en deux réservoirs de potentiels chimiques différents, reliés par un canal. Un courant apparaît du réservoir le plus peuplé (ici celui de droite) vers celui le moins peuplé. Extrait de la référence [96]. (b) Conductance en fonction de la profondeur V_g d'un puits de potentiel appliqué au sein du canal 2D, qui contient un point de contact quantique d'énergie fondamentale E_0 supérieure au potentiel chimique des réservoirs et d'espacement entre premiers niveaux égal à $h\nu_z$. Les mesures sont effectuées pour deux valeurs de $h\nu_z$, et un décalage vertical de 2 est appliqué à l'une des mesures afin de faciliter leur observation simultanée. La ligne en trait plein correspond à la prédiction théorique issue du modèle de Landauer. Les régions sombres prennent en compte les incertitudes sur les paramètres initiaux. Encart : Courbe universelle représentant la conductance en fonction de l'énergie du puits de potentiel renormalisée $(V_g + \mu - E_0)/\nu_z$. Extrait de la référence [97].

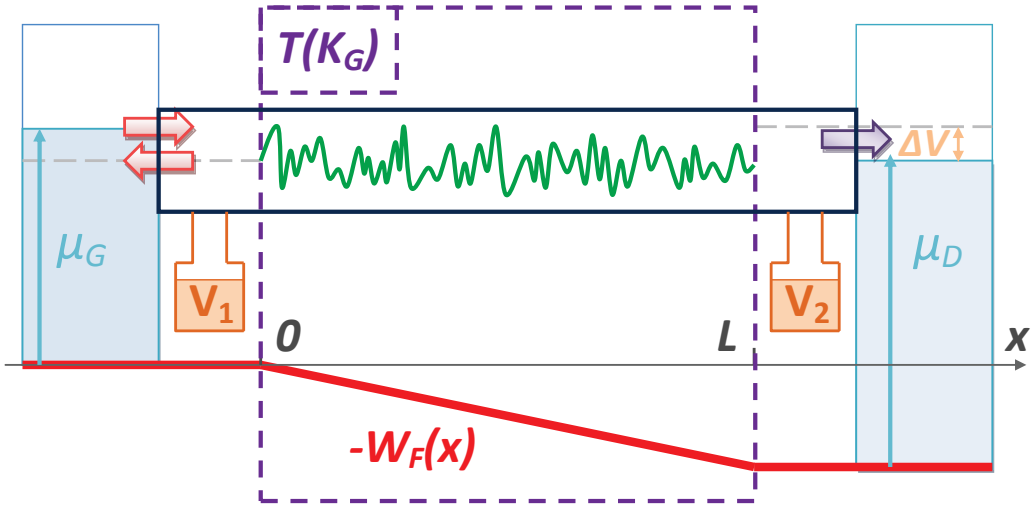


Fig 3.10 – Schéma du dispositif à quatre terminaux. Un courant est produit entre les deux réservoirs de gauche et de droite sous l'effet de leur différence de potentiel chimique, et de la force. La différence de potentiel est mesurée entre deux terminaux supplémentaires 1 et 2 au sein du guide.

expérimentalement. L'effet de température finie sur la conductance avec de tels paramètres est de l'ordre de 2% pour une température $\theta \sim 0.1\ \theta_{\rm F}$ et s'élève à 15% pour $\theta \sim 0.3\ \theta_{\rm F}$, de sorte qu'il peut être nécessaire expérimentalement de prendre en compte la température finie pour rendre compte du comportement de la conductance comme nous l'avons décrit ci-dessus.

3.6.3 Conductance à quatre terminaux

La conductance à deux terminaux fait apparaître une résistance finie dans un régime balistique, c'est-à-dire en l'absence de potentiel désordonné. Cette résistance provient des points de contact entre les réservoirs et le canal. Afin de s'affranchir de la résistance de contact, il est possible de mesurer la différence de potentiel entre les deux extrémités du canal, au niveau de deux réservoirs supplémentaires servant de voltmètres. On mesure ainsi une conductance dite à quatre terminaux, qui est bien infinie à température nulle pour un guide parfait ($T = 1$). Le schéma du dispositif que nous considérons est représenté sur la figure 3.10. Les réservoirs de gauche G et de droite D sont semblables au cas de la conductance à deux terminaux, et un courant I est engendré par la force et la différence de potentiel chimique entre ces deux réservoirs. La différence de potentiel $V_1 - V_2$ est en revanche mesurée entre les deux terminaux 1 et 2. On suppose plus précisément que la force et le potentiel désordonné sont appliqués dans la portion de guide située entre les terminaux 1 et 2, donnant ainsi une transmission T à cette portion de guide. On se place dans le régime $\Delta V = \mu_G - \mu_D - W_F(L) \ll \mu_G$, de sorte qu'on a $T = T(\mu_G)$. De plus, on suppose que les voltmètres (terminaux 1 et 2) peuvent absorber ou émettre des particules avec un coefficient de transmission $\varepsilon \ll 1$. Le cas de voltmètres idéaux correspond à $\varepsilon = 0$. On note $T_{\alpha\beta}$ la probabilité de transfert du terminal α vers le terminal β, avec $\alpha, \beta \in \{G, D, 1, 2\}$, et on supposera que le système est symétrique : $T_{\alpha\beta} = T_{\beta\alpha}$. La conductance à quatre terminaux est alors donnée à température nulle par [95]

$$G_4 = \frac{I}{V_1 - V_2} = \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar} \frac{D}{T_{G1}T_{D2} - T_{D1}T_{G2}} \tag{3.118}$$

(3.119)

avec

$$D = T_{12}\left[T_{GD}(T_{G1}+T_{G2}+T_{D1}+T_{D2})+(T_{G1}+T_{G2})(T_{D1}+T_{D2})\right]+T_{GD}(T_{G2}+T_{D2})(T_{G1}+T_{D1}) + T_{D1}T_{D2}(T_{G1}+T_{G2})+T_{G1}T_{G2}(T_{D1}+T_{D2}). \quad (3.120)$$

On suppose de plus que le système est symétrique : $T_{G1} = T_{D2}$ et $T_{G2} = T_{D1}$. On a alors

$$G_4^{sym} = \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}\frac{D^{sym}}{T_{G1}^2 - T_{G2}^2}, \quad (3.121)$$

avec

$$D^{sym} = T_{12}\left[2T_{GD}(T_{G1}+T_{G2})+(T_{G1}+T_{G2})^2\right]+T_{GD}(T_{G1}+T_{G2})^2+2T_{G1}T_{G2}(T_{G1}+T_{G2}). \quad (3.122)$$

Suivant une approche semi-classique, on considérera qu'au passage au niveau d'un voltmètre, la particule a une probabilité ε d'être absorbée par le voltmètre, et $1-\varepsilon$ de poursuivre son chemin. La probabilité qu'une particule s'échappe du voltmètre est également donnée par ε. Enfin, une particule incidente sur le guide a une probabilité T de le traverser et $1-T$ d'être réfléchie. On peut alors exprimer les probabilités de transfert entre les différents réservoirs :

$$T_{GD} = T - 2\varepsilon T + O(\varepsilon^2) \quad (3.123)$$
$$T_{G1} = \varepsilon(2-T) - \varepsilon^2(1-T) \quad (3.124)$$
$$T_{G2} = \varepsilon T - \varepsilon^2 T \quad (3.125)$$
$$T_{12} = \varepsilon^2 T. \quad (3.126)$$

On a ainsi $T_{G1}^2 - T_{G2}^2 = 4\varepsilon^2(1-T)+2\varepsilon^3(3T-2)+\varepsilon^4(1-2T)$ et $D^{sym} = 4\varepsilon^2 T - 4T\varepsilon^3 + O(\varepsilon^4)$, d'où

$$G_4^{sym} = \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}\frac{T(1-\varepsilon)}{1-T+\frac{\varepsilon}{2}(3T-2)+\frac{\varepsilon^2}{4}(1-2T)}. \quad (3.127)$$

Absence de désordre

En l'absence de désordre, le coefficient de transmission est égal à 1, et on obtient pour $\varepsilon \ll 1$

$$G_4^{sym} \sim \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}\frac{2-\varepsilon}{\varepsilon}. \quad (3.128)$$

Ce résultat a été confirmé par des mesures expérimentales de transport électronique [100].

Voltmètres idéaux

Pour des voltmètres idéaux ($\varepsilon = 0$), on obtient une conductance à quatre terminaux

$$G_4^{sym} = \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}\frac{T}{1-T}. \quad (3.129)$$

La conductance moyenne est alors donnée par

$$\overline{G_4^{sym}} = \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}\int_0^1 \mathrm{d}T\ \frac{T}{1-T}P(T) \quad (3.130)$$

où la distribution de probabilité de la transmission, donnée par l'Éq. (3.71). Cette distribution de probabilité est non nulle au voisinage de $T = 1$, ce qui conduit à une divergence de l'intégrale de l'Éq. (3.130).

La conductance à quatre terminaux moyenne diverge donc pour des voltmètres idéaux suite à la probabilité non nulle d'obtenir une transmission égale à 1, pour laquelle la conductance à quatre terminaux diverge (pour des voltmètres idéaux). Cette divergence rend alors impossible l'étude du comportement de la transmission et donc l'étude de la localisation ou de la délocalisation des particules. Un tel système permet en revanche d'illustrer de manière spectaculaire la probabilité non nulle que la transmission soit égale à 1.

Cas général

La conductance à quatre terminaux dépend du paramètre ε. Le calcul de la conductance moyenne à ε fixé nécessite de connaître la distribution de probabilité du coefficient de transmission. En particulier, la connaissance des transmissions typique ou moyenne est insuffisante pour prédire la valeur moyenne de la conductance.

La conductance moyenne s'obtient comme précédemment par

$$\overline{G_4^{sym}}(\varepsilon) = \frac{\mathcal{S}}{2\pi\hbar}\int_0^1 \mathrm{d}T\; P(T)\frac{T(1-\varepsilon)}{1-T+\frac{\varepsilon}{2}(3T-2)+\frac{\varepsilon^2}{4}(1-2T)}. \tag{3.131}$$

L'étude de la conductance moyenne en fonction de ε pourrait permettre d'obtenir des informations sur la distribution de probabilité de la transmission.

Chapitre 4

Approches complémentaires de la transmission

Nous avons vu au chapitre précédent que les transmissions typique et moyenne peuvent être mesurées expérimentalement à l'aide par exemple d'une mesure de conductance à deux terminaux. Nous présentons dans ce chapitre deux approches analytiques, différentes des matrices de transfert, qui permettent l'une de calculer la transmission typique et l'autre la transmission moyenne, sans recourir à un calcul de toute la distribution de probabilité. Ces deux méthodes ont été développées en l'absence de biais, et nous les généralisons ici à la présence d'une force. Dans ce chapitre, nous étendons de plus notre étude au cas d'un désordre non gaussien pour lequel nous effectuons des développements aux premiers ordres en l'intensité du désordre des différentes quantités calculées. Nous supposons toujours la moyenne du potentiel désordonné nulle et sa statistique invariante par translation spatiale. Au premier ordre, le désordre est donc caractérisé par un terme d'ordre deux dépendant de sa fonction de corrélation à deux points $C_2(x)$. Le terme d'ordre suivant fait intervenir sa fonction de corrélation à trois points, $C_3(x, x') = \overline{V(x'')V(x''+x)V(x''+x')}$.

La première méthode que nous présentons, appelée formalisme de phase, présente l'avantage d'une très grande simplicité de calcul, et utilise un développement perturbatif naturel. La seconde, appelée méthode diagrammatique, est en revanche plus délicate à mettre en œuvre. Cependant, cette méthode est identique à celle utilisée pour calculer la probabilité de diffusion quantique d'une particule et permet ainsi de justifier les différences de comportement entre la transmission et la probabilité de diffusion en présence d'une force sans biais méthodologique.

4.1 Exemple de désordre non gaussien : potentiel de tavelures

Dans ce chapitre, nous nous intéressons au cas d'un désordre non gaussien [60, 101]. C'est le cas du désordre de tavelures, utilisé dans les expériences d'atomes froids, que nous présentons dans cette section.

4.1.1 Réalisation expérimentale

L'interaction entre un atome de fréquence de transition ω_A entre deux niveaux internes et un champ électromagnétique (laser) de fréquence ω_L est à l'origine de forces (radiative et dipolaire) sur l'atome. Si le décalage $\delta = \omega_L - \omega_A$ est suffisamment grand devant le taux de désexcitation de l'atome, la force dipolaire est dominante et elle dérive d'un potentiel V_{dip} proportionnel à

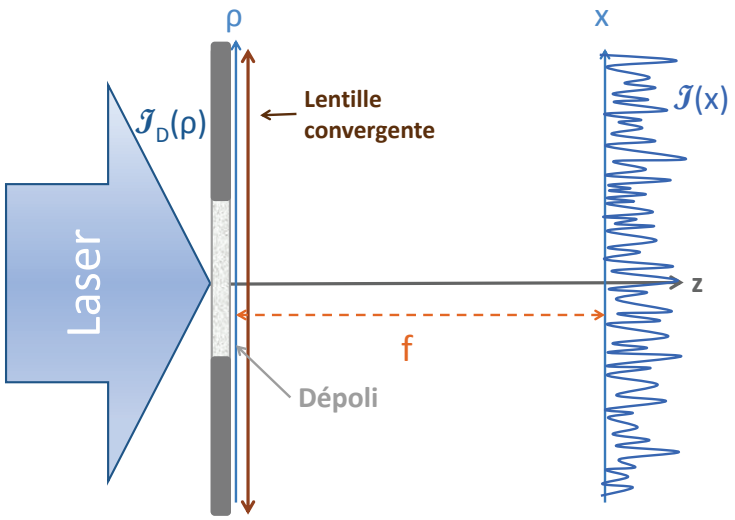


Fig 4.1 – Schéma du dispositif d'obtention d'un potentiel de tavelures. Un laser incident éclaire la surface d'un verre dépoli qui lui imprime alors une phase spatialement aléatoire. La figure de tavelures obtenue est observée dans le plan focal d'une lentille convergente.

l'intensité lumineuse $\mathcal{I}$ et inversement proportionnel au décalage δ : $V_{dip}(\vec{r}) \propto \mathcal{I}(\vec{r})/\delta$. On contrôle le signe de ce potentiel grâce à un décalage vers le bleu de la fréquence laser par rapport à la fréquence de transition atomique ($\delta > 0$) ou vers le rouge ($\delta < 0$). L'intensité du potentiel s'ajuste facilement en modifiant la puissance lumineuse du laser utilisé.

Afin de produire la figure lumineuse de tavelures qui crée le potentiel désordonné ressenti par les atomes, on place un morceau de verre dépoli sur la trajectoire d'un faisceau laser de longueur d'onde λ_L. Les variations aléatoires d'épaisseur du verre dépoli introduisent une phase aléatoire sur l'onde lumineuse qui le traverse. En plaçant les atomes au niveau du plan focal d'une lentille convergente de focale f placée en sortie du diffuseur (cf. figure 4.1), le champ électrique qui éclaire ces atomes est de la forme

$$\mathcal{E}(x) \propto \mathrm{e}^{\frac{i\pi}{\lambda_L f}x^2} \int \mathrm{d}\rho\, \epsilon(\rho)\, \mathrm{e}^{-\frac{i2\pi}{\lambda_L f}x\rho}, \tag{4.1}$$

avec $\epsilon(\rho) = \sqrt{\mathcal{I}_D(\rho)}\, \mathrm{e}^{i\varphi(\rho)}$, où $\mathcal{I}_D(\rho)$ est l'intensité lumineuse du faisceau éclairant le verre dépoli et $\varphi(\rho)$ la phase aléatoire acquise à la traversée du verre dépoli. La taille des grains de speckle σ_{R} est notamment inversement proportionnelle à la largeur de la zone éclairée du dépoli et peut ainsi être contrôlée.

En définissant le zéro d'énergie par rapport à la valeur moyenne du potentiel ressenti par les atomes, on obtient un potentiel de tavelures de moyenne nulle, de la forme

$$V(x) = V_R \left[\frac{\mathcal{I}(x) - \overline{\mathcal{I}}}{\overline{\mathcal{I}}} \right], \tag{4.2}$$

où $\overline{\mathcal{I}}$ est la valeur moyenne de l'intensité éclairant les atomes.

4.1.2 Fonctions de corrélation du potentiel de tavelures

Les fonctions de corrélation du potentiel désordonné interviennent dans les calculs de transport d'une particule dans le milieu désordonné. Nous présentons ici leurs expressions pour le potentiel de tavelures.

Les variables $\mathcal{E}(x)$ et $\mathcal{E}^*(x)$ résultent de l'intégrale de quantités aléatoires et sont donc gaussiennes, par application du théorème central limite. Cela permet en utilisant le théorème de Wick [cf. Éq. (2.4)] d'exprimer toutes les fonctions de corrélation du potentiel désordonné V à partir du corrélateur à deux points du champ électrique éclairant les atomes :

$$\overline{\mathcal{E}(x)\,\mathcal{E}^*(x')} = \overline{\mathcal{I}}\,\mathrm{e}^{\frac{i\pi}{\lambda_L f}(x^2-x'^2)}\,\frac{\int d\rho\,\mathcal{I}_D(\rho)\,\mathrm{e}^{-\frac{i2\pi}{\lambda_L f}(x-x')\rho}}{\int d\rho\,\mathcal{I}_D(\rho)}. \tag{4.3}$$

En particulier, on trouve

$$C_2(x) = \frac{V_R^2}{\overline{\mathcal{I}}^2}|\overline{\mathcal{E}(0)\,\mathcal{E}^*(x)}|^2 \tag{4.4}$$

et

$$C_3(x,x') = \frac{V_R^3}{\overline{\mathcal{I}}^3}2\,\mathrm{Re}\left[\overline{\mathcal{E}(0)\,\mathcal{E}^*(x)}\;\overline{\mathcal{E}(x')\,\mathcal{E}^*(0)}\;\overline{\mathcal{E}(x)\,\mathcal{E}^*(x')}\right]. \tag{4.5}$$

On remarque que le signe de la fonction de corrélation à deux points est indépendant du signe de V_R, i.e. du signe du décalage δ de la fréquence laser par rapport à la fréquence de transition atomique (cf. Sec. 4.1.1), tandis que le signe de la fonction de corrélation à trois points (en V_R^3) en dépend. Par conséquent, des calculs à l'ordre trois dans le potentiel désordonné, faisant intervenir la fonction de corrélations à trois points, sont nécessaires pour distinguer l'effet d'un potentiel de tavelures positif (ou *bleu*, i.e. $\delta \geqslant 0$) de celui d'un potentiel négatif (ou *rouge*, i.e. $\delta \leqslant 0$).

4.1.3 Application à un éclairage uniforme du dépoli

Pour un éclairage d'intensité uniforme du dépoli sur une largeur D, pour lequel $\mathcal{I}_D(\rho) = \mathcal{I}_0\,\Theta(D/2-|\rho|)$, on obtient

$$\overline{\mathcal{E}(x)\,\mathcal{E}^*(x')} = \overline{\mathcal{I}}\,\mathrm{e}^{\frac{i(x^2-x'^2)}{\sigma_\mathrm{R} D}}\,\frac{\sin\left[(x-x')/\sigma_\mathrm{R}\right]}{(x-x')/\sigma_\mathrm{R}}, \tag{4.6}$$

avec $\sigma_\mathrm{R} = \lambda_L f/\pi D$. Les fonctions de corrélation spatiales du potentiel désordonné sont alors données dans l'espace réel par

$$C_2(x) = V_R^2\left[\frac{\sin(x/\sigma_\mathrm{R})}{x/\sigma_\mathrm{R}}\right]^2 \tag{4.7}$$

et

$$C_3(u\sigma_\mathrm{R}, v\sigma_\mathrm{R}) = 2V_R^3\frac{\sin(u)}{u}\frac{\sin(v)}{v}\frac{\sin(u-v)}{u-v}, \tag{4.8}$$

et, dans l'espace réciproque, par

$$\tilde{C}_2(k) = \pi V_R^2\sigma_\mathrm{R}\left[1-\frac{|k|\sigma_\mathrm{R}}{2}\right]\Theta\left(1-\frac{|k|\sigma_\mathrm{R}}{2}\right), \tag{4.9}$$

$$\tilde{C}_3(q/\sigma_\mathrm{R}, q'/\sigma_\mathrm{R}) = V_R^3\sigma_\mathrm{R}^2\pi^2\int dk\;\Theta(1-|k|)\Theta(1-|k-q|)\Theta(1-|k+q'|). \tag{4.10}$$

Analyse dimensionnelle

On identifie l'intensité du potentiel désordonné définie dans les chapitres précédents [cf. Éq. (3.1)] $U_{\mathrm{R}} = \tilde{C}_2(0) = \pi V_{\mathrm{R}}^2 \sigma_{\mathrm{R}}$. Le potentiel désordonné est donc caractérisé ici par trois paramètres : son intensité U_{R}, sa longueur de corrélation σ_{R} et son signe $\mathrm{sign}(V_{\mathrm{R}})$.

On en déduit que la transmission d'une particule de masse m et d'énergie $E = \hbar^2 k^2(0)/2m$ dans un guide de longueur L en présence de ce potentiel désordonné et d'une force constante F dépend uniquement des paramètres adimensionnés $\{FL/E, \alpha, \sigma_{\mathrm{R}} k(0), \varepsilon, \mathrm{sign}(V_{\mathrm{R}})\}$, avec

$$\alpha = \frac{\hbar^2 F}{m U_{\mathrm{R}}} \tag{4.11}$$

$$\varepsilon = \frac{\hbar F}{\sqrt{2m} E^{3/2}}. \tag{4.12}$$

4.2 Formalisme de phase

Dans cette section, nous présentons une méthode de calcul direct de la transmission typique, appelée formalisme de phase [28]. Cette méthode a été développée dans un milieu homogène, et nous l'étendons ici à la présence d'une force variable. Contrairement au chapitre 3, le potentiel désordonné que nous considérons n'est pas nécessairement gaussien, et nous établissons la valeur de la transmission typique sous la forme d'un développement perturbatif en puissances du potentiel désordonné.

4.2.1 Principe

L'objectif du formalisme de phase est de calculer la valeur moyenne du logarithme de l'amplitude de la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger stationnaire dans un milieu désordonné, à partir de la donnée de la fonction d'onde et de sa dérivée en un point initial. Cette méthode est donc adaptée à l'étude de la transmission d'un guide de longueur $[0, L]$ (cf. section 3.1 et Fig. 3.1), en prenant comme condition initiale une onde plane en sortie du guide, $\psi'(L) = ik(L)\psi(L)$, où l'on a définit $k(x) = \sqrt{2m(E + Fx)}/\hbar$ le *vecteur d'onde local* de la particule au sein du guide [voir Chap. 3, Éq. (3.20)].

Nous avons vérifié numériquement que le comportement moyen du logarithme de l'amplitude de la fonction d'onde à grande distance devant le libre parcours moyen initial est indépendant de la condition initiale sur la phase de la fonction d'onde. Nous choisissons donc arbitrairement de travailler avec une fonction d'onde réelle, correspondant à une onde stationnaire, en sortie du guide. On définit alors l'amplitude $r(x)$ et la phase $\theta(x)$ de la fonction d'onde en tout point par

$$\begin{cases} \psi(x) = r(x)\sin[\theta(x)] \\ \partial_x \psi(x) = k(x) r(x) \cos[\theta(x)]. \end{cases} \tag{4.13}$$

Cette décomposition est toujours possible en définissant $r(x)$ et $\theta(x)$ comme la norme et la phase du vecteur $(\partial_x \psi(x)/k(x), \psi(x))$ dans le plan complexe.

L'équation de Schrödinger est alors équivalente au système d'équations différentielles suivant

$$\theta'(x) = k(x) - \frac{2mV(x)}{\hbar^2 k(x)} \sin^2[\theta(x)] + \frac{F(x)m}{2\hbar^2 k^2(x)} \sin[2\theta(x)], \tag{4.14}$$

$$\frac{\mathrm{d}\ln[r(x)]}{\mathrm{d}x} = -\frac{mF(x)}{\hbar^2 k^2(x)} \cos^2[\theta(x)] + \frac{mV(x)}{\hbar^2 k(x)} \sin[2\theta(x)]. \tag{4.15}$$

Nous imposons comme condition en sortie du guide $r(L) = 1$ et $\theta(L) = \theta_L$ une phase aléatoire à chaque réalisation du désordre de distribution uniforme. On souhaite alors calculer perturbativement en l'amplitude du désordre la valeur moyenne $\overline{\ln r(x)}$.

4.2.2 Calcul

Calcul perturbatif de la phase

Nous nous plaçons dans l'hypothèse où la variation relative du vecteur d'onde local à l'échelle de la longueur d'onde est négligeable [cf. Éq. (3.64)], ce qui correspond à supposer $\varepsilon \ll 1$. Le dernier terme de l'équation (4.14) peut alors être négligé. On résout cette équation différentielle portant uniquement sur la phase à l'aide d'un développement perturbatif en l'amplitude du désordre $V(x)$ de la phase $\theta = \theta^{(0)} + \theta^{(1)} + \theta^{(2)} + \dots$ On obtient ainsi les premiers termes [61]

$$\theta^{(0)}(x) = \theta_L + \int_L^x k(x')\,\mathrm{d}x' \tag{4.16}$$

$$\theta^{(1)}(x) = -\frac{2m}{\hbar^2}\int_L^x \mathrm{d}x' \frac{V(x')}{k(x')}\sin^2[\theta^{(0)}(x')] \tag{4.17}$$

$$\theta^{(2)}(x) = \frac{4m^2}{\hbar^4}\int_L^x \mathrm{d}x' \int_L^{x'} \mathrm{d}x'' \frac{V(x')V(x'')}{k(x')k(x'')}\sin[2\,\theta^{(0)}(x')]\sin^2[\theta^{(0)}(x'')]. \tag{4.18}$$

Calcul perturbatif de l'amplitude

En réinjectant les solutions trouvées pour la phase dans l'équation (4.15), on peut exprimer de même les premiers termes du développement perturbatif du logarithme de l'amplitude. En moyennant sur les réalisations du désordre, ce qui permet notamment d'éliminer les termes oscillants en $\theta^{(0)}(x)$, on obtient

$$\frac{\mathrm{d}\,\overline{\ln[r(x)]}^{(0)}}{\mathrm{d}x} = -\frac{mF(x)}{2\hbar^2 k^2(x)} \tag{4.19}$$

$$\frac{\mathrm{d}\,\overline{\ln[r(x)]}^{(1)}}{\mathrm{d}x} = 0 \tag{4.20}$$

$$\frac{\mathrm{d}\,\overline{\ln[r(x)]}^{(2)}}{\mathrm{d}x} = -\frac{m^2}{\hbar^4}\int_0^{L-x} \mathrm{d}\xi \frac{C_2(\xi)}{k(x+\xi)k(x)}\cos[2\,\theta^{(0)}(x) - 2\,\theta^{(0)}(x+\xi)] \tag{4.21}$$

$$\frac{\mathrm{d}\,\overline{\ln[r(x)]}^{(3)}}{\mathrm{d}x} = -\frac{2m^3}{\hbar^6}\int_0^{L-x} \mathrm{d}\xi \int_\xi^{L-x} \mathrm{d}\xi' \frac{C_3(\xi,\xi')}{k(x)k(x+\xi)k(x+\xi')}\sin[2\,\theta^{(0)}(x+\xi') - 2\,\theta^{(0)}(x)]. \tag{4.22}$$

Le terme d'ordre 0 correspond à une évolution de l'amplitude de la fonction d'onde sous l'effet de la force, de la forme

$$\overline{\ln\frac{r(x)}{r(L)}}^{(0)} = -\frac{1}{2}\ln\left[\frac{k(x)}{k(L)}\right]. \tag{4.23}$$

Le terme d'ordre 1 en V est nul car on considère un désordre de moyenne nulle.
Pour une position x suffisamment éloignée du point initial, $L - x \gg \sigma_\mathrm{R}$, les premiers termes dus

au désordre sont de la forme

$$\frac{\mathrm{d}\,\overline{\ln[r(x)]}^{(2)}}{\mathrm{d}x} = -\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(2)} \tag{4.24}$$

$$\frac{\mathrm{d}\,\overline{\ln[r(x)]}^{(3)}}{\mathrm{d}x} = -\frac{1}{2}\left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(3)}, \tag{4.25}$$

avec

$$\left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(2)} = \frac{m^2}{\hbar^4}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi\,\frac{C_2(\xi)}{k(x+\xi)k(x)}\cos[2\,\theta^{(0)}(x) - 2\,\theta^{(0)}(x+\xi)] \tag{4.26}$$

$$\left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(3)} = \frac{4m^3}{\hbar^6}\int_0^{\infty}\mathrm{d}\xi\int_{\xi}^{\infty}\mathrm{d}\xi'\,\frac{C_3(\xi,\xi')}{k(x)k(x+\xi)k(x+\xi')}\sin[2\,\theta^{(0)}(x+\xi') - 2\,\theta^{(0)}(x)]. \tag{4.27}$$

Dans le cas d'une force constante, la phase libre est celle d'une fonction d'Airy, $\theta^{(0)}(x) = cste + \frac{\hbar^2k^3(x)}{3mF}$, et la longueur $\ell_-^{(2)}$ s'identifie au libre parcours moyen calculé pour une force constante et un désordre gaussien [cf. Éq. (2.46)]. Cette expression exacte du libre parcours moyen pour un désordre gaussien devient pour un désordre non gaussien le premier terme d'un développement perturbatif en puissances de V du libre parcours moyen [1].

Pour une force variable $F(x)$, sous les hypothèses (3.67) et (3.69), les deux premiers termes de ℓ_-^{-1} se simplifient en

$$\left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(2)} = \frac{m^2}{\hbar^4k^2(x)}\tilde{C}_2[2k(x)] \tag{4.28}$$

$$\left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(3)} = \frac{4m^3}{\hbar^6k^3(x)}\int_0^{\infty}\mathrm{d}\xi\int_{\xi}^{\infty}\mathrm{d}\xi' C_3(\xi,\xi')\sin[2k(x)\xi']. \tag{4.29}$$

Cette dernière expression peut être réécrite sous différentes formes en utilisant la propriété de symétrie de la fonction de corrélation à trois points, $C_3(\xi,\xi') = C_3(\xi-\xi',-\xi')$. En particulier, de cette relation découlent les deux propriétés suivantes

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi'\;\theta(\xi)\theta(\xi-\xi')C_3(\xi,\xi')\sin[2k(x)\xi'] = 0 \tag{4.30}$$

$$\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi'\;\theta(-\xi)\theta(\xi'-\xi)C_3(\xi,\xi')\sin[2k(x)\xi'] = 0. \tag{4.31}$$

On calcule alors

$$\left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(3)} = \frac{4m^3}{\hbar^6k^3(x)}\int_0^{\infty}\mathrm{d}\xi\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\xi' C_3(\xi,\xi')\sin[2k(x)\xi'] \tag{4.32}$$

$$= \frac{-m^3}{\pi\hbar^6k^3(x)}\fint\mathrm{d}q\;\frac{\tilde{C}_3[q,2k(x)] + \tilde{C}_3[-q,-2k(x)]}{q}, \tag{4.33}$$

où le signe $\fint$ désigne la valeur principale de Cauchy de l'intégrale impropre.

1. Plus précisément, c'est l'inverse du libre parcours moyen, ℓ_-^{-1}, que l'on exprime par des termes perturbatifs en V.

4.2.3 Application au potentiel de tavelures

Pour le potentiel de tavelures généré par un éclairage uniforme du diffuseur, on a

$$\left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(2)} = \frac{\pi m^2 V_{\rm R}^2 \sigma_{\rm R}}{\hbar^4 k^2(x)} \left[1 - |k(x)|\sigma_{\rm R}\right] \Theta(1 - |k(x)|\sigma_{\rm R}) \tag{4.34}$$

$$\left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(3)} = -\frac{4\pi m^3 V_{\rm R}^3 \sigma_{\rm R}^2}{\hbar^6 k^3(x)} \left[(1 - k(x)\sigma_{\rm R})\ln(1 - k(x)\sigma_{\rm R}) + k(x)\sigma_{\rm R}\ln(k(x)\sigma_{\rm R})\right] \Theta(1 - k(x)\sigma_{\rm R}). \tag{4.35}$$

Pour $k(x)\sigma_{\rm R} < 1$, l'amplitude de la fonction d'onde est alors donnée par $\overline{\ln r(x)/r(L)} \simeq \overline{\ln r(x)/r(L)}^{(0)} + \overline{\ln r(x)/r(L)}^{(2)} + \overline{\ln r(x)/r(L)}^{(3)}$ avec [2]

$$\overline{\ln \frac{r(x)}{r(L)}}^{(2)} = \frac{1}{2\alpha}\left[k(x)\sigma_{\rm R} - k(L)\sigma_{\rm R} - \ln\frac{k(x)}{k(L)}\right], \tag{4.36}$$

où $\alpha = \hbar^2 F/mU_{\rm R}$, et

$$\begin{aligned}\overline{\ln \frac{r(x)}{r(L)}}^{(3)} = -\frac{2\pi m^2 V_R^3 \sigma_{\rm R}^3}{\hbar^4 F}\Bigg(&-\frac{1}{2}\ln^2[k(x)\sigma_{\rm R}] + \frac{1}{2}\ln^2[k(L)\sigma_{\rm R}] + \ln\left[\frac{k(x)}{k(L)}\right] - {\rm Li}_2[k(x)\sigma_{\rm R}] \\ &+ {\rm Li}_2[k(L)\sigma_{\rm R}] + \frac{1 - k(x)\sigma_{\rm R}}{k(x)\sigma_{\rm R}}\ln[1 - k(x)\sigma_{\rm R}] - \frac{1 - k(L)\sigma_{\rm R}}{k(L)\sigma_{\rm R}}\ln[1 - k(L)\sigma_{\rm R}]\Bigg).\end{aligned} \tag{4.37}$$

On remarque que, conformément à l'analyse dimensionnelle, le préfacteur peut se réécrire en fonction des paramètres adimensionnés α, $\varepsilon = \hbar F/\sqrt{2m}E^{3/2}$, $k(0)\sigma_{\rm R}$ et du signe du potentiel désordonné sous la forme

$$\frac{2\pi m^2 V_{\rm R}^3 \sigma_{\rm R}^3}{\hbar^4 F} = {\rm sign}(V_{\rm R})\sqrt{\frac{2}{\pi}}\frac{\varepsilon^{3/2}[k(0)\sigma_{\rm R}]^{3/2}}{\alpha^{3/2}}. \tag{4.38}$$

La prise en compte du terme d'ordre trois est notamment nécessaire pour distinguer entre l'effet d'un potentiel de tavelures positif et d'un potentiel de tavelures négatif.

Nous avons étudié numériquement l'évolution de la valeur moyenne du logarithme de l'amplitude d'une fonction d'onde $\overline{\ln|\psi(x)|}$ correspondant à une onde plane sortante en $x = L$, vérifiant au point initial $\psi(L) = 1$ et $\partial_x\psi(L) = ik(L)$, en présence d'une force constante F et du potentiel de tavelures. Sur la figure 4.2, on trace le logarithme moyen de l'amplitude de la fonction d'onde, normalisée par rapport à sa valeur à l'entrée du guide en $x = 0$, $\overline{\ln\frac{|\psi(x)|}{|\psi(L)|}} - \overline{\ln\frac{|\psi(0)|}{|\psi(L)|}}$, en fonction de $1 + Fx/E$. Le logarithme de l'amplitude de la fonction d'onde étant donné par $\overline{\ln|\psi(x)|} = \overline{\ln[r(x)]} - \overline{\ln|\sin\theta|} \sim \overline{\ln[r(x)]}$, on compare les valeurs numériques aux résultats analytiques à l'ordre zéro, deux et trois [3] sur $\overline{\ln\frac{r(x)}{r(L)}} - \overline{\ln\frac{r(0)}{r(L)}}$. Les paramètres du système utilisés sont $\alpha = 0.009794$, $k(0)\sigma_{\rm R} = 0.4$ et $\varepsilon = 0.0002539$. Les deux signes du potentiel de tavelures sont étudiés. On observe un excellent accord des résultats analytiques à l'ordre trois avec les résultats numériques.

2. ${\rm Li}_2$ désigne la fonction dilogarithme :

$${\rm Li}_2(z) = \sum_{k=1}^{\infty}\frac{z^k}{k^2}.$$

3. On trace par exemple à l'ordre trois, $f(x) - f(0)$ où $f(x) = \overline{\ln\frac{[r(x)]}{r(L)}}^{(0)} + \overline{\ln\frac{[r(x)]}{r(L)}}^{(2)} + \overline{\ln\frac{[r(x)]}{r(L)}}^{(3)}$.

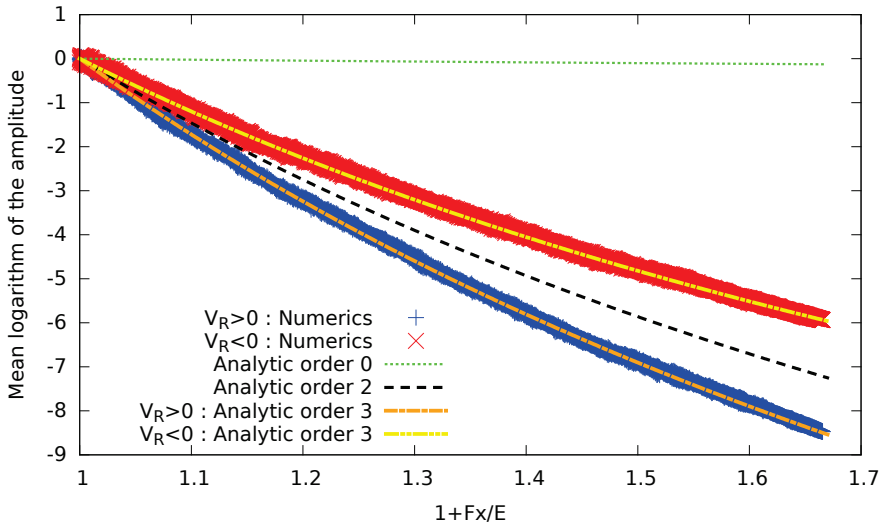


Fig 4.2 – Valeur moyenne du logarithme de l'amplitude de la fonction d'onde, renormalisée par rapport à sa valeur en $x = 0$, en fonction de $1 + Fx/E$. Les valeurs numériques pour un potentiel de tavelures positif sont tracées en bleu, et celles pour un potentiel de tavelures négatif en rouge. Les paramètres utilisés sont $\varepsilon = 0.00025$, $k(0)\sigma = 0.4$ et $\alpha = 0.01$.

4.2.4 Lien avec la transmission typique

Dans le cas d'une onde plane sortante en $x = L$ du guide, le coefficient de transmission T est donné par le rapport des courants positifs j_+ en L et en 0 [cf. Éq. (3.27)]. En inversant le système d'équation (3.24) et en injectant la solution trouvée pour $\psi_+(x)$ dans (3.26), le courant positif peut être réécrit sous la forme

$$j_+(x) = \frac{\hbar k(x)}{4m}\left|\psi(x) + \frac{\partial_x\psi(x)}{ik(x)}\right|^2. \tag{4.39}$$

Pour une fonction d'onde réelle, en utilisant l'amplitude $r(x)$ et la phase $\theta(x)$, on a ainsi

$$j_+(x) = \frac{\hbar k(x)}{4m} r^2(x). \tag{4.40}$$

Ayant constaté que la condition initiale en $x = L$ est sans importance sur la valeur moyenne du logarithme de l'amplitude, on applique l'égalité $T(L) = \frac{j_+(L)}{j+(0)}$, strictement valide pour une onde plane sortante, à la fonction d'onde réelle. On a alors

$$T(L) = \frac{k(L)}{k(0)}\frac{r^2(L)}{r^2(0)}, \tag{4.41}$$

d'où

$$\overline{\ln T(L)} = \ln\frac{k(L)}{k(0)} - 2\overline{\ln\frac{r(0)}{r(L)}} = -2\left[\overline{\ln\frac{r(0)}{r(L)}}^{(2)} + \overline{\ln\frac{r(0)}{r(L)}}^{(3)} + \dots\right]. \tag{4.42}$$

Le rapport des vitesses en entrée et en sortie du guide est compensé par la décroissance de l'amplitude de la fonction d'onde due à la force, et on a bien ainsi une transmission égale à 1 en l'absence de désordre. Pour un désordre gaussien, pour lequel les termes d'ordre supérieur à deux sont inexistants, on retrouve le résultat $\overline{\ln T(L)} = -\int_0^L \frac{\mathrm{d}x}{\ell_-(x)}$, avec $\frac{1}{\ell_-(x)} = \left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(2)}$, en

accord avec le résultat obtenu par la méthode des matrices de transfert (voir Chap. 3). Pour le désordre non gaussien, on généralise cette expression à l'ordre trois avec

$$\frac{1}{\ell_-(x)} = \left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(2)} + \left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(3)}. \tag{4.43}$$

4.3 Méthode diagrammatique

Nous présentons une approche diagrammatique analogue à celle utilisée par Prigodin pour calculer la probabilité de diffusion quantique en présence d'une force constante que nous appliquons à un problème de transmission. Ce calcul du coefficient de transmission a été utilisé en l'absence force par Mel'nikov [102]. Il nous permet de calculer le coefficient de transmission moyen. De plus, nous étendons l'approche diagrammatique à l'ordre trois dans le potentiel désordonné, ce qui est utile par exemple dans le cas d'un potentiel de tavelures non gaussien, en particulier pour distinguer entre un potentiel de tavelures négatif et un potentiel de tavelures positif. Nous présentons également un calcul à l'aide du formalisme diagrammatique du coefficient de réflexion élémentaire introduit dans la méthode des matrices de transfert, ce qui permet de généraliser à l'ordre trois les résultats obtenus par la méthode des matrices de transfert.

4.3.1 Expression du coefficient de transmission en termes de fonctions de Green

Nous considérons ici une force constante $F \geqslant 0$ sur tout l'espace et un potentiel désordonné $V(x)$ à support compact $[0, L]$. Le hamiltonien du système est ainsi la somme d'un hamiltonien libre $\hat{H}_0 = \frac{\hat{p}^2}{2m} - F\hat{x}$ et du potentiel désordonné $\hat{V}$. Contrairement au système précédemment utilisé pour étudier la transmission, et décrit dans la section 3.1, nous avons étendu ici la force à l'extérieur du segment $[0, L]$. Nous négligerons cependant dans notre étude toute réflexion sur le point de rebroussement classique. On souhaite alors définir des ondes quasi-planes $\phi^+(x)$ et $\phi^-(x)$ dirigées vers la droite et vers la gauche, états propres d'énergie E du hamiltonien $\hat{H}_0$. Ainsi, en envoyant une onde quasi-plane $\phi^+(x)$ incidente en $x = 0$, le coefficient de transmission entre 0 et L sera donné par

$$T = \frac{k(L)}{k(0)} \frac{|\psi(L)|^2}{|\phi^+(0)|^2}, \tag{4.44}$$

où $\psi(x)$ est un état propre du hamiltonien total d'énergie E.

Le hamiltonien libre possède comme base de solutions dans l'espace réel $\{\mathrm{Ai}\left[-\xi(x)\right], \mathrm{Bi}\left[-\xi(x)\right]\}$, où Ai et Bi désignent les fonctions d'Airy et $\xi(x) = \frac{(2m)^{1/3}}{(F\hbar)^{2/3}}(E + Fx)$. On définit alors les deux fonctions $\phi^+(x)$ et $\phi^-(x)$ par

$$\phi^+(x) = \frac{\mathrm{Bi}[-\xi(x)] + i\,\mathrm{Ai}[-\xi(x)]}{\sqrt{2}} \tag{4.45}$$

$$\phi^-(x) = \frac{\mathrm{Bi}[-\xi(x)] - i\,\mathrm{Ai}[-\xi(x)]}{\sqrt{2}}. \tag{4.46}$$

Pour $\xi(x) \gg 1$, on obtient [103]

$$\phi^+(x) \simeq \sqrt{\frac{i}{2\pi}} \frac{(2mF)^{1/6}}{\hbar^{1/3}\sqrt{k(x)}} \mathrm{e}^{i\frac{\hbar^2 k^3(x)}{3mF}} \tag{4.47}$$

$$\phi^-(x) \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi i}} \frac{(2mF)^{1/6}}{\hbar^{1/3}\sqrt{k(x)}} \mathrm{e}^{-i\frac{\hbar^2 k^3(x)}{3mF}}. \tag{4.48}$$

En particulier, en appliquant l'opérateur impulsion sur ces états propres, on a

$$\frac{\hbar}{i}\partial_x\phi^{\pm}(x) = \left[\hbar k(x) + \frac{iFm}{2\hbar k^2(x)}\right]\phi^{\pm}(x). \tag{4.49}$$

On fait l'hypothèse que l'on est dans le régime où la variation relative du vecteur d'onde local sur une longueur d'onde est négligeable, $\hbar^2 k^3(x)/Fm \gg 1$ [cf. Éq. (2.30)]. Les états propres du hamiltonien se comportent bien alors comme des ondes quasi-planes,

$$\frac{\hbar}{i}\partial_x\phi^{\pm}(x) \simeq \pm\hbar k(x)\phi^{\pm}(x). \tag{4.50}$$

4.3.2 Lien avec le formalisme diagrammatique

La fonction de Green libre en présence d'une force est la somme de deux termes, $G_0^R(x,x'|E) = \tilde{G}_0^R(x,x'|E) + \tilde{\tilde{G}}_0^R(x,x'|E)$, avec sous l'hypothèse (2.30)

$$\tilde{G}_0^R(x,x'|E) = -\frac{i}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{v(x)v(x')}}\,\mathrm{e}^{\frac{i\hbar^2}{3Fm}\left|k^3(x)-k^3(x')\right|} \tag{4.51}$$

$$\tilde{\tilde{G}}_0^R(x,x'|E) = -\frac{1}{\hbar}\frac{1}{\sqrt{v(x)v(x')}}\,\mathrm{e}^{\frac{i\hbar^2}{3Fm}\left|k^3(x)+k^3(x')\right|}. \tag{4.52}$$

Le premier terme s'identifie à la propagation directe du point x' au point x, tandis que le second s'interprète comme une propagation directe du point x' jusqu'au point de rebroussement classique x_c, suivie d'une réflexion en x_c et d'une propagation directe jusqu'au point x. Ce deuxième terme devra ainsi être négligé pour ne pas tenir compte de la réflexion sur le point de rebroussement classique. On peut de même décomposer la fonction de Green totale G_R en une somme de deux termes $\tilde{G}^R$ et $\tilde{\tilde{G}}^R$ où le premier ne comporte aucune réflexion sur le point de rebroussement classique tandis que le second en contient au moins une. La relation de récurrence sur G_R, Éq. (1.18), conduit ainsi à

$$\tilde{G}^R = \tilde{G}_0^R + \tilde{G}_0^R V \tilde{G}^R. \tag{4.53}$$

Une onde quasi-plane incidente $\phi^+(x)$ est alors diffusée par le potentiel désordonné sous la forme

$$\psi(x) = \phi^+(x) + \int_0^L \mathrm{d}x'\; \tilde{G}^R(x,x')V(x')\phi^+(x'). \tag{4.54}$$

Or on remarque que sur $x \geqslant 0$, $\phi^+(x) = B\tilde{G}_0^R(x,0)$, où B est une constante, d'où l'on déduit à partir de (4.53) et (4.54) que pour $x \geqslant 0$, $\psi(x) = B\tilde{G}^R(x,0)$. Par conséquent, le coefficient de transmission est donné par [cf. Éq. (4.44)]

$$T(L) = \frac{k(L)}{k(0)}\frac{|\tilde{G}^R(L,0)|^2}{|\tilde{G}_0^R(0,0)|^2} = \hbar^2 v(L)v(0)|\tilde{G}^R(L,0)|^2. \tag{4.55}$$

En particulier,

$$\overline{T}(L) = \hbar^2 v(L)v(0)\overline{\tilde{G}^R(L,0)\tilde{G}^A(0,L)}. \tag{4.56}$$

On reconnaît dans la moyenne des deux fonctions de Green le terme $\Gamma(L,0|E,0)$ utilisé dans le calcul de la probabilité de diffusion quantique [Éq. (2.14)], dont on a exclu les cas de réflexion sur le point de rebroussement classique. Par conséquent, ce terme peut être calculé en utilisant

la même approche diagrammatique que dans le calcul de la probabilité de diffusion quantique (présenté dans la section 2.1). Nous noterons ce terme $\tilde{\Gamma}(L,0)$.

Deux différences avec le calcul de la probabilité de diffusion apparaissent alors. La première est que la fréquence d'étude ω est dans le problème de transmission nulle (on étudie un régime stationnaire). La seconde est que dans le problème en transmission, du fait du support fini $[0,L]$ du potentiel désordonné et de l'absence de réflexion sur le point de rebroussement classique, les diagrammes utilisés pour le calcul de Γ sont l'ensemble des diagrammes n'ayant aucun point en dehors de $[0,L]$. La somme de ces diagrammes correspond alors aux diagrammes centraux entre $x'=0$ et $x=L$ utilisés dans le calcul de la probabilité de diffusion qui possèdent une seule patte externe en 0 et en L, notés $Z_{0,0}(0,L)$. Les deux vertex de fermeture (cf. Fig. 2.9) sont représentés sur la figure 4.3.



Fig 4.3 – Vertex de fermeture du système en transmission.

On en déduit $\tilde{\Gamma}(L,0) = Z_{0,0}(0,L)\mathcal{F}_d(0)\mathcal{F}_g(L) = Z_{0,0}(0,L)/\hbar^2 v(0)v(L)$ d'où

$$\overline{T}(L) = Z_{0,0}(0,L). \tag{4.57}$$

4.3.3 Calcul diagrammatique à l'ordre deux

À l'ordre deux en V, l'effet du désordre correspond à celui d'un désordre gaussien de même fonction de corrélation à deux points.

L'étude de combinatoire sur les diagrammes menée pour établir l'équation différentielle (2.57) sur Z reste valide, avec ici $\omega = 0$. En notant $Z_n(x) \equiv Z_{0,n}(0,x)$, on a donc

$$\partial_x Z_n = -\left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(2)} (2n^2+2n+1)Z_n + \left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(2)} \left[(n+1)^2 Z_{n+1} + n^2 Z_{n-1}\right]. \tag{4.58}$$

En introduisant la fonction génératrice $Z(r,s) = \sum_{n=0}^{\infty} \hat{Z}_n(s) r^n$, où l'on définit $\hat{Z}_n[s(x)] = Z_n(x)$ et la métrique usuelle [cf. Éq. (2.61)]

$$s(x) = \int_0^x \mathrm{d}x' \left[\frac{1}{\ell_-(x')}\right]^{(2)}, \tag{4.59}$$

on obtient l'équation différentielle sur $Z(r,s)$,

$$\partial_s Z = r(1-r)^2 \partial_r^2 Z + (1-r)(1-3r)\partial_r Z - (1-r)Z. \tag{4.60}$$

La condition initiale sur Z est $Z(r,0) = 1$. Cette équation est identique à celle obtenue par Mel'nikov [102] pour calculer le coefficient de transmission en l'absence de force, i.e. dans le cas où le libre parcours moyen ℓ_- est uniforme et $s = x/\ell_-$.

Résolution de l'équation différentielle

Nous présentons ici la résolution de l'équation différentielle sur Z, dont seule la forme asymptotique est donnée dans la référence [102].

On définit $Z_\sigma(r,\sigma)$ la transformée de Laplace [4] de la fonction $Z(r,s)$ par rapport à la variable s. On introduit la fonction $S(r)$ définie par

$$Z_\sigma(r,\sigma) = (1-r)^q S(r), \tag{4.61}$$

où q est l'une des racines du trinôme $q^2+q-\sigma$, égale à [5]

$$q = \frac{-1+i\lambda_0}{2} \qquad \text{avec} \qquad i\lambda_0 = \sqrt{1+4\sigma}. \tag{4.62}$$

La fonction $S(r)$ dépend de σ, mais nous omettons de noter cette variable explicitement pour simplifier les notations. L'équation (4.60) conduit à l'équation différentielle suivante sur la fonction $S(r)$

$$r(1-r)S'' + [-2qr+1-3r]S' - (q+1+\sigma)S = \frac{-1}{(1-r)^{q+1}}. \tag{4.63}$$

L'équation homogène associée à (4.63) est une équation différentielle géométrique dont une base de solution est donnée par [103]

$$S_1(r) = F\left(\frac{1+i\lambda_0}{2}, \frac{1+i\lambda_0}{2}, 1, r\right) \tag{4.64}$$

$$S_2(r) = F\left(\frac{1+i\lambda_0}{2}, \frac{1+i\lambda_0}{2}, 1+i\lambda_0, 1-r\right), \tag{4.65}$$

où $F(a,b,c,z)$ désigne la fonction hypergéométrique [6]. Les solutions S_1 et S_2 divergent respectivement en 0 et 1 et leur wronskien vaut [102]

$$W_{12}(r) \equiv S_1S_2' - S_1'S_2 = \frac{\Gamma(1+i\lambda_0)}{\Gamma^2\left(\frac{1+i\lambda_0}{2}\right) r(1-r)^{1+i\lambda_0}}. \tag{4.67}$$

On peut alors chercher une solution sous la forme :

$$S(r) = a(r)S_1(r) + b(r)S_2(r) \qquad S'(r) = a(r)S_1'(r) + b(r)S_2'(r). \tag{4.68}$$

On obtient :

$$a'(r) = \frac{S_2(r)}{r(1-r)^{q+2}[S_1(r)S_2'(r) - S_1'(r)S_2(r)]} \tag{4.69}$$

$$b'(r) = \frac{-S_1(r)}{r(1-r)^{q+2}[S_1(r)S_2'(r) - S_1'(r)S_2(r)]}. \tag{4.70}$$

D'où une solution régulière en 0 et 1 :

$$S(r) = -S_2(r)\int_0^r \mathrm{d}r' \frac{S_1(r')}{r'(1-r')^{\frac{3+i\lambda_0}{2}} W_{12}(r')} - S_1(r)\int_r^1 \mathrm{d}r' \frac{S_2(r')}{r'(1-r')^{\frac{3+i\lambda_0}{2}} W_{12}(r')} \tag{4.71}$$

$$= \frac{\Gamma^2\left(\frac{1+i\lambda_0}{2}\right)}{\Gamma(1+i\lambda_0)}\left[S_2(r)\int_0^r \mathrm{d}r' S_1(r')(1-r')^{\frac{-1+i\lambda_0}{2}} + S_1(r)\int_r^1 \mathrm{d}r' S_2(r')(1-r')^{\frac{-1+i\lambda_0}{2}}\right]. \tag{4.72}$$

4. La transformée de Laplace d'une fonction $f(s)$ au point σ est définie par $f_\sigma(\sigma) = \int_0^\infty \mathrm{d}s\, f(s)\,\mathrm{e}^{-s\sigma}$, et la transformée de Laplace inverse par $f(s)\theta(s) = \frac{1}{2i\pi}\int_{-i\infty}^{i\infty} \mathrm{d}\sigma\, f_\sigma(\sigma)\,\mathrm{e}^{s\sigma}$.

5. La fonction racine carrée est ici définie sur $\mathbb{C}\backslash\mathbb{R}^-$ par $\sqrt{z} = \sqrt{|z|}\,\mathrm{e}^{i\theta/2}$ où $z = |z|\,\mathrm{e}^{i\theta}$, $\theta \in]-\pi,\pi]$.

6. La fonction hypergéométrique est définie pour $\mathrm{Re}(a) > 0$ et $\mathrm{Re}(b) > 0$ par

$$F(a,b,c,z) = \frac{\Gamma(c)}{\Gamma(b)\Gamma(c-b)}\int_0^1 t^{b-1}(1-t)^{c-b-1}(1-tz)^{-a}\,\mathrm{d}t. \tag{4.66}$$

En appliquant la transformée de Laplace inverse, on obtient pour $s \geqslant 0$

$$Z(r,s) = \int_0^r \mathrm{d}r'[(1-r)(1-r')]^{-1/2} I_0(r,r') + \int_r^1 \mathrm{d}r'[(1-r)(1-r')]^{-1/2} I_0(r',r) \tag{4.73}$$

avec

$$I_0(r,r') = \frac{1}{2i\pi}\int_{-i\infty}^{i\infty} \mathrm{d}\sigma\, \mathrm{e}^{\sigma s}\, S_2(r) S_1(r')[(1-r)(1-r')]^{i\lambda_0/2} \frac{\Gamma^2(\frac{1+i\lambda_0}{2})}{\Gamma(1+i\lambda_0)} \tag{4.74}$$

$$= \frac{1}{2i\pi}\int_{-i\infty}^{i\infty} \mathrm{d}\sigma\; f\left[i\lambda_0(\sigma)\right]. \tag{4.75}$$

Cette intégrale présente une ligne de coupure correspondant à $\sigma \in]-\infty, -1/4]$ pour laquelle l'argument de la racine carrée complexe définissant λ_0 est réel négatif. En modifiant le contour d'intégration pour intégrer le long de cette ligne de coupure, et en effectuant alors le changement de variable $i\lambda = \sqrt{1+4\sigma+i0^+}$, on obtient

$$I_0(r,r') = \frac{1}{2i\pi}\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}\lambda\;\lambda}{2}\big[f(-i\lambda) - f(i\lambda)\big]. \tag{4.76}$$

En utilisant les égalités suivantes [103]

$$F(a,b,c,z) = (1-z)^{c-a-b} F(c-a, c-b, c, z) \tag{4.77}$$

$$F(a,b,c,z) = \frac{\Gamma(c)\Gamma(c-a-b)}{\Gamma(c-a)\Gamma(c-b)} F(a,b,a+b-c+1,1-z) \tag{4.78}$$

$$+ (1-z)^{c-a-b}\frac{\Gamma(c)\Gamma(a+b-c)}{\Gamma(a)\Gamma(b)} F(c-a, c-b, c-a-b+1, 1-z), \tag{4.79}$$

on calcule

$$I_0(r,r') = \frac{1}{4\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}\lambda\, \mathrm{e}^{-\frac{1+\lambda^2}{4}s}\, S_1(r) S_1(r')[(1-r)(1-r')]^{i\lambda/2} \frac{\Gamma^2(\frac{1+i\lambda}{2})\Gamma^2(\frac{1-i\lambda}{2})}{\Gamma(i\lambda)\Gamma(-i\lambda)}. \tag{4.80}$$

En particulier, $I_0(r,r')$ est invariant par échange de ses variables, et la fonction $Z(r,s)$ fait alors intervenir une intégrale sur r' que l'on peut calculer,

$$\int_0^1 \mathrm{d}r'(1-r')^{\frac{-1+i\lambda}{2}} S_1(r') = \Gamma\left(\frac{1+i\lambda}{2}\right)\Gamma\left(\frac{1-i\lambda}{2}\right), \tag{4.81}$$

grâce à la propriété suivante [93] vraie pour $\mathrm{Re}(\rho) > 0$, $\mathrm{Re}(\gamma) > 0$ et $\mathrm{Re}(\gamma+\rho-\alpha-\beta) > 0$:

$$\int_0^1 \mathrm{d}x\; x^{\gamma-1}(1-x)^{\rho-1} F(\alpha,\beta,\gamma,x) = \frac{\Gamma(\gamma)\Gamma(\rho)\Gamma(\gamma+\rho-\alpha-\beta)}{\Gamma(\gamma+\rho-\alpha)\Gamma(\gamma+\rho-\beta)}. \tag{4.82}$$

À partir des égalités [103]

$$\frac{1}{\Gamma(i\lambda)\Gamma(-i\lambda)} = \frac{\lambda}{\pi}\,\mathrm{sh}(\pi\lambda) \qquad \text{et} \qquad \Gamma(z)\Gamma(1-z) = \frac{\pi}{\sin(\pi z)}, \tag{4.83}$$

on réécrit alors $Z(r,s)$ sous la forme

$$Z(r,s) = \frac{\pi}{2}\,\mathrm{e}^{-s/4}\int_0^\infty \mathrm{d}\lambda \frac{\lambda\,\mathrm{sh}\left(\frac{\pi\lambda}{2}\right)}{\mathrm{ch}^2\left(\frac{\pi\lambda}{2}\right)}\,\mathrm{e}^{-\lambda^2 s/4}\, F\left(\frac{1+i\lambda}{2}, \frac{1+i\lambda}{2}, 1, r\right)(1-r)^{\frac{-1+i\lambda}{2}}. \tag{4.84}$$

Transmission moyenne

La valeur moyenne du coefficient de transmission est égale à $Z[0, s(L)]$. Sachant que $F(a, b, c, 0) = 1$, on obtient

$$\overline{T}(L) = \frac{\pi}{2} \mathrm{e}^{-s(L)/4} \int_0^\infty \mathrm{d}\lambda \frac{\lambda \,\mathrm{sh}\left(\frac{\pi\lambda}{2}\right)}{\mathrm{ch}^2\left(\frac{\pi\lambda}{2}\right)} \mathrm{e}^{-\lambda^2 s(L)/4} . \tag{4.85}$$

Nous avons vérifié que ce résultat est identique à celui obtenu à l'aide de la méthode des matrices de transfert [Éq. (3.78)]. Cela confirme la validité de l'approche diagrammatique pour le calcul du coefficient de transmission. Bien que cette méthode soit beaucoup plus lourde que la méthode des matrices de transfert, elle présente l'avantage d'être utilisable pour calculer la probabilité de diffusion quantique. Elle nous permettra donc de mettre en évidence les différences entre un problème de transmission et un problème d'étalement en présence d'une force, sans aucun biais méthodologique.

4.3.4 Calcul diagrammatique à l'ordre trois

La méthode diagrammatique peut être étendue à l'ordre trois en V pour prendre en compte les contributions des moyennes de la forme $C_3(\xi, \xi') = \overline{V(x)V(x+\xi)V(x+\xi')}$.

Nous cherchons à obtenir une équation différentielle sur $Z_n(x)$. Pour cela, nous utilisons la même méthode diagrammatique que pour un désordre gaussien, mais les vertex possibles peuvent être d'ordre deux ou trois.

Équation différentielle en terme de diagrammes

Considérons $Z_n(x)$ la somme de tous les diagrammes situés entre les points $x' = 0$ et x présentant une patte externe à droite de x' et $2n+1$ pattes externes à gauche de x. On note $\mathcal{V}(X)$ le premier vertex à gauche du point x, dont la position est notée X, $2n_\mathcal{V}+1$ le nombre de pattes externes à gauche du point X du sous-diagramme allant de 0 à X, et $N_\mathcal{V}(n)$ le nombre de façons de connecter deux diagrammes dont celui de gauche présente $2n_\mathcal{V}+1$ pattes externes à son extrémité droite, et celui de droite $2n+1$ pattes externes à son extrémité gauche. La valeur de $n_\mathcal{V}$ dépend de n et du type de vertex $\mathcal{V}$. On a alors [cf. Éq. (2.53)]

$$Z_n(x) = \sum_\mathcal{V} \int_0^x \mathrm{d}X \; \mathcal{V}(X) N_\mathcal{V}(n) Z_{n_\mathcal{V}}(X). \tag{4.86}$$

On a ainsi l'équation différentielle

$$\partial_x Z_n(x) = \sum_\mathcal{V} \mathcal{V}(x) N_\mathcal{V}(n) Z_{n_\mathcal{V}}(x). \tag{4.87}$$

Les vertex $\mathcal{V}$ d'ordre deux ont déjà été traités, et donnent une première contribution à $\partial_x Z_n(x)$ donnée par l'équation (4.58).

Nous nous intéressons maintenant à la contribution des vertex d'ordre trois. Comme à l'ordre deux, on peut montrer que les vertex qui n'oscillent pas avec x conservent la différence entre le nombre de lignes avancées et retardées. On vérifie ainsi que la forme générale des diagrammes (nombre impair de lignes avancées en tout point, égal au nombre de lignes retardées) est inchangée. L'ensemble des vertex qui n'oscillent pas avec x est donné sur la figure 4.4. La valeur de $n_\mathcal{V}$ est égale à $n-1$ pour les vertex dont le nom est de la forme $\mathcal{V}_d$, $n+1$ pour ceux dont le nom est de la forme $\mathcal{V}_g$, et n pour les autres. Les nombres de façons $N_\mathcal{V}(n)$ de combiner les diagrammes à l'aide des vertex sont présentés dans le tableau 4.1.

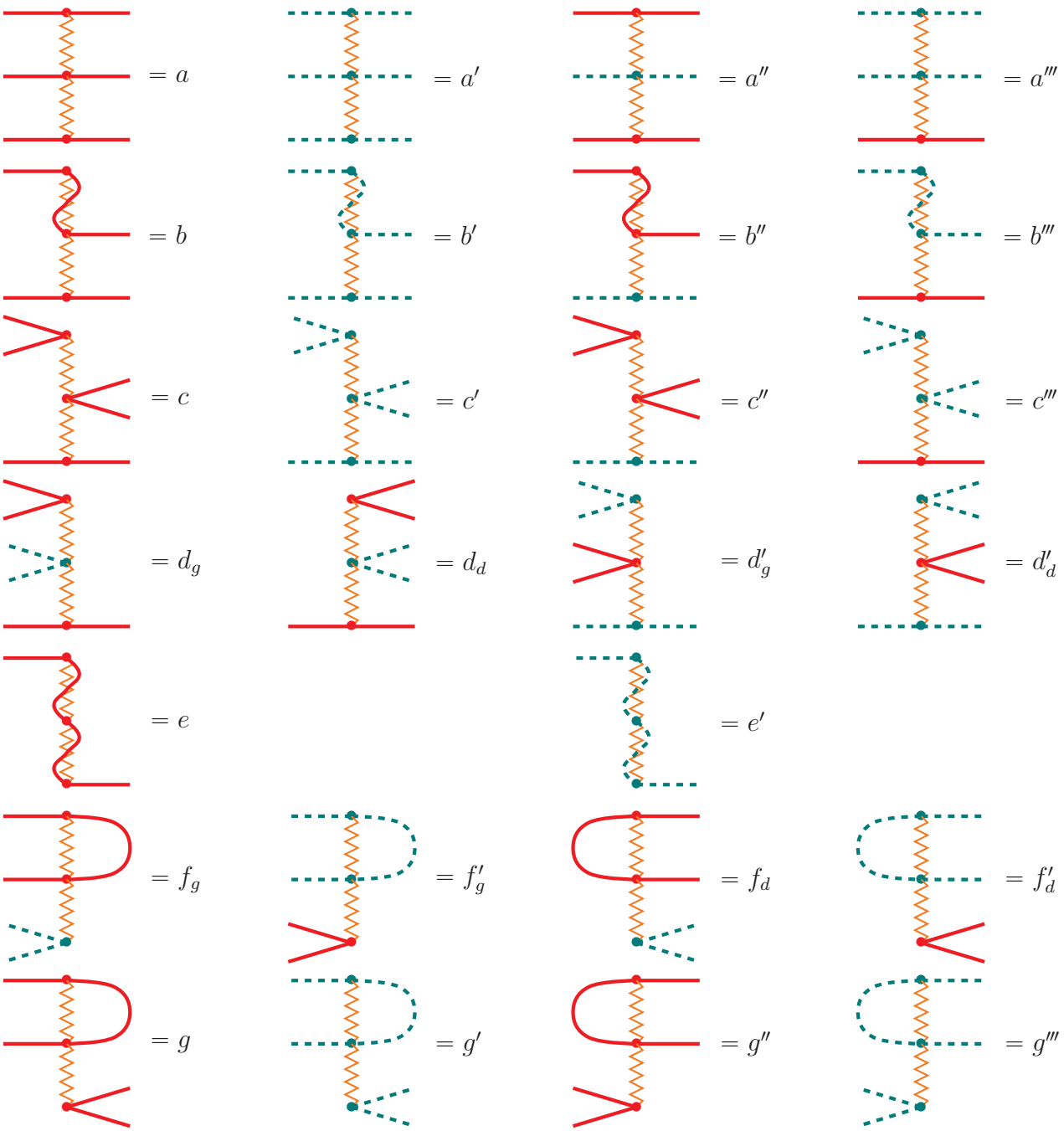


Fig 4.4 – Vertex d'ordre trois n'oscillant pas avec la position.

$N_a = N_{a'}$	$N_{a''} = N_{a'''}$	$N_b = N_{b'}$	$N_{b''} = N_{b'''}$	$N_c = N_{c'}$	$N_{c''} = N_{c'''}$
$n(2n+1)(2n-1)/3$	$n(2n+1)^2$	$2n(2n+1)$	$(2n+1)^2$	$n^2(2n-1)$	$n^2(2n+1)$
$N_{d_g} = N_{d'_g}$	$N_{d_d} = N_{d'_d}$	$N_e = N_{e'}$	$N_{f_g} = N_{f'_g}$	$N_{f_d} = N_{f'_d}$	$N_g = N_{g'} = N_{g''} = N_{g'''}$
$(n+1)^2(2n+1)$	$n^2(2n-1)$	$2n+1$	$(n+1)^2$	n^2	n^2

TABLE 4.1 – Nombre de façons $N_{\mathcal{V}}$ de combiner à l'aide du vertex $\mathcal{V}$ deux diagrammes tels que celui de gauche possède $2n_{\mathcal{V}}+1$ pattes externes à droite et celui de droite possède $2n+1$ pattes externes à gauche.

Pour calculer les vertex, nous rappelons sur la figure 4.5 les valeurs associées aux demi-fonctions de Green, identiques au problème de diffusion quantique d'une particule avec $\omega = 0$, et valides sous l'hypothèse (2.30).

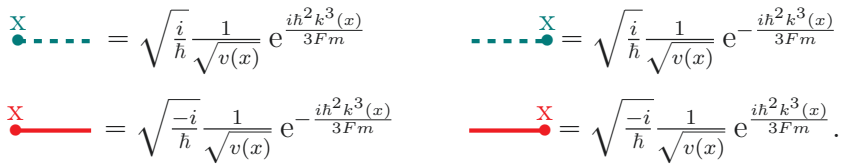


Fig 4.5 – Diagrammes élémentaires associés aux fonctions de Green libres pour $\omega = 0$. Les diagrammes en tirets bleus sont associés à la fonction de Green avancée, et ceux en traits pleins rouges à la fonction de Green retardée.

De plus, nous nous plaçons dans le cadre de validité des hypothèses (2.48) et (2.50), afin de pouvoir approximer $v(x+\xi) \simeq v(x)$ et $e^{\frac{i\hbar^2 k^3(x+\xi)}{3Fm}} \simeq e^{\frac{i\hbar^2 k^3(x)}{3Fm}} \times e^{2ik(x)\xi}$ pour ξ inférieur ou de l'ordre de la longueur de corrélation du désordre σ_{R}.

Vertex qui se compensent

On souhaite calculer $S \equiv \sum_{\mathcal{V}} \mathcal{V}(x) N_{\mathcal{V}}(n) Z_{n_{\mathcal{V}}}(x)$. Si deux vertex $\mathcal{V}_1$ et $\mathcal{V}_2$ vérifient $n_{\mathcal{V}_1} = n_{\mathcal{V}_2}$, $N_{\mathcal{V}_1}(n) = N_{\mathcal{V}_2}(n)$ et $\mathcal{V}_1(x) = -\mathcal{V}_2(x)$, alors leur contribution au terme S est nulle. C'est le cas des paires de vertex (a, a'), (a'', a'''), (c, c'), (c'', c'''), (d_g, d'_g) et (d_d, d'_d).

Vertex tels que $n_{\mathcal{V}} = n$

Les vertex restants tels que $n_{\mathcal{V}} = n$ sont les vertex $b^{(i)}$, $e^{(i)}$ et $g^{(i)}$. Si deux vertex $\mathcal{V}_1$ et $\mathcal{V}_2$ sont complexes conjugués et vérifient $N_{\mathcal{V}_1}(n) = N_{\mathcal{V}_2}(n)$, alors leur contribution au terme S est égale à $2N_{\mathcal{V}_1}(n)\,\mathrm{Re}[\mathcal{V}_1]$. C'est le cas de tous les vertex qui nous intéressent ici, en les assemblant par paires (b, b'), (b'', b'''), (e, e'), (g, g') et (g'', g''').

On calcule alors

$$b = \frac{i}{\hbar^3 v^3(x)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_2\; C_3(y_1, y_2) \left[\theta(y_1) + \theta(-y_1)\, e^{-2ik(x)y_1}\right] \tag{4.88}$$

d'où

$$\mathrm{Re}(b) = \frac{1}{\hbar^3 v^3(x)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_2\; C_3(y_1, y_2)\theta(-y_1) \sin[2k(x)y_1], \tag{4.89}$$

et on a $b'' = -b$ d'où

$$\mathrm{Re}(b'') = -\,\mathrm{Re}(b). \tag{4.90}$$

On calcule de même

$$e = \frac{i}{\hbar^3 v^3(x)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_2 \; C_3(y_1, y_2)\{\theta(-y_1)\theta(y_2) + \\ \mathrm{e}^{2ik(x)y_1} \times [\theta(y_1)\theta(y_1 - y_2) + \theta(y_2)\theta(y_1 - y_2) + \theta(y_1)\theta(y_2)]\}. \quad (4.91)$$

En utilisant la symétrie de la fonction de corrélation à trois points $C_3(y_1, y_2) = C_3(-y_1, y_2)$ et l'égalité (4.30) qui en découle, on obtient [7]

$$\mathrm{Re}(e) = -\frac{1}{\hbar^3 v^3(x)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_2 \; C_3(y_1, y_2) \sin[2k(x)y_1] \left[2\theta(y_2) - \theta(-y_1)\right]. \quad (4.92)$$

Enfin, on a

$$g = \frac{2i}{\hbar^3 v^3(x)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_2 \; C_3(y_1, y_2)\theta(y_1 - y_2)\, \mathrm{e}^{2ik(x)y_1}, \quad (4.93)$$

dont on déduit en utilisant la relation (4.31)

$$\mathrm{Re}(g) = -\frac{2}{\hbar^3 v^3(x)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_2 \; C_3(y_1, y_2)\theta(y_2) \sin[2k(x)y_1], \quad (4.94)$$

et on a $g'' = g$, d'où

$$\mathrm{Re}(g'') = \mathrm{Re}(g). \quad (4.95)$$

On peut alors calculer la contribution à S des vertex tels que $n_{\mathcal{V}} = n$, et on obtient

$$S^{(n)} = -(2n^2 + 2n + 1) \times \frac{4}{\hbar^3 v^3(x)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_2 \; C_3(y_1, y_2)\theta(y_2) \sin[2k(x)y_1] \times Z_n(x). \quad (4.96)$$

Vertex tels que $n_{\mathcal{V}} = n - 1$

Les vertex qui ne se compensent pas tels que $n_{\mathcal{V}} = n - 1$ sont f_d et f'_d. Ils sont complexes conjugués, et

$$f_d = -\frac{2i}{\hbar^3 v^3(x)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_2 \; C_3(y_1, y_2)\theta(y_2)\, \mathrm{e}^{2ik(x)y_1} \quad (4.97)$$

d'où

$$\mathrm{Re}(f_d) = \frac{2}{\hbar^3 v^3(x)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_2 \; C_3(y_1, y_2)\theta(y_2) \sin[2k(x)y_1]. \quad (4.98)$$

La contribution à S de ces termes est alors donnée par

$$S^{(n-1)} = n^2 \times \frac{4}{\hbar^3 v^3(x)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_2 \; C_3(y_1, y_2)\theta(y_2) \sin[2k(x)y_1] \times Z_{n-1}(x). \quad (4.99)$$

Vertex tels que $n_{\mathcal{V}} = n + 1$

Les vertex qui ne se compensent pas tels que $n_{\mathcal{V}} = n + 1$ sont f_g et f'_g. Ils sont complexes conjugués, et $f_g = -g$, d'où une contribution à S égale à

$$S^{(n+1)} = (n + 1)^2 \times \frac{4}{\hbar^3 v^3(x)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_2 \; C_3(y_1, y_2)\theta(y_2) \sin[2k(x)y_1] \times Z_{n+1}(x). \quad (4.100)$$

7. Il convient de noter également que $C_3(y_1, y_2) = C_3(y_2, y_1)$.

Équation différentielle totale

En sommant $S = S^{(n)} + S^{(n+1)} + S^{(n-1)}$, on obtient la contribution totale des vertex d'ordre trois à $\partial_x Z_n(x)$ qui vaut

$$S = -\left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(3)} (2n^2+2n+1)Z_n + \left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(3)} \left[(n+1)^2 Z_{n+1} + n^2 Z_{n-1}\right], \tag{4.101}$$

avec

$$\left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(3)} = \frac{4}{\hbar^3 v^3(x)} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_1 \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y_2 \; C_3(y_1,y_2)\theta(y_2)\sin[2k(x)y_1]. \tag{4.102}$$

On a ainsi en prenant en compte les diagrammes d'ordre deux et ceux d'ordre trois,

$$\partial_x Z_n(x) = -\frac{1}{\ell_-(x)}(2n^2+2n+1)Z_n + \frac{1}{\ell_-(x)}\left[(n+1)^2 Z_{n+1} + n^2 Z_{n-1}\right], \tag{4.103}$$

avec

$$\frac{1}{\ell_-(x)} = \left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(2)} + \left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(3)}. \tag{4.104}$$

L'équation différentielle sur $Z_m(x)$ est identique à celle obtenue en ne considérant que les vertex d'ordre deux, en remplaçant $\frac{1}{\ell_-(x)}$ par sa nouvelle valeur. Par conséquent, la même résolution que précédemment peut être menée, et on obtient ainsi la même expression de $\overline{T}(L)$ (cf. Éq. (4.85)), avec

$$s(L) = \int_0^L \frac{\mathrm{d}x}{\ell_-(x)}, \tag{4.105}$$

où le libre parcours moyen est maintenant donné par l'équation (4.104).

On a ainsi montré que l'on étend à l'ordre trois en V le calcul de la transmission moyenne en prenant un libre parcours moyen dont l'inverse est la somme d'un terme d'ordre deux correspondant au cas d'un désordre gaussien et d'un terme correctif d'ordre trois. Ce résultat est également vrai pour le calcul de la transmission typique, comme on l'a montré à l'aide du formalisme de phase, en particulier on vérifie bien que les termes correctifs sont identiques pour les deux systèmes.

4.3.5 Lien avec le calcul du coefficient de réflexion

Lors de la diffusion d'une onde plane incidente $\phi^+(x)$ sur un potentiel désordonné à support compact $[0,L]$, donnée par l'équation (4.54), on a pour $x < 0$ la superposition de l'onde incidente avec l'onde réfléchie égale à $\int_0^L \mathrm{d}x' \; \tilde{G}^R(x,x')V(x')\phi^+(x')$. En utilisant la relation $\phi^+(x) = B\tilde{G}_0^R(x,0)$, on en déduit l'expression exacte du coefficient de réflexion

$$R = \frac{|\int_0^L \mathrm{d}x' \; \tilde{G}^R(0,x')V(x')\tilde{G}_0^R(x',0)|^2}{|\tilde{G}_0^R(0,0)|^2}. \tag{4.106}$$

Si l'on considère à présent la réflexion au point x de l'onde par le désordre compris dans un intervalle $[x, x+\Delta x]$ suffisamment court pour ne permettre qu'un événement de diffusion unique (cf. Chap. 3 Sec. 3.2.3), la fonction de Green totale $\tilde{G}^R$ peut être remplacée par la fonction de Green libre $\tilde{G}_0^R$ dans l'expression du coefficient de réflexion $R_{\Delta x}$. On a alors

$$\overline{R_{\Delta x}(x)} = \frac{\int_x^{x+\Delta x} \mathrm{d}x' \int_x^{x+\Delta x} \mathrm{d}x'' [\tilde{G}_0^R(x,x')\tilde{G}_0^A(x,x'')]^2 \overline{V(x')V(x'')}}{|\tilde{G}_0^R(x,x)|^2}. \tag{4.107}$$

Or on remarque qu'en utilisant les notations diagrammatiques, on a pour $x', x'' > x$,

$$\tilde{G}_0^R(x,x') = \overset{x'}{\text{———•}} \times \sqrt{\frac{-i}{\hbar v(x)}}\, \mathrm{e}^{-i\frac{\hbar^2 k^3(x)}{3Fm}}$$

$$\tilde{G}_0^A(x,x'') = \overset{x''}{\text{- - -•}} \times \sqrt{\frac{i}{\hbar v(x)}}\, \mathrm{e}^{i\frac{\hbar^2 k^3(x)}{3Fm}}.$$

Le numérateur de l'expression du coefficient de réflexion se réécrit alors sous la forme :

 $\times \Delta x \times \frac{1}{\hbar^2 v^2(x)}$,

tandis que le dénominateur est égal à $1/\hbar^2 v^2(x)$. Le vertex d'interaction qui intervient au numérateur est égal à $1/\ell_-(x)$ pour un système en transmission (cf. annexe C avec $\omega = 0$). On obtient alors

$$\overline{R_{\Delta x}(x)} = \frac{\Delta x}{\ell_-(x)}. \tag{4.108}$$

Calcul perturbatif à l'ordre trois

Pour un désordre non gaussien, le coefficient de réflexion trouvé précédemment correspond au premier terme d'un développement perturbatif en V,

$$\overline{R_{\Delta x}(x)}^{(2)} = \Delta x \times \left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(2)}. \tag{4.109}$$

On peut poursuivre le calcul du coefficient de réflexion sur Δx au troisième ordre en V, en remplaçant l'un des $G^{R/A}(0,y)$ qui interviennent dans l'expression développée du numérateur de l'Éq. (4.106) par $\int \mathrm{d}y' G_0^{R/A}(0,y')V(y')G_0^{R/A}(y',y)$.

On obtient alors par le même raisonnement que précédemment un terme correctif d'ordre trois $\overline{R_{\Delta x}(x)}^{(3)}$ pour le coefficient de réflexion, tel que

 $= \frac{\overline{R_{\Delta x}(x)}^{(3)}}{\Delta x}$.

La somme de ces deux diagrammes est égale à $\left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(3)}$, d'où à l'ordre trois en V un coefficient de réflexion sur la longueur Δx

$$\overline{R_{\Delta x}(x)} = \frac{\Delta x}{\ell_-(x)}, \tag{4.110}$$

avec

$$\frac{1}{\ell_-(x)} = \left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(2)} + \left[\frac{1}{\ell_-(x)}\right]^{(3)}. \tag{4.111}$$

Par conséquent, le traitement analytique utilisé dans la méthode des matrices de transfert peut être appliqué en présence d'un désordre non gaussien, en corrigeant la valeur du libre parcours moyen. La distribution de probabilité et les valeurs moyenne et typique de la transmission qui en découlent ont la même expression que pour un désordre gaussien, en utilisant le libre parcours moyen corrigé, ce qui est en parfait accord avec les résultats obtenus par le formalisme de phase (transmission typique) et par l'approche diagrammatique (transmission moyenne).

4.3.6 Différence entre probabilité de diffusion quantique et transmission

Le résultat obtenu par la méthode diagrammatique sur le coefficient de transmission est cohérent avec les résultats obtenus par d'autres méthodes (matrices de transfert, formalisme de phase) et diffère donc du résultat sur la probabilité de diffusion quantique. En particulier, la probabilité de diffusion décroît à grande distance dans la direction de la force en $x^{-\beta_{exp}}$, avec $\beta_{exp} = 1 + (1-\alpha)^2/8\alpha$, tandis que le coefficient de transmission moyen décroît avec la longueur du guide en $L^{-1/8\alpha}$. Une différence majeure entre les deux systèmes, mise en évidence dans la méthode diagrammatique, est la possibilité d'interaction avec le désordre au-delà du point x considéré dans le calcul de la probabilité de diffusion (sous-diagrammes à droite du point x), qui n'existe pas dans le cas de la transmission (pas de désordre au-delà du point L). Cette différence ne joue pas de rôle important en l'absence de force, car la probabilité de retour au point x d'une particule ayant exploré l'espace à droite de celui-ci décroît exponentiellement avec la distance maximale atteinte par la particule, sous l'effet de la localisation forte. En revanche, en présence d'une force, la décroissance de cette probabilité de retour est a priori plus lente, algébrique de loi de puissance $\sim -1/\alpha$. Il devient moins probable pour la particule d'être transmise à droite du point x si elle peut interagir avec le désordre à droite de ce point, que s'il n'y pas de désordre à droite du point x. Le premier cas est celui qui apparaît dans le calcul de la probabilité de diffusion. La probabilité que la particule soit transmise au-delà du point x à temps infini est alors donnée par $\int_x^\infty \mathrm{d}x' p_\infty(x'|E) \sim x^{-(1-\alpha)^2/8\alpha}$. Elle diminue en effet plus lentement que le coefficient de transmission, qui correspond au second cas.

Chapitre 5

Étalement d'un paquet d'onde en présence de désordre et d'une force extérieure

Jusqu'à présent (Chap. 3 et 4), nous avons étudié la localisation d'ondes de matière en présence d'une force dans des schémas de transmission. Nous nous tournons dans ce chapitre vers l'étude de l'étalement d'un paquet d'onde, comme étudié par Prigodin dans le cas d'un désordre blanc [2]. Ainsi que nous l'avons discuté précédemment (voir Chap. 2, Sec. 2.1), la localisation d'un paquet d'onde en expansion qui apparaît à faible force est algébrique, et est caractérisée par un exposant différent de celui en transmission. Nous souhaitons dans un premier temps confronter cette prédiction à des calculs numériques, comme cela a été fait en l'absence de force [26, 50]. Plus important, nous cherchons ici à déterminer l'étalement en temps réel du paquet d'onde qui n'est pas prédit par le calcul de Prigodin. De tels calculs sont très utiles pour une confrontation ultérieure avec des expériences d'étalement de paquets d'onde d'atomes ultrafroids similaires à celles réalisées en l'absence de force [55]. En particulier, les expériences ayant lieu à temps fini et sur des distances finies, une étude dynamique de l'étalement du paquet d'onde peut être nécessaire pour rendre compte des résultats expérimentaux. Notre approche numérique nous permet de plus de prendre en compte les corrélations spatiales du potentiel désordonné, qui jouent un rôle important dans les expériences mais qui sont négligées dans l'approche de Prigodin.

Nous nous intéressons dans ce chapitre à la probabilité de transfert d'une particule d'énergie E initialement localisée en $x' = 0$, en présence d'un potentiel désordonné gaussien $V(x)$ de moyenne nulle, et d'une force constante F, dans un milieu unidimensionnel. Le potentiel désordonné est un désordre blanc dans les deux premières parties. Nous revenons ainsi sur le résultat analytique de la probabilité de transfert, dont nous mettons en évidence les paramètres pertinents, et dont nous déduisons des transitions de délocalisation des différents moments de position de la particule à temps infini. Nous approfondissons ensuite ces résultats analytiques en simulant la dynamique d'étalement d'un paquet d'onde. Dans une troisième partie, nous étudions l'effet d'un désordre corrélé sur l'étalement du paquet d'onde.

5.1 Probabilité de transfert

Au chapitre 2, nous avons présenté une méthode diagrammatique permettant de calculer la probabilité de transfert d'une particule. Nous complétons les résultats existants par une analyse dimensionnelle qui nous permet de mettre en évidence les paramètres du problème, et

de réécrire les hypothèses effectuées pour calculer la probabilité de transfert en terme de ces paramètres. Nous étudions ensuite les transitions de délocalisation des différents moments de la position de la particule.

5.1.1 Adimensionnement et mise en équation

Adimensionnement

La probabilité de transfert au point x à l'instant t de la particule dépend a priori de sa masse m, de son énergie E, de l'intensité du désordre U_{R} (on considère ici un désordre blanc) et de celle de la force F. Nous choisissons d'adimensionner la longueur par rapport à

$$l_0 = E/F, \tag{5.1}$$

le temps par rapport à

$$t_0 = \sqrt{2mE}/F, \tag{5.2}$$

et l'énergie par rapport à $\hbar/t_0$. Quatre paramètres adimensionnés sont alors nécessaires pour décrire le système. Nous définissons ainsi un ensemble de paramètres $S = \{\alpha, \xi, \tau, \varepsilon\}$, avec

$$\xi = x/l_0 \tag{5.3}$$

la position adimensionnée,

$$\tau = t/t_0 \tag{5.4}$$

le temps adimensionné,

$$\alpha = \hbar^2 F/mU_{\mathrm{R}} \tag{5.5}$$

qui caractérise l'amplitude de la force sur celle du désordre, et

$$\varepsilon = \hbar F/\sqrt{2m}E^{3/2} \tag{5.6}$$

qui est proportionnel au rapport entre le travail de la force sur la longueur d'onde initiale de la particule et l'énergie de la particule. En particulier, la probabilité de transfert de la particule au point x à l'instant t, $p(x,t)$ peut se réécrire sous la forme

$$p(x,t|m,E,U_{\mathrm{R}},F) = \frac{1}{l_0}\tilde{p}(\xi,\tau|\alpha,\varepsilon), \tag{5.7}$$

où $\tilde{p}$ est la probabilité de transfert adimensionnée, normalisée par $\int \mathrm{d}\xi\ \tilde{p}(\xi,\tau|\alpha,\varepsilon) = 1$.
Afin de calculer la probabilité de transfert dans un désordre blanc en présence d'une force, Prigodin effectue plusieurs hypothèses (cf. Chap. 2). Nous revenons ci-dessous sur les hypothèses nécessaires que nous réécrivons à partir des paramètres adimensionnés et que nous interprétons.

Régime d'ondes quasi-planes

Dans l'ensemble du manuscrit, nous nous sommes placés dans l'hypothèse d'ondes quasi-planes, correspondant à un vecteur d'onde local $k(x)$ bien défini sur l'échelle de la longueur d'onde locale de la particule [cf. Éq. (2.30)]. En particulier, cette hypothèse est nécessaire pour exprimer les fonctions de Green dans l'espace réel, voir Éq. (3.64). Elle correspond à $\hbar^2 k^3(x)/Fm \gg 1$. Sachant que le vecteur d'onde local augmente avec la position x, si cette condition est valide en $x' = 0$, elle l'est pour tout $x > 0$. Ce critère se réécrit sous la forme [cf. Éq. (5.6)]

$$\varepsilon \ll 1. \tag{5.8}$$

On remarque cependant que pour $x < 0$, et en particulier quand $x \to x_c$, où x_c désigne le point de rebroussement classique pour lequel $k(x)$ s'annule (voir Fig. 2.1), l'hypothèse d'onde quasi-plane devient fausse. On en déduit que le résultat analytique sur la probabilité de transfert (5.13) n'est a priori pas valide au voisinage du point de rebroussement classique. Cependant, le comportement exact de la probabilité de transfert au voisinage du point de rebroussement classique est sans importance pour la suite de notre étude. En effet, la localisation éventuelle du paquet d'onde est déterminée par la décroissance de la probabilité de transfert dans la direction de la force.

Condition pour négliger ε

Afin d'établir les équations différentielles maîtresses de la probabilité de transfert, Éq. (2.62), (2.63) et (2.64), il est nécessaire d'effectuer l'hypothèse supplémentaire (2.41) d'un temps long devant le temps de Heisenberg associé à l'énergie cinétique locale $E + Fx$ de la particule, que l'on réécrit à l'aide des paramètres adimensionnés sous la forme $\tilde{\omega}\varepsilon \ll 1 + \xi$, où l'on a défini la fréquence adimensionnée $\tilde{\omega} = \omega \times t_0$. En particulier, cette équation est valide pour tout $\xi \geqslant 0$ sous l'hypothèse

$$\tilde{\omega}\varepsilon \ll 1, \tag{5.9}$$

qui correspond à s'intéresser à des temps $\tau \gg \varepsilon$.

Ces équations différentielles maîtresses font intervenir la fonction $\nu(s)$ (2.65). En conservant la forme générale de $\Delta(x)$ donnée par l'équation (2.42) et en utilisant l'Éq. (2.69), on a

$$\nu(s) = \frac{4\alpha}{\varepsilon}(1+\xi)^{3/2}\left[\left(1+\frac{\tilde{\omega}\varepsilon}{1+\xi}\right)^{3/2} - 1 - \frac{\tilde{\omega}\varepsilon}{1+\xi}\left(1+\frac{\tilde{\omega}\varepsilon}{1+\xi}\right)^{1/2}\right]. \tag{5.10}$$

Par conséquent, l'hypothèse (5.9) suffit à obtenir la valeur de $\nu(s)$ donnée par l'équation (2.73), et réécrite ici en terme de variables adimensionnées,

$$\nu(s) = 2\alpha\tilde{\omega}\sqrt{1+\xi}. \tag{5.11}$$

En particulier, toute dépendance en ε a ainsi disparu des équations maîtresses. Par conséquent, sous les hypothèses $\varepsilon \ll 1$ et $\varepsilon \ll \tau$, la probabilité de transfert réduite de la particule $\tilde{p}(\xi, \tau|\alpha)$ ne dépend que du seul paramètre α.

Condition de validité de la solution asymptotique

Comme discuté au paragraphe *Résolution des équations différentielles* de la Sec. 2.1.2, page 58, les équations différentielles maîtresses peuvent être résolues dans la limite $\nu(s) \ll 1$, correspondant à

$$\alpha\tilde{\omega}\sqrt{1+\xi} \ll 1, \tag{5.12}$$

pour $\alpha < 1$. Dans la limite d'un temps infini, correspondant à $\tilde{\omega} \to 0$, cette hypothèse est vérifiée, et on peut obtenir la forme asymptotique $\tilde{p}_\infty(\xi|\alpha)$.

À un temps fini τ, il résulte de (5.12) que la probabilité de transfert $\tilde{p}(\xi, \tau|\alpha)$ pour des points ξ suffisamment proches de l'origine, tels que $\xi \ll \frac{\tau^2}{\alpha^2}$, peut avoir convergé vers la solution asymptotique. Sachant que $\alpha < 1$, la probabilité de transfert converge donc vers sa valeur asymptotique sur les points $\xi \ll \tau^2$. Cette position τ^2 est la position typique atteinte à l'instant τ par une particule accélérée en l'absence de désordre.

5.1.2 Probabilité de transfert à temps infini

Écrivons à présent la solution stationnaire obtenue par Prigodin [cf. Éq. (2.89) et (2.90)] sous forme adimensionnée. Elle est prise nulle à gauche du point de rebroussement classique $\xi_c = -1$. À droite du point de rebroussement classique, elle est donnée pour $\xi < 0$ par

$$\tilde{p}_\infty(\xi|\alpha) = \frac{\pi \sin(\pi\alpha)}{32\alpha^2(1+\xi)^{\eta_-}} \int_0^\infty \mathrm{d}\lambda\, f(\alpha,\lambda)(1+\xi)^{\frac{\lambda^2}{8\alpha}}, \tag{5.13}$$

et pour $\xi \geqslant 0$ par

$$\tilde{p}_\infty(\xi|\alpha) = \frac{\pi \sin(\pi\alpha)}{32\alpha^2(1+\xi)^{\eta_+}} \int_0^\infty \mathrm{d}\lambda\, f(\alpha,\lambda)(1+\xi)^{-\frac{\lambda^2}{8\alpha}}, \tag{5.14}$$

où

$$f(\alpha,\lambda) = \lambda \,\mathrm{sh}(\pi\lambda) \frac{(1+\alpha^2+\lambda^2)^2 - 4\alpha^2}{[\mathrm{ch}(\pi\lambda)+\cos(\pi\alpha)]^2} \tag{5.15}$$

et

$$\eta_+ = 1 + \frac{(1-\alpha)^2}{8\alpha}, \tag{5.16}$$

$$\eta_- = 1 - \frac{(1+\alpha)^2}{8\alpha}. \tag{5.17}$$

Normalisation

On peut vérifier que cette distribution de probabilité est bien normalisée. On trouve

$$\int_{-1}^\infty \mathrm{d}\xi\, \tilde{p}_\infty(\xi|\alpha) = \frac{\sin(\pi\alpha)}{2\alpha} \int_0^\infty \frac{\mathrm{d}\lambda}{\mathrm{ch}(\pi\lambda)+\cos(\pi\alpha)} (3\lambda^2+\alpha^2+1). \tag{5.18}$$

En utilisant les résultats suivants [93]

$$\int_0^\infty \frac{x^2\,\mathrm{d}x}{\mathrm{ch}(x)+\cos(t)} = \frac{t}{3}\frac{\pi^2-t^2}{\sin t} \qquad \text{pour} \qquad 0<t<\pi, \tag{5.19}$$

$$\int_0^\infty \frac{\mathrm{d}x}{a+b\,\mathrm{ch}(x)} = \frac{2}{\sqrt{b^2-a^2}} \arctan\frac{\sqrt{b^2-a^2}}{a+b} \qquad \text{pour} \qquad b^2>a^2, \tag{5.20}$$

on obtient la normalisation

$$\int_{-1}^\infty \mathrm{d}\xi\, \tilde{p}_\infty(\xi|\alpha) = 1. \tag{5.21}$$

Comportement au voisinage du point de rebroussement classique

Nous commençons par discuter le comportement au voisinage du point de rebroussement classique, où des divergences apparaissent. Au voisinage du point de rebroussement classique $\xi_c = -1$, l'intégrale $\int_0^\infty \mathrm{d}\lambda\, f(\alpha,\lambda)(1+\xi)^{\frac{\lambda^2}{8\alpha}}$ qui intervient dans la probabilité de transfert [Éq. (5.13)] est dominée par son comportement en $\lambda \simeq 0$. Par conséquent, la distribution de probabilité se calcule en remplaçant $f(\alpha,\lambda)$ par sa limite quand $\lambda \to 0$, donnée par

$$f(\alpha,\lambda) \simeq \frac{\pi\lambda^2(1-\alpha^2)^2}{[1+\cos(\pi\alpha)]^2}. \tag{5.22}$$

On obtient (voir aussi [2])

$$\tilde{p}_\infty(\xi_c+\xi_0|\alpha) \simeq \frac{\pi^{5/2}\sin(\pi\alpha)(1-\alpha^2)^2}{4\sqrt{2\alpha}[1+\cos(\pi\alpha)]^2}\frac{1}{\xi_0^{\eta_-}|\ln(\xi_0)|^{3/2}} \qquad \text{pour} \qquad \xi_0 \to 0^+. \tag{5.23}$$

Par conséquent, la probabilité de transfert tend vers 0 au point de rebroussement classique si $\eta_- < 0$ et diverge si $\eta_- > 0$. En utilisant l'expression de η_- donnée par l'Éq. (5.17), on en déduit que sur la gamme de valeurs de α qui nous intéresse, $0 \leqslant \alpha < 1$, la probabilité de transfert tend bien vers 0 au point de rebroussement classique pour $\alpha \leqslant 3-2\sqrt{2} \simeq 0.17$, mais diverge pour $\alpha > 3-2\sqrt{2}$. Cette divergence peut s'expliquer par le fait que le calcul de la probabilité de transfert au voisinage du point de rebroussement classique est inexact (l'hypothèse d'onde quasi-plane en particulier n'est pas valide). Néanmoins, cette divergence ne pose pas de problème an pratique car la probabilité de transfert reste intégrable au voisinage du point de rebroussement classique. Le poids associé à la divergence de la probabilité de transfert est donc faible, et cette divergence peut être négligée.

Comportement asymptotique

Nous discutons à présent le comportement de la probabilité de transfert à grande distance dans la direction de la force, qui nous permettra d'étudier la localisation de la particule. À grande distance dans la direction de la force, la probabilité de transfert se calcule en utilisant la même approximation qu'au point de rebroussement classique, et donne [cf. Éq. (2.92)]

$$\tilde{p}_\infty(\xi|\alpha) \simeq \frac{\pi^{5/2}\sin(\pi\alpha)(1-\alpha^2)^2}{4\sqrt{2\alpha}[1+\cos(\pi\alpha)]^2}\frac{1}{\xi^{\eta_+}[\ln(\xi)]^{3/2}} \qquad \text{pour} \qquad \xi \to \infty. \tag{5.24}$$

Le comportement asymptotique de la probabilité de transfert est donc dominé par une décroissance algébrique en $\xi^{-\eta_+}$, qui s'accompagne d'une correction logarithmique $[\ln(\xi)]^{-3/2}$.

5.1.3 Étude des moments à temps infini

Les différents moments de la position de la particule à temps infini, notés $\overline{\langle x^m\rangle}_\infty$, renseignent sur sa localisation. En effet, dans le cas d'une localisation exponentielle (comme c'est le cas en l'absence de force), tous les moments sont finis. En revanche, dans le cas d'une localisation algébrique, les moments de la position de la particule peuvent diverger. On peut alors établir un critère de localisation basé sur le caractère fini d'un moment, $\overline{\langle x^m\rangle}_\infty < \infty$. La localisation dépend ainsi de l'ordre m du moment considéré.

À l'instant t, le moment d'ordre m de la position de la particule est défini par

$$\overline{\langle x^m(t)\rangle} = \int_{x_c}^{\infty} \mathrm{d}x\; p(x,t)x^m. \tag{5.25}$$

Dans notre échelle adimensionnée, cela se réécrit sous la forme

$$\overline{\langle \xi^m(\tau)\rangle} = \int_{-1}^{\infty} \mathrm{d}\xi\; \tilde{p}(\xi,\tau)\xi^m, \tag{5.26}$$

avec $\overline{\langle x^m(\tau\times t_0)\rangle} = (l_0)^m \times \overline{\langle \xi^m(\tau)\rangle}$. On note $\overline{\langle \xi^m\rangle}_\infty$ le moment d'ordre m adimensionné à temps infini.

À temps infini, la décroissance essentiellement algébrique de la probabilité de transfert à grande distance, $\tilde{p}_\infty(\xi|\alpha) \sim \xi^{-\eta_+}$, entraîne une divergence en $+\infty$ de l'intégrale $\overline{\langle \xi^m\rangle}_\infty =$

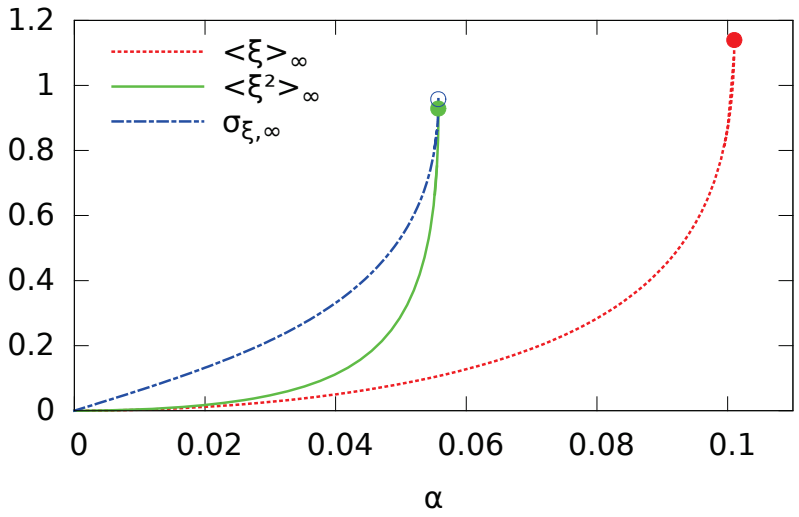


Fig 5.1 – Valeurs analytiques de la position moyenne de la particule, de sa variance et de son écart-type, à temps infini, en fonction de α.

$\int_{-1}^{\infty} \mathrm{d}\xi\ \tilde{p}_\infty(\xi|\alpha)\xi^m$ des moments d'ordre m tels que $\eta_+ - m < 1$. On obtient ainsi pour chaque moment d'ordre m une valeur critique du paramètre α, notée α_m, au-delà de laquelle le moment diverge. Cette valeur critique correspond à $\eta_+(\alpha_m) = m + 1$, i.e. [cf. Éq. (5.16)]

$$\alpha_m = 1 + 4m - 2\sqrt{4m^2 + 2m}. \tag{5.27}$$

En $\alpha = \alpha_m$, la présence du terme correctif logarithmique en $[\ln(\xi)]^{-3/2}$ permet d'assurer la convergence du moment d'ordre m. Les valeurs approchées des α critiques associés aux premiers moments de la position sont données dans le tableau 5.1.

m	0	1	2	3	4	...	∞
α_m	1	0.101	0.0557	0.0385	0.0294		0

TABLE 5.1 – Valeurs critiques du paramètre α correspondant à la délocalisation des premiers moments de la position.

Position moyenne

Pour $\alpha < \alpha_1$, le calcul de la position moyenne de la particule donne

$$\overline{\langle\xi\rangle}_\infty = 24\pi\alpha \sin(\pi\alpha) g(\alpha, 8) \tag{5.28}$$

où l'on a défini

$$g(\alpha, c) \equiv \int_0^\infty \mathrm{d}\lambda \frac{\mathrm{sh}(\pi\lambda)}{[\mathrm{ch}(\pi\lambda) + \cos(\pi\alpha)]^2} \left[\frac{\lambda}{\lambda^2 + (1-\alpha)^2 - c\alpha} + \frac{\lambda}{\lambda^2 + (1+\alpha)^2 + c\alpha} \right]. \tag{5.29}$$

Cette position moyenne est tracée sur la figure 5.1 (tirets rouges). On observe qu'elle augmente avec la valeur du paramètre α (donc avec la valeur de la force à désordre fixé), et atteint une valeur maximale finie en $\alpha = \alpha_1$, $\overline{\langle\xi\rangle}_\infty^{max} \simeq 1.140$. Le comportement de la position moyenne change ensuite brutalement, passant d'une valeur finie en $\alpha = \alpha_1$ à une valeur infinie pour $\alpha > \alpha_1$.

Dans la limite $\alpha \to 0$, la position moyenne adimensionnée $\overline{\langle\xi\rangle}_\infty$ tend vers 0. Cette limite est atteinte pour une particule de masse infinie, un désordre d'amplitude infini, ou une force nulle. Dans les deux premiers cas on déduit directement que la position moyenne $\overline{\langle x\rangle}_\infty = E/F \times \overline{\langle\xi\rangle}_\infty$ est nulle. Le cas d'une force nulle nécessite de considérer la limite pour $\alpha \to 0$ de $\overline{\langle\xi\rangle}_\infty$. Elle est proportionnelle à $\alpha^2 \sim F^2$, et on a donc bien une position moyenne nulle comme attendu en l'absence de force.

Variance de la position de la particule

Pour $\alpha < \alpha_2$, le calcul du second moment de position de la particule donne

$$\overline{\langle\xi^2\rangle}_\infty = 16\pi\alpha \sin(\pi\alpha)\big[5g(\alpha,16) - 3g(\alpha,8)\big]. \tag{5.30}$$

Le moment d'ordre deux et l'écart-type $\sigma_{\xi,\infty} = \sqrt{\overline{\langle\xi^2\rangle}_\infty - \overline{\langle\xi\rangle}_\infty^2}$ sont tracés sur la figure 5.1 (respectivement en trait plein vert et en tirets-pointillés bleus). On observe que ces deux quantités augmentent avec la valeur du paramètre α, le second moment atteignant une valeur maximale finie en $\alpha = \alpha_2$, $\overline{\langle\xi^2\rangle}_\infty^{max} \simeq 0.929$, tandis que l'écart-type atteint une valeur maximale finie $\sigma_{\xi,\infty}^{\max} \simeq 0.958$.

Dans la limite $\alpha \to 0$, le second moment de la position adimensionnée s'annule. La variance de la position est ainsi nulle pour une particule de masse infinie ou un désordre d'amplitude infini. En revanche, dans le cas d'une force nulle, on a $\overline{\langle x^2\rangle}_\infty = E^2/F^2 \times \overline{\langle\xi^2\rangle}_\infty$ qui tend vers une limite finie égale à $8\pi^2 g_0 \ell_-^2(0)$, où $g_0 = g(0,c) \simeq 0.122$. On remarque que cette expression, $8\pi^2 g_0 \ell_-^2(0) \simeq 9.63\ell_-^2$, diffère de celle attendue pour un profil strictement exponentiel, $p_{\exp}(x) = \frac{1}{8\ell_-} \mathrm{e}^{-|x|/4\ell_-}$, pour lequel on obtient $\overline{\langle x^2\rangle} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\, p_{\exp}(x)x^2 = 32\ell_-^2$. Cela illustre le fait que le profil localisé n'est pas strictement exponentiel [cf. Éq. (1.37)].

5.2 Étalement d'un paquet d'onde

5.2.1 Du paquet d'onde à la particule idéale

La particule idéale, initialement localisée en $x' = 0$ et d'énergie E, est plus précisément décrite par un paquet d'onde centré autour du vecteur d'onde $k_0 = \pm\sqrt{2mE}/\hbar$, de largeur en vecteur d'onde κ, et centré autour de $x' = 0$ dans l'espace réel, de largeur $1/\kappa$.

La densité du paquet d'onde au point x à l'instant t, moyennée sur l'ensemble des réalisations du désordre, est alors donnée par

$$n(x,t) \simeq \int \mathrm{d}x'\, \mathrm{d}E'\, \mathcal{P}(E',x') p(x,t|x',E'), \tag{5.31}$$

où $\mathcal{P}(E',x')$ est la distribution conjointe en énergie et position initiales de la particule, et $p(x,t|x',E')$ la probabilité de transfert au point x à l'instant t d'une particule idéale initialement localisée en x' d'énergie E'. L'expression (5.31), qui néglige les termes d'interférences entre états d'énergies différentes, est valable à temps suffisamment grand. Afin de pouvoir assimiler le paquet d'onde à une particule idéale, on souhaite se placer dans le régime $\mathcal{P}(E',x') \simeq \delta(E'-E)\delta(x')$.

En l'absence de force, dans une approche semi-classique, la distribution de probabilité initiale peut être approximée par

$$\mathcal{P}(E',x') \simeq \int \frac{\mathrm{d}k'}{2\pi} W_0(x',k') A(k',E'). \tag{5.32}$$

La fonction

$$W_0(x',k') = 2\int_{-\infty}^{\infty} \psi^*(x'+u)\,\mathrm{e}^{2ik'u}\,\psi(x'-u)\,\mathrm{d}u \tag{5.33}$$

est la distribution de Wigner initiale du paquet d'onde, qui peut être interprétée comme la distribution de probabilité conjointe position-impulsion initiale du paquet d'onde. Pour un paquet d'onde gaussien centré autour de k_0 et d'écart-type κ par exemple, on a $W_0(x',k') = 2\,\mathrm{e}^{-(k'-k_0)^2/2\kappa^2}\,\mathrm{e}^{-2\kappa^2 x'^2}$.
La fonction spectrale $A(k',E')$, donnée pour un désordre faible par (cf. Chap. 1)

$$A(k',E') = \frac{\hbar}{2\pi\tau_e(E')}\frac{1}{(E'-\hbar^2k'^2/2m)^2+\hbar^2/4\tau_e^2(E')} \qquad \text{avec} \qquad \tau_e(E') = \frac{\hbar^2\sqrt{E'}}{\sqrt{2m}U_\mathrm{R}}, \tag{5.34}$$

correspond à la distribution de probabilité en énergie E' pour un vecteur d'onde k' fixé due au potentiel désordonné.

En présence d'une force, le système n'est plus invariant par translation et la fonction spectrale $A(k,E)$ ne peut pas être définie. En utilisant la formule semi-classique développée en l'absence de force, nous déterminons sous quelles conditions le paquet d'onde peut être assimilé à une particule idéale, i.e. sa largeur en énergie et sa largeur en position initiales peuvent être négligées.
Afin de pouvoir négliger la largeur en énergie du paquet d'onde initial, il est nécessaire que la largeur dans l'espace réciproque du paquet d'onde soit faible devant sa valeur moyenne,

$$\kappa \ll k_0, \tag{5.35}$$

et que l'élargissement en énergie dû au désordre soit également faible devant l'énergie moyenne, $\hbar/2\tau_e(E) \ll E$, équivalent à [cf. Éq. (5.5) et (5.6)]

$$\varepsilon \ll \alpha. \tag{5.36}$$

La largeur en position du paquet d'onde initial devient négligeable à suffisamment grande distance, grâce à l'accélération de la particule. Elle est typiquement négligeable si $\xi \gg \Delta\xi$, où $\Delta\xi = 1/\kappa l_0$, que l'on peut réécrire sous la forme

$$\xi \gg \alpha \times \frac{\varepsilon}{\alpha} \times \frac{k_0}{\kappa}. \tag{5.37}$$

Par la suite, on se placera dans les conditions (5.35) et (5.36). De plus, nous étudierons le profil du paquet d'onde sur des distances suffisamment grandes pour que la condition (5.37) soit vérifiée sur une grande part de la fenêtre spatiale d'étude.

5.2.2 Méthode de résolution numérique

Nous étudions l'étalement d'un paquet d'onde en temps réel en résolvant l'équation de Schrödinger. Nous présentons ici la méthode de résolution numérique utilisée et nous discutons les valeurs des paramètres d'étude choisies.

Conditions initiales

Le paquet d'onde utilisé dans nos simulations numériques est un paquet d'onde gaussien de vecteur d'onde moyen k_0 tel que l'énergie moyenne vaut $E = \hbar^2k_0^2/2m$, et d'écart-type κ. Deux possibilités s'offrent alors pour la direction du vecteur d'onde initial du paquet d'onde.

Sauf mention explicite, k_0 est choisi positif, c'est-à-dire que le paquet d'onde a une impulsion moyenne initiale dirigée dans le sens de la force, de la gauche vers la droite. L'influence d'un vecteur d'onde moyen initial négatif sera présentée sur quelques exemples.

Afin de satisfaire aux conditions (5.35) et (5.36) permettant de négliger la largeur initiale en énergie du paquet d'onde, on choisit de fixer $\frac{\kappa}{k_0} = 0.1$ et $\frac{\varepsilon}{\alpha} = 0.1$ en l'absence de notification contraire. On testera également parfois le cas $\frac{\varepsilon}{\alpha} = 0.01$. Enfin, une étude menée pour des grandes valeurs de α ($\alpha \geqslant 100$) sera effectuée en fixant $\varepsilon = 1$ ou $\varepsilon = 0.05$, de sorte qu'on aura $\frac{\varepsilon}{\alpha} \leqslant 0.01$.

La largeur initiale en position du paquet d'onde est alors négligeable à distance $\xi \gg \alpha$ pour $\varepsilon/\alpha = 0.1$, $\xi \gg 0.1\alpha$ pour $\varepsilon/\alpha = 0.01$, $\xi \gg 10$ pour $\varepsilon = 1$ ou $\xi \gg 0.5$ pour $\varepsilon = 0.05$.

Méthode numérique

Pour calculer la fonction d'onde $\psi(x,t)$, solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar\partial_t\psi(x,t) = \frac{-\hbar^2}{2m}\partial_x^2\psi(x,t) + V(x)\psi(x,t) - Fx\psi(x,t), \tag{5.38}$$

nous avons décomposé l'état initial $\psi_0(x)$ sur la base des états propres du hamiltonien, $\{\phi_j(x)\}$, obtenus par diagonalisation exacte. Afin de conserver un coût numérique raisonnable, le calcul des états propres et la décomposition sur ces états sont effectués uniquement pour la fraction des états propres d'énergie $E_j \in [E_{\min}, E_{\max}]$. La valeur de l'énergie minimale $E_{\min}$ est choisie en déterminant numériquement en dessous de quelle énergie le recouvrement d'un état propre avec l'état initial est négligeable. Elle est de l'ordre de $E_{\min} \sim -E$. La valeur de l'énergie maximale est fixée arbitrairement à $E_{max} = 5E$ (ou parfois $E_{max} = 2E$ ou $E_{max} = 20E$) après avoir vérifié que le recouvrement de l'état initial d'énergie moyenne E avec les états d'énergie supérieure à $E_{\max}$ était bien négligeable.

On peut alors connaître l'état du système à tout instant t, en sommant

$$\psi(x,t) \simeq \sum_{\substack{j \\ E_j\in[E_{\min},E_{\max}]}} \phi_j(x)\,\langle\phi_j|\psi_0\rangle\,\mathrm{e}^{-iE_jt/\hbar}\,. \tag{5.39}$$

L'espace est tronqué entre $x_{\min}$ inférieur à quelques x_c, et $x_{\max}$. La longueur d'onde locale minimale est ainsi donnée par $\lambda_{\min} = 2\pi/k(x_{\max})$. L'espace est discrétisé avec un pas $\delta x \sim 0.1\lambda_{\min}$. Ce pas de discrétisation a été choisi en vérifiant qu'un pas plus petit conduit bien au même profil.

Classiquement, pour $k_0 > 0$, les particules qui se sont le plus propagées à l'instant t atteignent la position $x_{cl}(t) = Ft^2/2m + \hbar k_0 t/m$. En présence de désordre, cette abscisse $x_{cl}(t)$ correspond à la position maximale explorée par la particule à l'instant t, atteinte si elle n'a pas interagi avec le désordre pour $k_0 > 0$, ou bien si elle s'est immédiatement réfléchie sur le désordre puis n'a plus interagi avec lui pour $k_0 < 0$. On peut donc avec ce système de longueur finie étudier l'étalement du paquet d'onde jusqu'à un instant maximal $t_{\max}$ telle que $x_{cl}(t_{\max}) \simeq x_{\max}$.

Le nombre de points de l'espace requis évolue ainsi comme

$$N \sim \frac{x_{\max}}{\delta x} \sim x_{\max}k(x_{\max}) \sim \frac{\xi_{\max}^{3/2}}{\varepsilon}. \tag{5.40}$$

Sachant que toutes les hypothèses de validité de l'approximation particule idéale et de validité du calcul de la probabilité de transfert supposent ε petit, nous nous sommes placés dans des

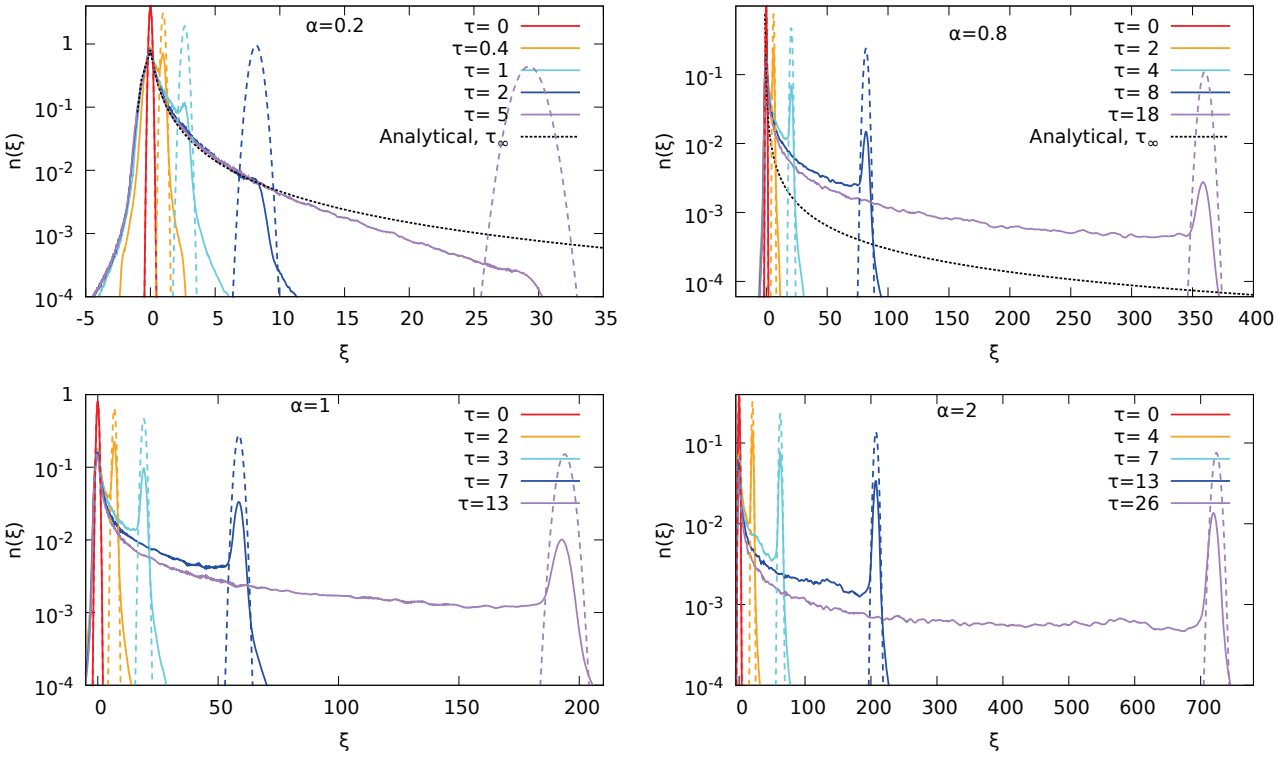


Fig 5.2 – Étalement d'un paquet d'onde initialement centré sur $\xi = 0$ en présence d'un désordre blanc et d'une force constante dirigée vers la droite. Trait plein : densité $\tilde{n}$ en fonction de la position ξ à différents instants τ, pour différentes valeurs de α ($\alpha = 0.2$, $\alpha = 0.8$, $\alpha = 1$, $\alpha = 2$). Traits pointillés : densité analytique aux mêmes temps τ en l'absence de désordre. Tirets noirs ($\alpha < 1$) : probabilité de transfert analytique à temps infini $\tilde{p}_\infty(\xi|\alpha)$.

conditions où ε est le plus grand possible pour diminuer le coût numérique (à longueur adimensionnée ξ_{max} fixée) tout en le maintenant assez faible pour satisfaire les différentes hypothèses.

Pour chaque étude, la même simulation d'étalement est reproduite de l'ordre de 10 à 1000 fois avec une nouvelle réalisation du désordre à chaque fois, de manière à obtenir une densité moyenne $n(x,t)$. De plus, lors des tracés de la densité celle-ci est lissée spatialement sur un nombre N' de points de l'ordre de quelques unités à quelques centaines, c'est-à-dire que l'on trace $n(x_j = j \times N' \times \delta x, t) = \frac{1}{N'} \sum_{i=-N'/2+1}^{N'/2} |\psi(x_j + i\delta x, t)|^2$.

5.2.3 Évolution temporelle du profil de densité du paquet d'onde

Influence de la force

La densité moyenne adimensionnée $\tilde{n}(\xi,\tau)$ en fonction de la position ξ à différents instants τ est tracée sur la figure 5.2, pour différentes valeurs du rapport force sur désordre α. À chaque instant présenté, une courbe en pointillés donne le profil (analytique) du paquet d'onde en l'absence de désordre. Pour $\alpha < 1$, la prédiction théorique à temps infini $p_\infty(\xi|\alpha)$ est également tracée.

On observe qu'à l'instant τ, le paquet d'onde s'est étendu dans la direction de la force jusqu'à environ la position

$$\xi_{cl}(\tau) = \tau^2 + 2\tau, \tag{5.41}$$

qui est la position moyenne atteinte par la particule en l'absence de désordre. En particulier, un pic reproduisant le paquet d'onde au même instant en l'absence de désordre apparaît autour de

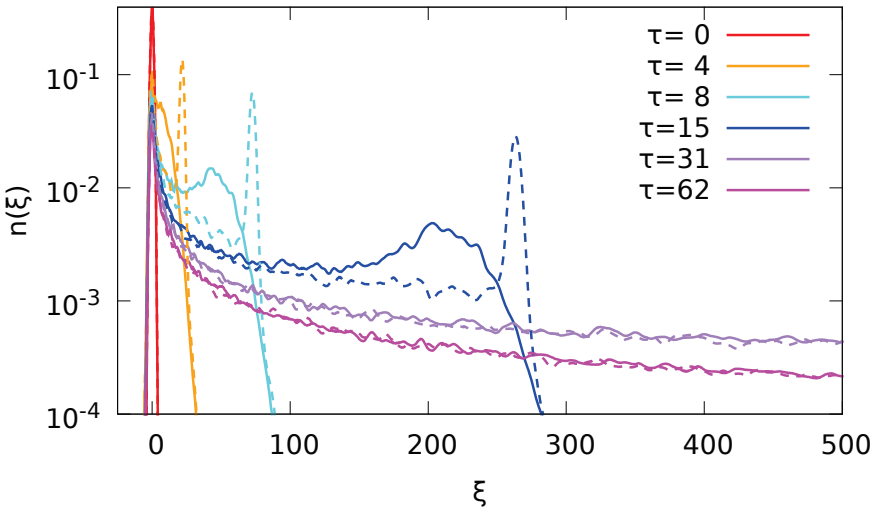


Fig 5.3 – Densité $\tilde{n}$ en fonction de la position ξ à différents temps τ, pour $\alpha = 2$. Les courbes en trait plein correspondent à $k_0 < 0$, et celles en tirets à $k_0 > 0$.

ξ_{cl}, avec une largeur identique mais une amplitude plus faible. L'amplitude du pic est d'autant plus importante que le rapport force sur désordre, α, est grand.

Pour α faible, par exemple $\alpha = 0.2$, on observe qu'à l'exception d'un voisinage immédiat du point initial, la densité est inférieure à sa valeur asymptotique à temps infini. Elle augmente alors progressivement vers celle-ci, à partir du point initial. Ainsi, à un instant τ fixé, la densité a saturé à sa valeur asymptotique pour ξ suffisamment faible, et est inférieure à sa valeur asymptotique au-delà. Dans ce régime de désordre assez fort comparé à la force, les particules sont donc essentiellement piégées autour du point initial et s'en éloignent progressivement.

Lorsque α augmente, par exemple pour $\alpha = 0.8$, la densité au point maximal ξ_{cl} est supérieure à sa valeur asymptotique, et elle diminue progressivement vers celle-ci avec le temps en un point donné. Les particules sont ainsi beaucoup plus mobiles à grande force.

Lorsque α est supérieur ou égal à 1, le même comportement de diminution de la densité en un point inférieur à ξ_{cl} est observé. Dans ce régime, on s'attend à temps infini à ce que la densité tende vers 0 en tout point. En accord avec cette prédiction, on observe que la densité tend vers une sorte de plateau entre le point initial et le pic autour du point maximal ξ_{cl}, dont la hauteur diminue lorsque τ augmente.

Cas d'une vitesse initiale opposée à la force

Dans le cas où l'impulsion initiale de la particule est dirigée vers la gauche, celle-ci doit être réfléchie par la barrière de potentiel due à la force au point de rebroussement classique ou bien par le potentiel désordonné au minimum une fois avant de pouvoir se propager vers la droite. En l'absence de désordre, on obtient ainsi un paquet d'onde se dirigeant vers la droite après sa réflexion à l'instant $t \simeq \hbar|k_0|/F$ sur le point de rebroussement classique. Ce paquet d'onde est centré sur la position classique $x_{cl,neg}(t)$ d'une particule de vitesse initiale $-\hbar|k_0|/m$, en retard par rapport à la position classique $x_{cl}(t)$ d'une particule de vitesse initiale $\hbar|k_0|/m$, suivant la relation $x_{cl,neg}(t) = x_{cl}(t) - 2\hbar|k_0|t/m$. En présence de désordre, on observe sur la Fig. 5.3 pour le paquet d'onde tel que $k_0 < 0$ (tracé en trait plein) un pic qui est effectivement en retard par rapport au cas $k_0 > 0$ (tracé en tirets). De plus, le pic correspondant à $k_0 < 0$ est élargi par la contribution des particules qui ont interagi avec le désordre. En effet, alors que dans le cas $k_0 > 0$ seules les particules n'ayant pas interagi avec le désordre atteignent la position du

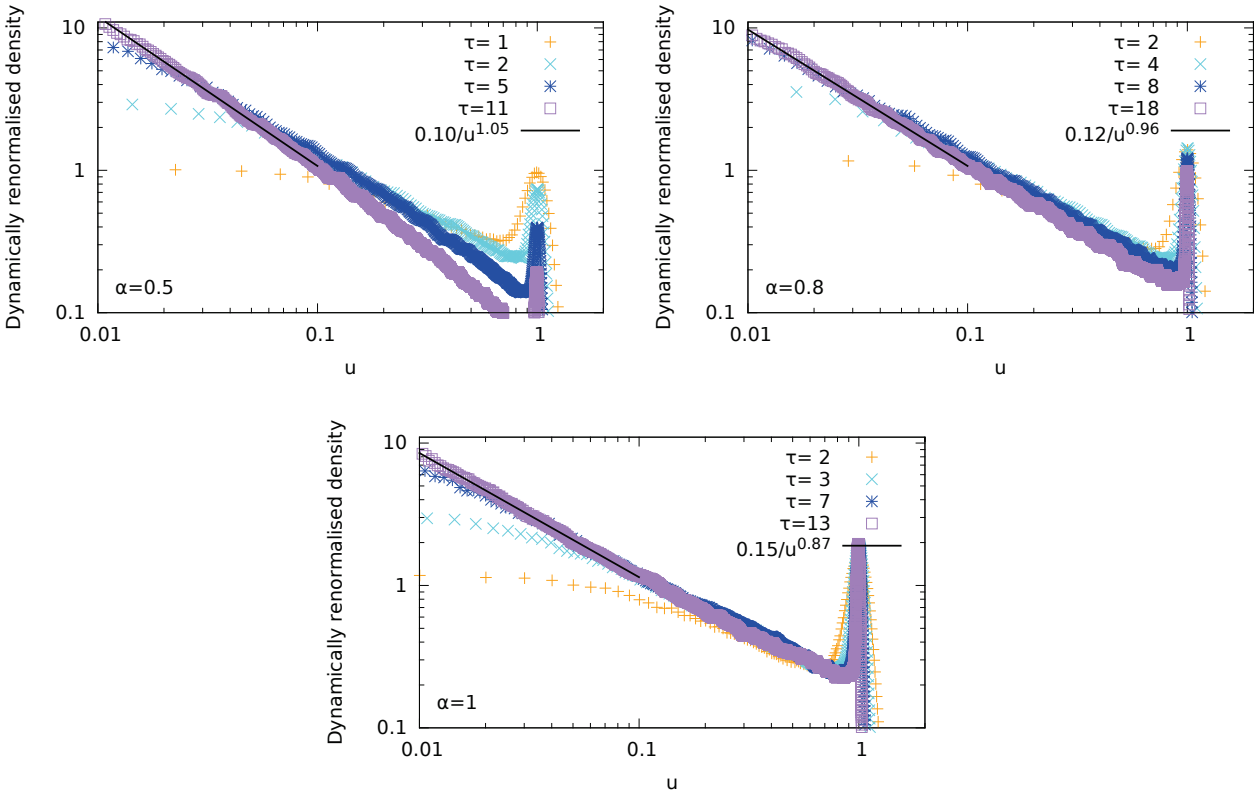


Fig 5.4 – Densité renormalisée dynamiquement $\hat{n}(u,\tau)$ en fonction de la position renormalisée dynamiquement u, à différents temps τ correspondant à différentes couleurs, en échelle log-log. La droite noire est obtenue par un ajustement linéaire de la courbe représentant la densité renormalisée en fonction de la position renormalisée en échelle log-log sur l'intervalle $u \in [0.01, 0.1]$. Les trois graphes sont obtenus pour $\alpha = 0.5$, 0.8 et 1.

pic $x_{cl}(t)$, dans le cas $k_0 < 0$ les particules peuvent en se réfléchissant sur le désordre atteindre une position maximale $x_{cl}(t)$ supérieure à $x_{cl,neg}(t)$. Cette position maximale est atteinte par les particules qui se sont réfléchies sur le désordre à $t = 0$ puis se sont propagées sans interaction avec le désordre.

Étude du comportement asymptotique du profil

À temps infini, d'après le résultat analytique de Prigodin, la densité décroît essentiellement algébriquement à grande distance pour $\alpha < 1$, en $\xi^{-\eta_+}$. L'exposant de la décroissance algébrique vaut (5.16) $\eta_+ = 1 + (1-\alpha)^2/8\alpha$. Il décroit de $+\infty$ en $\alpha = 0$ (cela provient de la décroissance exponentielle de la densité en l'absence de force) à 1 lorsque α tend vers 1. Cette limite $\eta_+ = 1$ correspond à la valeur maximale de l'exposant d'une décroissance algébrique permettant une normalisation de la densité. Afin de comparer le comportement asymptotique analytique aux résultats numériques à temps fini, on définit une densité renormalisée dynamiquement

$$\hat{n}(u,\tau) = \xi_{cl}(\tau)\tilde{n}(u\xi_{cl}(\tau),\tau), \tag{5.42}$$

où $\xi_{cl}(\tau)$ est la position atteinte par la particule classique à l'instant τ en l'absence de désordre [cf. Éq. (5.41)]. Cette position correspondant environ à la position maximale atteinte par le paquet d'onde à l'instant τ, la densité renormalisée s'étend jusqu'à $u \simeq 1$. Plus le temps τ augmente et plus le point maximal classique $\xi_{cl}(\tau)$ est élevé, et donc plus la position ξ correspondant à une valeur de u fixée est grande. On s'attend ainsi à observer de mieux en

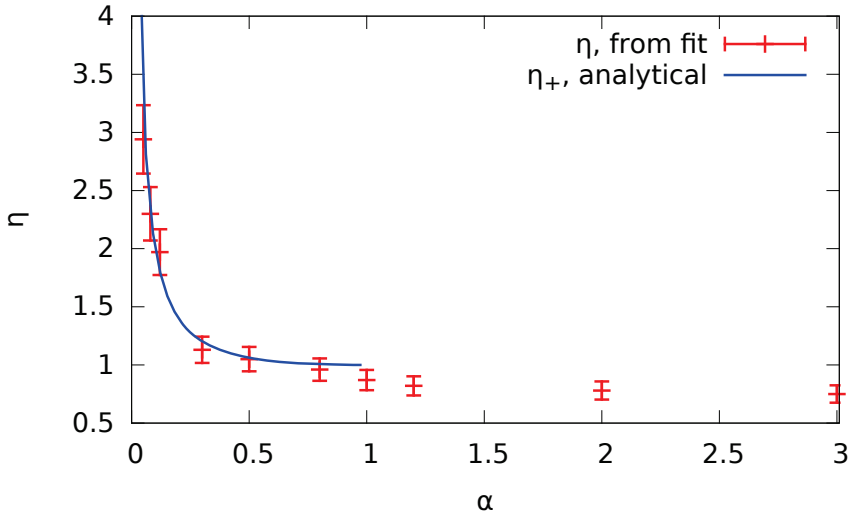


Fig 5.5 – Exposant η_+ de la décroissance algébrique asymptotique en fonction de α. Les valeurs numériques sont obtenues à partir d'un ajustement linéaire de la densité renormalisée en fonction de la position renormalisée u en échelle log-log, sur l'intervalle $u \in [0.01, 0.1]$. Des barres d'incertitude de 10% sont ajoutées aux points. La valeur analytique de l'exposant, donnée par l'équation (5.16), est représentée par une courbe bleue.

mieux la décroissance algébrique de la densité $\hat{n}$ en fonction de u pour des valeurs croissantes du temps τ.

La densité renormalisée dynamiquement est tracée sur la figure 5.4, en échelle log-log, à différents temps correspondant à différentes couleurs. On observe que les profils renormalisés semblent converger vers un même profil lorsque τ augmente. Pour la valeur maximale de τ représentée (carrés violets), on effectue un ajustement linéaire de la courbe en échelle log-log sur l'intervalle $u \in [0.01, 0.1]$. Cette ajustement correspond en échelle linéaire à une décroissance algébrique $\sim u^{-\eta}$, et permet notamment d'extraire une valeur numérique de l'exposant η. Sur la figure 5.5, on compare les valeurs de l'exposant η ainsi obtenues à la prédiction analytique η_+ pour $\alpha < 1$ [cf. Éq. (5.16)]. On observe un très bon accord entre les deux résultats, à 10% près (barres d'erreur). Cet écart est raisonnable et provient notamment du fait que les valeurs numériques de l'exposant sont extraites à temps fini. En outre, on observe que l'exposant numérique η est inférieur à 1 pour $\alpha \geqslant 1$. Une telle décroissance algébrique est incompatible avec l'existence d'un profil stationnaire à temps infini, car celui-ci ne serait alors pas normalisé. Cela signale donc l'existence d'une transition de délocalisation complète à $\alpha > 1$, qui se manifeste par la disparition du profil stationnaire à temps infini.

5.3 Évolution temporelle de la position moyenne et de sa variance

La décroissance algébrique de la densité du paquet d'onde entraîne la divergence successive de ses différents moments lorsque α augmente (voit tableau 5.1). Ainsi, à $\alpha = 1$, tous les moments divergent. La divergence d'un moment traduit une délocalisation de la quantité considérée à temps infini. La position moyenne subit ainsi une transition de délocalisation à $\alpha = \alpha_1 \simeq 0.101$, l'écart-type à $\alpha = \alpha_2 \simeq 0.056$, etc. Dans cette partie, nous étudions l'évolution temporelle des premiers moments de la position de la particule, et nous cherchons à mettre notamment en évidence une transition entre un régime localisé où le moment sature à grand

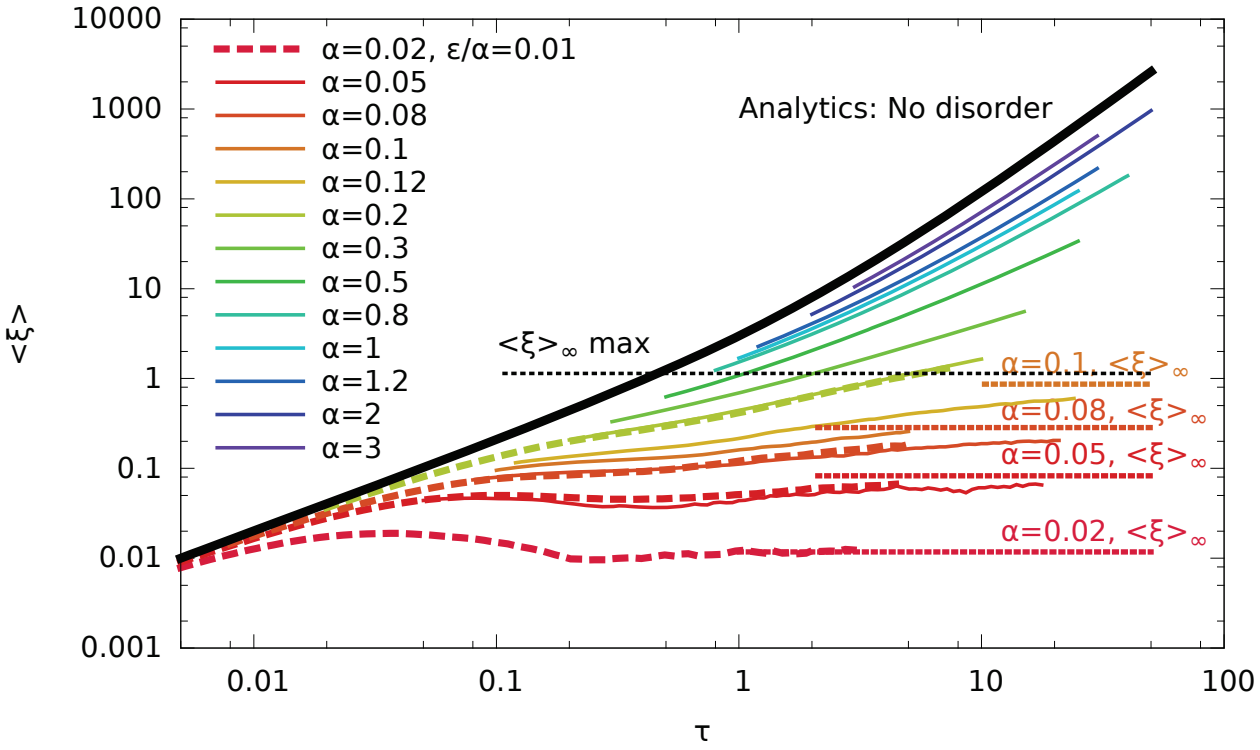


Fig 5.6 – Évolution temporelle de la position moyenne pour différentes valeurs du rapport force sur désordre α. Le paramètre ε/α est pris égal à 0.1 pour les courbes en traits pleins, et 0.01 pour les courbes en tirets. Les valeurs asymptotiques analytiques $\overline{\langle\xi\rangle}_\infty$ sont tracées en pointillés.

temps, et un régime délocalisé où il augmente avec une loi à déterminer, qui n'est pas prédite par la solution statique de Prigodin.

5.3.1 Position moyenne

L'évolution de la position moyenne $\overline{\langle\xi(\tau)\rangle}$ en fonction du temps τ en échelle log-log, pour différentes valeurs de α (représentées par des couleurs différentes), est tracée sur la figure 5.6. La valeur du rapport ε/α est prise égale à 0.1 pour toutes les courbes en trait plein. Ce rapport doit être petit devant 1 pour que l'élargissement spectral dû au désordre soit négligeable. Afin de s'assurer que la valeur 0.1 choisie pour le rapport ε/α est assez faible pour que son incidence sur le comportement de la valeur moyenne soit négligeable, elle est prise égale à 0.01 sur les courbes en tirets. On remarque que la valeur moyenne de la position à un temps donné augmente avec α, ce qui est naturel puisque pour une intensité de désordre fixée, la force qui entraîne la particule vers la droite augmente avec α.

Pour les valeurs de α inférieures ou égales à 0.08 testées, le comportement de la valeur moyenne de la position que l'on observe est compatible avec une convergence vers la valeur asymptotique prédite par la théorie à temps infini $\overline{\langle\xi\rangle}_\infty$. En particulier, la position moyenne est toujours inférieure à la position asymptotique finie maximale prédite pour $\alpha = \alpha_1$, représentée par la ligne en pointillés noirs « $\langle\xi\rangle_\infty$ max ». Par ailleurs, on note la présence d'oscillations des courbes représentant la valeur moyenne de la position à grand temps. Ces oscillations proviennent du nombre fini (de l'ordre de la centaine) de réalisations numériques du potentiel désordonné. Elles apparaissent ainsi pour des valeurs faibles de α, correspondant à un désordre fort comparé à la force. À α fixé, elles sont de même plus marquées pour $\varepsilon/\alpha = 0.1$ que pour $\varepsilon/\alpha = 0.01$, donc pour un désordre fort comparé à l'énergie de la particule.

Pour les valeurs de α supérieures ou égales à 0.2 testées, on observe une augmentation de la position moyenne avec le temps plus rapide qu'une loi de puissance dans l'intervalle de temps considéré. La position moyenne dépasse notamment la valeur maximale prédite dans un régime localisé, $\overline{\langle\xi\rangle}_\infty^{\max}$, qui s'obtient pour $\alpha = \alpha_1$. On remarque de plus que toutes les courbes sont situées en-dessous de la prédiction analytique en l'absence de désordre (correspondant à $\langle\xi\rangle = \tau^2 + 2\tau$) tracée en trait épais noir. En outre, plus α est grand et plus on se rapproche de ce comportement sans désordre, comme on peut s'y attendre.

Au voisinage de la transition $\alpha = \alpha_1 \simeq 0.101$, pour $\alpha = 0.1$ ou $\alpha = 0.12$, les données numériques ne permettent pas de mettre en évidence sur la figure 5.6 la convergence vers une valeur maximale pour $\alpha = 0.1$ et le dépassement de la valeur $\overline{\langle\xi\rangle}_\infty^{\max}$ pour $\alpha = 0.12$, du fait de la valeur finie du temps maximal d'étude. On observe que la transition entre les deux régimes n'est pas visible à temps court et est donc probablement très lente à apparaître.

Loi de puissance locale en fonction du temps

Afin de caractériser l'évolution de la position moyenne du paquet d'onde, nous recherchons si elle prend la forme d'une loi de puissance $\overline{\langle\xi(\tau)\rangle} \sim \tau^{\beta_1}$ à grand temps. Pour cela, nous définissons à tout instant un exposant $\beta_1(\tau)$ associé à une loi de puissance locale. Numériquement, l'exposant $\beta_1(\tau)$ est obtenu par la pente d'un ajustement linéaire local autour de l'instant τ des courbes de la figure 5.6 qui représentent la position moyenne en fonction du temps en échelle log-log. Mathématiquement, on définit cet exposant par

$$\beta_1(\tau) = \frac{\mathrm{d}\ln\overline{\langle\xi(\tau)\rangle}}{\mathrm{d}\ln\tau}. \tag{5.43}$$

En l'absence de désordre, ce qui correspond à $\alpha \to \infty$, on a $\langle\xi(\tau)\rangle = \tau^2 + 2\tau$, d'où $\beta_1(\tau) = g(\tau)$ avec

$$g(\tau) = 2\frac{\tau+1}{\tau+2}. \tag{5.44}$$

La fonction $g(\tau)$ est croissante, bijective de $[0,\infty[$ vers $[1,2[$. On peut donc l'utiliser comme mesure du temps. Cette représentation a l'avantage de ramener la limite de temps infini, $\tau = \infty$, à une valeur finie $g(\infty) = 2$, ce qui est utile pour extrapoler la limite de β_1 à temps infini, comme nous allons le voir.

On trace alors sur la figure 5.7 l'évolution de β_1 en fonction de $g(\tau)$ pour différentes valeurs de α. En l'absence de désordre, l'évolution est linéaire de pente 1. En présence de désordre, ces courbes nous permettent d'estimer une valeur locale de β_1 à τ fixé. On observe que β_1 évolue lentement avec $g(\tau)$. En particulier, les courbes $\beta_1(\tau)$ ne montrent aucun changement de pente brusque en approchant $g(\tau) = 2$, et semblent converger vers une valeur finie à $g(\tau) = 2$. Ceci suggère qu'à temps infini, la position moyenne de la particule augmente suivant une loi de puissance $\overline{\langle\xi(\tau)\rangle} \sim \tau^{\beta_1(\infty)}$. Afin de déterminer la valeur de l'exposant asymptotique $\beta_1(\infty)$, nous extrapolons les courbes de la figure 5.7 par un ajustement linéaire sur les points numériques correspondant à $g(\tau) > 1.75$. Cette extrapolation est tracée en tirets. La valeur des droites d'ajustement linéaire en $g(\tau) = 2$ nous donne alors une estimation de la valeur de $\beta_1(\infty)$. Pour $\alpha < \alpha_1$, la position moyenne asymptotique étant finie d'après les prédictions théoriques, on s'attend à avoir $\beta_1(\infty) = 0$. Ce résultat est en accord avec l'extrapolation obtenue pour $\alpha = 0.08$. Pour les valeurs plus faibles de α testées numériquement, les oscillations de la valeur moyenne de la position en fonction du temps, visibles sur la figure 5.6, conduisent à des oscillations de β_1 qui rendent l'extrapolation à temps infini très peu précise. Ces oscillations étant des artefacts numériques provenant du nombre fini de réalisations du potentiel désordonné, nous ne traçons pas les courbes obtenues pour $\alpha = 0.05$ et 0.02.

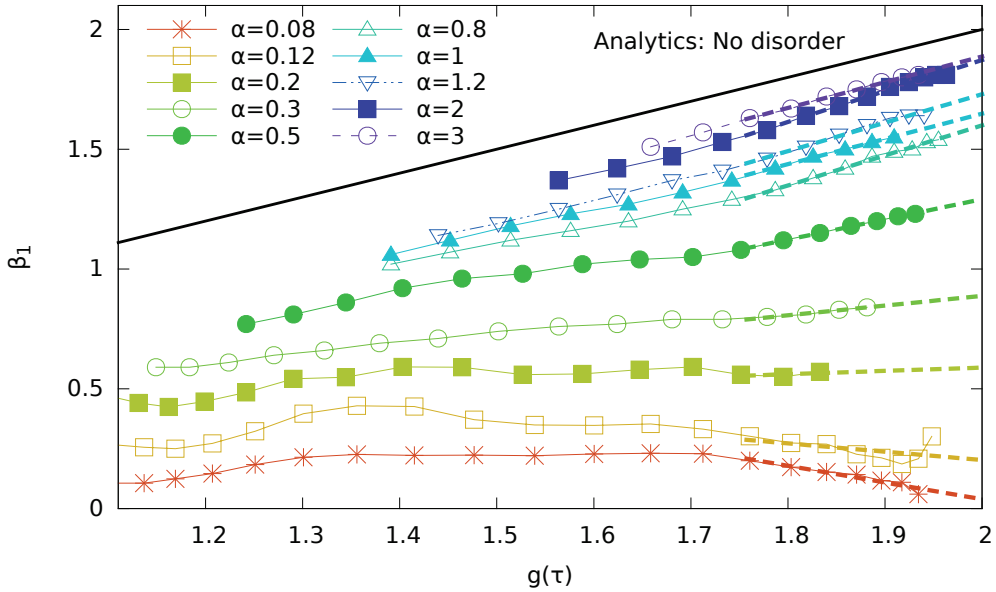


Fig 5.7 – Tracé de β_1 en fonction de $g(\tau) = 2\frac{\tau+1}{\tau+2} \in [1,2]$. Les droites en tirets correspondent à un ajustement linéaire obtenu à partir des points des courbes correspondant à $g(\tau) > 1.75$. La courbe noire en trait plein indique la valeur de β_1 en l'absence de désordre.

Loi de puissance locale en fonction de α

Sur la figure 5.8, on représente l'évolution de l'exposant de la loi de puissance locale $\beta_1(\tau)$ en fonction de α, à différents temps, ainsi que le résultat extrapolé à temps infini.

À temps fixé, on observe ainsi une augmentation de β_1 avec α. Proche de 0 pour $\alpha \lesssim 0.1$, la valeur de $\beta_1(\tau)$ se rapproche de $g(\tau)$, représenté par des flèches pointant vers $\alpha \to \infty$ sur le graphe, lorsque α augmente.

Lorsqu'on augmente le temps τ, pour des valeurs de α faibles ($\alpha \lesssim 0.1$) l'exposant de la loi de puissance diminue faiblement, tandis qu'elle augmente clairement pour des valeurs de α plus élevées.

À temps infini, les résultats obtenus par extrapolation sont en accord avec une valeur nulle de $\beta(\infty)$ pour $\alpha < \alpha_1$. Ensuite, une augmentation de $\beta_1(\infty)$ avec α est observée. Elle est compatible avec une valeur maximale $\beta_1(\infty) = 2$ pour $\alpha \to \infty$, correspondant à l'accélération de la particule sous l'effet d'une force en l'absence de désordre.

Ces résultats numériques confirment donc la prédiction analytique de Prigodin d'une transition de délocalisation de la position moyenne à $\alpha = \alpha_1$. Ils renseignent de plus sur la manière dont la position moyenne diverge.

5.3.2 Écart-type

Nous nous tournons à présent vers l'étude de l'écart-type de la position, $\sigma_\xi(\tau) = \sqrt{\overline{\langle \xi^2(\tau) \rangle} - \overline{\langle \xi(\tau) \rangle}^2}$.

Sur la figure 5.9, on trace l'évolution de cet écart-type avec le temps, pour différentes valeurs de α allant de 0.02 à 3. Le paramètre ε/α est pris égal à 0.1 pour les courbes en traits pleins, et 0.01 pour les courbes en tirets. Le comportement de l'écart-type à grand temps est identique pour ces deux valeurs de ε/α à α fixé.

On observe que pour toutes les valeurs de α les courbes sont croissantes. On a pour les valeurs de α inférieures à $\alpha_2 \simeq 0.056$ une convergence de l'écart-type vers une valeur finie

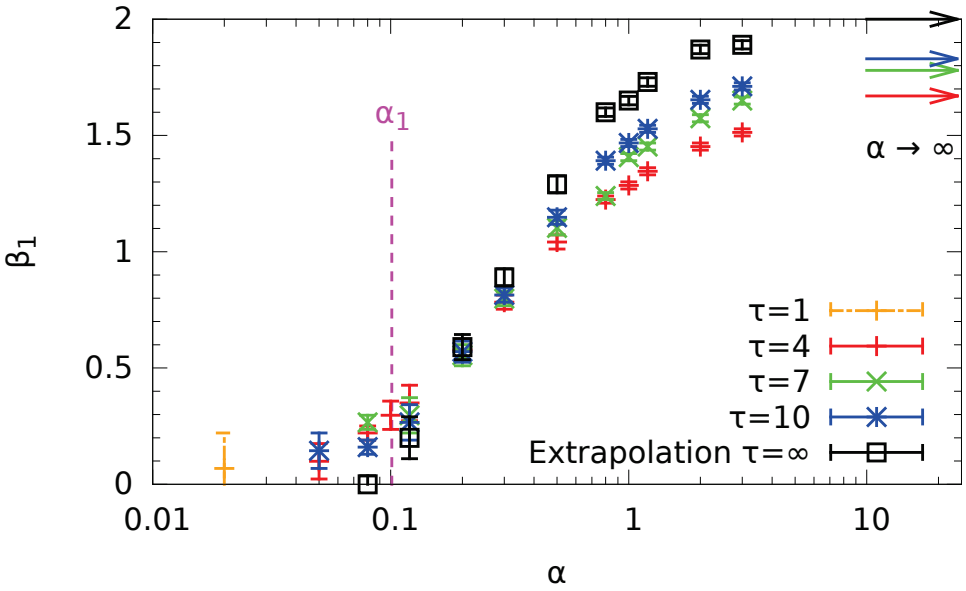


Fig 5.8 – Tracé de β_1 en fonction de α, à différents temps correspondant à différentes couleurs de points. Les valeurs de β_1 à temps infini obtenues par extrapolation de la courbe traçant β_1 en fonction de $g(\tau)$ sont représentées en noir. Les flèches donnent la valeur de $\beta_1(\tau) = g(\tau)$ pour $\alpha \to \infty$ (obtenue en considérant un désordre nul).

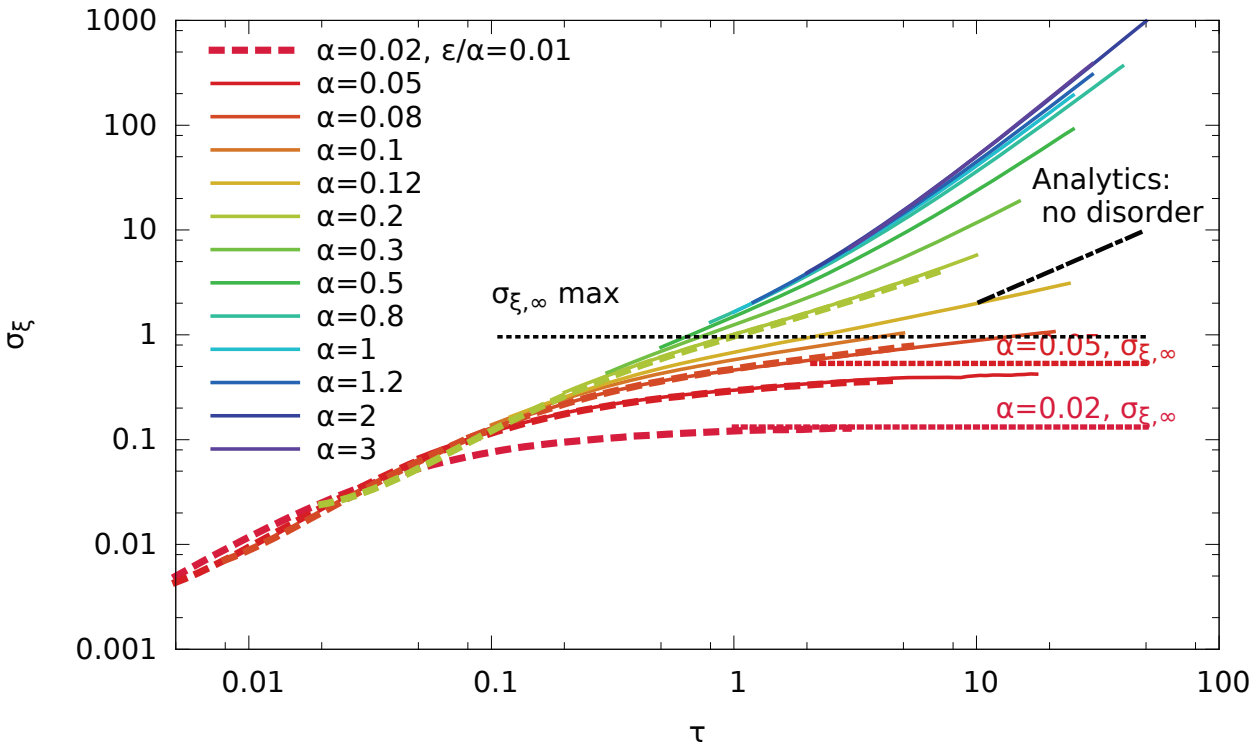


Fig 5.9 – Évolution temporelle de l'écart-type de la position pour différentes valeurs de α correspondant à différentes couleurs. Le paramètre ε/α est pris égal à 0.1 pour les courbes en traits pleins, et 0.01 pour les courbes en tirets. Les valeurs asymptotiques analytiques $\sigma_{\xi,\infty}$ sont tracées en pointillés. La forme asymptotique en l'absence de désordre $\sigma_\xi(\tau) \simeq 2\frac{\kappa}{k_0}\tau$ est tracée en tirets-pointillés noirs.

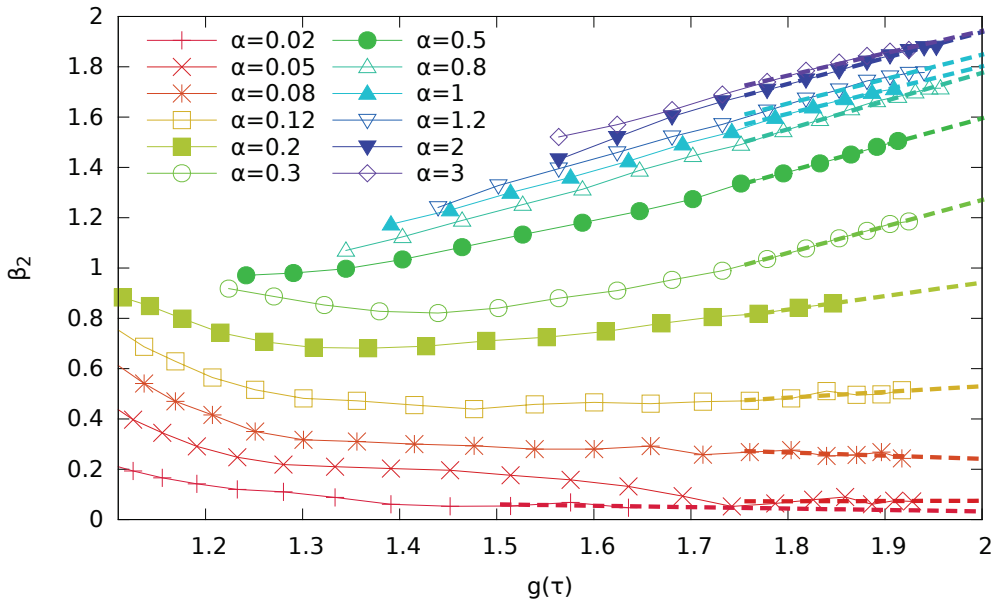


Fig 5.10 – Tracé de β_2 en fonction de $g(\tau)$. Les droites en tirets correspondent à un ajustement linéaire obtenu à partir des points des courbes correspondant à $g(\tau) > 1.75$ ($g(\tau) > 1.5$ pour $\alpha = 0.02$).

donnée par la théorie. Pour $\alpha > \alpha_2$, on observe au contraire une augmentation non bornée de l'écart-type, conforme à la délocalisation. L'écart-type dépasse notamment la valeur finie théorique maximale $\sigma_{\xi,\infty}^{\max} \simeq 0.958$, obtenue pour $\alpha = \alpha_2$.

Par ailleurs, pour les valeurs de α présentées ici, toutes les courbes semblent tendre vers une même courbe qui se situerait légèrement au-dessus des courbes tracées pour les plus grandes valeurs de α. Cependant, une telle courbe est très différente du comportement prévu à désordre nul, correspondant à $\alpha = \infty$. En effet, l'écart-type présente une augmentation temporelle linéaire à grand temps en l'absence de désordre, de la forme $\sigma_\xi(\tau) \simeq 2\frac{\kappa}{k_0}\tau$ [cf. Éq. (5.45)]. Ce comportement asymptotique est tracé en tirets-pointillés noirs. Nous analyserons d'abord les courbes obtenues sur la figure 5.9 pour des valeurs de α inférieures à 3 afin de mettre en évidence la transition de délocalisation à $\alpha \simeq 0.05$, puis nous étudierons le comportement de l'écart-type pour des valeurs de α plus élevées.

Loi de puissance locale

Les courbes de la figure 5.9 donnant l'évolution de l'écart-type de la position en fonction du temps présentent un comportement similaire à celles de la figure 5.6 qui représentent l'évolution de la position moyenne en fonction du temps. Par conséquent, on cherche à nouveau à déterminer un comportement en loi de puissance de l'écart-type à grand temps, de la forme $\sigma_\xi(\tau) \sim \tau^{\beta_2}$. L'exposant β_2 est obtenu comme précédemment à partir de la pente d'un ajustement linéaire local des courbes donnant l'écart-type en fonction du temps en échelle log-log. L'évolution de l'exposant $\beta_2(\tau)$ en fonction de $g(\tau)$ est représentée sur la figure 5.10. On extrapole la valeur de β_2 dans la limite d'un temps infini ($g(\tau) \to 2$) en effectuant un ajustement linéaire des valeurs numériques obtenues pour $g(\tau) > 1.75$ (pour $\alpha = 0.02$, on a pris $g(\tau) > 1.5$).

On trace alors sur la figure 5.11 l'évolution de β_2 en fonction de α à différents temps, et son extrapolation à temps infini. Les résultats obtenus sont compatibles avec l'existence d'une transition de délocalisation du moment d'ordre 2 à $\alpha = \alpha_2 \simeq 0.056$, visible à travers une loi de puissance d'exposant nul pour $\alpha \leqslant \alpha_2$, qui augmente ensuite avec α.

On note de plus que pour $\alpha \gtrsim 0.2$, l'exposant de la loi de puissance qui donne l'augmentation

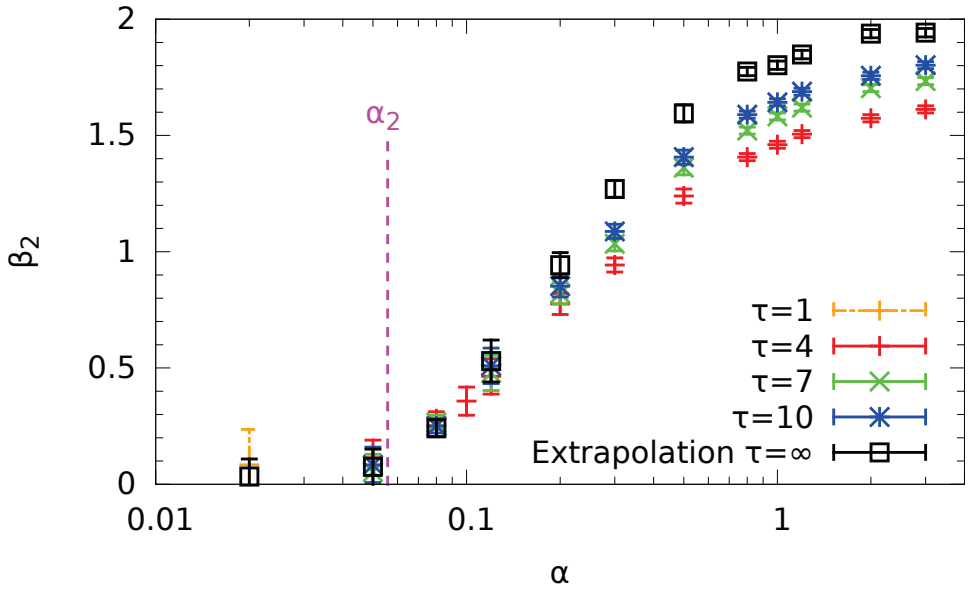


Fig 5.11 – Tracé de β_2 en fonction de α, à différents temps. Les valeurs de β_2 à temps infini obtenues par extrapolation de la courbe de β_2 en fonction de $g(\tau)$ sont représentées. La valeur du paramètre ε/α est prise égale à 0.1 pour tous les résultats, excepté en $\alpha = 0.02$ où elle est prise égale à 0.01.

de l'écart-type en fonction du temps dépasse la valeur 1 correspondant au résultat attendu à $\alpha = \infty$ (désordre nul). Nous étudions donc le comportement de l'écart-type pour des valeurs de α plus élevées dans la sous-section suivante, afin de voir si l'on se rapproche à très grand α du comportement en l'absence de désordre.

Comportement à grand α

Sur la figure 5.12, on trace l'évolution temporelle de l'écart-type en échelle log-log, pour $\alpha = 100$, 1000, 10000 et $+\infty$, chaque valeur de α étant représentée par une couleur différente. Deux valeurs du paramètre ε sont étudiées, à savoir $\varepsilon = 0.05$ (courbes en trait plein) et $\varepsilon = 1$ (courbes en tirets). Pour un paquet d'onde donné, augmenter α à ε fixé correspond à fixer une valeur de force et diminuer l'intensité du désordre. Cette intensité est en particulier nulle pour $\alpha = \infty$. Le résultat analytique en l'absence de désordre (voir annexe E),

$$\sigma_\xi(\tau) = \frac{\varepsilon}{2}\frac{k_0}{\kappa}\sqrt{1 + \frac{16}{\varepsilon^2}\left(\frac{\kappa}{k_0}\right)^4 \tau^2}, \tag{5.45}$$

est tracé en noir pour les deux valeurs de ε testées.

On observe sur la figure 5.12 que les courbes en trait plein ($\varepsilon = 0.05$) et en tirets ($\varepsilon = 1$) correspondant à une même valeur de α semblent se rejoindre à grand temps. L'évolution asymptotique de l'écart-type semble donc ne dépendre que de α et être indépendante de ε. Ce résultat est en accord avec les observations effectuées précédemment pour des valeurs de α plus faibles, et est également en accord avec le résultat analytique à grand temps en l'absence de désordre.

Pour une valeur de force fixée (ε fixé), on observe que la présence de désordre n'influe pas sur la valeur de l'écart-type aux temps courts, puis à des temps plus longs l'écart-type commence à augmenter plus rapidement qu'en l'absence de désordre. Ce décrochage de l'écart-type a lieu d'autant plus tôt que l'intensité du désordre est élevée. Un tel décrochage de l'écart-type en

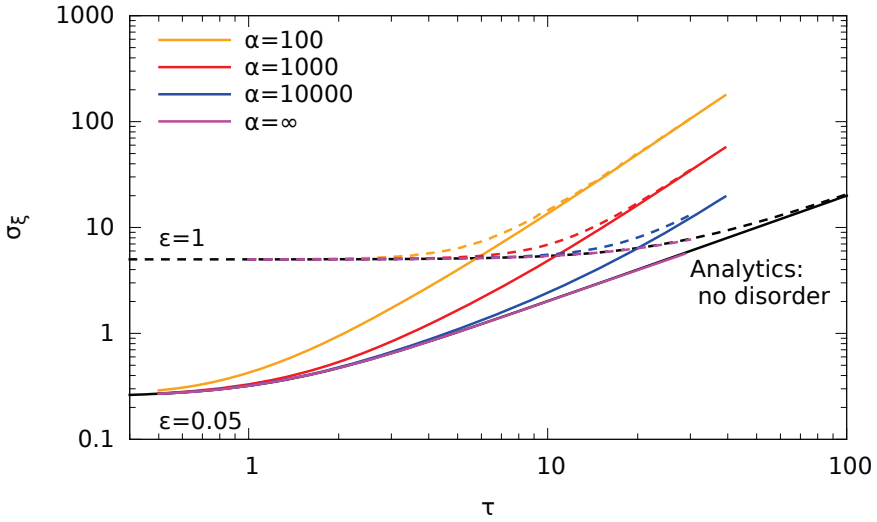


Fig 5.12 – Évolution temporelle de l'écart-type pour différentes valeurs de α correspondant à différentes couleurs. Les courbes en trait plein correspondent à $\varepsilon = 0.05$, et celles en tirets à $\varepsilon = 1$. Les résultats analytiques en l'absence de désordre sont tracés en noir.

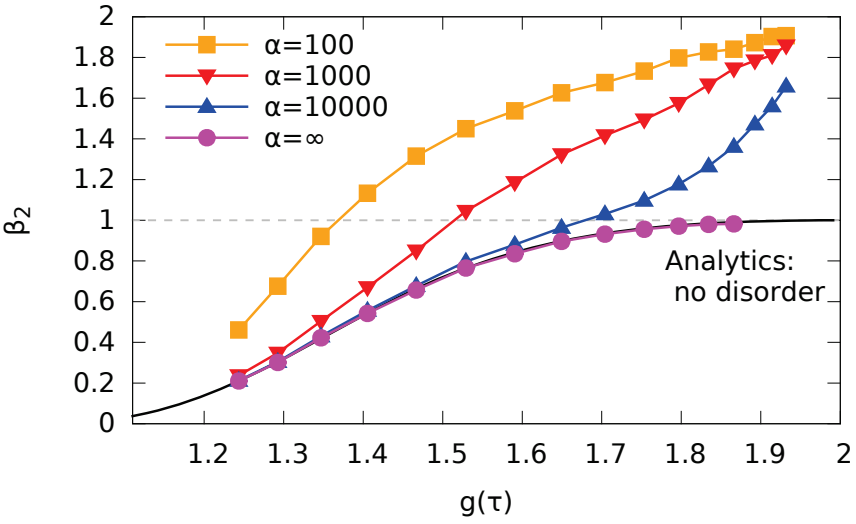


Fig 5.13 – Exposant de la loi de puissance locale β_2 en fonction de $g(\tau)$, pour différentes valeurs de α. Le paramètre ε est pris égal à 0.05. Le résultat analytique en l'absence de désordre est tracé en noir.

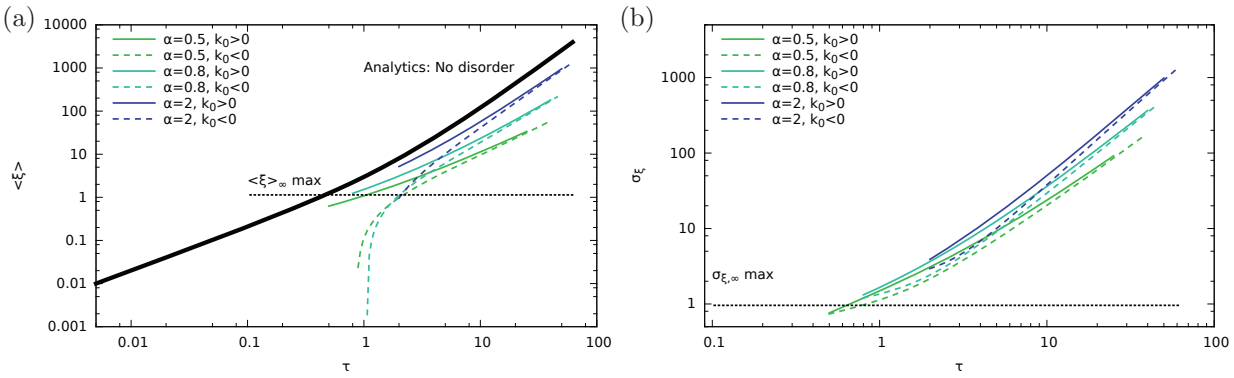


Fig 5.14 – Évolution temporelle de la position moyenne (a) et de l'écart-type (b) pour différentes valeurs de α. Le paramètre ε/α est pris égal à 0.1. On compare $k_0 > 0$ pour les courbes en traits pleins, et $k_0 < 0$ pour les courbes en tirets. Les valeurs asymptotiques analytiques maximales de la position moyenne obtenue pour $\alpha = \alpha_1$, $\overline{\langle \xi(\infty) \rangle}^{\max}$, et de l'écart-type pour $\alpha = \alpha_2$, $\sigma^{\max}_{\xi,\inf}$, sont tracées en pointillés noirs.

présence de désordre suggère que, dès que l'on introduit du désordre, l'écart-type augmente toujours plus rapidement qu'en l'absence de désordre à grand temps. Un tracé de l'exposant de la loi de puissance locale β_2 en fonction de $g(\tau)$ pour $\varepsilon = 0.05$ sur la figure 5.13 confirme ce résultat. En effet, on observe que l'exposant β_2 est proche de 2 à grand temps pour toutes les grandes valeurs de α ($\alpha \sim 100 - 10000$), alors qu'il est égal à 1 en l'absence de désordre ($\alpha = \infty$).

5.3.3 Influence du sens de la vitesse initiale sur la dynamique des moments de la position

Tous les résultats précédents ont été tracés dans le cas où la vitesse initiale est dans le même sens que la force, correspondant à $k_0 > 0$. Nous présentons sur la figure 5.14 une comparaison de l'évolution de la position moyenne (a) et de l'écart-type (b) pour $k_0 > 0$ et $k_0 < 0$. On observe qu'à grand temps, les comportements de la position moyenne et de l'écart-type ne dépendent pas du sens de la vitesse initiale. Les courbes donnant $\beta_1(\infty)$ et $\beta_2(\infty)$ en fonction de α sont donc indépendantes du signe de k_0.

5.4 Effet des corrélations du désordre

Dans cette dernière partie, on s'intéresse à l'influence des corrélations spatiales du désordre sur l'étalement d'un paquet d'onde. Cette étude est essentielle d'un point de vue expérimental puisque tout désordre réel est corrélé au moins sur une certaine longueur. En pratique, elle est particulièrement intéressante pour l'étude de l'étalement d'un paquet d'onde d'atomes ultra-froids. En effet, la statistique du potentiel désordonné utilisé dans les expériences est connue, et la longueur de corrélation σ_{R} est mesurable et contrôlable.

En l'absence de force, les effets des corrélations spatiales du potentiel désordonné ont ainsi pu être étudiées théoriquement et expérimentalement. D'un point de vue fondamental, les corrélations du potentiel désordonné ne modifient pas la nature de la localisation dans un tel milieu homogène. Seule la longueur de localisation est renormalisée par les corrélations du potentiel. Plus précisément, la transformée de Fourier de la fonction de corrélation d'ordre deux du potentiel désordonné, $\tilde{C}_2(k)$, est généralement une fonction décroissante de k, ce qui conduit

alors à une augmentation de la longueur de localisation avec l'énergie de la particule. Des cas plus exotiques de fonctions de corrélation non monotones, réalisables par exemple à l'aide de champs de tavelures optiques, peuvent néanmoins conduire à une diminution de la longueur de localisation [104, 105]. Enfin, lorsque le support de $\tilde{C}_2(k)$ est fini, comme c'est le cas dans certains champs de tavelures réalisés expérimentalement [106, 107], les corrélations du potentiel désordonné peuvent induire des effets spectaculaires comme des seuils de mobilité effective correspondant à des variations abruptes de la longueur de localisation [50, 61].

En présence d'une force, les effets qui nous intéressent sont différents. On considère ici le cas standard d'un désordre corrélé dont la fonction spectrale $\tilde{C}_2(k)$ est décroissante. Les résultats analytiques obtenus dans l'étude de la transmission (cf. Chap. 3) indiquent qu'une force conduit à une délocalisation en présence d'un tel désordre. On s'attend donc à observer de même un effet de délocalisation du paquet d'onde en étalement en présence d'un désordre corrélé et d'une force. L'étude analytique n'est cependant pas réalisable comme dans le cas de la transmission. En effet, contrairement au système en transmission, dans le problème d'étalement la force ne se traduit par une simple renormalisation de la longueur du système. Il n'existe ainsi aujourd'hui aucun résultat analytique ou numérique qui traite de l'étalement en présence d'une force et d'un désordre corrélé. Ici, nous étudions ce problème par une approche numérique.

5.4.1 Étude numérique

Pour notre étude, nous avons considéré un désordre gaussien, de moyenne nulle, et de fonction de corrélation à deux points gaussienne

$$C_2(x) = \frac{U_{\mathrm{R}}}{\sqrt{2\pi}\sigma_{\mathrm{R}}} \exp\left(\frac{-x^2}{2\sigma_{\mathrm{R}}^2}\right). \tag{5.46}$$

Ce désordre est caractérisé par son intensité $U_{\mathrm{R}} = \tilde{C}_2(0)$ et sa longueur de corrélation σ_{R}. Au système adimensionné introduit précédemment, voir Éq. (5.3) à (5.6), on doit ajouter un nouveau paramètre adimensionné. On choisit $\sigma_{\mathrm{R}} k_0$.

En l'absence de force, la particule d'énergie $E = \hbar^2 k_0^2/2m$ est localisée exponentiellement dans un tel désordre sur un longueur de localisation $L_{\mathrm{loc}} = 8E\hbar^2/m\tilde{C}_2(2k_0)$ [cf. Chap. 1 Éq. (1.38) et (1.40), avec $L_{\mathrm{loc}} = 4\ell_-$]. En particulier, la longueur de localisation est égale à $L_{\mathrm{loc}} = 8E\hbar^2/mU_{\mathrm{R}}$ dans la limite d'un désordre blanc. Par analogie, on définit un paramètre $\alpha(0)$ qui caractérise l'amplitude de la force sur celle du désordre dans le désordre corrélé,

$$\alpha(0) = \frac{\hbar^2 F}{m\tilde{C}_2(2k_0)}. \tag{5.47}$$

Dans la limite d'un désordre blanc, le paramètre $\alpha(0)$ est égal à α. Pour le désordre que nous considérons ici, on déduit de l'Éq. (5.46)

$$\alpha(0) = \alpha \times \frac{U_{\mathrm{R}}}{\tilde{C}_2(2k_0)} = \alpha \exp(2k_0^2 {\sigma_{\mathrm{R}}}^2). \tag{5.48}$$

Dans les simulations numériques effectuées, nous avons fixé $\varepsilon/\alpha = 0.1$ et $k_0\sigma_{\mathrm{R}} = 0.5\alpha$, et nous avons étudié l'évolution du paquet d'onde pour trois valeurs différentes de $\alpha(0)$, à savoir (a) $\alpha(0) = 0.033$, (b) 0.082 et (c) 0.198. Ces valeurs ont été choisies de sorte à avoir (a) $\alpha(0) < \alpha_2 < \alpha_1$, (b) $\alpha_2 < \alpha(0) < \alpha_1$ et (c) $\alpha_2 < \alpha_1 < \alpha(0)$. Les évolutions temporelles de la valeur moyenne sont tracées sur le panneau de gauche de la figure 5.15 et celles de l'écart-type sur celui de droite (disques rouges). Ces résultats sont comparés aux évolutions du même paquet

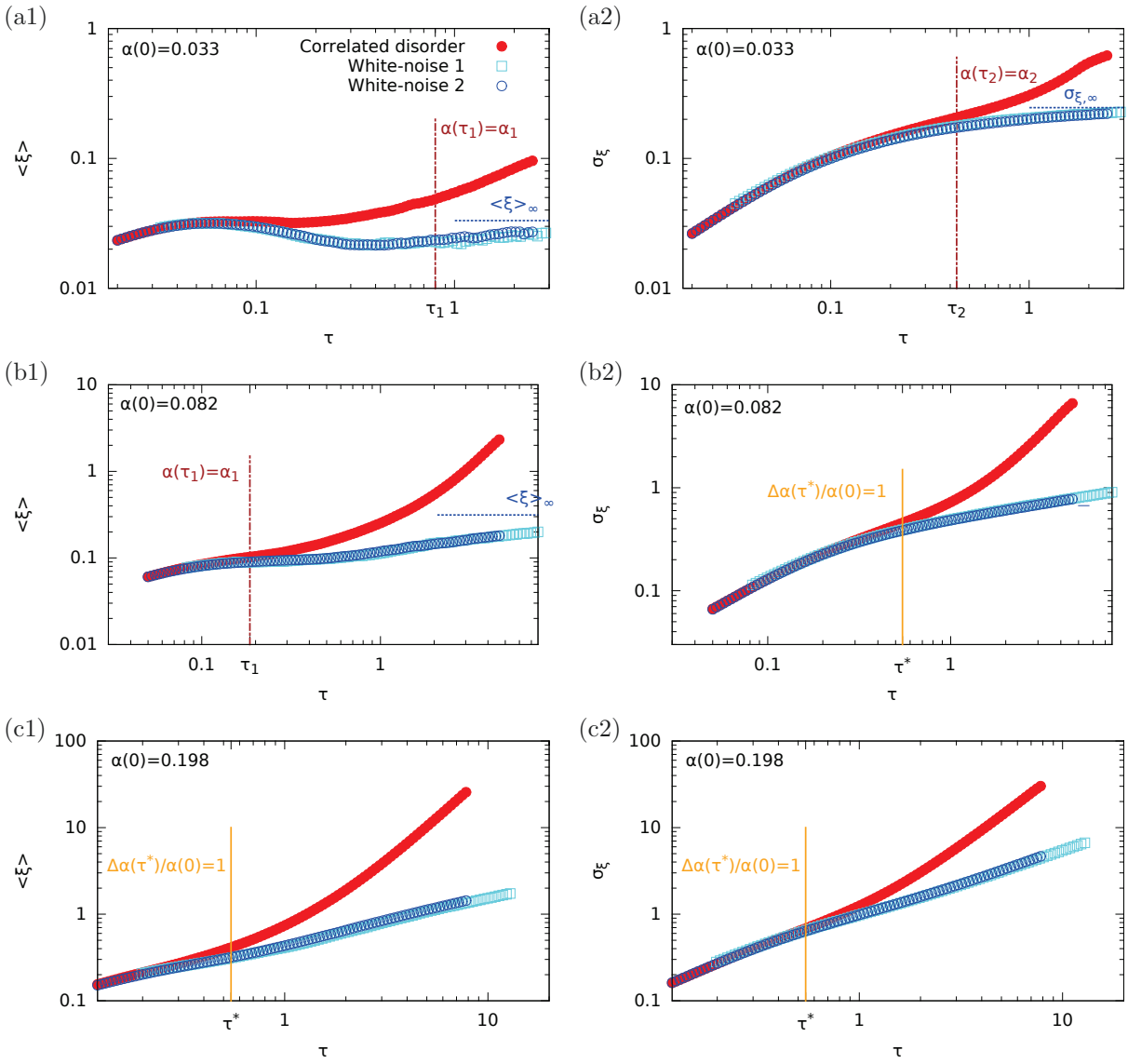


Fig 5.15 – Évolution de la position moyenne du paquet d'onde $\overline{\langle \xi(\tau) \rangle}$ (à gauche), et de son écart-type $\sigma_\xi(\tau)$ (à droite). Les disques rouges correspondent à un désordre de corrélations spatiales gaussiennes [cf. Éq. (5.46)], avec $\varepsilon/\alpha = 0.1$, $k_0\sigma_\mathrm{R} = 0.5\alpha$, et (a) $\alpha(0) = 0.033$, (b) $\alpha(0) = 0.082$ et (c) $\alpha(0) = 0.198$. Les évolutions pour deux désordres blancs tels que $\alpha = \alpha(0)$, pour lesquels $\varepsilon/\alpha = 0.1$ (carrés cyans) ou $\varepsilon \exp(2\sigma_\mathrm{R}^2 k_0^2)/\alpha = 0.1$ (cercles bleus), sont également tracées.

Figure	(a)	(b)	(c)
$\alpha = \alpha(0)$	0.033	0.0824	0.198
$\langle\xi\rangle_\infty$	Fini	Fini	∞
$\sigma_{\xi,\infty}$	Fini	∞	∞

TABLE 5.2 – Valeurs du paramètre α utilisées pour le désordre blanc dans les simulations numériques présentées sur la figure 5.15, et comportement des premiers moments de la position à temps infini prédit par la théorie.

d'onde dans un désordre blanc, pour une valeur de α égale à $\alpha(0)$. Le résultat analytique dans un désordre blanc prédit ainsi une convergence de la position moyenne et de l'écart-type pour le cas (a), une convergence de la position moyenne et une divergence de l'écart-type pour le cas (b) et une divergence des deux quantités pour le cas (c). Ces différentes situations sont résumées dans le tableau 5.2.

Deux valeurs du paramètre ε sont testées. Dans le premier cas, on fixe la valeur du rapport ε/α pour le désordre blanc égale à celle de ce rapport pour le désordre corrélé. En pratique, pour un paquet d'onde donné (masse et énergie fixées), cela correspond à conserver la même intensité de désordre $U_{\rm R}$ que pour le désordre corrélé, mais à augmenter la force de sorte à obtenir α égal à $\alpha(0)$. Les résultats numériques sont représentés par des carrés bleu clair. Dans le second cas, la valeur de ε est la même que pour le désordre corrélé. Cela correspond cette fois en pratique à garder la même valeur de force, mais à diminuer l'intensité du désordre $U_{\rm R}$. Les résultats numériques sont représentés par des cercles bleu foncé. Les résultats obtenus sur la position moyenne et sur l'écart-type sont identiques pour les deux valeurs de ε testées dans le désordre blanc, comme attendu à grand temps (cf. Sec. 5.1.1). De plus, comme prédit par la théorie, on observe la convergence de la valeur moyenne vers $\overline{\xi}_\infty$ pour $\alpha < \alpha_1$ [figures (a1) et (b1)], de l'écart-type vers $\sigma_{\xi,\infty}$ pour $\alpha < \alpha_2$ [figure (a2)], ainsi que les divergences de la position moyenne et de l'écart-type pour les cas concernés [figures (c1), (b2) et (c2)].

Pour toutes les valeurs de $\alpha(0)$ testées, on constate que $\overline{\langle\xi(\tau)\rangle}$ et $\sigma_\xi(\tau)$ sont quasiment identiques pour le désordre corrélé et le désordre blanc à temps courts. À temps longs en revanche, ces deux quantités augmentent plus rapidement en présence du désordre corrélé. Cela indique un cross-over vers une délocalisation du paquet d'onde aux temps longs en présence d'un désordre corrélé, qui apparaît quelle que soit l'intensité du désordre ou la valeur de la force (non nulle).

5.4.2 Interprétation physique

Afin d'interpréter la délocalisation que l'on observe en présence d'une force et d'un désordre corrélé, nous procédons par analogie avec les résultats obtenus dans le calcul de la transmission. Dans un problème en transmission, nous avons ainsi établi au Chap. 3 que la délocalisation provient de l'augmentation de l'énergie cinétique semi-classique de la particule $K(x) = E + Fx$, qui conduit à une augmentation du libre parcours moyen local $\ell_-(x) = 2\hbar^2 K(x)/m\tilde{C}[2k(x)]$. On définit par analogie un paramètre local,

$$\alpha_{\rm loc}(x) = \frac{\hbar^2 F}{m\tilde{C}_2[2k(x)]}, \tag{5.49}$$

qui caractérise localement l'amplitude de la force sur celle du désordre. Dans un désordre blanc, nous avons mis en évidence que le paquet d'onde s'étend à l'instant t approximativement jusqu'à la position classique en l'absence de désordre $\xi_{cl}(\tau) = \tau^2 + 2\tau$ (voir Sec. 5.2.3). La valeur

maximale de $\alpha_{\rm loc}$ ressentie par le paquet d'onde est donc donnée par

$$\alpha(\tau) = \alpha_{\rm loc}[\xi_{cl}(\tau) l_0]. \tag{5.50}$$

En particulier, à l'instant $\tau = 0$, on retrouve la valeur $\alpha(0) = \hbar^2 F/m\tilde{C}_2[2k(0)]$ introduite précédemment [Éq. (5.47)]. Afin d'interpréter le comportement en présence d'un désordre corrélé, on compare la valeur de $\alpha(\tau)$ aux valeurs critiques de délocalisation dans un désordre blanc α_1 (position moyenne) et α_2 (écart-type). On considère deux situations.

On s'intéresse d'abord au cas où le moment d'ordre m est fini dans le désordre blanc, i.e. $\alpha(0) < \alpha_m$. La délocalisation peut alors être estimée par l'instant τ_m auquel la valeur locale maximale $\alpha(\tau)$ atteint la valeur critique α_m, i.e. $\alpha(\tau_m) = \alpha_m$. Sur la Fig. 5.15, les valeurs de τ_1 [Fig. (a1) et (b1)] et τ_2 [Fig. (a2)] sont représentées par une ligne en tirets-pointillés marron. On observe que les valeurs de τ_m repèrent bien le cross-over vers une délocalisation pour des valeurs de $\alpha(0)$ assez grandes. En revanche, pour la plus petite valeur de $\alpha(0)$ testée, la position moyenne en présence du désordre corrélé augmente plus rapidement que pour un désordre blanc bien avant l'instant τ_1 [Fig. (a1)]. Cela provient du fait que plus α est faible et moins le bord du paquet d'onde à la position maximale $\xi_{cl}(\tau)$ est abrupt. En revanche, nous avons vérifié que ce bord est plus marqué pour un désordre corrélé. Le paquet s'étend alors davantage jusqu'à la position $\xi_{cl}(\tau)$ pour le désordre corrélé, ce qui favorise une augmentation plus rapide de la position moyenne.

On considère ensuite les cas où le moment d'ordre m diverge déjà pour un désordre blanc. On s'attend alors à ce que les comportements pour un désordre blanc et un désordre corrélé commencent à différer significativement lorsque la variation relative de α par rapport à sa valeur initiale est de l'ordre de 1. On introduit ainsi l'instant τ^* tel que

$$\frac{\Delta\alpha(\tau^*)}{\alpha(0)} = \frac{\alpha(\tau^*) - \alpha(0)}{\alpha(0)} = 1. \tag{5.51}$$

L'instant τ^* est représenté par des traits verticaux oranges sur les Fig. (b1), (c1) et (c2). Il indique de façon satisfaisante le début de la différence de comportement dans les deux types de désordre. Cela confirme que la dynamique des moments de la position est essentiellement gouvernée par l'étalement du bord du paquet d'onde en $\xi_{cl}(\tau)$, et par le désordre ressenti par le paquet d'onde en ce point.

5.4.3 Bilan

L'étude numérique de l'étalement d'un paquet d'onde en présence d'une force et d'un désordre corrélé nous a permis de mettre en évidence une délocalisation du paquet d'onde à temps infini, visible par la divergence des moments de la position. Nous avons montré que cette délocalisation peut s'interpréter par l'augmentation de l'énergie cinétique semi-classique locale des particules dans le sens de la force. Lorsque l'énergie cinétique augmente, le désordre ressenti par les particules diminue, ce qui favorise la délocalisation. En particulier, le rapport de la force sur le désordre ressenti localement, $\alpha_{\rm loc}(x)$, augmente dans la direction de la force, et dépasse donc les moments critiques $\{\alpha_m\}$ à grande distance. Cette interprétation très générale n'est pas spécifique au désordre de corrélations gaussiennes que nous avons testé. Au contraire, elle s'applique à tout type de désordre réaliste, du fait de la décroissance de la fonction spectrale $\tilde{C}_2(k)$ en $+\infty$. Par conséquent, l'effet d'une force lors de l'étalement d'un paquet d'onde en présence d'un désordre corrélé est une délocalisation du paquet d'onde. On retrouve ainsi le même effet que dans le système en transmission.

Conclusion

Dans ce manuscrit, nous avons étudié la localisation d'Anderson dans un milieu unidimensionnel en présence d'une force. C'est un problème fondamental d'un point de vue théorique. Ainsi, alors qu'en l'absence de force un système unidimensionnel est toujours fortement localisé dans un milieu désordonné, nous avons montré que l'ajout d'une force conduit à une diminution de la localisation, voire à une suppression. Dans cette thèse, nous avons étudié analytiquement et numériquement l'effet d'une force dans deux cas : une expérience de transmission d'une onde quantique de matière, et une expérience d'étalement d'un paquet d'onde quantique. Contrairement au cas sans force, la physique dans ces deux systèmes est différente, comme nous l'expliquerons ci-dessous. Outre son aspect fondamental, la question de l'effet d'une force est essentielle d'un point de vue pratique. Elle se pose notamment lors de l'étude de conductivité d'un système, qui nécessite de mesurer la réponse en courant à une force. De plus, les systèmes d'atomes ultrafroids rendent aujourd'hui possible une observation expérimentale du comportement d'une onde de matière quantique en présence d'un potentiel désordonné et d'une force connus.

Nous nous sommes d'abord intéressés à un système en transmission (Chap. 3 et 4). Diverses approches analytiques permettent de traiter ce type de système en l'absence de force. Nous les avons étendues au cas d'un système rendu inhomogène par la présence d'une force.

Au Chap. 3, nous avons utilisé la méthode des matrices de transfert afin de calculer la distribution exacte du coefficient de transmission d'un guide de longueur donnée, au sein duquel le désordre et la force sont appliqués. Notre calcul nous a permis de montrer que cette distribution est universelle et ne dépend que d'un paramètre sans dimension. Ce paramètre s'obtient en renormalisant la longueur du guide par un libre parcours moyen local, qui dépend de l'énergie cinétique semi-classique locale de la particule due à la force. On montre ainsi que tous les détails de la force et du potentiel désordonné sont inclus dans la valeur du paramètre sans dimension. Notre résultat nous a alors permis de considérer différents types de force et de désordre. Nous avons ainsi montré que le cas idéal d'une force constante et d'un désordre blanc conduit à une localisation algébrique de la particule, caractérisée par une décroissance algébrique de la transmission avec la longueur du système. Notre résultat est en accord avec des résultats numériques préexistants sur la transmission typique. Il va plus loin en ce que nous avons également accès à la transmission moyenne et plus généralement à toute la distribution du coefficient de transmission. De plus, ce résultat est analytique, non spécifique à un modèle de désordre particulier. Nous nous sommes ensuite intéressés à la question fondamentale des corrélations spatiales du potentiel désordonné, présentes dans tout désordre réaliste. Nos résultats prédisent une délocalisation systématique dans un tel désordre corrélé en présence d'une force. Cet effet spectaculaire est très différent du cas homogène où les corrélations du potentiel renormalisent simplement la longueur de localisation. Au contraire, en présence d'une force, la localisation algébrique est fragile. Elle nécessite un désordre blanc d'une part, et d'autre part nous avons également montré qu'une force croissante peut conduire à une délocalisation. Nos simulations numériques de calcul du coefficient de transmission du guide sont en excellent

accord avec nos résultats analytiques, et nous proposons des expériences permettant d'observer les effets prédits sur la transmission en présence d'une force. Nous avons en particulier détaillé le cas d'une expérience de mesure de conductance entre deux réservoirs, liée au problème fondamental de la réponse en courant à une force extérieure.

Au Chap. 4, nous avons étendu deux autres méthodes analytiques de calcul de la transmission à la présence d'une force. D'une part, l'utilisation du formalisme de phase en présence d'une force nous a permis de retrouver la transmission typique prédite par la méthode diagrammatique. D'autre part, une méthode diagrammatique nous a conduit à une expression de la transmission moyenne équivalente à celle obtenue par la méthode des matrices de transfert. Dans ce chapitre, nous sommes également allés plus loin en étendant notre étude à un désordre non gaussien d'intensité plus élevée, à l'aide d'un développement perturbatif dans l'amplitude du désordre. Nous avons alors montré que les résultats obtenus pour un désordre faible restent valides en ajoutant des termes d'ordre supérieur en l'intensité du potentiel désordonné dans l'expression du libre parcours moyen local. Par ailleurs, la méthode diagrammatique permet de traiter aussi bien un problème de transmission qu'un problème d'étalement. Son utilisation nous a permis de mettre en évidence l'importance des conditions aux limites en présence d'une force, qui conduisent à des résultats différents selon le système considéré.

Nous nous sommes ensuite intéressés au problème d'étalement d'un paquet d'onde en présence de désordre et d'une force constante, dans un milieu unidimensionnel non borné. Un résultat analytique à temps infini existe pour ce système dans le cas d'un désordre blanc. Nous l'avons rappelé au Chap. 2. Dans cette thèse, nous nous sommes intéressés à la dynamique d'étalement du paquet d'onde, grâce à des simulations numériques. Les résultats de notre étude sont présentés dans le Chap. 5. Pour une force faible comparée au désordre, nos résultats sont en accord avec une convergence à temps infini de la position moyenne et de la largeur du paquet d'onde vers des valeurs constantes prédites par le résultat analytique. Pour une force plus élevée, nous avons montré que la position moyenne et la largeur du paquet d'onde croissent algébriquement à grand temps, et nous avons estimé les exposants des lois de puissances associées en fonction de la valeur du rapport force sur désordre. Enfin, nous avons considéré le cas réaliste d'un désordre corrélé. Nous avons alors mis en évidence l'apparition systématique d'une délocalisation du paquet d'onde. Nous avons justifié ce comportement par l'intervention d'une intensité de désordre locale liée à l'énergie cinétique semi-classique locale, par analogie avec les résultats du problème en transmission.

Perspectives

Dans cette thèse, nous avons montré que la localisation exponentielle dans un milieu désordonné unidimensionnel est détruite en présence d'une force. Pour un désordre blanc, nous avons montré qu'une localisation plus faible, algébrique, apparaît dans un système en transmission, ou dans un système en étalement pour une force faible. Une délocalisation apparaît en revanche dans ce dernier système pour une force élevée, et de manière générale dans tout désordre corrélé. Il serait extrêmement enrichissant de confronter ces prédictions fondamentales à des expériences réelles. Les développements expérimentaux de cette dernière décennie dans la manipulation d'atomes ultrafroids, qui ont notamment rendu possible l'observation directe de la localisation d'Anderson, font des systèmes d'atomes ultrafroids une plateforme privilégiée d'étude de la localisation en présence d'une force. Nous avons ainsi proposé dans cette thèse plusieurs schémas expérimentaux qui pourraient être implémentés avec les moyens actuels.

Pour aller plus loin d'un point de vue théorique, il serait intéressant d'étendre l'étude de l'effet d'une force en dimension supérieure à un, dans un système en transmission ou en étalement. Des simulations numériques, par une approche de type matrices de transfert par exemple pour

un système en étalement, permettraient d'obtenir des premiers résultats en dimension deux ou trois.

Enfin, l'effet combiné du désordre et des interactions entre particules est un problème encore largement ouvert dans de nombreux systèmes, y compris unidimensionnels. Il serait intéressant d'étendre les études présentées dans ce manuscrit à la présence d'interactions entre particules.

Annexe A

Compléments au modèle de Drude

A.1 Hypothèses

On considère la propagation d'électrons indépendants de masse m et de charge $q_e < 0$ en présence d'un champ électrique extérieur $\boldsymbol{E}$. On suppose que ces électrons sont soumis à des événements de collisions, qui vérifient les hypothèses suivantes :

— La vitesse d'un électron après un événement de collision, notée $\boldsymbol{v_0}$, est indépendante de sa vitesse avant la collision. Sa norme est fixée à une valeur constante, et sa direction est distribuée de façon isotrope.

— La probabilité de collision pendant un temps élémentaire $\mathrm{d}t$ est indépendante de la vitesse de l'électron, et est égale à tout instant à $\mathrm{d}t/\tau_e$, où le temps τ_e est appelé temps de libre parcours moyen.

A.2 Durée moyenne entre deux collisions

On définit $P_{nc}(t)$ la probabilité qu'un électron n'ait pas subi de collision entre l'instant $t = 0$ et l'instant t.

Pour qu'un électron n'ait pas subi de collision de l'instant $t = 0$ à l'instant $t + \mathrm{d}t$, il ne doit pas avoir subi de collision entre $t = 0$ et t (probabilité égale à $P_{nc}(t)$), et il ne doit pas subir de collision pendant la durée $\mathrm{d}t$ (probabilité égale à 1 moins la probabilité d'une collision pendant $\mathrm{d}t$, qui vaut $\mathrm{d}t/\tau_e$). D'où

$$P_{nc}(t + \mathrm{d}t) = P_{nc}(t)(1 - \mathrm{d}t/\tau_e). \tag{A.1}$$

On en déduit

$$\frac{\mathrm{d}\, P_{nc}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{P_{nc}(t)}{\tau_e}, \tag{A.2}$$

d'où

$$P_{nc}(t) = \mathrm{e}^{-t/\tau_e}\,. \tag{A.3}$$

La durée moyenne entre deux collisions $\langle t \rangle$ est donnée par

$$\langle t \rangle = \frac{\int_0^\infty \mathrm{d}t\ P_{nc}(t) t}{\int_0^\infty \mathrm{d}t\ P_{nc}(t)} \tag{A.4}$$

$$= \tau_e \tag{A.5}$$

Elle correspond donc au temps de libre parcours moyen τ_e.

A.3 Évolution de la vitesse des électrons

On note $\boldsymbol{v}(t)$ la vitesse d'un électron à l'instant t. La vitesse de l'électron à l'instant $t + \mathrm{d}t$ dépend de sa vitesse à l'instant t, et de la probabilité qu'il ait subi une collision pendant la durée $\mathrm{d}t$. S'il subit une collision pendant $\mathrm{d}t$ (probabilité $\mathrm{d}t/\tau_e$), sa vitesse est $\boldsymbol{v_0}$ à l'instant $t + \mathrm{d}t$, et s'il ne subit pas de collision pendant $\mathrm{d}t$ (probabilité $1 - \mathrm{d}t/\tau_e$), elle vaut $\boldsymbol{v}(t) + q_e\boldsymbol{E}\,\mathrm{d}t/m$. D'où

$$\boldsymbol{v}(t + \mathrm{d}t) = \frac{\mathrm{d}t}{\tau_e}\boldsymbol{v_0} + \left(1 - \frac{\mathrm{d}t}{\tau_e}\right)\left[\boldsymbol{v}(t) + \frac{q_e\boldsymbol{E}\,\mathrm{d}t}{m}\right] \tag{A.6}$$

$$= \boldsymbol{v}(t) + \mathrm{d}t\left[\frac{\boldsymbol{v_0}}{\tau_e} - \frac{\boldsymbol{v}(t)}{\tau_e} + \frac{q_e\boldsymbol{E}}{m}\right] + O(\mathrm{d}t^2). \tag{A.7}$$

D'où

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v}(t)}{\mathrm{d}t} = \frac{\boldsymbol{v_0}}{\tau_e} - \frac{\boldsymbol{v}(t)}{\tau_e} + \frac{q_e\boldsymbol{E}}{m}. \tag{A.8}$$

En moyennant sur l'ensemble des électrons, sachant que la vitesse moyenne après collision $\langle\boldsymbol{v_0}\rangle$ est nulle (isotropie des vitesses après collision), on obtient

$$\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{v_{moy}}(t)}{\mathrm{d}t} = -\frac{\boldsymbol{v_{moy}}(t)}{\tau_e} + \frac{q_e\boldsymbol{E}}{m}. \tag{A.9}$$

Annexe B

Distribution log-normale tronquée

Au chapitre 3, nous avons vu que la distribution exacte du logarithme de la transmission tend vers une distribution gaussienne au voisinage de sa valeur moyenne lorsque la métrique s tend vers $+\infty$ (voir Sec. 3.3.1). Après avoir interprété ce résultat dans le cas d'un système homogène, nous présentons ici les résultats sur les transmissions typique et moyenne que l'on obtient en utilisant une distribution gaussienne tronquée et renormalisée du logarithme du coefficient de transmission. Nous montrons ainsi que la loi log-normale suffit à obtenir le comportement dominant de la transmission moyenne à grand s, mais ne permet pas de connaître le terme correctif à ce comportement.

B.1 Interprétation de la loi log-normale dans un système homogène

La distribution normale du logarithme de la transmission dans la limite d'un guide de longueur $L \to +\infty$ peut s'interpréter assez facilement pour un système homogène (i.e. en l'absence de force). En effet, la matrice de transfert d'un tel système de longueur $L = N\Delta x$, où Δx est la longueur d'une cellule élémentaire du guide (3.44), est le produit des matrices de transferts des N cellules élémentaires (3.42)

$$\mathbf{T}(L,0) = \mathbf{T}(N\Delta x,(N-1)\Delta x)...\mathbf{T}(2\Delta x,\Delta x)\mathbf{T}(\Delta x,0). \tag{B.1}$$

Le logarithme de la matrice de transfert est donc égal à la somme des logarithmes de chaque matrice de transfert élémentaire $\mathbf{T}(i\Delta x,(i-1)\Delta x)$. Or chacune de ces matrices élémentaires est une quantité aléatoire, de distribution statistique identique (en l'absence de force). En assimilant grossièrement matrice de transfert et coefficient de transmission, le logarithme du coefficient de transmission est donc la somme des logarithmes de variables aléatoires identiquement distribuées. En utilisant le théorème central limite [108], la distribution du logarithme du coefficient de transmission tend donc vers une loi normale pour $N \to \infty$, i.e. pour un guide de longueur $L \to +\infty$, de moyenne et de variance proportionnelles à N.

B.2 Loi log-normale tronquée

Le comportement à grande distance du logarithme du coefficient de transmission dans un système homogène conduit parfois à approximer la distribution du logarithme de la transmission par une distribution approchée $P_1(\ln T, s)$ correspondant à une loi normale de moyenne $-s$ et

de variance $2s$, tronquée sur $]-\infty, 0]$ (car $T \in [0,1]$) et renormalisée :

$$P_1(\ln T, s) = \frac{1}{2\sqrt{\pi s}} \exp\left[-\frac{(\ln T + s)^2}{4s}\right] \times K_1(s), \tag{B.2}$$

avec [1]

$$K_1(s) = \left[\int_{-\infty}^{0} \mathrm{d}\ln T \frac{1}{2\sqrt{\pi s}} \exp\left[-\frac{(\ln T + s)^2}{4s}\right]\right]^{-1} \tag{B.4}$$

$$= \frac{2}{1 + \mathrm{erf}(\sqrt{s}/2)}. \tag{B.5}$$

À partir de (B.2), on obtient dans la limite $s \to \infty$

$$\overline{\ln T} = \int_{-\infty}^{0} \mathrm{d}(\ln T)\ P_1(\ln T, s) \ln T \simeq -s, \tag{B.6}$$

$$\overline{T} = \int_{-\infty}^{0} \mathrm{d}(\ln T)\ P_1(\ln T, s)\, \mathrm{e}^{\ln T} \simeq \frac{\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi s}}. \tag{B.7}$$

La transmission typique $T^{typ} = \exp(\overline{\ln T})$ et la transmission moyenne $\overline{T}$ décroissent donc essentiellement exponentiellement avec s dans la limite $s \to +\infty$. Les deux décroissances exponentielles diffèrent d'un facteur quatre.

B.3 Bilan

Les décroissances exponentielles à grand s de T^{typ} et $\overline{T}$ trouvées en utilisant la loi log-normale tronquée $P_1(\ln T, s)$ sont en accord avec le résultat obtenu en utilisant la distribution de probabilité exacte $P_0(\ln T, s)$ [cf. Éq. (3.77) et (3.80)]. En revanche, le terme sous-dominant de $\overline{T}$, correspondant à une correction algébrique à la décroissance exponentielle, est mal évalué en utilisant la loi log-normale tronquée. En effet, la loi log-normale tronquée donne un terme correctif en $s^{-1/2}$, tandis que la loi exacte conduit à un terme correctif en $s^{-3/2}$. Il est donc nécessaire pour obtenir des résultats précis d'utiliser la distribution exacte du coefficient de transmission.

1. La notation erf désigne la fonction erreur :

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_0^x \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{-t^2}. \tag{B.3}$$

Annexe C

Vertex d'ordre deux

Les différents vertex à prendre en compte pour calculer la probabilité de transfert d'un désordre blanc sont donnés sur la figure C.1. Leurs valeurs sont données par

$$a = a' = -\frac{1}{\ell_+(x)} \tag{C.1}$$

$$b = -\frac{1}{2\ell_+(x)} - \frac{1}{2\ell_-(x)} + \frac{i}{2\ell(x)} \tag{C.2}$$

$$b' = -\frac{1}{2\ell_+(x)} - \frac{1}{2\ell_-(x)} - \frac{i}{2\ell(x)} \tag{C.3}$$

$$c = c' = -\frac{1}{\ell_-(x)} \tag{C.4}$$

$$a'' = \frac{1}{\ell_+(x)} \tag{C.5}$$

$$d_g = \frac{1}{\ell_-(x)}\,\mathrm{e}^{2i\omega\Delta(x)} \tag{C.6}$$

$$d_d = \frac{1}{\ell_-(x)}\,\mathrm{e}^{-2i\omega\Delta(x)} \tag{C.7}$$

avec

$$\frac{1}{l_+(x)} = \frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y\frac{C_2(y)}{v(x+y/2)v(x-y/2)} \tag{C.8}$$

$$\frac{1}{l_-(x)} = \frac{1}{\hbar^2}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}y\frac{C_2(y)}{v(x+y/2)v(x-y/2)}\,\mathrm{e}^{\frac{2i\hbar^2}{3Fm}\left[k^3(x+y/2)-k^3(x-y/2)\right]} \tag{C.9}$$

$$\begin{aligned}\frac{i}{l(x)} = \frac{1}{\hbar^2}\int_0^{\infty}\mathrm{d}y\frac{C_2(y)}{v(x+y/2)v(x-y/2)}\,\mathrm{e}^{\frac{2i\hbar^2}{3Fm}\left[k^3(x-y/2)-k^3(x+y/2)\right]}\\ -\frac{1}{\hbar^2}\int_0^{\infty}\mathrm{d}y\frac{C_2(y)}{v(x+y/2)v(x-y/2)}\,\mathrm{e}^{\frac{2i\hbar^2}{3Fm}\left[k^3(x+y/2)-k^3(x-y/2)\right]}.\end{aligned} \tag{C.10}$$

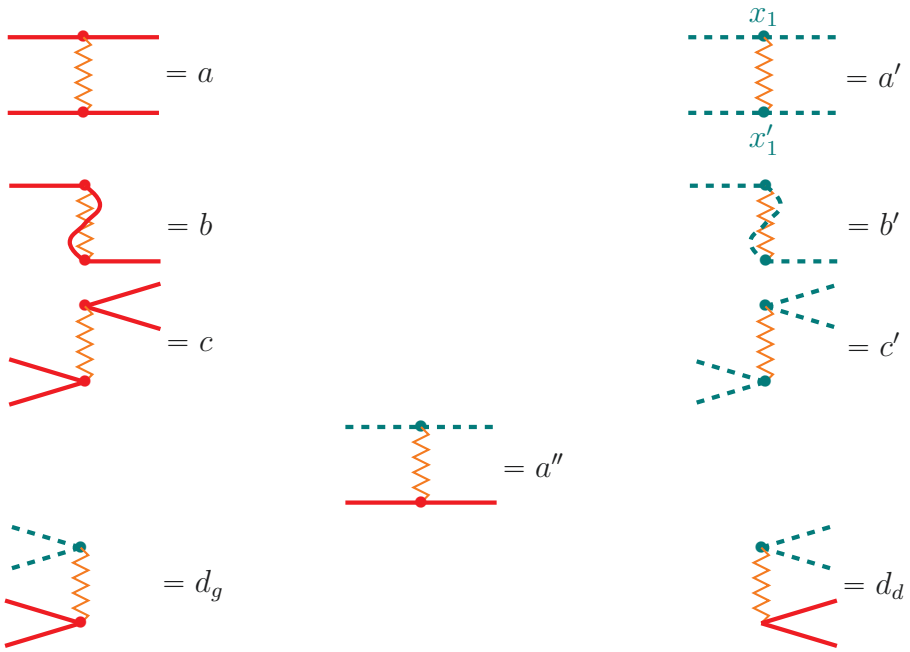


Fig C.1 – Vertex d'ordre deux n'oscillant pas avec la position.

Annexe D

Coefficient de transmission

On considère la distribution de probabilité du coefficient de transmission T pour une valeur de la métrique s fixée :

$$P(T,s) = \frac{2\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}T^2}\int_{\operatorname{argch}\sqrt{1/T}}^{\infty}\mathrm{d}y\frac{y\ \mathrm{e}^{-y^2/s}}{\sqrt{\operatorname{ch}^2 y - 1/T}}. \tag{D.1}$$

Il est utile d'effectuer le changement de variable

$$T = \frac{1}{\operatorname{ch}^2(x)}, \tag{D.2}$$

avec $x \in [0,\infty[$.

La distribution de probabilité de x est donnée par

$$P_x(x,s) = P(T,s)\left|\frac{\mathrm{d}T}{\mathrm{d}x}\right| \tag{D.3}$$

$$= 2T^2 \operatorname{ch} x \operatorname{sh} x P(T,s). \tag{D.4}$$

On obtient à partir de (D.1)

$$P_x(x,s) = \frac{4\,\mathrm{e}^{-s/4}\operatorname{ch} x \operatorname{sh} x}{\sqrt{\pi}s^{3/2}}\int_x^{\infty}\mathrm{d}y\frac{y\,\mathrm{e}^{-y^2/s}}{\sqrt{\operatorname{ch}^2 y - \operatorname{ch}^2 x}}. \tag{D.5}$$

D.1 Normalisation de la distribution de probabilité du coefficient de transmission

Vérifions la normalisation de la distribution de probabilité $P_x(x,s)$ (D.5).

$$I_0 = \int_0^{\infty}\mathrm{d}x\ P_x(x,s) \tag{D.6}$$

$$= \frac{4\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}}\int_0^{\infty}\mathrm{d}y\ y\,\mathrm{e}^{-y^2/s}\int_0^{y}\mathrm{d}x\ \frac{\operatorname{ch} x \operatorname{sh} x}{\sqrt{\operatorname{ch}^2 y - \operatorname{ch}^2 x}}. \tag{D.7}$$

Or on a

$$\int_0^{y}\mathrm{d}x\ \frac{\operatorname{ch} x \operatorname{sh} x}{\sqrt{\operatorname{ch}^2 y - \operatorname{ch}^2 x}} = \left[-\sqrt{\operatorname{ch}^2 y - \operatorname{ch}^2 x}\right]_{x=0}^{x=y} \tag{D.8}$$

$$= \sqrt{\operatorname{ch}^2 y - 1} \tag{D.9}$$

$$= \operatorname{sh} y. \tag{D.10}$$

D'où

$$I_0 = \frac{4\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}} \int_0^\infty \mathrm{d}y\; y \,\mathrm{sh}\, y\, \mathrm{e}^{-y^2/s}\,. \tag{D.11}$$

En intégrant par partie $\int_0^\infty \mathrm{d}y\; u(y)v'(y) = [u(y)v(y)]_0^\infty - \int_0^\infty \mathrm{d}y\; u'(y)v(y)$, avec

$$\begin{cases} u(y) = \mathrm{sh}\, y & u'(y) = \mathrm{ch}\, y \\ v(y) = \dfrac{-s}{2}\,\mathrm{e}^{-y^2/s} & v'(y) = y\,\mathrm{e}^{-y^2/s} \end{cases} \tag{D.12}$$

on obtient

$$I_0 = \frac{4\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}} \left\{ \left[\frac{-s}{2}\,\mathrm{e}^{-y^2/s}\,\mathrm{sh}\, y \right]_0^\infty - \int_0^\infty \mathrm{d}y\; \frac{-s}{2}\,\mathrm{e}^{-y^2/s}\,\mathrm{ch}\, y \right\} \tag{D.13}$$

$$= \frac{2\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi s}} \int_0^\infty \mathrm{d}y\;\, \mathrm{e}^{-y^2/s}\,\mathrm{ch}\, y. \tag{D.14}$$

Or on montre aisément en décomposant $\mathrm{ch}\, y = \frac{\mathrm{e}^y + \mathrm{e}^{-y}}{2}$ et en effectuant les intégrations gaussiennes le résultat suivant :

$$\int_0^\infty \mathrm{d}y\;\, \mathrm{e}^{-y^2/s}\,\mathrm{ch}\, y = \frac{1}{2}\sqrt{\pi s}\,\mathrm{e}^{s/4}\,. \tag{D.15}$$

On en déduit

$$I_0 = 1. \tag{D.16}$$

D.2 Valeur moyenne du logarithme du coefficient de transmission

On souhaite calculer $\overline{\ln T}$. En effectuant le changement de variable (D.2), on a

$$\ln T = -2\ln(\mathrm{ch}\, x). \tag{D.17}$$

D'où

$$\overline{\ln T} = \int_0^\infty \mathrm{d}x\; P_x(x,s)(-2)\ln(\mathrm{ch}\, x) \tag{D.18}$$

$$= \frac{-8\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}} \int_0^\infty \mathrm{d}y\; y\,\mathrm{e}^{-y^2/s} \int_0^y \mathrm{d}x\; \frac{\mathrm{ch}\, x\,\mathrm{sh}\, x}{\sqrt{\mathrm{ch}^2 y - \mathrm{ch}^2 x}} \ln(\mathrm{ch}\, x). \tag{D.19}$$

En intégrant par partie $\int_0^y \mathrm{d}x\; u(x)v'(x) = [u(x)v(x)]_0^\infty - \int_0^y \mathrm{d}x\; u'(x)v(x)$, avec

$$\begin{cases} u(x) = \ln(\mathrm{ch}\, x) & u'(x) = \dfrac{\mathrm{sh}\, x}{\mathrm{ch}\, x} \\ v(x) = -\sqrt{\mathrm{ch}^2 y - \mathrm{ch}^2 x} & v'(x) = \dfrac{\mathrm{ch}\, x\,\mathrm{sh}\, x}{\sqrt{\mathrm{ch}^2 y - \mathrm{ch}^2 x}} \end{cases} \tag{D.20}$$

on obtient

$$\overline{\ln T} = \frac{-8\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}} \int_0^\infty \mathrm{d}y\; y\,\mathrm{e}^{-y^2/s} \left\{ \left[-\sqrt{\mathrm{ch}^2 y - \mathrm{ch}^2 x}\,\ln(\mathrm{ch}\, x) \right]_{x=0}^{x=y} + \int_0^y \mathrm{d}x\; \sqrt{\mathrm{ch}^2 y - \mathrm{ch}^2 x}\,\frac{\mathrm{sh}\, x}{\mathrm{ch}\, x} \right\}. \tag{D.21}$$

Le terme entre crochets est nul. On effectue le changement de variable $u = \mathrm{ch}\, x$ dans l'intégrale sur x :

$$\overline{\ln T} = \frac{-8\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}} \int_0^\infty \mathrm{d}y\; y\,\mathrm{e}^{-y^2/s} \int_1^{\mathrm{ch}\, y} \mathrm{d}u\; \frac{\sqrt{\mathrm{ch}^2 y - u^2}}{u}. \tag{D.22}$$

Or on vérifie aisément que la fonction $f(u) = \sqrt{a^2-u^2} + a\ln u - a\ln\left(a^2 + a\sqrt{a^2-u^2}\right)$ a pour dérivée $f'(u) = \frac{\sqrt{a^2-u^2}}{u}$. D'où

$$\int_1^{\mathrm{ch}\, y} \mathrm{d}u\; \frac{\sqrt{\mathrm{ch}^2 y - u^2}}{u} = \left[\sqrt{\mathrm{ch}^2 y - u^2} + \mathrm{ch}\, y \ln u - \mathrm{ch}\, y \ln\left(\mathrm{ch}^2 y + \mathrm{ch}\, y \sqrt{\mathrm{ch}^2 y - u^2} \right) \right]_{u=1}^{u=\mathrm{ch}\, y} \tag{D.23}$$

$$= \mathrm{ch}\, y \ln(\mathrm{ch}\, y) - 2\,\mathrm{ch}\, y \ln(\mathrm{ch}\, y) - \sqrt{\mathrm{ch}^2 y - 1} + \mathrm{ch}\, y \ln(ch^2 y + \mathrm{ch}\, y\, \mathrm{sh}\, y) \tag{D.24}$$

$$= -\,\mathrm{ch}\, y \ln(\mathrm{ch}\, y) - \mathrm{sh}\, y + \mathrm{ch}\, y \ln(\mathrm{ch}\, y) + \mathrm{ch}\, y \ln(\mathrm{ch}\, y + \mathrm{sh}\, y) \tag{D.25}$$

$$= -\,\mathrm{sh}\, y + y\,\mathrm{ch}\, y. \tag{D.26}$$

On a donc

$$\overline{\ln T} = \frac{-8\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}} \int_0^\infty \mathrm{d}y\; y\,\mathrm{e}^{-y^2/s}(-\,\mathrm{sh}\, y + y\,\mathrm{ch}\, y). \tag{D.27}$$

En utilisant (D.11) et (D.16), il vient

$$\overline{\ln T} = 2 - \frac{8\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}} \int_0^\infty \mathrm{d}y\; y^2\,\mathrm{e}^{-y^2/s}\,\mathrm{ch}\, y. \tag{D.28}$$

En intégrant par partie $\int_0^\infty \mathrm{d}y\; u(y)v'(y) = [u(y)v(y)]_0^\infty - \int_0^\infty \mathrm{d}y\; u'(y)v(y)$, avec

$$\begin{cases} u(y) = y\,\mathrm{ch}\, y & u'(y) = \mathrm{ch}\, y + y\,\mathrm{sh}\, y \\ v(y) = \dfrac{-s}{2}\,\mathrm{e}^{-y^2/s} & v'(y) = y\,\mathrm{e}^{-y^2/s} \end{cases} \tag{D.29}$$

on obtient

$$\overline{\ln T} = 2 - \frac{8\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}} \left\{ \left[\frac{-s}{2}\,\mathrm{e}^{-y^2/s}\, y\,\mathrm{ch}\, y \right]_0^\infty - \int_0^\infty \mathrm{d}y\; \frac{-s}{2}\,\mathrm{e}^{-y^2/s}(\mathrm{ch}\, y + y\,\mathrm{sh}\, y) \right\}. \tag{D.30}$$

En utilisant (D.11), (D.16) et (D.15), on obtient alors

$$\overline{\ln T} = 2 - 2 + s \tag{D.31}$$

$$= s. \tag{D.32}$$

D.3 Valeur moyenne du coefficient de transmission

On souhaite calculer $\overline{T}$. En effectuant le changement de variable $T = \frac{1}{\mathrm{ch}^2 x}$ (D.2), on a

$$\overline{T} = \int_0^\infty \mathrm{d}x\ P_x(x,s)\frac{1}{\mathrm{ch}^2 x} \tag{D.33}$$

$$= \frac{4\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}}\int_0^\infty \mathrm{d}y\ y\,\mathrm{e}^{-y^2/s}\int_0^y \mathrm{d}x\ \frac{\mathrm{ch}\,x\,\mathrm{sh}\,x}{\sqrt{\mathrm{ch}^2 y-\mathrm{ch}^2 x}}\frac{1}{\mathrm{ch}^2 x}. \tag{D.34}$$

En intégrant par partie $\int_0^y \mathrm{d}x\ u(x)v'(x) = [u(x)v(x)]_0^\infty - \int_0^y \mathrm{d}x\ u'(x)v(x)$, avec

$$\begin{cases} u(x) = \dfrac{1}{\mathrm{ch}^2 x} & u'(x) = \dfrac{-2\,\mathrm{sh}\,x}{\mathrm{ch}^3 x} \\ v(x) = -\sqrt{\mathrm{ch}^2 y-\mathrm{ch}^2 x} & v'(x) = \dfrac{\mathrm{ch}\,x\,\mathrm{sh}\,x}{\sqrt{\mathrm{ch}^2 y-\mathrm{ch}^2 x}} \end{cases} \tag{D.35}$$

puis en en effectuant le changement de variable $\mathrm{ch}\,x = u$, on obtient

$$\overline{T} = \int_0^\infty \mathrm{d}x\ P_x(x,s)\frac{1}{\mathrm{ch}^2 x} \tag{D.36}$$

$$= \frac{4\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}}\int_0^\infty \mathrm{d}y\ y\,\mathrm{e}^{-y^2/s}\left(\mathrm{sh}\,y - 2\int_1^{\mathrm{ch}\,y}\mathrm{d}u\ \frac{\sqrt{\mathrm{ch}^2 y-u^2}}{u^3}\right). \tag{D.37}$$

Or on vérifie que la fonction $f(u) = -\frac{\sqrt{a^2-u^2}}{2u^2} - \frac{\ln u}{2a} + \frac{\ln\left(a^2+a\sqrt{a^2-u^2}\right)}{2a}$ a pour dérivée $f'(u) = \frac{\sqrt{a^2-u^2}}{u^3}$. D'où

$$\mathrm{sh}\,y - 2\int_1^{\mathrm{ch}\,y}\mathrm{d}u\ \frac{\sqrt{\mathrm{ch}^2 y-u^2}}{u^3} = \mathrm{sh}\,y - 2\left[-\frac{\sqrt{\mathrm{ch}^2 y-u^2}}{2u^2} - \frac{\ln u}{2\,\mathrm{ch}\,y} + \frac{\ln\left(\mathrm{ch}^2 y + \mathrm{ch}\,y\sqrt{\mathrm{ch}^2 y-u^2}\right)}{2\,\mathrm{ch}\,y}\right]_{u=1}^{u=\mathrm{ch}\,y} \tag{D.38}$$

$$= \frac{y}{\mathrm{ch}\,y}. \tag{D.39}$$

On en déduit

$$\overline{T} = \frac{4\,\mathrm{e}^{-s/4}}{\sqrt{\pi}s^{3/2}}\int_0^\infty \mathrm{d}y\ \frac{y^2\,\mathrm{e}^{-y^2/s}}{\mathrm{ch}\,y}. \tag{D.40}$$

Annexe E

Propagation d'un paquet d'onde gaussien en présence d'une force

Dans cette annexe, nous étudions la propagation unidimensionnelle d'un paquet d'onde gaussien en présence d'une force constante F. On considère à l'instant $t = 0$ un paquet d'onde gaussien centré en $x = 0$, d'impulsion moyenne $\hbar k_0$ et de largeur en impulsion (écart-type) $\hbar\kappa$.

E.1 État initial

Le paquet d'onde est ainsi décrit à l'instant $t = 0$ par la fonction d'onde

$$\psi(x, t = 0) = \frac{\sqrt{2\kappa}}{(2\pi)^{1/4}} \, \mathrm{e}^{-x^2\kappa^2 + ik_0 x} \, . \tag{E.1}$$

Dans l'espace des impulsions, avec la convention

$$\int \frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar} \, |p\rangle\langle p| = \mathbb{1}, \tag{E.2}$$

i.e.

$$\langle x|p\rangle = \mathrm{e}^{ipx/\hbar}, \tag{E.3}$$

la fonction d'onde initiale est donnée par

$$\phi(p, t = 0) = \int \mathrm{d}x \psi(x, t = 0) \, \mathrm{e}^{-ipx/\hbar} \tag{E.4}$$

$$= (2\pi)^{1/4} \sqrt{\frac{\hbar}{\sigma_p}} \, \mathrm{e}^{-(p-p_0)^2/4\sigma_p^2}, \tag{E.5}$$

avec $p_0 = \hbar k_0$ et $\sigma_p = \hbar\kappa$.

Le hamiltonien du système est donné par

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} - F\hat{x}. \tag{E.6}$$

E.2 Évolution dans l'espace des impulsions

Soit $|\psi_E\rangle$ un état stationnaire, que l'on normalise avec la convention

$$\int \mathrm{d}E \, |\psi_E\rangle\langle\psi_E| = \mathbb{1}. \tag{E.7}$$

On note $\phi_E(p) = \langle p|\psi_E\rangle$ la fonction d'onde de cet état stationnaire dans l'espace des impulsions. Elle est solution de l'équation de Schrödinger stationnaire exprimée dans l'espace des impulsions

$$\frac{p^2}{2m}\phi_E(p) - iF\hbar\partial_p\phi_E(p) = E\phi_E(p). \tag{E.8}$$

Cette équation se résout par méthode de séparation des variables, et on obtient avec la condition de normalisation (E.7)

$$\phi_E(p) = \frac{1}{\sqrt{F}}\,\mathrm{e}^{\frac{i}{F\hbar}(Ep-p^3/6m)}\,. \tag{E.9}$$

Le paquet d'onde gaussien est donc donné dans l'espace des impulsions par

$$\begin{aligned}
\phi(p,t) &= \langle p|\psi(t)\rangle && \text{(E.10)}\\
&= \int \mathrm{d}E\ \langle p|\psi_E\rangle\langle\psi_E|\psi(t)\rangle && \text{(E.11)}\\
&= \int \mathrm{d}E\ \phi_E(p)\,\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\langle\psi_E|\psi(t=0)\rangle && \text{(E.12)}\\
&= \int \mathrm{d}E\ \phi_E(p)\,\mathrm{e}^{-iEt/\hbar}\int\frac{\mathrm{d}p'}{2\pi\hbar}\phi_E^*(p')\phi(p',t=0). && \text{(E.13)}
\end{aligned}$$

En injectant l'expression de $\phi_E(p)$ [cf. Éq. (E.9)] dans l'équation (E.13), et en effectuant l'intégrale sur E (qui donne un terme égal à $2\pi F\hbar\delta(p-p'-Ft)$), on obtient

$$\phi(p,t) = (2\pi)^{1/4}\sqrt{\frac{\hbar}{\sigma_p}}\,\mathrm{e}^{-(p-p_0-Ft)^2/4\sigma_p^2}\,\mathrm{e}^{it[-F^2t^2-3p(p-Ft)]/6m\hbar}\,. \tag{E.14}$$

E.3 Évolution dans l'espace réel

On déduit de la solution dans l'espace des impulsions (E.14) la solution dans l'espace réel en résolvant l'intégrale gaussienne en p qui apparaît

$$\begin{aligned}
\psi(x,t) &= \int\frac{\mathrm{d}p}{2\pi\hbar}\,\mathrm{e}^{ipx/\hbar}\,\phi(p,t) && \text{(E.15)}\\
&= \frac{1}{\sqrt{2\sqrt{2\pi}A\sigma_p\hbar}}\,\mathrm{e}^{-(Ft+p_0)^2/4\sigma_p^2+B^2/4A-iF^2t^3/6m\hbar}, && \text{(E.16)}
\end{aligned}$$

avec :

$$\begin{aligned}
A &= \frac{1}{4\sigma_p^2} + \frac{it}{2m\hbar} && \text{(E.17)}\\
B &= \frac{Ft+p_0}{2\sigma_p^2} + \frac{i}{\hbar}\left[x + \frac{Ft^2}{2m}\right]. && \text{(E.18)}
\end{aligned}$$

En particulier, cela donne :

$$\begin{aligned}
|\psi(x,t)|^2 &= \frac{1}{2\sqrt{2\pi}\hbar\sigma_p|A|}\,\mathrm{e}^{-(Ft+p_0)^2/2\sigma_p^2}\,\mathrm{e}^{2\,\mathrm{Re}(B^2/4A)} && \text{(E.19)}\\
&= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_x(t)}\,\mathrm{e}^{-[x-x_{cl}(t)]^2/2\sigma_x^2(t)} && \text{(E.20)}
\end{aligned}$$

avec :

$$x_{cl}(t) = \frac{p_0 t}{m} + \frac{F t^2}{2m} \tag{E.21}$$

$$\sigma_x(t) = \frac{\hbar}{2\sigma_p}\sqrt{1 + \frac{4t^2\sigma_p^4}{m^2\hbar^2}}. \tag{E.22}$$

En terme de variables adimensionnées [cf. Chap. 5, Éq. (5.1) à (5.6)], on obtient la densité adimensionnée

$$\tilde{n}(\xi,\tau) = l_0|\psi(\xi l_0, \tau t_0)|^2 \tag{E.23}$$

$$= \frac{1}{\sqrt{2\pi}\sigma_\xi(\tau)}\, \mathrm{e}^{-[x-\xi_{cl}(\tau)]^2/2\sigma_\xi^2(\tau)} \tag{E.24}$$

avec

$$\xi_{cl}(\tau) = \tau^2 + 2\tau \tag{E.25}$$

$$\sigma_\xi(\tau) = \frac{1}{2\kappa l_0}\sqrt{1 + 16\tau^2\kappa^4 l_0^4 \varepsilon^2} \tag{E.26}$$

$$= \frac{\varepsilon}{2}\frac{k_0}{\kappa}\sqrt{1 + 16\frac{\tau^2}{\varepsilon^2}\left(\frac{\kappa}{k_0}\right)^4}. \tag{E.27}$$

Bibliographie

1. Soukoulis, C. M., José, J. V., Economou, E. N. & Sheng, P. Localization in one-dimensional disordered systems in the presence of an electric field. *Phys. Rev. Lett.* **50,** 764 (1983).
2. Prigodin, V. N. One-dimensional disordered system in an electric field. *Zh. Eksp. Teor. Fiz* **79.** [Sov. Phys. JETP **52**, 1185 (1980)], 2338 (1980).
3. Horn, L. J., Nelson, R. M., Smythe, W. D. & Hapke, B. W. *Coherent Backscatter Opposition Effect from Saturn Ring Particles and Their Regoliths* in *IAU Colloq. 150 : Physics, Chemistry, and Dynamics of Interplanetary Dust* (éds. Gustafson, B. A. & Hanner, M. S.) **104** (1996), 443.
4. Drude, P. Zur Elektronentheorie der Metalle. *Ann. Phys.* **306,** 566 (1900).
5. Ashcroft, N. W. & Mermin, N. D. *Physique des solides* trad. par Biet, F. & Kachkachi, H. (EDP sciences, Les Ulis, 2002).
6. Alloul, H. *Physique des électrons dans les solides : Structure de bandes, supraconductivité et magnétisme. I* (Les Éditions de l'École Polytechnique, Palaiseau, 2007).
7. Nozières, P. & Pines, D. *The theory of quantum liquids* (Perseus Books, Cambridge, 1999).
8. Akkermans, E. & Montambaux, G. *Physique mésoscopique des électrons et des photons* (EDP Sciences, Les Ulis, 2004).
9. Wiersma, D. S. *Light in strongly scattering and amplifying random media* thèse de doct. (University of Amsterdam, 1995).
10. Wolf, P.-E. & Maret, G. Weak Localization and Coherent Backscattering of Photons in Disordered Media. *Phys. Rev. Lett.* **55,** 2696 (1985).
11. Albada, M. P. V. & Lagendijk, A. Observation of Weak Localization of Light in a Random Medium. *Phys. Rev. Lett.* **55,** 2692 (1985).
12. Barabanenkov, Y. N., Kravtsov, Y. A., Ozrin, V. D. & Saichev, A. I. in *Progress in Optics* (éd. Wolf, E.) 65 (Elsevier, 1991).
13. Akkermans, E., Wolf, P. E. & Maynard, R. Coherent Backscattering of Light by Disordered Media : Analysis of the Peak Line Shape. *Phys. Rev. Lett.* **56,** 1471 (1986).
14. Akkermans, E., Wolf, P. E., Maynard, R. & Maret, G. Theoretical study of the coherent backscattering of light by disordered media. *J. Phys. France* **49,** 77–98 (1988).
15. Van der Mark, M. B., van Albada, M. P. & Lagendijk, A. Light scattering in strongly scattering media : Multiple scattering and weak localization. *Phys. Rev. B* **37,** 3575–3592 (1988).
16. Hapke, B. & Blewett, D. Coherent backscatter model for the unusual radar reflectivity of icy satellites. *Nature* **352,** 46 (1991).

17. Labeyrie, G., Müller, C. A., Wiersma, D. S., Miniatura, C. & Kaiser, R. Observation of coherent backscattering of light by cold atoms. *J. Opt. B : Quantum Semiclass. Opt.* **2,** 672 (2000).

18. Tourin, A., Derode, A., Roux, P., van Tiggelen, B. A. & Fink, M. Time-Dependent Coherent Backscattering of Acoustic Waves. **79,** 3637–3639 (1997).

19. Jendrzejewski, F. *et al.* Coherent Backscattering of Ultracold Atoms. *Phys. Rev. Lett.* **109,** 195302 (2012).

20. Anderson, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.* **109,** 1492 (1958).

21. Abrahams, E., Anderson, P. W., Licciardello, D. C. & Ramakrishnan, T. V. Scaling theory of localization : Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **42,** 673 (1979).

22. Van Wees, B. J. *et al.* Quantized conductance of point contacts in a two-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.* **60,** 848 (1988).

23. Berezinskii, V. L. Kinetics of a quantum particle in a one-dimensional random potential. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **65.** [Sov. Phys. JETP **38**, 620 (1974)], 1251 (1973).

24. Gogolin, A. A., Mel'Nikov, V. I. & Rashba, É. I. Conductivity in a disordered one-dimensional system induced by electron-phonon interaction. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **69.** [Sov. Phys. JETP **42**, 168 (1976)], 327 (1975).

25. Gogolin, A. A. Electron density distribution for localized states in one-dimensional disordered system. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **71.** [Sov. Phys. JETP **44**, 1003 (1976)], 1912 (1976).

26. Piraud, M., Lugan, P., Bouyer, P., Aspect, A. & Sanchez-Palencia, L. Localization of a matter wave packet in a disordered potential. *Phys. Rev. A* **83** (2011).

27. Beenakker, C. W. J. Random-matrix theory of quantum transport. *Rev. Mod. Phys.* **69,** 731 (1997).

28. Lifshits, I. M., Gredeskul, S. A. & Pastur, L. A. *Introduction to the theory of disordered systems* (Wiley, New York, 1988).

29. Vollhardt, D. & Wölfle, P. Diagrammatic, self-consistent treatment of the Anderson localization problem in 2 dimensions. *Phys. Rev. B* **22,** 4666 (1980).

30. Vollhardt, D. & Wölfle, P. Anderson Localization in 2 Dimensions : A Self-Consistent Diagrammatic Theory. *Phys. Rev. Lett.* **45,** 842 (1980).

31. Vollhardt, D. & Wölfle, P. Scaling Equations from a Self-Consistent Theory of Anderson Localization. *Phys. Rev. Lett.* **48,** 699 (1982).

32. Müller, C. & Delande, D. Disorder and interference : localization phenomena. *arXiv :1005.0915 [cond-mat, physics :quant-ph].* arXiv : 1005.0915 (2010).

33. Delande, D., Garreau, J. C., Sanchez-Palencia, L. & Tiggelen, B. V. La localisation forte d'Anderson. *Image de la physique,* 70 (2009).

34. Slevin, K. & Ohtsuki, T. Corrections to Scaling at the Anderson Transition. *Phys. Rev. Lett.* **82,** 382 (1999).

35. Lagendijk, A., Van Tiggelen, B. & Wiersma, D. S. Fifty Years of Anderson Localization. *Physics Today* **29,** 24 (2009).

36. John, S. Electromagnetic Absorption in a Disordered Medium near a Photon Mobility Edge. *Phys. Rev. Lett.* **53,** 2169 (1984).

37. Sheng, P. & Zhang, Z.-Q. Scalar-Wave Localization in a Two-Component Composite. *Phys. Rev. Lett.* **57,** 1879 (1986).

38. Economou, E. N. & Soukoulis, C. M. Calculation of optical transport and localization quantities. *Phys. Rev. B* **40,** 7977 (1989).

39. Schuurmans, F. J. P., Vanmaekelbergh, D., Lagemaat, J. v. d. & Lagendijk, A. Strongly Photonic Macroporous Gallium Phosphide Networks. *Science* **284,** 141 (1999).

40. Wiersma, D. S., Bartolini, P., Lagendijk, A. & Righini, R. Localization of light in a disordered medium. *Nature* **390,** 671 (1997).

41. Scheffold, F., Lenke, R., Tweer, R. & Maret, G. Localization or classical diffusion of light ? *Nature* **398,** 206 (1999).

42. Skipetrov, S. E. & Page, J. H. Red light for Anderson localization. *New J. Phys.* **18,** 021001 (2016).

43. Mello, P. A., Pereyra, P. & Kumar, N. Macroscopic approach to multichannel disordered conductors. *Annals of Physics* **181,** 290 (1988).

44. Chabanov, A. A., Stoytchev, M. & Genack, A. Z. Statistical signatures of photon localization. *Nature* **404,** 850 (2000).

45. Segev, M., Silberberg, Y. & Christodoulides, D. N. Anderson localization of light. *Nature Photonics* **7,** 197 (2013).

46. Schwartz, T., Bartal, G., Fishman, S. & Segev, M. Transport and Anderson localization in disordered two-dimensional photonic lattices. *Nature* **446,** 52 (2007).

47. Hu, H., Strybulevych, A., Page, J. H., Skipetrov, S. E. & van Tiggelen, B. A. Localization of ultrasound in a three-dimensional elastic network. *Nat. Phys.* **4,** 945 (2008).

48. Sanchez-Palencia, L. & Lewenstein, M. Disordered quantum gases under control. *Nat. Phys.* **6,** 87 (2010).

49. Sanchez-Palencia, L. & Santos, L. Bose-Einstein condensates in optical quasicrystal lattices. *Phys. Rev. A* **72,** 053607 (2005).

50. Sanchez-Palencia, L. *et al.* Anderson Localization of Expanding Bose-Einstein Condensates in Random Potentials. *Phys. Rev. Lett.* **98** (2007).

51. Skipetrov, S. E., Minguzzi, A., van Tiggelen, B. A. & Shapiro, B. Anderson Localization of a Bose-Einstein Condensate in a 3D Random Potential. *Phys. Rev. Lett.* **100,** 165301 (2008).

52. Press, W. H., Teukolsky, S. A., Vetterling, W. T. & Flannery, B. P. *Numerical recipes : the art of scientific computing* (Cambridge University Press, Cambridge, 1986).

53. Damski, B., Zakrzewski, J., Santos, L., Zoller, P. & Lewenstein, M. Atomic Bose and Anderson Glasses in Optical Lattices. *Phys. Rev. Lett.* **91,** 080403 (2003).

54. Piraud, M., Pezzé, L. & Sanchez-Palencia, L. Matter wave transport and Anderson localization in anisotropic three-dimensional disorder. *Europhys. Lett.* **99,** 50003 (2012).

55. Billy, J. *et al.* Direct observation of Anderson localization of matter waves in a controlled disorder. *Nature* **453,** 891 (2008).

56. Roati, G. *et al.* Anderson localization of a non-interacting Bose–Einstein condensate. *Nature* **453,** 895 (2008).

57. Kondov, S. S., McGehee, W. R., Zirbel, J. J. & DeMarco, B. Three-dimensional Anderson localization of ultracold matter. *Science* **334,** 66 (2011).

58. Jendrzejewski, F. *et al.* Three-dimensional localization of ultracold atoms in an optical disordered potential. *Nature Phys.* **8,** 398 (2012).

59. Semeghini, G. *et al.* Measurement of the mobility edge for 3D Anderson localization. *Nat. Phys.* **11,** 554 (2015).

60. Goodman, J. W. *Speckle phenomena in optics : theory and applications* (Roberts et Company Publishers, Greenwood Village, Colorado, 2007).

61. Lugan, P. *et al.* One-dimensional Anderson localization in certain correlated random potentials. *Phys. Rev. A* **80,** 023605 (2009).

62. Aubry, S. & André, G. Analyticity breaking and Anderson localization in incommensurate lattices. *Ann. Israel Phys. Soc* **3,** 18 (1980).

63. Wölfle, P. & Bhatt, R. N. Electron localization in anisotropic systems. *Phys. Rev. B* **30,** 3542 (1984).

64. Vollhardt, D. & Wölfle, P. in *Electronic phase transitions* (éds. Hanke, W. & Kopaev, I. V.) (North-Holland, Amsterdam, 1992).

65. Moore, F. L., Robinson, J. C., Bharucha, C. F., Sundaram, B. & Raizen, M. G. Atom Optics Realization of the Quantum δ-Kicked Rotor. *Phys. Rev. Lett.* **75,** 4598 (1995).

66. Chabé, J. *et al.* Experimental Observation of the Anderson Metal-Insulator Transition with Atomic Matter Waves. *Phys. Rev. Lett.* **101,** 255702 (2008).

67. Lopez, M., Clément, J.-F., Szriftgiser, P., Garreau, J. C. & Delande, D. Experimental test of universality of the Anderson transition. *Phys. Rev. Lett.* **108,** 095701 (2012).

68. Lemarié, G. *et al.* Observation of the Anderson metal-insulator transition with atomic matter waves : Theory and experiment. *Phys. Rev. A* **80,** 043626 (2009).

69. Manai, I. *et al.* Experimental observation of two-dimensional Anderson localization with the atomic kicked rotor. *Phys. Rev. Lett.* **115,** 240603 (2015).

70. Anderson, P. W. in *Nobel Lectures, Physics 1971-1980* Editor Stig Lundqvist (World Scientific Publishing Co., Singapore, 1992).

71. Lugan, P., Clément, D., Bouyer, P., Aspect, A. & Sanchez-Palencia, L. Anderson localization of Bogolyubov quasiparticles in interacting Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. Lett.* **99,** 180402 (2007).

72. Gaul, C. & Müller, C. A. Bogoliubov excitations of disordered Bose-Einstein condensates. *Phys. Rev. A* **83,** 063629 (2011).

73. Rapsch, S., Schollwöck, U. & Zwerger, W. Density matrix renormalization group for disordered bosons in one dimension. *Europhys. Lett.* **46,** 559 (1999).

74. Cherroret, N., Vermersch, B., Garreau, J. C. & Delande, D. How Nonlinear Interactions Challenge the Three-Dimensional Anderson Transition. *Phys. Rev. Lett.* **112,** 170603 (2014).

75. Nandkishore, R. & Huse, D. A. Many-Body Localization and Thermalization in Quantum Statistical Mechanics. *Annual Rev. Cond. Matt. Phys.* **6,** 15 (2015).

76. Bentosela, F. *et al.* Schrödinger operators with an electric field and random or deterministic potentials. *Commun.Math. Phys.* **88,** 387 (1983).

77. Delyon, F., Simon, B. & Souillard, B. From power-localized to extended states in a class of one-dimensional disordered systems. *Phys. Rev. Lett.* **52,** 2187 (1984).

78. Bentosela, F., Grecchi, V. & Zironi, F. Stark-Wannier states in disordered systems. *Phys. Rev. B* **31,** 6909 (1985).

79. Cota, E., José, J. V. & Azbel, M. Y. Delocalization transition in random electrified chains with arbitrary potentials. *Phys. Rev. B* **32,** 6157 (1985).

80. Kirkpatrick, T. R. Anderson localization and delocalization in an electric field. *Phys. Rev. B* **33,** 780 (1986).

81. Castello, D., Caro, A. & López, A. Localization in one-dimensional disordered systems with electric field : An analytical approach. *Phys. Rev. B* **36,** 3002 (1987).

82. Prigodin, V. N. & Altshuler, B. L. Localization dynamics and delocalization in a 1d disordered conductor in an external electric field. *Physics Letters A* **137,** 301 (1989).

83. Gasparian, V., Cahay, M. & Jódar, E. Localization length in a quasi-one-dimensional disordered system in the presence of an electric field. *J. Phys. : Condens. Matter* **23,** 045301 (2011).

84. Abrikosov, A. A. & Ryzhkin, I. A. Electrical properties of one-dimensional metals. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **71.** [Sov. Phys. JETP **44**, 630 (1976)], 1204 (1976).

85. Kronig, R. d. L. & Penney, W. G. *Quantum mechanics of electrons in crystal lattices* in *Proceedings of the Royal Society of London A : Mathematical, Physical and Engineering Sciences* **130** (The Royal Society, 1931), 499.

86. Bellissard, J., Formoso, A., Lima, R. & Testard, D. Quasiperiodic interaction with a metal-insulator transition. *Phys. Rev. B* **26,** 3024 (1982).

87. Crosnier de Bellaistre, C., Aspect, A., Georges, A. & Sanchez-Palencia, L. Effect of a bias field on disordered waveguides : Universal scaling of conductance and application to ultracold atoms. *Phys. Rev. B* **95,** 140201 (2017).

88. Mello, P. A. & Kumar, N. *Quantum Transport in Mesoscopic Systems : Complexity and Statistical Fluctuations, a Maximum-entropy Viewpoint* (Oxford University Press, Oxford, 2004).

89. Cohen-Tannoudji, C., Diu, B. & Laloë, F. *Mécanique quantique. Tome I* Hermann (Paris, 1973).

90. Risken, H. in *The Fokker-Planck Equation Springer Series in Synergetics* 18, 63 (Springer Berlin Heidelberg, 1984).

91. Abrikosov, A. The paradox with the static conductivity of a one-dimensional metal. *Solid State Communications* **37,** 997 (1981).

92. Mel'Nikov, V. I. Distribution of resistivity probabilities of a finite, disordered system. *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **32.** [JETP Lett. **32**, 225 (1980)], 244 (1980).

93. Gradshteyn, I. S. & Ryzhik, I. M. *Table of Integrals, Series, and Products* (Academic Press, San Diego (California), 2014).

94. Piraud, M. *Localisation d'Anderson d'ondes de matière dans un désordre corrélé : de 1D à 3D* thèse de doct. (Paris 11, 2012).

95. Buttiker, M. Symmetry of electrical conduction. *IBM J. Res. Dev.* **32,** 317 (1988).

96. Brantut, J.-P., Meineke, J., Stadler, D., Krinner, S. & Esslinger, T. Conduction of ultracold fermions through a mesoscopic channel. *Science* **337,** 1069 (2012).

97. Krinner, S., Stadler, D., Husmann, D., Brantut, J.-P. & Esslinger, T. Observation of quantized conductance in neutral matter. *Nature* **517,** 64 (2015).

98. Stadler, D., Krinner, S., Meineke, J., Brantut, J.-P. & Esslinger, T. Observing the drop of resistance in the flow of a superfluid Fermi gas. *Nature* **491,** 736 (2012).

99. Krinner, S., Stadler, D., Meineke, J., Brantut, J.-P. & Esslinger, T. Superfluidity with disorder in a thin film of quantum gas. *Phys. Rev. Lett.* **110,** 100601 (2013).

100. De Picciotto, R., Stormer, H. L., Pfeiffer, L. N., Baldwin, K. W. & West, K. W. Four-terminal resistance of a ballistic quantum wire. *Nature* **411,** 51 (2001).

101. Sanchez-Palencia, L., Clément, D., Lugan, P., Bouyer, P. & Aspect, A. Disorder-induced trapping versus Anderson localization in Bose–Einstein condensates expanding in disordered potentials. *New J. Phys.* **10,** 045019 (2008).

102. Mel'nikov, V. Motion of electrons in finite one-dimensional disordered systems. *Sov. Phys. Solid State* **22,** 1398 (1980).

103. Abramowitz, M. & Stegun, I. A. *Handbook of Mathematical Functions : With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables* (U.S. Government Printing Office, Washington, 1964).

104. Piraud, M., Aspect, A. & Sanchez-Palencia, L. Anderson localization of matter waves in tailored disordered potentials. *Phys. Rev. A* **85,** 063611 (2012).

105. Piraud, M. & Sanchez-Palencia, L. Tailoring Anderson localization by disorder correlations in 1D speckle potentials. *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **217,** 91 (fév. 2013).

106. Clément, D. *et al.* Suppression of transport of an interacting elongated Bose-Einstein condensate in a random potential. *Phys. Rev. Lett.* **95,** 170409 (2005).

107. Fort, C. *et al.* Effect of optical disorder and single defects on the expansion of a Bose-Einstein condensate in a one-dimensional waveguide. *Phys. Rev. Lett.* **95,** 170410 (2005).

108. Appel, W. *Mathématiques pour la physique et les physiciens* (H. et K. Editions, Paris, 2008).

université PARIS-SACLAY

ÉCOLE DOCTORALE
Ondes et Matière (EDOM)

Titre : Conductance et étalement d'une onde quantique dans un guide unidimensionnel : effet d'une force.

Mots clés : Localisation d'Anderson, atomes ultrafroids, force, conductance, diffusion.

Résumé : Dans un milieu désordonné, une onde peut être localisée exponentiellement par des effets d'interférence. Ce phénomène de localisation d'Anderson conduit notamment à une annulation de la conductance d'un fluide quantique unidimensionnel. Des travaux théoriques ont cependant montré que l'application d'un champ électrique pouvait réduire, voire supprimer, cette localisation. Nous étudions ici l'effet d'une force sur la localisation d'une onde quantique de matière dans un système unidimensionnel. En lien direct avec les expériences d'atomes ultrafroids, qui permettent d'observer la localisation d'Anderson d'un paquet d'onde en étalement, ou bien l'effet du désordre sur le transport entre deux réservoirs, nous nous intéressons à deux systèmes : la diffusion et la transmission d'une particule. Afin d'étudier la transmission à travers un guide, nous étendons un formalisme de matrices de transfert à la présence d'une force, éventuellement inhomogène. Deux approches analytiques complémentaires nous permettent d'étendre les résultats au cas d'un désordre de tavelures tel que celui utilisé dans les expériences d'atomes ultrafroids. Nous montrons que la force peut être entièrement prise en compte à l'aide d'une renormalisation de la longueur du guide par un libre parcours moyen local de la particule. Pour un désordre blanc, la force conduit alors une localisation plus faible, algébrique, tandis qu'une délocalisation apparaît pour un désordre corrélé. Nous nous intéressons ensuite à la diffusion d'une particule, à l'aide d'une approche numérique. Nous mettons en évidence une délocalisation de la position à grande force sous la forme d'une croissance temporelle algébrique, dont l'exposant augmente avec la force. Nous montrons de plus que la localisation est systématiquement détruite dans un désordre corrélé.

Title : Conductance and expansion of a quantum wave in a one-dimensional guide : effect of a force.

Keywords : Anderson localization, ultracold atoms, force, conductance, diffusion.

Abstract : A wave can be exponentially localized in a disordered medium, due to interference effects. This Anderson localization phenomenon leads to a cancellation of the conductance of a quantum fluid in 1D. However, theoretical works pointed out that an electric field may reduce or cancel this localization. We study here the effect of a force on the localization of a 1D quantum matter wave. Since both Anderson localization of an expanding wave packet and the effect of disorder on the transport between two reservoirs have been studied in ultracold atom experiments, we focus on two systems, namely the diffusion, or the transmission, of a particle. In order to calculate the transmission, we generalize a transfer matrix formalism to the presence of a, possibly inhomogeneous, force. The case of a speckle disorder as used in ultracold atom experiments is dealt with using two other analytical approaches. Our main is result is that the force can be entirely taken into account by renormalising the length with a local mean free path of the particle. For white-noise disorder, the force leads to a weaker, algebraic localization, whereas full delocalization appears for a correlated disorder. We then focus on the diffusion of a particle, using a numerical approach. A transition of delocalization of the particle for strong forces is shed into light through a power law increase of its position, whose exponent increases with the force. Moreover, we show that localization is systematically destroyed in a correlated disorder.

Université Paris-Saclay
Espace Technologique / Immeuble Discovery
Route de l'Orme aux Merisiers RD 128 / 91190 Saint-Aubin,
France