



## Mémoire de Master

# Instabilité d'Euler et blocage du courant dans les nanosystèmes électromécaniques

---

Master Matière Condensée et Nanophysique  
Supervision : G. Weick - D. Weinmann

Dominique Meyer

Institut de Physique et de Chimie des Matériaux de Strasbourg  
Juin 2011



## Remerciements

Je remercie tout particulièrement le professeur Rodolfo Jalabert, responsable de l'équipe de Physique Mésooscopique du Département de Magnétisme des Objets Nanostructurés (DMONS) à l'Institut de Physique et Chimie des Matériaux de Strasbourg (IPCMS). Je remercie également messieurs Dietmar Weinmann, responsable de ce stage de fin de Master et Guillaume Weick qui en fut son instigateur et principal encadrant pour sa patience et son aide, ainsi que les professeurs Gert Ingold de l'Université d'Augsbourg et Janós Polonyi de l'Université de Strasbourg pour leurs conseils précis et avisés.



# Table des matières

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
<b>2</b>	<b>Modèle</b>	<b>5</b>
2.1	Partie vibrationnelle du système . . . . .	5
2.2	Transistor à un électron . . . . .	6
2.3	Couplage entre électron et vibrations . . . . .	7
<b>3</b>	<b>Approximation de Born-Oppenheimer hors-équilibre</b>	<b>8</b>
3.1	Dynamique de Langevin résultant du transport . . . . .	8
3.2	Régime de transport séquentiel . . . . .	9
3.3	Régime de transport résonant . . . . .	10
3.4	Echelle d'énergie caractéristique du problème . . . . .	12
<b>4</b>	<b>Résultats</b>	<b>14</b>
4.1	Approximation de champ moyen . . . . .	14
4.2	Incidence sur le courant des fluctuations en régime séquentiel . . . . .	14
4.3	Incidence sur le courant des fluctuations en régime résonant . . . . .	15
<b>5</b>	<b>Conclusion</b>	<b>19</b>
<b>A</b>	<b>Hamiltonien vibrationnel effectif du système avec instabilité d'Euler</b>	<b>20</b>
<b>B</b>	<b>Dérivation de l'équation de Langevin en régime de couplage résonant</b>	<b>23</b>
<b>C</b>	<b>Coefficients de l'équation de Fokker-Planck en régime résonant</b>	<b>28</b>
<b>D</b>	<b>Calcul des diamants de Coulomb en champ moyen</b>	<b>30</b>
<b>E</b>	<b>Résolution numérique de l'équation de Fokker-Planck</b>	<b>32</b>



# Chapitre 1

## Introduction

La physique est la science qui tend à une explication rationnelle de la Nature, et depuis des siècles, des savants ont étudié l'Univers selon différentes échelles de temps, de longueur et de masse. Après avoir progressé dans la compréhension de notre environnement des points de vue macroscopiques et microscopiques, c'est l'interface entre ces deux descriptions du monde qui suscite la curiosité d'une partie de la communauté scientifique. Ceci relève autant d'une question de recherche fondamentale (la transition classique-quantique) que d'une réalité économique et industrielle, puisque l'avenir dépend de plus en plus de la petitesse de technologies telles que les dispositifs électroniques. En effet, cette course à la miniaturisation arrive aujourd'hui à un tournant de son histoire puisque la taille caractéristique des transistors à base de silicium joute l'échelle de longueur témoin de l'interface entre description classique et quantique de la Nature. Cette césure porte le nom de régime mésoscopique et qualifie également la branche de la physique qui se consacre à son étude.

Le transport quantique s'intéresse à la conduction des électrons dans des dispositifs nanoscopiques, comme par exemple les transistors à un électron (single electron transistor ou SET) [1]. Un SET est composé de deux jonctions tunnel rattachant deux réservoirs d'électrons  $L$  et  $R$  (la source et le drain) à un îlot central, lui-même couplé capacitivement à une troisième électrode, la grille. A tension nulle aux bornes du générateur ( $V = 0$ ), les potentiels chimiques des réservoirs sont alignés (leur niveaux de Fermi sont  $E_F = \mu_L = \mu_R$ , voir Fig.1a). Si ces potentiels chimiques sont eux-mêmes alignés avec le potentiel  $\mu_N$  de l'îlot central comportant  $N$  électrons (situations pouvant se modifier via la tension de grille  $V_g$ ), les électrons peuvent passer de la source  $L$  au drain  $R$ . La différence  $\Delta\mu_N = \mu_{N+1} - \mu_N$  entre deux niveaux  $N$  et  $N + 1$  de l'îlot étant égale à l'énergie de charge  $E_{ch} = e^2/2C$ , avec  $C$  la capacité totale du dispositif, on observe des pics de conductance (les pics de Coulomb) espacés de  $E_{ch}$  en fonction de  $V_g$  (voir Fig.1b). Ceci est appelé "blocage de Coulomb" [1]. A tension  $V$  nulle,  $\mu_L - \mu_R = eV$  (Fig.1c) et il y a du transport si  $|V_g| \lesssim V$ ; le courant passant au travers du SET ayant une structure en diamant en fonction de  $V$  et de  $V_g$ , nommée "diamant de Coulomb" (voir Fig.1d).

Une étape supplémentaire vers la miniaturisation consiste à employer des molécules uniques comme transistors à la place des circuits intégrés conventionnels. Ces dernières possèdent des degrés de libertés supplémentaires, par exemple vibrationnels, qu'il faut prendre en compte étant donné leur couplage au transport électronique. L'interrogation principale est donc de savoir quels sont les effets des vibrations sur le courant. Notre étude porte sur les SETs utilisés comme senseurs pour la détection en position des systèmes nanomécaniques. L'ensemble composé d'un SET couplé à un résonateur nanoscopique porte le nom

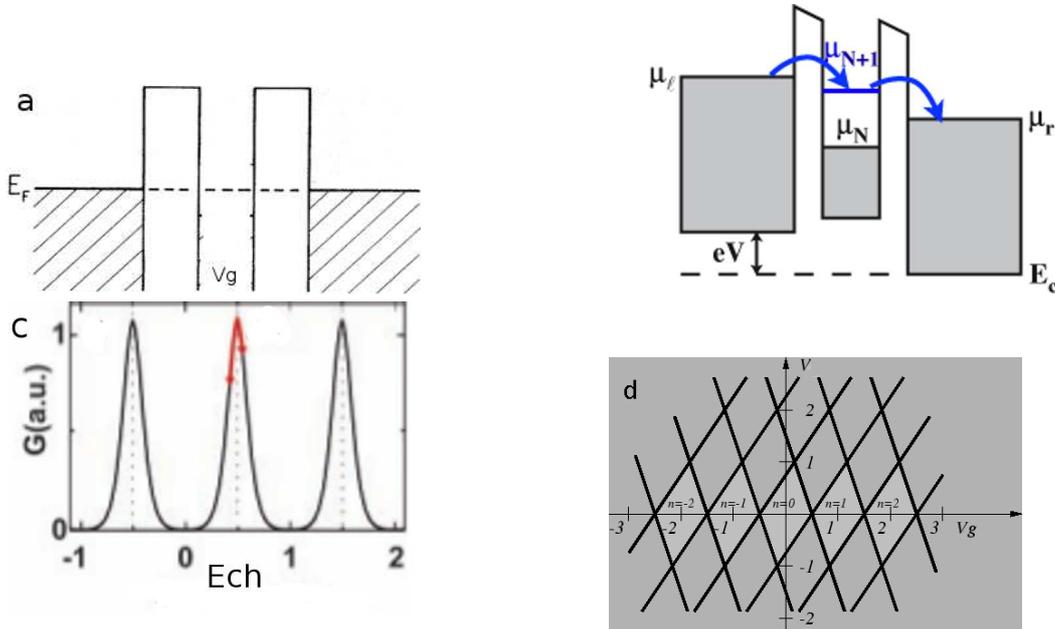


FIGURE 1.1 – Illustration du SET pour des tensions de polarisation  $V \ll 1$  (a) (d'après Kaster, Cambridge) et  $V \neq 0$  (b) (d'après D.J.Paul, Cambridge). (c) Comptage des électrons par mesure des variations de la capacitance  $C$  (d'après [3]). (d) Diamants de Coulomb dans le plan  $(V, V_g)$  (d'après Christoph Wasshuber, Vienne).

de nanosystème électromécanique (nanoelectromechanical systems ou NEMS). Le nanorésonateur peut-être formé par exemple d'un nanotube de carbone suspendu connecté à deux électrodes (voir Fig.1.2) [2], [3].

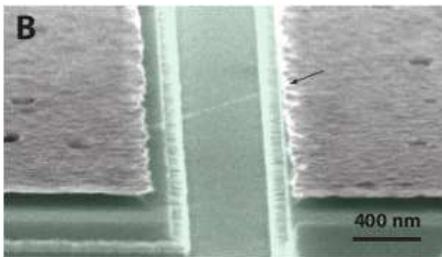


FIGURE 1.2 – Nanotube de carbone suspendu connecté à un dispositif source-drain (issu de [2]).

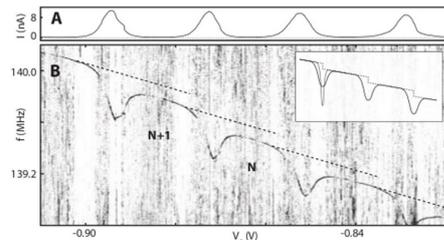


FIGURE 1.3 – Courant (A) et fréquence de vibration en fonction de la tension de grille  $V_g$  (issus de la réf[3]).

Il a été montré théoriquement [4] que les systèmes composés d'un SET couplé par une capacitance à un oscillateur harmonique de taille nanométrique et de constante de rappel  $k$  présentent un blocage du courant aux faibles tensions. En effet, dû à une force de couplage capacitif  $F_e$ , le transport d'un électron sur l'oscillateur va déplacer sa position d'équilibre de  $\Delta X = F_e/k$ . Par conséquent, la tension de grille  $V_g$  perçue par le SET est modifiée d'une valeur de  $F_e^2/ek$ . Ceci est dû à la grande proximité entre la grille et le résonateur chargé du NEMS. Ainsi, la condition sur la suppression du courant pour un SET  $V \lesssim V_g$  s'écrit  $V \lesssim F_e^2/ek$ . Il y a donc blocage du courant pour des tensions  $V \leq \Delta V = F_e^2/ek$ , voir Fig.1.4.

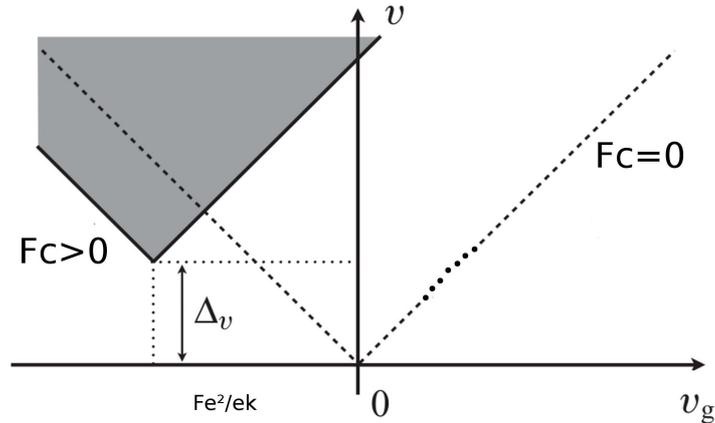


FIGURE 1.4 – Illustration pour  $v > 0$  du blocage du courant : à  $F_e > 0$ , la région conductrice (grise) est décalée de  $F_e^2/ek$  selon  $V_g$  pour un décalage de  $\Delta_v$  en  $v$  (d'après [5]). La figure de la région  $v < 0$  est le symétrique de celle à  $v > 0$  par rapport à l'axe des abscisses.

A ce jour, le blocage du courant prédit théoriquement [4] n'a pas été observé expérimentalement, bien que les expériences de référence [2], [3] aient mesuré une modification de la fréquence  $\omega$  du mode de flexion fondamental d'un nanotube couplé à un SET (voir Fig.1.3). Ce phénomène est une manifestation directe du couplage capacitif  $F_e$ . Or, ce dernier est trop faible dans les expériences des refs. [2] et [3] afin que le blocage du courant soit observé. En effet, la température  $T$  est beaucoup plus grande que le gap en tension  $\Delta V$ .

L'étude théorique [5] propose un moyen d'amplifier le blocage du courant en réduisant la constante de raideur  $k$  de l'oscillateur. Ceci peut être réalisé en exploitant l'instabilité d'Euler ou flambage mécanique [6]. Ce phénomène de déformation des matériaux a, dès l'Antiquité, éveillé la curiosité des architectes chargés de la construction des édifices supportés par des colonnes (voir Fig.1.5). La problématique était de savoir quelle masse maximale une colonne peut-elle porter en fonction de sa longueur et du matériau la constituant. Le physicien suisse Euler s'intéressa à la question lorsqu'il vécut à Saint-Petersbourg, ville construite sur des extrémités de troncs d'arbres puisque localisée dans le delta marécageux de la Néva. Il établit la force critique

$$F_c = \frac{\pi^2 \kappa}{L^2} \quad (1.1)$$

que peut supporter une tige d'une longueur  $L$  et d'un matériau de module de compressibilité  $\kappa$ , au-delà de laquelle elle présenterait un flambage (voir Fig.1.6).

Dans la réf.[4], le couplage par effet tunnel entre l'îlot quantique formé sur le nanorésonateur et les réservoirs d'électrons a été supposé faible. Dans ce régime, le transport électronique est séquentiel, c'est-à-dire que les électrons sautent et quittent la boîte quantique un à un. C'est dans ce régime que le blocage de Coulomb, et ainsi a priori du courant, est le plus prononcé. Or il peut être expérimentalement difficile de contrôler le couplage entre îlot et réservoirs. Par conséquent, ce dernier peut devenir fort et donner lieu à un régime de transport qualifié de "résonant" qui est entièrement cohérent. Ce travail vise à reprendre le contexte de [5], en s'interrogeant sur les modifications induites sur le blocage du courant en régime de transport résonant [7]. Notre résultat principal est que, même à fort couplage, le blocage du courant persiste.



FIGURE 1.5 – Colonnes du temple d'Amon à Karnak (Egypte, env. -1375 av. J.-C.).



FIGURE 1.6 – Illustration de la force de compression sur le flambage d'une tige pour  $F < F_c$  (bas) et  $F > F_c$  (haut).

Cette étude s'organise de la manière suivante : nous présenterons le modèle d'un nanorésonateur proche de l'instabilité d'Euler couplé à un dispositif source-drain en Sect.2. Dans la Sect.3 est explicité la méthode de Born-Oppenheimer hors équilibre avec laquelle ce problème est résolu. La Sect.4 présente nos résultats et la Sect.5 nos conclusions et perspectives. Les détails techniques sont explicités dans des annexes.

# Chapitre 2

## Modèle

Le modèle adopté est similaire à celui décrit dans [5] et [8]. Le système nanoélectromécanique considéré ainsi que les interactions qu'entretiennent les degrés de liberté vibrationnels de l'îlot central avec le transport des électrons se décrivent par le hamiltonien total

$$H = H_{\text{vib}} + H_{\text{SET}} + H_c. \quad (2.1)$$

Il comprend trois termes relatifs au caractère vibrationnel du résonateur soumis à une force latérale de compression  $H_{\text{vib}}$ , au SET ( $H_{\text{SET}}$ ), et au couplage  $H_c$  entre transport électrique et vibrations.

### 2.1 Partie vibrationnelle du système

Le terme correspondant au mode de flexion fondamental du nanorésonateur est de la forme

$$H_{\text{vib}} = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}X^2 + \frac{\alpha}{4}X^4, \quad (2.2)$$

avec  $X$  la déflexion du point du nanorésonateur  $P$  l'impulsion généralisée associée à  $X$ . Notons que cette composante vibrationnelle décrivant le flambage du tube prend pour expression une forme de Landau-Ginzburg (voir détails en annexe A), avec

$$\omega = \omega_0 \sqrt{1 - \frac{F}{F_c}}, \quad (2.3)$$

la fréquence du mode fondamental de pliage du tube et  $F$  la force de compression exercée sur le résonateur. La force critique est  $F_c = \kappa(2\pi/L)^2$ . On désigne en outre par  $m = 3\sigma L/8$  la masse effective du tube, donnée par l'intégration de sa densité linéaire massique  $\sigma$  sur la longueur maximale d'élongation  $L$  du tube de rigidité  $\kappa$ . La quantité  $\alpha = LF_c(\pi/2L)^4 > 0$  est garante de la stabilité du système pour des forces de compression  $F$  supérieures à la force critique d'Euler  $F_c$ , situation où les positions d'équilibres symétriques du nanotube

sont  $X_{\text{éq}} = \pm\sqrt{-m\omega^2/\alpha}$ , avec  $\omega^2 < 0$  (cf. éq. (2.3)). En revanche, si  $F < F_c$  ( $\omega^2 > 0$ ), on aura une position d'équilibre du tube  $X_{\text{éq}} = 0$ . La proximité à l'instabilité d'Euler se résume dans la quantité  $\delta = 1 - F/F_c$ , telle que  $\omega = \omega_0\sqrt{-\delta}$ .

## 2.2 Transistor à un électron

Le terme relatif au transistor à un électron est donné par la somme de ses différentes contributions [1]

$$H_{\text{SET}} = H_{\text{îlot}} + H_{\text{réservoirs}} + H_{\text{sauts}}. \quad (2.4)$$

Il se construit donc à partir des hamiltoniens de l'îlot central (ou boîte quantique)  $H_{\text{îlot}}$ , des réservoirs gauche  $L$  et droit  $R$ ,  $H_{\text{réservoirs}}$ , ainsi que des sauts par effet tunnel des électrons entre électrodes et îlot central  $H_{\text{sauts}}$ . L'expression de la partie relative à l'îlot

$$H_{\text{îlot}} = (\epsilon_d - eV_g)n_d \quad (2.5)$$

s'obtient avec l'énergie  $\epsilon_d$  de son niveau quantique isolé, renormalisé par l'énergie  $eV_g$  fournit par la grille. Ici,  $n_d = d^\dagger d$  est l'opérateur occupation de l'îlot,  $d$  annihilant un électron sur ce dernier. Le terme décrivant les réservoirs  $L$  et  $R$  est de la forme

$$H_{\text{réservoirs}} = \sum_{k,a} (\epsilon_k - \mu_a) c_{k,a}^\dagger c_{k,a}, \quad (2.6)$$

avec  $\epsilon_k$  l'énergie de l'électron de nombre d'onde  $k$  annihilé par l'opérateur  $c_{k,a}$  présent dans l'un des bains  $a = L$  ou  $R$  caractérisé par le potentiel chimique  $\mu_a$ . Le produit  $c_{k,a}^\dagger c_{k,a}$  représente le nombre d'électrons d'énergie  $\epsilon_k$  dans le réservoir  $a$ . Enfin, le hamiltonien

$$H_{\text{sauts}} = \sum_{k,a} (t_a c_{k,a}^\dagger d + t_a^* d^\dagger c_{k,a}) \quad (2.7)$$

décrit les sauts par effet tunnel des électrons entre les bains et l'îlot. Le recouvrement  $t_a$ , est considéré comme indépendant de l'énergie  $\epsilon_k$  des électrons. Le hamiltonien d'Anderson (2.4), quadratique en opérateurs fermioniques, peut-être facilement diagonalisé [9]. On suppose que les deux électrodes  $L$  et  $R$  sont constituées du même métal, ainsi la relation de dispersion des électrons  $\epsilon_k$  est la même pour  $a = L$  et  $a = R$ . La méthode de diagonalisation consiste à chercher une base propre  $\alpha_{k,a}$  dans laquelle  $H_{\text{SET}}$  pourra s'écrire de manière diagonale. Ainsi, les opérateurs d'annihilation de l'îlot et des bains  $a$  avec une particule d'énergie  $\epsilon_k$  sont respectivement donnés par

$$\begin{aligned} d &= \sum_{k,a=L,R} \nu_{k,a} \alpha_{k,a}, \\ c_{k,a} &= \sum_{k',a=L,R} \eta_{k,a;k',a'} \alpha_{k',a'}. \end{aligned} \quad (2.8)$$

De plus, les coefficients de  $d$  et de  $c_{k,a}$  exprimés dans la base diagonale sont

$$\begin{aligned} \nu_{k,a} &= \frac{t_{k,a}^*}{\epsilon_k - \epsilon_d - \Sigma_k}, \\ \eta_{k,a;k',a'} &= \delta_{k,k'} \delta_{a,a'} - \frac{t_{k,a} \nu_{k',a'}}{\epsilon_k - \epsilon_{k'} - i0^+}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

avec la self-énergie

$$\Sigma_k = \sum_{k,a} \frac{|t_{k',a}|^2}{(\epsilon_k - \epsilon_{k'}) + i0^+}. \quad (2.10)$$

Tout calculs faits, on obtient la forme du Hamiltonien (2.4) recherchée :

$$H_{SET} = \sum_{k,a=L,R} \epsilon_k \alpha_{k,a}^\dagger \alpha_{k,a}. \quad (2.11)$$

## 2.3 Couplage entre électron et vibrations

La partie dédiée au couplage entre les degrés de vibrations du nanorésonateur et le transport des électrons

$$H_c = F_e X n_d \quad (2.12)$$

est donné par le travail de la force électrostatique sur son déplacement  $\Delta X F_e$  dû à l'excès de charge sur le tube et induite par la tension de grille  $V_g$ . Ce terme est pondéré par l'occupation  $n_d$  du niveau en question. C'est ce couplage qui se manifeste dans les modifications de la fréquence propre  $\omega$  du nanorésonateur au cours des expériences [2] et [3] (voir Fig.1.3), et que l'on interprète comme un signe précurseur du blocage du courant.

# Chapitre 3

## Approximation de Born-Oppenheimer hors-équilibre

### 3.1 Dynamique de Langevin résultant du transport

On souhaite se donner les équations du mouvement pour une déflexion  $X$  du nanorésonateur soumis à l'instabilité d'Euler. Avec le Hamiltonien (2.1), les équations de Heisenberg pour  $X$  et  $P$  donnent

$$m\ddot{X} = -m\omega^2 X - \alpha X^3 - F_e n_d \quad (3.1)$$

Cette équation est couplée à une équation pour l'opérateur  $n_d$ . La dépendance des termes différentiels les uns envers les autres rendent cette équation impossible à résoudre exactement. Si l'on amène le système à proximité de l'instabilité d'Euler en augmentant l'intensité de la force de compression  $F$ , le rapport  $\delta \rightarrow 0$  et par conséquent la pulsation du mode fondamental du nanorésonateur diminue tel que  $\omega \rightarrow 0$ . De plus, les vibrations classiques du tube sont lentes par rapport à la fréquence de transport  $\Gamma$  des électrons, et donc  $\omega \ll \Gamma$ . Par conséquent, il est raisonnable de considérer que le résonateur est quasiment fixe entre deux évènements tunnels.

L'occupation  $n_d$  est une variable stochastique puisqu'elle relève de la fréquence des sauts des électrons des réservoirs  $L$  et  $R$  vers le niveau quantique de l'îlot. Sa variation très rapide, de l'ordre de  $1/\Gamma$ , amène à considérer uniquement sa moyenne  $\langle n_d \rangle_X$  pour une position du résonateur fixée. On peut alors réécrire la force induite par le courant comme  $-Fe\langle n_d \rangle_X$  et rendre la force effective de  $F_{eff}$  tributaire de la position en posant

$$F_{eff}(X) = -m\omega^2 X - \alpha X^3 - Fe\langle n_d \rangle_X. \quad (3.2)$$

Notons d'autre par que les fluctuations aléatoires de  $n_d$  se retrouvent dans celles de la force  $-Fen_d$ , que l'on modélise en introduisant un champ stochastique  $\zeta(X, t)$  dans l'équation du mouvement. D'autre part, des effets de retard induisent une friction représentées par un coefficient  $\eta(X)$  dans un terme différentiel du premier ordre en déplacement auquel s'ajoutent les frictions extrinsèques dues à l'environnement et représentées par  $\eta_e$ . L'équation du mouvement résultante de ces approximations est l'équation de type Langevin

$$m\ddot{X} + \frac{\eta(X) + \eta_e}{m}\dot{X} = F_{eff}(X) + \zeta(X, t). \quad (3.3)$$

Enfin, le caractère poissonien du transport des électrons implique

$$\begin{aligned} \langle \zeta(X, t) \rangle &= 0 \\ \langle \zeta(X, t)\zeta(X, t') \rangle &= [2\eta_e k_b T + D(X)]\delta(t - t'), \end{aligned} \quad (3.4)$$

avec  $D(X)$  le coefficient représentant les fluctuations et  $T$  la température. Le bruit  $\zeta$  étant gaussien et blanc, l'équation de Langevin (3.3) peut être reformulée via l'équation de Fokker-Planck

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial t} = -\frac{P}{m} \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial X} - F_{eff}(X) \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial P} + \left( \frac{\eta(X) + \eta_e}{m} \right) \frac{\partial P \mathcal{P}}{\partial X} + \left( \frac{D(X)}{2} + \eta_e k_b T \right) \frac{\partial^2 \mathcal{P}}{\partial P^2}, \quad (3.5)$$

où  $\mathcal{P}(X, P, t)$  représente la probabilité de trouver un point d'espace des phases  $(X, P)$  au temps  $t$ . Il est important de réaliser que les coefficients de friction et de diffusion  $\eta(X)$  et  $D(X)$  entrant dans l'équation de Langevin (3.3) et de Fokker-Planck (3.5) sont *induits par le passage du courant*.

## 3.2 Régime de transport séquentiel

Le point de départ pour la dérivation du courant en régime séquentiel est l'équation maîtresse stationnaire pour l'occupation moyenne  $n_0$  de l'îlot [1]

$$\frac{dn_0}{dt} = \Gamma_{01}(1 - n_0) + \Gamma_{10}n_0 = 0, \quad (3.6)$$

avec [10]

$$\begin{aligned} \Gamma_{01}(X) &= \sum_{a=L,R} \Gamma_a f_F \left( \frac{F_e X - eV_g - \mu_a}{k_b T} \right), \\ \Gamma_{10}(X) &= \sum_{a=L,R} \Gamma_a [1 - f_F \left( \frac{F_e X - eV_g - \mu_a}{k_b T} \right)], \end{aligned} \quad (3.7)$$

où  $f_F(X) = 1/(e^X + 1)$  représente la distribution de Fermi-Dirac. Les taux de transfert  $\Gamma_{01}$  vers et  $\Gamma_{10}$  hors du nanotube sont proportionnels à  $\Gamma_a = 2\pi|t_a|^2\nu/\hbar$ , avec  $\nu$  la densité d'état des réservoirs (supposée constante). L'occupation moyenne est  $n_0(X) = \frac{\Gamma_{01}(X)}{\Gamma}$ , avec  $\Gamma = \Gamma_L + \Gamma_R$ , tandis que les coefficients de fluctuation et de dissipation s'écrivent (voir [5]) :

$$\begin{aligned}
D(X) &= \frac{2F_e^2}{\Gamma} n_0(X) \frac{[1 - n_0(X)]}{\Gamma}, \\
\eta(X) &= -\frac{F_e}{\Gamma} \frac{\partial n_0(X)}{\partial X}.
\end{aligned} \tag{3.8}$$

Puis, avec les définitions des courants électriques gauche  $\mathcal{I}_L = +e\Gamma_{10}(1 - n_0)f_L$  et droite  $\mathcal{I}_R = -e\Gamma_{01}n_0f_R$  et en sachant que le courant total est la somme de ces deux contributions, on a

$$\mathcal{I}(X) = e[\Gamma_{10}(1 - n_0)f_L(\epsilon) - \Gamma_{01}n_0f_R(\epsilon)]. \tag{3.9}$$

Tous calculs faits, ceci se ramène a

$$\mathcal{I}(X) = \frac{e\Gamma_L\Gamma_R}{\Gamma} \left[ f_F\left(\frac{FX - eV_g - eV/2}{k_bT}\right) - f_F\left(\frac{FX - eV_g + eV/2}{k_bT}\right) \right]. \tag{3.10}$$

Il suffit alors d'intégrer  $\mathcal{I}(X)$  sur l'espace des phase  $\{X, P\}$ , en le pondérant avec la densité de probabilité stationnaire  $\mathcal{P}(X, P)$  issue de la résolution de l'équation de Fokker-Planck (3.5)

$$I = \int dX dP \mathcal{P}(X, P) \mathcal{I}(X), \tag{3.11}$$

pour obtenir le courant moyen  $I$  transitant dans le résonateur suspendu.

### 3.3 Régime de transport résonant

Dans le cadre du régime de conduction résonant, l'occupation moyenne  $n_0(x)$ , et par conséquent les coefficients de dissipation  $\eta(x)$  et de fluctuation  $D(x)$  de l'équation de Fokker-Planck changent de forme. Leur obtention relève de l'emploi de la théorie de la fonctionnelle d'influence (voir détails en annexe B). On trouve (voir annexe (C)) :

$$\begin{aligned}
\eta(X) &= \frac{F_e^2 \hbar^3 \Gamma}{4\pi} \sum_a \Gamma_a \frac{1}{((\mu_a - \epsilon_d)^2 + (\frac{\hbar\Gamma}{2})^2)^2}, \\
D(X) &= \frac{2F_e^2 \Gamma_L \Gamma_R}{\Gamma^3 \pi} \left[ \Theta(\mu_R - \mu_L) \left[ \frac{\arctan(y)}{2} + \frac{y}{2(1+y^2)} \right] \frac{2(\mu_R - \epsilon_d)}{\hbar\Gamma} \right. \\
&\quad \left. + \Theta(\mu_L - \mu_R) \left[ \frac{\arctan(y)}{2} + \frac{y}{2(1+y^2)} \right] \frac{2(\mu_L - \epsilon_d)}{\hbar\Gamma} \right]
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Dans la limite des basses températures, avec  $\epsilon_d \equiv \epsilon(X) = F_e X - eV_g$  l'occupation moyenne se dérive directement de l'expression des opérateurs d'échelle du niveau quantique

isolé, et donné par le modèle d'Anderson (voir Sect.2.2). En effet,  $\nu_{k,a}$  et  $\alpha_{k,a}$  donnent accès à  $d$  et  $d^\dagger$ , et donc à  $\langle n_d \rangle$  s'écrivent :

$$\langle n_d \rangle = \sum_{k,a} |\nu_{k,a}|^2 f_a(\epsilon_k), \quad (3.13)$$

avec  $\epsilon_k$  l'énergie d'un électron des réservoirs, et

$$\nu_{k,a} = \frac{t_a^*}{\epsilon_k - \epsilon_d + i\frac{\hbar\Gamma}{2}}. \quad (3.14)$$

On trouve après injection de (3.14) dans (3.13),

$$\langle n_d \rangle_x = \sum_a \frac{\hbar\Gamma_a}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \frac{f_a(\epsilon)}{\left(\epsilon_k - \epsilon_d\right)^2 + \left(\frac{\hbar\Gamma}{2}\right)^2}. \quad (3.15)$$

A température nulle, l'expression (3.15) se réduit à

$$\langle n_d \rangle_x = \frac{1}{2} + \sum_a \frac{\Gamma_a}{\pi\Gamma} \arctan\left(2\frac{(\mu_a - \epsilon_d)}{\hbar\Gamma}\right). \quad (3.16)$$

En ce qui concerne le courant, soulignons que la conservation du courant  $\langle I \rangle$  implique  $\langle I_L \rangle = -\langle I_R \rangle$ . Le point de départ de l'obtention du courant gauche  $I_L$  est l'équation de Heisenberg. Avec  $N_L = \sum_k c_{k,L}^\dagger c_{k,L}$  l'opérateur représentant le nombre de fermions dans le réservoir gauche, on écrit

$$I_L = -e\dot{N}_L = -\frac{ie}{\hbar}[H, N_L]. \quad (3.17)$$

La suite du calcul relève de l'injection des différents termes de  $H$  dans le commutateur de l'éq.(3.17) :

$$I_L = \left(-\frac{ie}{\hbar}\right) \sum_k [t_{k,l} c_{k,l}^\dagger d - t_{k,l}^* d^\dagger c_{k,l}]. \quad (3.18)$$

En utilisant (2.9), on trouve :

$$\mathcal{I}(X) = \langle I_L \rangle = \frac{4e\Gamma_R\Gamma_L}{\hbar\Gamma} \left[ \arctan\left(\frac{eV - 2\epsilon_d}{\Gamma}\right) - \arctan\left(\frac{eV + 2\epsilon_d}{\Gamma}\right) \right]. \quad (3.19)$$

Il ne reste qu'à intégrer (3.19) pondérée par la densité de probabilité  $\mathcal{P}^{stat}$  sur l'espace des phases  $\{X, P\}$  au moyen de l'expression (3.11).

### 3.4 Echelle d'énergie caractéristique du problème

La résolution numérique de l'équation de Fokker-Planck (3.5) est une étape essentielle de cette étude. Ainsi que l'on procède habituellement en calcul scientifique, l'équation est adimensionnée afin de travailler dans un cadre débarrassé de toutes unités. Ceci s'effectue via l'introduction de variables sans dimensions dans les coefficients intervenant dans les expressions (3.5) et (3.12). On procède donc en se donnant une échelle d'énergie typique du problème que l'on traite et qui permet d'introduire une énergie adimensionnée. Le processus est ensuite répété pour les variables de position  $X$  et de moment linéaire  $P$ . Les grandeurs adimensionnées en terme d'énergie et de longueur sont (voir [5] et [7])

$$E_0 = \frac{F_e^2}{m\omega_0^2} \quad \text{et} \quad l = \frac{F_e}{m\omega_0^2}. \quad (3.20)$$

Il est ainsi possible de définir les pendants adimensionnés  $x$ ,  $\tau$ ,  $p$  de la position, du temps, et de l'impulsion :

$$\tau = \omega_0 t \quad , \quad x = \frac{X}{l} \quad \text{et} \quad p = \frac{P}{m\omega_0 l}. \quad (3.21)$$

L'adimensionnement se poursuit par  $\tilde{\alpha} = \alpha l^4/E_0$ ,  $v = V/E_0$ ,  $vg = V_g/E_0$  et  $\tilde{T} = k_b T/E_0$ . Puis, en introduisant les expressions (3.20) et (3.21) dans (3.5), on obtient l'équation de Fokker-Planck adimensionnée

$$\frac{\partial \mathcal{P}}{\partial \tau} = -p \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial x} - f_{\text{eff}}(x) \frac{\partial \mathcal{P}}{\partial p} + \left( \gamma(x) + \gamma_e \right) \frac{\partial p \mathcal{P}}{\partial x} + \left( \frac{d(x)}{2} + \gamma_e \tilde{T} \right) \frac{\partial^2 \mathcal{P}}{\partial p^2}. \quad (3.22)$$

En régime de couplage transport, nous avons

$$\begin{aligned} \gamma(x) &= -\frac{\omega_0}{\Gamma} \frac{\partial n_0(x)}{\partial x} \\ d(x) &= \frac{2\omega_0}{\Gamma} n_0(x) [1 - n_0(x)] \\ f_{\text{eff}}(x) &= \delta x - \tilde{\alpha} x^3 - n_0(x) \\ n_0(x) &= \frac{1}{\Gamma} \left[ \Gamma_L f_F \left( \frac{x - v_g - \mu_L}{\tilde{T}} \right) + \Gamma_R f_F \left( \frac{x - v_g - \mu_R}{\tilde{T}} \right) \right], \end{aligned} \quad (3.23)$$

avec les coefficients de dissipation  $\gamma(x)$ , de diffusion  $d(x)$ , l'occupation moyenne  $n_0(x)$  et la force effective  $f_{\text{eff}}(x)$  adimensionnées. De plus,  $\gamma_e$  représente la dissipation extrinsèque et  $\tilde{T} = k_b T/E_0$  la température du système. Dans le cas du régime de couplage résonant, l'équation de Fokker-Planck adimensionnée demeure l'expression (3.22). Avec introduction des variables sans dimensions  $\tilde{\Gamma} = \hbar \Gamma / 2E_0$  et  $\tilde{\omega}_0 = \hbar \omega_0 / 2E_0$ , nous avons

$$\begin{aligned}
\eta(X) &= \frac{\tilde{\omega}\tilde{\Gamma}^2}{8\pi} \sum_a \Gamma_a \frac{1}{((\mu_a - \epsilon_d)^2 + \tilde{\Gamma}^2)^2}, \\
D(X) &= \frac{\tilde{\omega}}{2\pi\tilde{\Gamma}} \left[ \Theta(\mu_R - \mu_L) \left[ \frac{\arctan(y)}{2} + \frac{y}{2(1+y^2)} \right] \frac{2(\mu_R - \epsilon_d)}{\tilde{\Gamma}} \right. \\
&\quad \left. + \Theta(\mu_L - \mu_R) \left[ \frac{\arctan(y)}{2} + \frac{y}{2(1+y^2)} \right] \frac{2(\mu_L - \epsilon_d)}{\tilde{\Gamma}} \right] \\
f_{eff}(x) &= \delta x - \tilde{\alpha}x^3 - n_0(x).
\end{aligned} \tag{3.24}$$

L'occupation moyenne en couplage fort devient, à basse température,

$$n_0(x) = \frac{1}{2} + \frac{1}{2\pi} \left( \arctan \left( \frac{(2(v_g - x) + v)}{\tilde{\Gamma}} \right) + \arctan \left( \frac{(2(v_g - x) - v)}{\tilde{\Gamma}} \right) \right). \tag{3.25}$$

Ce sont les jeux d'équations (3.22), (3.23) et (3.24), (3.25) qu'il faut résoudre numériquement dans le cas stationnaire afin d'obtenir la densité de probabilité stationnaire  $\mathcal{P}^{stat}$  nécessaire à l'obtention du courant.

# Chapitre 4

## Résultats

### 4.1 Approximation de champ moyen

On commence par regarder la forme de l'intensité  $I$  en fonction de  $v$  et de la tension de grille  $v_g$ , en négligeant les fluctuations  $\gamma_e$  induites par l'environnement ainsi que les fluctuations induites par le courant en supposant  $\omega_0/\Gamma \ll 1$ . Par conséquent, on a  $d(x) = \gamma(x) = 0$  en régime de transport séquentiel comme en régime résonant, voir (3.23) et (3.25). De plus, si l'on se place à la limite  $\tilde{T} \rightarrow 0$  ou  $\tilde{\Gamma} \rightarrow 0$  selon le type de couplage, l'occupation moyenne [cf (3.23) et (3.24)] devient pour une situation de couplage symétrique ( $\Gamma_L = \Gamma_R = \Gamma/2$ )

$$n_0(x) = \frac{1}{2} \left[ \Theta \left( -x + v_g + \frac{v}{2} \right) + \Theta \left( -x + v_g - \frac{v}{2} \right) \right]. \quad (4.1)$$

Dans ce cadre, on peut obtenir analytiquement le courant  $I$  en fonction de  $v$  et de  $v_g$ , et déterminer les régions dans lesquelles le courant  $I$  circule, et celles dans lesquelles se retrouve le blocage de Coulomb où  $I = 0$ , c'est-à-dire les diamants de Coulomb [1]. La Fig.4.1 reproduit les diamants de Coulomb pour différentes proximités  $\delta$  à l'instabilité d'Euler. Ils se dérivent en considérant que la densité de probabilité stationnaire  $\mathcal{P}^{stat}$  est une distribution de Boltzman fortement piquée sur le minimum global du potentiel effectif associé à la force effective  $f_{eff}(x)$ . La recherche de ce minimum entraîne un ensemble de conditions sur  $v$  et  $v_g$  donnant accès à la paramétrisation des frontières des régions bloqués, de la forme  $v_{\pm} = \pm 2v_g + C_{\pm}(\Delta v)$ , où  $\Delta v$  est appelé gap en tension (voir [5]). Les différentes valeurs des paramètres  $v_g$  et  $\Delta v$  en fonction de  $\delta$  sont donnés dans l'annexe C, et permettent d'en reproduire les diamants. On constate dans la Fig.4.1 que le blocage du courant est maximal à l'instabilité d'Euler, où  $\delta = 0$  et  $F = F_c$ .

### 4.2 Incidence sur le courant des fluctuations en régime séquentiel

Dans cette section, on s'intéresse au rôle des fluctuations en régime de transport séquentiel. Il s'agit d'une part de vérifier notre code numérique avec pour test la reproduction de certains résultats de [5], puis de se rendre compte de l'élargissement de la zone de

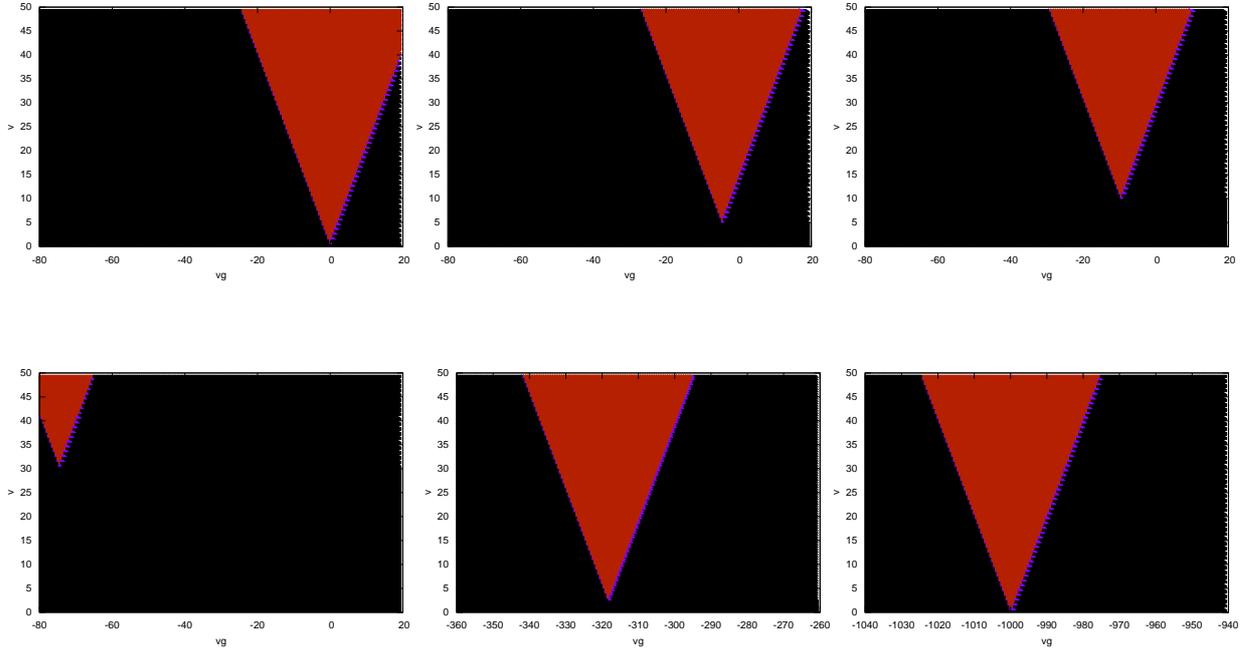


FIGURE 4.1 – Reproduction des diamants de Coulomb en régime séquentiel de [5], avec  $\tilde{\alpha} = 10^{-6}$ ,  $\Gamma_R = \Gamma_L = \Gamma/2$  et (de haut en bas et de gauche à droite)  $\delta = -1$ ,  $\delta = -0.1$ ,  $\delta = -0.05$ ,  $\delta = 0$ ,  $\delta = 0.1$ , et  $\delta = 1$ . Les zones noires et rouges correspondent à un courant  $I = 0$  et  $I = e\Gamma/4$ , respectivement.

conduction de  $I$  vers les régions bloquées, en regardant le profil du courant en fonction de la tension  $v$ . Les détails relatifs à la résolution numérique de l'équation de Fokker-Planck sont donnés en D. Le blocage du courant est retrouvé (voir Fig.4.2) à une tension  $v = \Delta_v$  aux grandes dissipations extrinsèques  $\gamma_e = 10^{-2}$ , et s'atténue pour des environnements de plus en plus petits ( $\gamma_e \rightarrow 0$ ).

### 4.3 Incidence sur le courant des fluctuations en régime résonant

La résolution de l'équation de Fokker-Planck s'effectue au moyen de la même méthode utilisée afin de reproduire les résultats de [5] en régime séquentiel (voir annexe B). On se restreint uniquement à la situation d'un couplage symétrique  $\Gamma_L = \Gamma_R = \Gamma/2$  et au biais en tension  $\mu_L = -\mu_R = eV/2$ .

En régime résonant, le paramètre  $\tilde{\Gamma}$  joue un rôle similaire à la température  $\tilde{T}$  du régime séquentiel sur la forme des courbes représentant l'intensité en fonction de la tension appliquée  $v$ , en unité du gap en tension  $\Delta_v$ , et annulent le blocage du courant aux petits  $v$  dans la limite des grands  $\tilde{T}$  en séquentiel et  $\tilde{\Gamma}$  en résonant. Une interprétation possible est que les fluctuations induites en tension par le passage du courant dans le nanotube ont plus d'incidence sur l'intensité  $I$  que les processus électroniques alors ignorés par le régime

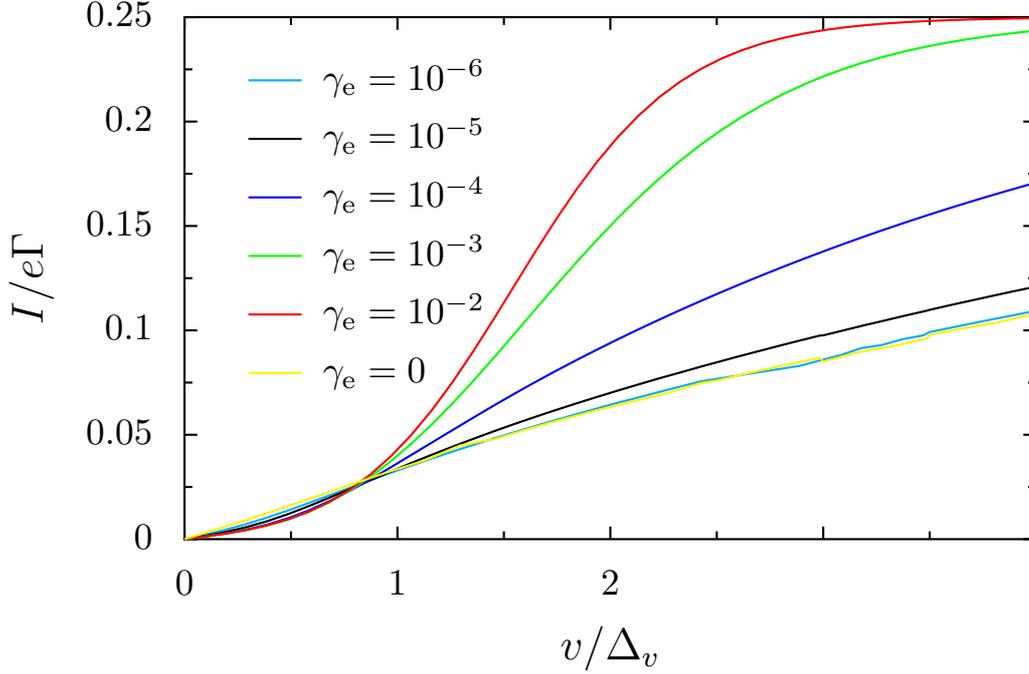


FIGURE 4.2 – Courant en régime séquentiel à l’apex du diamant de Coulomb (voir réf.[5]), représenté en fonction de la dissipation  $\gamma_e$  due à l’environnement avec  $\delta = 0$ ,  $\tilde{\alpha} = 10^{-6}$ ,  $\omega_0/\Gamma = 10^{-2}$ , et  $\tilde{T}/\Delta_v = 0.1$ .

de couplage séquentiel.

Le profil du courant  $I$  en fonction de  $v$  (voir Fig.4.2 en couplage faible ainsi que Fig.4.3 et Fig.4.4) en couplage fort) présente des déviations par rapport aux calculs à la limite basse température. L’explication réside dans les fluctuations induites par l’augmentation de la température  $\tilde{T}$ . Celle-ci permet au système d’explorer des régions de l’espace des phases plus larges que les alentours du puits de potentiel dans lequel il est confiné à  $\tilde{T} \ll 1$ , et se retrouver sur des secteurs de  $v_{eff}(x)$  menant à des minimums de potentiels locaux. Ainsi, et si le minimum global n’est pas conducteur à une tension donnée (voir Fig.4.3 à  $v/\Delta_v \leq 1$ ), on observe une augmentation progressive de  $I$ . En revanche, si le minimum global est conducteur (voir Fig.4.3 à  $v/\Delta_v \geq 1$ ), alors une baisse progressive du courant vers  $v = \Delta_v$  se fait sentir. Ces fluctuations sont tributaires de l’intensité du couplage, et valables en régime de transport séquentiel comme en résonant (voir Fig.4.2 et 4.3).

Les variations du potentiel effectif  $v_{eff}(x)$  sont données en Fig.4.5 pour différentes valeurs de la tension  $v/\Delta_v = 0.2$ ,  $v/\Delta_v = 1.0$  et  $v/\Delta_v = 1.8$ . Elles illustrent les dispositions relatives de la région la plus stable ainsi que des deux autres minima locaux dont l’exploration par le système est reliée à l’augmentation de  $\tilde{T}$ . La Fig.4.6 permet d’apprécier les évolutions de la fenêtre de conduction du courant  $I$  en fonction du minimum global du potentiel effectif du système.

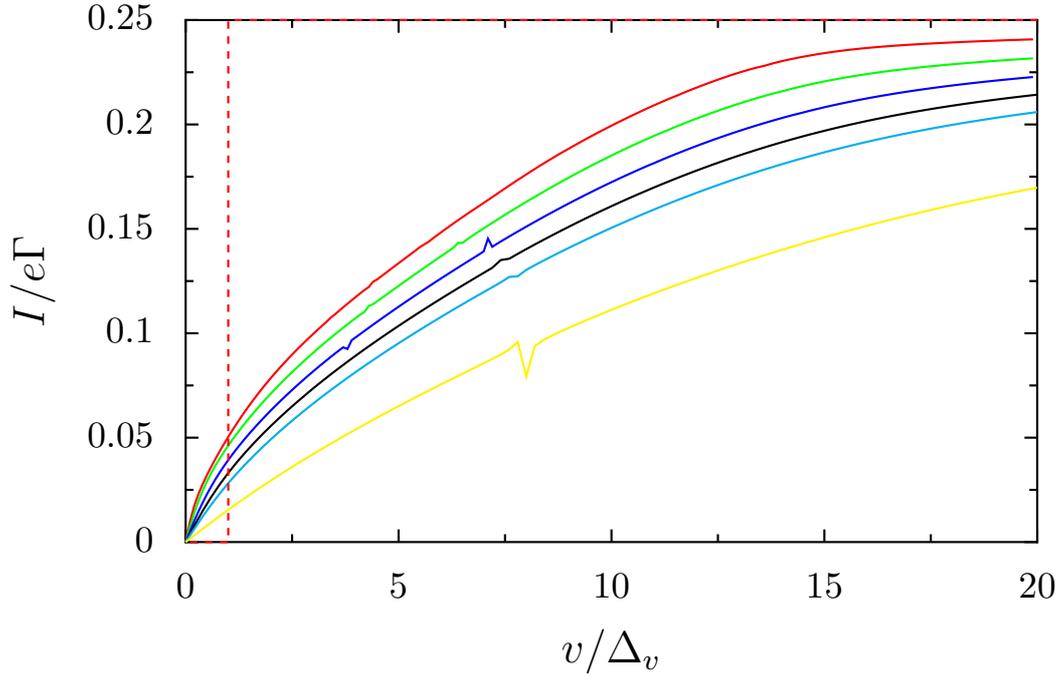


FIGURE 4.3 – Courant en régime résonant à l'apex du diamant de Coulomb, représenté pour différents couplages  $\tilde{\Gamma}$  (rouge en pointillé :  $\tilde{\Gamma} = 0$ , rouge en continue :  $\tilde{\Gamma} = 1$ , vert :  $\tilde{\Gamma} = 2$ , bleu foncé :  $\tilde{\Gamma} = 3$ , noir :  $\tilde{\Gamma} = 4$ , bleu clair :  $\tilde{\Gamma} = 5$ , jaune :  $\tilde{\Gamma} = 10$ , et rose :  $\tilde{\Gamma} = 10^{-1}$ ), avec  $\delta = 0$ ,  $\tilde{\alpha} = 10^{-6}$ ,  $\tilde{\omega}_0 = 10^{-3}$  et  $\tilde{T}/\Delta_v = 0.1$ .

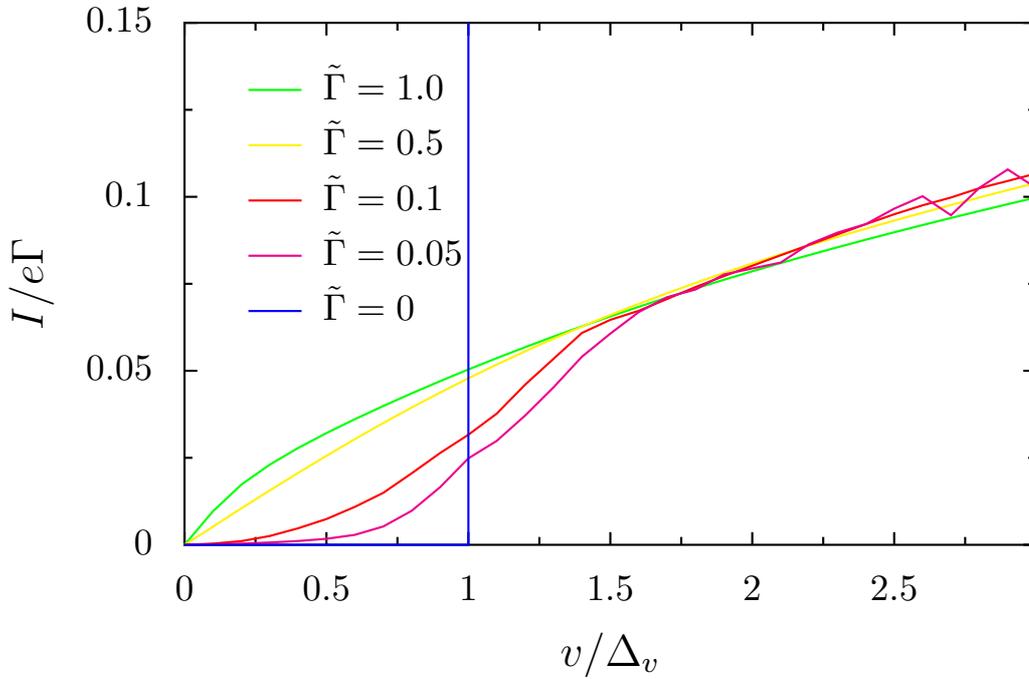


FIGURE 4.4 – Courant en régime résonant à l'apex du diamant de Coulomb, représenté pour différents couplages  $\tilde{\Gamma}$ , avec  $\delta = 0$ ,  $\tilde{\alpha} = 10^{-6}$ ,  $\tilde{\omega}_0 = 10^{-3}$  et  $\tilde{T}/\Delta_v = 0.1$ .

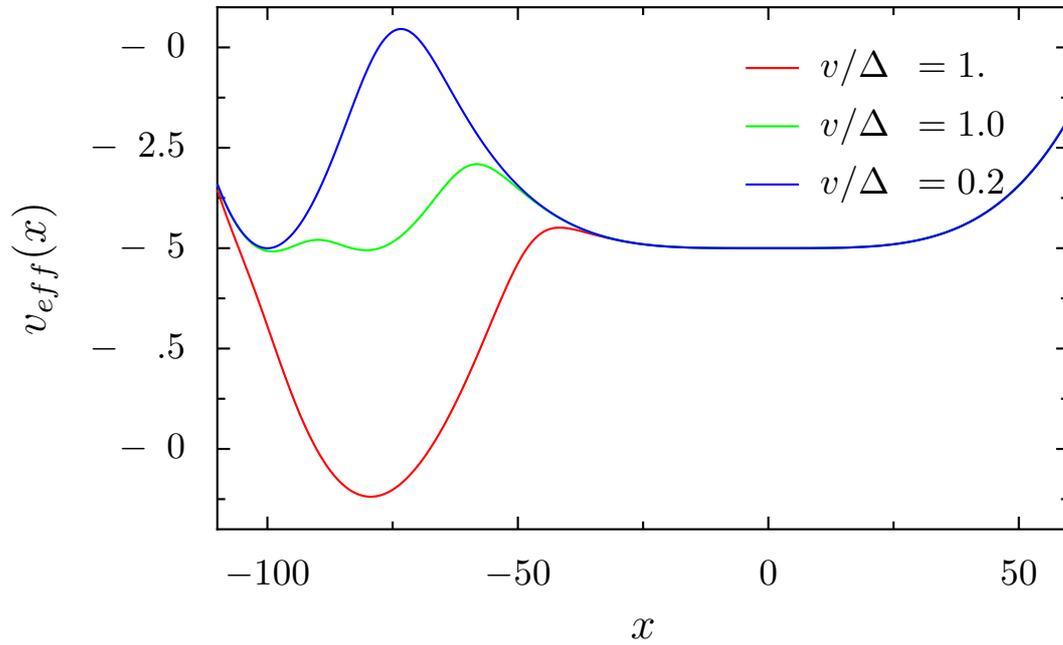


FIGURE 4.5 – Potentiel effectif  $v_{eff}$  en fonction du déplacement  $x$ , avec  $\delta = 0$ ,  $\tilde{\alpha} = 10^{-6}$ ,  $\tilde{\omega}_0 = 10^{-3}$ ,  $v_g = -3/4(\tilde{\alpha}^{1/3})$  et  $\tilde{T}/\Delta_v = 0.1$ .

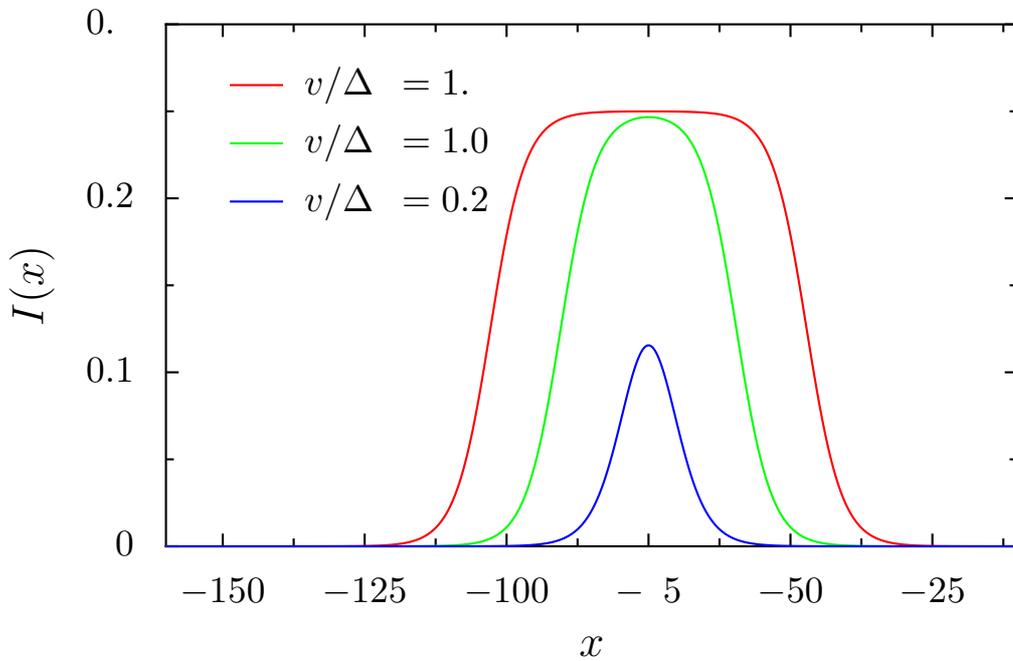


FIGURE 4.6 – Courant électrique  $I$  en fonction du déplacement  $x$ , avec  $\delta = 0$ ,  $\tilde{\alpha} = 10^{-6}$ ,  $\tilde{\omega}_0 = 10^{-3}$ ,  $v_g = -3/4(\tilde{\alpha}^{1/3})$  et  $\tilde{T}/\Delta_v = 0.1$ .

# Chapitre 5

## Conclusion

Ce mémoire a présenté de manière théorique un moyen capable d'augmenter le blocage du courant dans les NEMS couplés capacitivement à un transistor à un électron (SET). En amenant le résonateur à l'instabilité d'Euler, l'îlot central présente un flambage modifiant sa fréquence de vibration fondamentale et réduisant la fenêtre de conduction du courant.

Il a été établi que pour un régime de conduction résonant, c'est-à-dire en considérant un couplage entre un SET et un nanorésonateur fort, le blocage du courant prédit par [4] n'est pas annulé. En effet, en dépit de la considération de tous les processus de transport des électrons possibles dans l'élaboration des équations du mouvement, qu'il s'agisse de sauts énergétiquement accessibles ou bien d'interactions avec des niveaux d'énergies vides de l'îlot, le blocage du courant reste présent.

La mesure des effets sur le courant d'une force de compression appliquée à un NEMS couplé capacitivement à un SET puis amené par compression à proximité de l'instabilité d'Euler serait un moyen de se prononcer sur la pertinence de ces prédictions. Cependant, la sensibilité que requiert un tel dispositif expérimental est à l'heure actuelle hors de la portée des appareils dont on dispose.

# Annexe A

## Hamiltonien vibrationnel effectif du système avec instabilité d'Euler

Cette annexe vise à donner les étapes détaillées relatives à l'obtention de la partie vibrationnelle du hamiltonien du résonateur suspendu. On se base sur la situation décrite dans la sous-section 2.1 et reportée sur la Fig.A.1. Soit un élément différentiel d'abscisse curviligne  $ds$ , de projection  $dh$  et  $du$  sur les axes  $(Oh)$  et  $(Ou)$ . Enfin,  $F$  désigne la force de compression exercée sur le tube et  $u_{max}$  le maximum de la projection orthogonale sur l'axe des abscisses du tube comprimé.

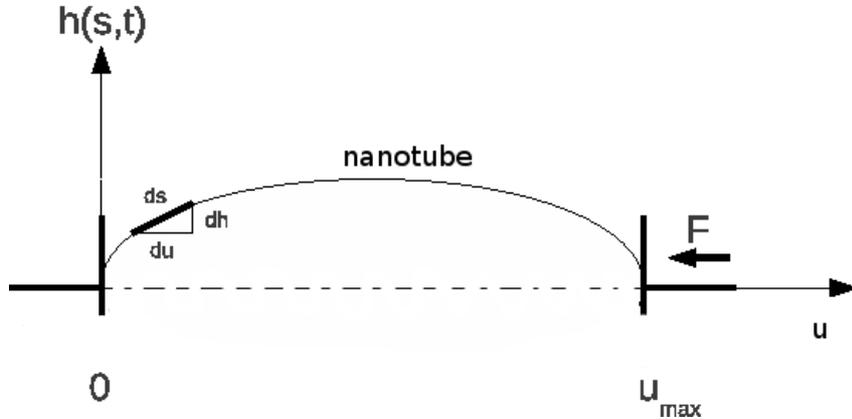


FIGURE A.1 – Description du système de coordonnées dont est muni le nanotube de carbone. Afin d'étudier ce système physique, on en écrit le Lagrangien (voir [6])

$$\mathcal{L} = \mathcal{T} - \mathcal{V} \quad (\text{A.1})$$

donné par la différence des termes cinétiques  $\mathcal{T}$  et potentiels  $\mathcal{V}$  de l'énergie. Le terme potentiel  $\mathcal{V} = \mathcal{V}_b + \mathcal{V}_F$  est scindé en deux composantes rendant respectivement compte de l'énergie de courbure et de la compression. En notant  $\hat{t} = (u', h')$  le vecteur unitaire tangent au nanotube avec  $u'$  et  $h'$  les dérivées de  $u$  et de  $h$  par rapport à l'abscisse curviligne  $s$ , et en utilisant le théorème de Pythagore entre les projections de  $ds$ , on peut redéfinir les composantes de  $\hat{t}$  et de sa dérivée première par rapport à  $s$ ,  $(d\hat{t}/ds) = (u'', h'')$ . Notons enfin les définitions suivantes :

$$\begin{aligned}
\mathcal{T} &= \frac{\sigma}{2} \int_0^L ds \dot{h}^2(s, t), \\
\mathcal{V}_b &= \frac{\kappa}{2} \int_0^L ds \left| \frac{d\hat{t}}{ds} \right|^2, \\
\mathcal{V}_F &= -F(L - u_{max}).
\end{aligned} \tag{A.2}$$

Il est alors possible d'injecter les expressions (A.2) et des coordonnées de  $\hat{t}$  dans (A.1), et d'obtenir le lagrangien vibrationnel

$$\mathcal{L} = \frac{\sigma}{2} \int_0^L ds \dot{h}^2 - \frac{\kappa}{2} \int_0^L ds \frac{h''^2}{1 - h'^2} + F \int_0^L ds (1 - \sqrt{1 - h'^2}). \tag{A.3}$$

Etant donné que l'on considère uniquement de petits déplacements  $|h'| \ll 1$  en terme de déformation du tube, il est judicieux de développer (A.3) au premier ordre non nul en  $h$  et en ses dérivées par rapport à  $s$ . Dans cette approximation harmonique, on trouve

$$\mathcal{L} \approx \int_0^L ds \left( \frac{\sigma}{2} \dot{h}^2 - \frac{\kappa}{2} h''^2 + \frac{F}{2} h'^2 \right). \tag{A.4}$$

La technique employée ensuite est la variation fonctionnelle au premier ordre, c'est-à-dire le calcul  $\delta X = X[h + \delta h, \dot{h} + \delta \dot{h}, t] - X[h, \dot{h}, t]$  pour chaque terme de l'action  $S = \int_{t_1}^{t_2} dt \mathcal{L}(h, \dot{h}, t)$ . Avec les conditions de déplacements du tube et via intégrations par parties successives par rapport à  $h'$ ,  $h''$  et  $h'''$ , on met en évidence l'équation différentielle du déplacement vertical  $h(s, t)$  du tube

$$\sigma \ddot{h} + \kappa h'''' + F h'' = 0. \tag{A.5}$$

La relation de dispersion s'obtient en considérant la solution  $h(s, t)$  de (A.3) par son développement de Fourier de la forme  $e^{i(\omega_n t - q_n s)}$  dans une base de fonctions orthogonale  $\{f_n(s)\}$ . En exprimant les dérivées spatiales et temporelles en fonction de  $h$ , il est possible d'avoir accès aux modes propres de vibrations. En séparant pour chaque modes  $n$  partie temporelle  $X_n(t)$  et spatiale  $g_n(s)$  de  $h_n(s, t) = g_n(s)X_n(t)$ , on a l'expression de la pulsation d'un mode  $n$

$$\omega_n^2 = \frac{\kappa}{\sigma} q_n^2 \left( q_n^2 - \frac{F}{\kappa} \right). \tag{A.6}$$

Le premier harmonique  $n=1$  de (A.5) est nulle pour une force critique  $F_c$

$$F_c = \kappa q_1^2. \tag{A.7}$$

Elle s'exprime en fonction du module de rigidité  $\kappa$  du tube ainsi que du premier mode propre  $q_1$  de vibration. La forme définitive de  $\mathcal{L}$  est similaire à celle de Landau-Ginzburg (voir [6]). Lorsque la force de compression axiale  $F$  sur le nanotube est supérieur à la force critique  $F_c$

d'Euler, alors le mode de vibration fondamental  $\omega_1$  est instable. En développant à l'ordre quartique les termes contenant des dérivées de  $h$  par rapport à  $s$  petits devant 1 du lagrangien (A.3), et en se restreignant à la première solution en mode  $h = h_1(s, t) = g_1(s)X_1(t)$ . En introduisant ces développements dans (A.2), alors, en identifiant les coefficients pondérants les termes d'exposants paires de  $X$  et de  $\dot{X}$  afin de conférer au lagrangien approximé la forme d'une somme de termes à la dimension d'une énergie

$$\mathcal{L} = \frac{m}{2}\dot{X}^2 - \frac{m\omega^2}{2}X^2 - \frac{\alpha}{4}X^4, \quad (\text{A.8})$$

avec

$$m = \sigma \int_0^L ds g_1^2 \quad (\text{A.9})$$

la masse effective du mode de flexion fondamental, et

$$\alpha = \int_0^L ds \left( 2\kappa g_1''^2 g_1'^2 - \frac{F_c}{2} g_1'^4 \right) \quad (\text{A.10})$$

le paramètre d'anharmonicité. L'hamiltonien vibrationnel effectif est ensuite donné par la transformée de Legendre de du langrangien  $H(q, \dot{q}; t) = \dot{q}p - \mathcal{L}(q, \dot{q}; t)$ , ce qui donne le Hamiltonien (2.2).

## Annexe B

# Dérivation de l'équation de Langevin en régime de couplage résonant

Cette annexe vise à expliciter les étapes importantes mentionnées dans la section 3.2 portant sur la dérivation de l'équations de Fokker-Planck en régime de couplage résonant. Le point de départ de leur établissement est l'écriture de la matrice densité  $\rho(t)$  en représentation de Heisenberg du système considéré, avec un branchement adiabatique du couplage [10]. Ceci s'écrit :

$$\rho(t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)}\rho(t_0)e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \quad \text{avec} \quad \rho(t_0) = \rho_{vib}(t_0) \otimes \rho_{SET}(t_0). \quad (\text{B.1})$$

On a séparé le terme stationnaire  $\rho_e(t) = \rho_e(t_0) \propto e^{-\beta(H_e - \sum_a \mu_a N_a)}$  correspondant à l'environnement extrinsèque, c'est-à-dire des éléments du SET. Ainsi, la composante qui nous intéresse est  $\rho_{vib}(t) = \text{tr}_e[\rho(t)]$ , encore appelée matrice densité réduite. Le passage en représentation position de (B.1),

$$\rho_v(q, q', t) = \int \int dq_0 dq'_0 J(q, q', t; q_0, q_0, t_0) \rho_v(q_0, q_0, t_0), \quad (\text{B.2})$$

permet de mettre en évidence le propagateur  $J$  de la matrice densité, et l'on a

$$J(q, q', t; q_0, q_0, t_0) = \text{tr}_e \left[ \rho_e(t) \left\langle q'_0 \left| e^{\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \right| q' \right\rangle \left\langle q \left| e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} \right| q_0 \right\rangle \right]. \quad (\text{B.3})$$

La suite consiste à écrire les propagateurs de (B.3) avec le formalisme de Feynman<sup>1</sup>, c'est-à-dire en exprimant les propagateurs sous forme d'intégrales de chemins. On commence par introduire  $\Delta t = (t - t_0)/N$  de manière à ce que

$$e^{-\frac{i}{\hbar}H(t-t_0)} = \lim_{N \rightarrow +\infty} e^{-\frac{i}{\hbar}HN\Delta t} = \lim_{N \rightarrow +\infty} \left( e^{-\frac{i}{\hbar}H\Delta t} \right)^N. \quad (\text{B.4})$$

En considérant les propagateurs en représentation position, et en insérant  $N - 1$  fois la relation de fermeture sous sa forme intégrale, on obtient ensuite

---

1. Voir annexe A "Path integral representation of the reduced density matrix" de la réf.[11].

$$\left\langle q \left| e^{-\frac{i}{\hbar} H(t-t_0)} \right| q_0 \right\rangle = \int dq_1 \dots dq_{N-1} \prod_{j=1}^N \left\langle q_j \left| \lim_{N \rightarrow +\infty} e^{-\frac{i}{\hbar} H \Delta t} \right| q_{j-1} \right\rangle. \quad (\text{B.5})$$

Chacun des crochets se traite en y injectant l'Hamiltonien  $H = H_{SET} + H_{vib} + H_c$ . La relation de Campbell-Hausdorff-Baker permet de dire pour tout  $j$ ,

$$\left\langle q_j \left| e^{-\frac{i}{\hbar} H \Delta t} \right| q_{j-1} \right\rangle = \left\langle q_j \left| e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t (p^2/2M)} \right| q_{j-1} \right\rangle e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t (V_0(q) + H_e + H_c)}, \quad (\text{B.6})$$

ainsi il reste qu'à transformer la partie cinétique des propagateurs. On utilise les définitions  $\langle q_j | p \rangle = e^{\frac{i}{\hbar} p q_j} / \sqrt{2\pi\hbar}$  et  $\langle p' | q_{j-1} \rangle = e^{-\frac{i}{\hbar} p' q_{j-1}} / \sqrt{2\pi\hbar}$  de [12], avant de compléter les carrés de l'argument de l'exponentielle :

$$\left\langle q_j \left| e^{\frac{i}{\hbar} \Delta t \left( \frac{p^2}{2M} \right)} \right| q_{j-1} \right\rangle = \sqrt{\frac{M}{2i\pi\hbar\Delta t}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{M\Delta t}{2} \left( \frac{q_j - q_{j-1}}{\Delta t} \right)^2}. \quad (\text{B.7})$$

Ainsi, chacune des deux composantes du propateur  $J$  de la matrice densité réduite donne

$$\begin{aligned} \left\langle q \left| e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t H(t-t_0)} \right| q_0 \right\rangle &= \lim_{N \rightarrow +\infty} \sqrt{\frac{M}{2i\pi\Delta t}} \int \left[ \prod_{j=0}^{N-1} dq_j \sqrt{M 2i\pi\Delta t} \right] \times \\ &e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{k=0}^{N-1} \Delta t \left[ \frac{M}{2} \left( \frac{q_{j+1} - q_j}{\Delta t} \right)^2 - (V_0(q_j) - H_e - H_c) \right]} \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

Puis, avec  $q = q(s)$  et en introduisant l'élément différentiel fonctionnel

$$D[q(s)] = \sqrt{\frac{\pi\Delta t}{2i\pi(q_{j+1} - q_j)}}, \quad (\text{B.9})$$

ainsi que le produit ordonné  $\mathcal{T}$ , nous avons

$$\left\langle q \left| e^{-\frac{i}{\hbar} \Delta t H(t-t_0)} \right| q_0 \right\rangle = \int_{q(t_0)}^{q(t)} D[q(s)] e^{\frac{i}{\hbar} S_v[q(s)]} \mathcal{T} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds [H_e(\dot{q}(s)) + H_c(q(s))]} \quad (\text{B.10})$$

La dernière étape du développement ci-dessus consiste à remarquer que  $S_v[q]$  est l'action de vibration du nanotube, définie par

$$S_v[q] = \int_{t_0}^t ds \left[ \frac{M}{2} \dot{q}^2(s) - V_0(q(s)) \right], \quad (\text{B.11})$$

avec  $V_0$  l'énergie potentielle du résonateur non-couplé. Nous pouvons réarranger le propagateur de la matrice densité réduite (B.3) tel que

$$J(q, q', t; q_0, q'_0, t) = \int_{q'(t_0)}^{q'(t)} Dq' \int_{q(t_0)}^{q(t)} Dq e^{-\frac{i}{\hbar} [S_v[q'(s)] - S_v[q(s)]]} \text{tr}_e \rho_e(t) \times \underbrace{\tilde{\mathcal{T}} e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds [H_e(q'(s)) + H_c](q'(s))}}_{U_{[q'(s)](t, t_0)}^\dagger} \times \underbrace{\mathcal{T} e^{+\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds [H_e(q(s)) + H_c](q(s))}}_{U_{[q(s)](t, t_0)}}, \quad (\text{B.12})$$

et

$$J(q, q', t; q_0, q'_0, t) = \int_{q_0}^q D[q] \int_{q'_0}^{q'} D[q'] F[q, q'] e^{\frac{i}{\hbar} (S_v[q] - S_v[q'])}. \quad (\text{B.13})$$

Dans l'équation (B.14),  $F[q, q']$  est appelée fonctionnelle d'influence (voir [13]), et s'écrit :

$$F[q, q'] = \text{tr}_e \left[ \rho_e(t_0) U_{[q'(s)]}^\dagger(t, t_0) U_{[q(s)]}(t, t_0) \right] \quad (\text{B.14})$$

On effectue le changement de variables [13] donné par l'introduction de la trajectoire classique<sup>2</sup>  $x = (q + q')/2$  et des fluctuations quantiques  $y = (q - q')$ , si bien que  $q = x + y/2$  et  $q' = x - y/2$ . Le point de départ sont les équations d'évolutions des opérateurs  $U_{q(s)}^{(\dagger)}(t, t_0)$ . En posant  $U_{[q(s)]}^{(\dagger)}(t, t_0) = U_{[x(s)]}(t, t_0) \bar{U}(t, t_0)$  et en les injectant dans l'équation de Heisenberg, nous obtenons

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \bar{U}(t, t_0) = [H, \bar{U}(t, t_0)]. \quad (\text{B.15})$$

Le développement de la partie couplage  $H_c$  de l'Hamiltonien donne

$$H_c(x + y/2) = H_c(x) + \frac{y}{2} H_c'(x) + \frac{1}{2} \left( \frac{y}{2} \right)^2 H_c''(x) + O(y^3), \quad (\text{B.16})$$

puis, injectant  $H = H_c + H_e(x(s))$  dans (B.15) et en simplifiant convenablement, on a

$$i\hbar \dot{\bar{U}}(t, t_0) = -U_{[x(s)]}^\dagger(t, t_0) H_c(x(s)) U[x(s) + y(s)/2](t, t_0) + U_{[x(s)]}^\dagger(t, t_0) H_c(x(s)) U[x(s) + y(s)/2](t, t_0). \quad (\text{B.17})$$

En représentation interaction, l'opérateur unitaire s'écrit :

$$\bar{U}(t, t_0) = \mathcal{T} e^{-\frac{i}{2\hbar} \int_{t_0}^t ds \left[ y(s) \tilde{H}'_c + \left( \frac{y(s)}{2} \right)^2 \tilde{H}'(x'(s)) \right]}. \quad (\text{B.18})$$

---

2. Notons que  $x$  désigne le déplacement  $X$  du tube, noté ici par  $x \equiv X$

On recommence les étapes (B.15) à (B.18) pour l'opérateur transposé  $U^\dagger(t_0, t)$  si bien que la fonctionnelle d'influence (B.14) peut alors s'exprimer sous la forme

$$F[x(s), y(s)] = \text{tr}_e \left[ \rho_e(t_0) \tilde{\mathcal{T}} e^{-\frac{i}{2\hbar} \int_{t_0}^t ds \left[ y(s) \tilde{H}'_c - \left( \frac{y(s)}{2} \right)^2 \tilde{H}'(x's) \right]} \mathcal{T} e^{-\frac{i}{2\hbar} \int_{t_0}^t ds \left[ y(s) \tilde{H}'_c + \left( \frac{y(s)}{2} \right)^2 \tilde{H}'(x's) \right]} \right]. \quad (\text{B.19})$$

On continue à développer les arguments des exponentielles des intégrales de chemin à l'ordre quadratique en fluctuations  $y(s)$ <sup>3</sup>, d'où

$$\begin{aligned} \mathcal{T} e^{-\frac{i}{2\hbar} \int_{t_0}^t ds \left[ y(s) \tilde{H}'_c + \left( \frac{y(s)}{2} \right)^2 \tilde{H}'(x's) \right]} &\approx 1 - \frac{i}{2\hbar} \int_{t_0}^t ds \left[ y(s) \tilde{H}'_c + \left( \frac{y(s)}{2} \right)^2 \tilde{H}'(x's) \right] \\ &\quad - \left( \frac{1}{2\hbar} \right)^2 \int_{t_0}^t ds \int_{t_0}^s du y(s) y(u) \tilde{H}'_c(x(s)) \tilde{H}'_c(x(u)). \end{aligned} \quad (\text{B.20})$$

Enfin, en resumant le développement limité (procédé de réexponentiation), il vient

$$\begin{aligned} F[x(s), y(s)] &= \exp \left[ -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds y(s) \langle \tilde{H}'_c(x(s)) \rangle \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t ds \int_{t_0}^s du y(s) y(u) \Re \left\{ \langle \tilde{H}'_c(x(s)) \tilde{H}'_c(x(u)) \rangle - \langle \tilde{H}'_c(x(s)) \rangle \langle \tilde{H}'_c(x(u)) \rangle \right\} \right]. \end{aligned} \quad (\text{B.21})$$

Attachons-nous à expliciter les termes linéaires et quadratiques en  $\tilde{H}'_c$  de l'argument de la fonctionnelle d'influence  $F[x(s), y(s)]$ . Le terme linéaire  $\langle \tilde{H}'_c(x(s)) \rangle = h'(x(s)) \langle \tilde{n}_d(x(s)) \rangle$  avec  $\langle \tilde{n}_d(x(s)) \rangle = \text{tr}_e(n_d \rho_e^{[x(s)]})$  et en y insérant  $\rho_e^{[x(s)]}(t)$  en représentation interaction. Si l'on suppose que  $x$  est fixé, alors on peut montrer que  $H_e + H_c(x) = H_e(x)$  donc que  $\rho_e(t_0) = \rho_e^x(t_0)$  est la matrice densité à l'équilibre pour un  $x$  donné. Puis, en écrivant  $x(s) = x(t) + \delta x(s)$  et en revenant à la représentation de Schroedinger, on a l'expression du terme linéaire en  $\tilde{H}'_c$ . Il présente deux composantes reliées à la force  $\langle n_d \rangle_{x(s)}$  et à la friction  $\dot{x}(s)$

$$\begin{aligned} -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds y(s) \langle \tilde{H}'_c(x(s)) \rangle &= -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds y(s) h'(x(s)) \langle n_d \rangle_{x(s)} \\ &\quad - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t ds \int_{t_0}^s du (u-s) y(s) \dot{x}(s) h'^2(x(s)) \langle [n_d(x(s)), n_d(x(u))] \rangle \end{aligned} \quad (\text{B.22})$$

En ce qui concerne le terme quadratique, on considère toujours  $\rho_e^{[x(s)]}$  à  $x$  fixé, d'où  $\langle \tilde{H}'_c(x(s)) \tilde{H}'_c(x(u)) \rangle \approx h'(x(s)) h'(x(u)) \langle n_d(s) n_d(u)_{x(s)} \rangle$ . D'où l'écriture simplifiée

3. Il s'agit d'effectuer un développement de Taylor de chaque produit  $\mathcal{T}$  au deuxième ordre, et d'utiliser la relation  $\int_{t_0}^t \int_{t_0}^t ds du [f(s)f(u)\theta(s-u) + f(u)f(s)\theta(u-s)] = 2 \int_{t_0}^t ds \int_{t_0}^t du f(s)f(u)$  avec  $f(s) = \tilde{H}'_c(x(s))$ .

$$J(q, q', t; q_0, q'_0, t) = \int_{q_0}^q D[q] \int_{q'_0}^{q'} D[q'] e^{\frac{i}{\hbar} \Sigma[x, y]}, \quad (\text{B.23})$$

avec  $\Sigma[x, y]$  l'action effective linéarisée au deuxième ordre :

$$\begin{aligned} \Sigma[x, y] = & \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds y(s) h'(x(s)) \langle n_d \rangle_{x(s)} \right. \\ & - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t ds \int_{t_0}^s du (u-s) y(s) \dot{x}(s) h'^2(x(s)) \langle [n_d(x(s)), n_d(x(u))] \rangle \\ & \left. - \frac{1}{\hbar^2} \int_{t_0}^t ds \int_{t_0}^s du y(s) y(u) h'(x(s)) h'(x(u)) (\langle \{n_d(s), n_d(u)\} \rangle_{x(s)} - 2 \langle n_d \rangle_{x(s)} \langle n_d \rangle_{x(u)}) \right) \end{aligned} \quad (\text{B.24})$$

Il suffit pour finir d'inclure la définition de l'action effective (B.24) et d'identifier la force effective  $F_{eff}(x(s)) = -V'(x(s)) - h'(x(s)) \langle n_d \rangle_{x(s)}$  :

$$\begin{aligned} \Sigma[x, y] = & \int_{t_0}^t ds \left( m \dot{x}(s) \dot{y}(s) + y(s) F_{eff}(x(s)) \right) \\ & + \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t ds \int_{t_0}^s du \left( (u-s) y(s) \dot{x}(s) [h'(x(s))]^2 \langle \{n_d(s), n_d(u)\} \rangle_{x(s)} \right. \\ & \left. + y(s) y(u) h'(x(s)) h'(x(u)) (\langle \{n_d(s), n_d(u)\} \rangle_{x(s)} - 2 \langle n_d \rangle_{x(s)} \langle n_d \rangle_{x(u)}) \right) \end{aligned} \quad (\text{B.25})$$

La dernière étape consiste à appliquer la transformation de Stratonovitch-Hubbard [14] définie par

$$e^{-\frac{y^2}{2}} = \sqrt{\frac{1}{2\pi a}} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{\zeta^2}{2D} - i\zeta y} D\zeta \quad (\text{B.26})$$

à (B.25) afin de se débarrasser de la partie linéaire en  $y$ . Finalement, on a mis en évidence un terme dans l'argument de l'exponentielle qui s'annule nécessairement. En incluant au raisonnement la dissipation extrinsèque  $\eta_e$ , on trouve ainsi l'équation de Langevin (3.3) en couplage fort.

# Annexe C

## Coefficients de l'équation de Fokker-Planck en régime résonant

Cette annexe donne les étapes de la dérivation des coefficients de l'équation de Fokker-Planck en régime résonant (3.12). Le formalisme utilisé reste le même, tandis que le point de départ est la fonction de corrélation  $K(\tau)$  définie par

$$K(\tau) = \langle n_d(\tau)n_d(0) \rangle - \langle n_d(\tau) \rangle \langle n_d(0) \rangle. \quad (\text{C.1})$$

La définition  $n_d(\tau) = d^\dagger(\tau)d(\tau)$  associée à la propriété  $n_d(\tau) = n_d(0)$ , donne, après application du théorème de Wick par rapport aux opérateurs  $d$  et  $d^\dagger$  dans le premier terme de (C.1) l'expression

$$K(\tau) = G_d^>(\tau)G_d^<(\tau), \quad (\text{C.2})$$

où les fonctions de Green hors équilibre  $G_d^>(\tau)$  et  $G_d^<(\tau)$  sont définies par

$$G_d^<(\tau) = i \langle d(\tau)d^\dagger \rangle = i \sum_{k,a} \frac{|t_a|^2}{(\epsilon_k - \epsilon_d)^2 + (\frac{\hbar\Gamma}{2})^2} f_a(\epsilon_k) e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k\tau} \quad (\text{C.3})$$

et

$$G_d^>(\tau) = -i \langle d^\dagger d(\tau) \rangle = -i \sum_{k,a} \frac{|t_a|^2}{(\epsilon_k - \epsilon_d)^2 + (\frac{\hbar\Gamma}{2})^2} (1 - f_a)(\epsilon_k) e^{-\frac{i}{\hbar}\epsilon_k\tau}, \quad (\text{C.4})$$

avec  $d$  défini par (2.9) et  $f_a(\epsilon)$  la distribution de Fermi-Dirac relative aux électrons d'un réservoir  $a$  donné ( $a = L$  ou  $a = R$ ). Si l'on écrit l'expression (C.2) en seconde quantification, on obtient

$$K(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon d\epsilon'}{(2\pi\hbar)^2} e^{\frac{i}{\hbar}(\epsilon - \epsilon')\tau} \tilde{G}_d^<(\epsilon) \tilde{G}_d^>(\epsilon'), \quad (\text{C.5})$$

avec

$$\tilde{G}_d^<(\epsilon) = \int d\tau e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon\tau} G_d^<(\tau) = i\hbar^2 \sum_{a=L,R} \frac{\Gamma_a f_a(\epsilon)}{(\epsilon - \epsilon_d)^2 + (\frac{\hbar\Gamma}{2})^2} \quad (\text{C.6})$$

et

$$\tilde{G}_d^>(\epsilon') = \int d\tau e^{\frac{i}{\hbar}\epsilon'\tau} G_d^>(\tau) = -i\hbar^2 \sum_{a=L,R} \frac{\Gamma_a(1 - f_a(\epsilon'))}{(\epsilon' - \epsilon_d)^2 + (\frac{\hbar\Gamma}{2})^2}, \quad (\text{C.7})$$

où  $\tilde{G}_d^<(\epsilon)$  et  $\tilde{G}_d^>(\epsilon')$  désignent les transformées de Fourier des fonctions  $G_d^>(\tau)$  et  $G_d^<(\tau)$ . Les expressions générales des coefficients dissipation  $\eta(x)$  et de fluctuation  $D(x)$  de l'équation de Fokker-Planck sont des fonctions des parties réelles et imaginaires du corrélateur  $K(\tau, x)$ . Ils se définissent par

$$\eta(x) = 2F_e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \Im\{K(\tau, x)\}\tau \quad (\text{C.8})$$

ainsi que par

$$D(x) = 2F_e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau \Re\{K(\tau, x)\}. \quad (\text{C.9})$$

La friction  $\eta(x)$  s'obtient en remarquant que la variable  $\tau$  que multiplie  $\Im\{K(\tau, x)\}$  dans (C.8) provient d'une dérivation par rapport à  $\epsilon$  de l'intégrand exponentiel du corrélateur, puis en utilisant la définition de la distribution de Dirac nous avons

$$\eta(x) = \frac{F_e^2}{\pi\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} d\epsilon \tilde{G}_d^<(\epsilon) \frac{\partial}{\partial \epsilon'} \tilde{G}_d^>(\epsilon'). \quad (\text{C.10})$$

En ce qui concerne le coefficient de dissipation  $D(x)$ , un calcul similaire donne

$$D(x) = F_e^2 \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\epsilon}{2\pi\hbar} \tilde{G}_d^<(\epsilon) \tilde{G}_d^>(\epsilon'). \quad (\text{C.11})$$

Puis, en injectant les fonctions de Green (C.6) et (C.7) ainsi que le corrélateur  $K(\tau, x)$  dans les réécritures (C.10) et (C.11), on aboutit aux expressions définitives des coefficients de Fokker-Planck. Notons que l'on se place à température nulle, donc les distributions de Fermi-Dirac  $f_a(\epsilon)$  des bains  $a$  se remplacent par les fonctions de Heaviside  $\Theta(\epsilon - \mu_a)$ . Tous calculs fait, on trouve les expressions des coefficients de dissipation et de fluctuation de l'équation de Fokker-Planck en régime résonnant (3.12).

## Annexe D

# Calcul des diamants de Coulomb en champ moyen

Les diamants de Coulomb sont les régions bloquées en courant de la caractéristique  $(v, v_g)$  de l'intensité électrique  $I$  aux bornes du nanorésonateur. Leur établissement nécessite la résolution de l'équation de Fokker-Planck (3.5) donnant accès à la densité de probabilité  $\mathcal{P}^{stat}$  décrivant le flambage du tube puis le calcul du courant  $I$ . Au problème posé par la délicatesse de l'estimation de la position d'équilibre  $\tilde{x}$  du nanorésonateur minimisant la force effective  $f_{eff}(x) = \delta x - \tilde{\alpha}x^3 - n_0(x)$  s'ajoute les ennuis numériques relatifs au temps de calcul de  $I$  pour chaque point du plan  $(v, v_g)$ . Une autre manière de procéder est de considérer le problème via une approximation de type champ moyen. On se place à  $T = 0$ , ainsi

$$n_0(x) = \frac{1}{2} \left[ \Theta(-x + v_g + \frac{v}{2}) + \Theta(-x + v_g - \frac{v}{2}) \right] = \begin{cases} 1 & \text{si } x \leq v_g - v/2 \\ 1/2 & \text{si } v_g - v/2 \leq x \leq v_g + v/2 \\ 0 & \text{si } v_g + v/2 \leq x, \end{cases} \quad (\text{D.1})$$

et on cherche les équations des courbes délimitant les régions conductrice et bloquées du demi-plan  $(v > 0, v_g)$ . Il convient de regarder tous les cas qu'offre la combinaison des valeurs de  $n_0(x)$ , de  $\delta$  et de la tension  $v$  par rapport à  $v_g \pm v/2$ , et de discriminer les situations métastables où coexistent plusieurs solutions en retenant celle qui minimise le potentiel effectif

$$v_{eff}(x) = \begin{cases} -\frac{\delta x^2}{2} + \frac{\tilde{\alpha} x^4}{4} + x & \text{si } x \leq v_g - v/2 \\ -\frac{\delta x^2}{2} + \frac{\tilde{\alpha} x^4}{4} + \frac{2(x+v_g)-v}{4} & \text{si } v_g - v/2 < x < v_g + v/2 \\ -\frac{\delta x^2}{2} + \frac{\tilde{\alpha} x^4}{4} + v_g & \text{si } v_g + v/2 \leq x. \end{cases} \quad (\text{D.2})$$

Examinons le cas  $\delta \ll \tilde{\alpha}$  proche de l'instabilité d'Euler. La force effective  $f_{eff}(x) = -\tilde{\alpha}x^3 - n_0(x)$  admet alors trois solutions  $\tilde{x}_1 = -1/\tilde{\alpha}^{1/3}$ ,  $\tilde{x}_{1/2} = -1/2\tilde{\alpha}^{1/3}$  et  $\tilde{x}_0 = 0$  pour  $v_g + v/2 < 0$  (voir Fig.D.1), deux solutions  $\tilde{x}_1$  et  $\tilde{x}_{1/2}$  pour  $v_g - v/2 \leq 0 \leq v_g + v/2$  et enfin une solution  $\tilde{x}_0$  pour  $v_g - v/2 > 0$ . L'on se soucie ensuite des corrections au premier ordre en  $x$  en introduisant  $\tilde{x}'_i = \tilde{x}_i + \Delta\tilde{x}_i$  ( $i=1,2,3$ ) dans  $f_{eff}(x)$ . Il en découle que  $\Delta\tilde{x}_1 = \delta/3\tilde{\alpha}^{2/3}$ ,  $\Delta\tilde{x}_2 = \delta/3\tilde{\alpha}$  et  $\Delta\tilde{x}_3 = 0$ . Lorsqu'il s'agit d'un cas métastable avec solutions doubles et

triples, on les injectent dans (D.2) et l'on trouve le  $\tilde{x}_i$  minimisant  $v_{eff}(x)$  et caractérisant la région du diamant conductrice. La condition sur  $v$  telle que  $v_{eff}(\tilde{x}_1) = v_{eff}(\tilde{x}_{1/2})$  ou bien  $v_{eff}(\tilde{x}_{1/2}) = v_{eff}(\tilde{x}_0)$ , donnant la paramétrisation du diamant.

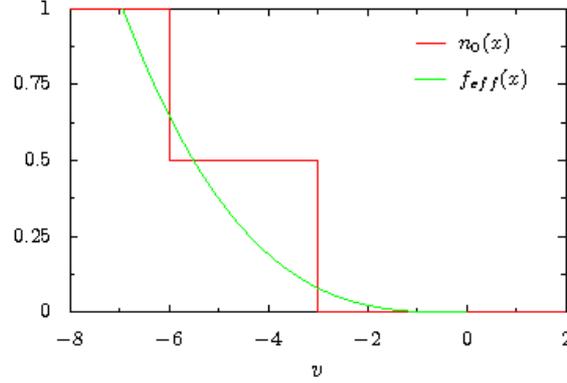


FIGURE D.1 – Illustration des trois solutions du cas métastable  $\delta \ll \tilde{\alpha}$ , avec  $v_g + v/2 < 0$ .

On obtient ainsi deux équations de droites  $v_{\pm} = \pm 2v_g + C_{\pm}$ . L'apex du diamant est le point vérifiant  $v_+ = v_-$ , d'où l'obtention du coefficient directeur et de l'ordonnée à l'origine

$$\begin{aligned} v_g(\delta) &= -\frac{3}{4\tilde{\alpha}^{1/3}} - \frac{2\delta}{4\tilde{\alpha}^{2/3}} \\ \Delta_v(\delta) &= \frac{3(2^{1/3} - 1)}{2^{4/3}\tilde{\alpha}^{1/3}} - \frac{\delta(2^{1/3} - 1)}{\tilde{\alpha}^{2/3}} \end{aligned} \quad (\text{D.3})$$

des droites. Les autres cas se traitent de la même manière. Les expressions de  $v_g$  et de  $\Delta_v$  sont telles que

$$\begin{aligned} v_g(\delta) &= \frac{1}{2\delta}, \\ \Delta_v(\delta) &= -\frac{1}{2\delta}, \end{aligned} \quad (\text{D.4})$$

pour  $\delta \ll -\tilde{\alpha}^{1/3}$ , avec  $\tilde{x}_1 = 1/\delta$ ,  $\tilde{x}_{1/2} = 1/2\delta$ ,  $\tilde{x}_0 = 0$  et  $\Delta\tilde{x}_1 = \Delta\tilde{x}_{1/2} = \Delta\tilde{x}_0 = 0$ . De même,

$$\begin{aligned} v_g(\delta) &= -\frac{1}{4\delta} - \frac{\delta}{\tilde{\alpha}}, \\ \Delta_v(\delta) &= \frac{1}{4\delta}, \end{aligned} \quad (\text{D.5})$$

pour  $\delta \gg \tilde{\alpha}^{1/3}$ , avec les mêmes  $\tilde{x}_i$  et  $\Delta\tilde{x}_i$  que pour  $\delta \ll -\tilde{\alpha}^{1/3}$ . Il convient ensuite, pour une valeur de  $\delta$  donnée, de remplir le demi-plan avec la valeur 1 pour chaque point  $(v_g, v)$  vérifiant  $v_- = -2v_g - \Delta_v \leq v \leq v_+ = 2v_g + 3\Delta_v$ , et 0 sinon. Ceci permet de reproduire les diamants de [5] en Fig.4.1.

## Annexe E

# Résolution numérique de l'équation de Fokker-Planck

La résolution numérique de l'équation de Fokker-Planck (3.22) est menée au moyen d'une grille adaptative  $\{x, p\}$  représentant  $N_x \times N_p$  points répartis sur deux axes orthogonaux  $Ox$  et  $Oy$ . Chaque point de la grille est repéré par rapport à l'origine  $(0, 0)$  par ses coordonnées  $(x_i, p_j)$ , avec  $x_i = x_{min} + i\Delta x$  et  $p_j = p_{min} + j\Delta p$ . La discrétisation des axes de la grille s'effectue à l'aide des pas  $\Delta x = (x_{max} - x_{min})/N_x$  et  $\Delta p = (p_{max} - p_{min})/N_p$  respectivement, et nous avons  $x_{min} \leq x \leq x_{max}$  et  $p_{min} \leq p \leq p_{max}$ . L'équation de Fokker-Planck étant une équation aux dérivées partielles, les termes différentiels sont discrétisés au moyen de différences finies au premier ordre, permettant de projeter (3.22) sur la grille. Puis, on effectue le changement d'indilage de la grille  $(i, j) \rightarrow 0 \leq n \leq N_x \times N_p$  de manière à ce que la densité de probabilité d'avoir le nanorésonateur dans un état de déflexion  $X$  avec l'impulsion  $P$  soit représentée par un vecteur  $\mathcal{P}$  de dimensions  $N_x \times N_p$ . L'équation discrétisée s'écrit alors sous la forme d'une matrice  $\mathcal{L}$  de dimensions  $N_x^2 \times N_p^2$ . En se souvenant que la situation que l'on souhaite résoudre est un cas stationnaire, nous avons  $\mathcal{L}\mathcal{P}^{stat} = 0$ . Son remplissage le plus économique numériquement relève d'une bonne utilisation des symétries entre les indices  $n$  des éléments de  $\mathcal{L}$ . En notant  $Q_{i,j}$  le coefficient pondérant  $\mathcal{P}_{i,j}^{stat}$ , on a

$$0 = \mathcal{P}_{i+1,j}^{stat} Q_{i+1,j} + \mathcal{P}_{i-1,j}^{stat} Q_{i-1,j} + \mathcal{P}_{i,j}^{stat} Q_{i,j} + \mathcal{P}_{i,j+1}^{stat} Q_{i,j+1} + \mathcal{P}_{i,j-1}^{stat} Q_{i,j-1}, \quad (\text{E.1})$$

avec

$$\begin{aligned} Q_{i+1,j} &= \left[ -\frac{p_j}{2\Delta x} \right], \\ Q_{i-1,j} &= \left[ \frac{p_j}{2\Delta x} \right], \\ Q_{i,j} &= \left[ -\frac{2}{\Delta p^2} \left( \frac{d(x_i)}{2} + \gamma_e \tilde{T} \right) \right], \\ Q_{i,j+1} &= \left[ -\frac{f_{eff}(x_i)}{2\Delta p} + \frac{(\gamma(x_i) + \gamma_e)}{2\Delta p} p_{j+1} + \left( \frac{d(x_i)}{2} + \gamma_e \tilde{T} \right) \frac{1}{\Delta p^2} \right], \\ Q_{i,j-1} &= \left[ \frac{f_{eff}(x_i)}{2\Delta p} - \frac{(\gamma(x_i) + \gamma_e)}{2\Delta p} p_{j-1} + \left( \frac{d(x_i)}{2} + \gamma_e \tilde{T} \right) \frac{1}{\Delta p^2} \right]. \end{aligned} \quad (\text{E.2})$$

Les règles de résolution des systèmes linéaires d'Euler permettent de remplacer la première ligne de la matrice  $\mathcal{L}$  par la condition de normalisation de la densité de probabilité  $\mathcal{P}^{stat}$ . Ceci permet de résoudre le système contenu dans  $\mathcal{L}$ , doté d'un très grand nombre d'éléments nuls, par un algorithme de type sparse (voir [15]), tout en évitant le renvoi de la solution triviale non-physique. Pour un point  $n = (i, j)$ , cette procédure se schématise par

$$\underbrace{\begin{pmatrix} 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \\ \vdots & \ddots & Q_{n+1=(i,j+1)} & & \vdots \\ \vdots & Q_{n-N_p=(i-1,j)} & Q_{n=(i,j)} & Q_{n+N_p=(i+1,j)} & \vdots \\ \vdots & & Q_{n-1=(i,j-1)} & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & \dots & \dots & 0 \end{pmatrix}}_{\mathcal{L}} \otimes \underbrace{\begin{pmatrix} \vdots \\ \vdots \\ \mathcal{P}_{n=(i,j)}^{stat} \\ \vdots \\ \vdots \end{pmatrix}}_{\mathcal{P}^{stat}} = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ \vdots \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (E.3)$$

Les conditions limites du problème, nulles aux bords de  $\{x, p\}$ , assurent que l'espace des phases est assimilable à la grille. L'inversion de  $\mathcal{L}$  donne accès à la  $\mathcal{P}^{stat}(x, p)$ , et la vérification de sa normalisation est un premier indicateur de la pertinence des paramètres de grille. On commence avec une taille arbitraire  $\{[x_{min}, x_{max}], [p_{min}, p_{max}]\}$ , et l'affichage de  $\mathcal{P}^{stat}(x, p)$  permet d'estimer si elle englobe bien la région de l'espace des phases contenant les principales fluctuations de la densité. Si besoin est, la grille est ensuite ajustée afin de s'assurer que la région contenant le maximum de  $\mathcal{P}^{stat}$  ainsi que ses principales contributions soient correctement encadrées. Notons enfin que pour une situation donnée, les dimensions de la grille peuvent évoluer en fonction de la tension  $v$ . Un exemple d'une résolution satisfaisante de (E.3) est donné en Fig.E.1.

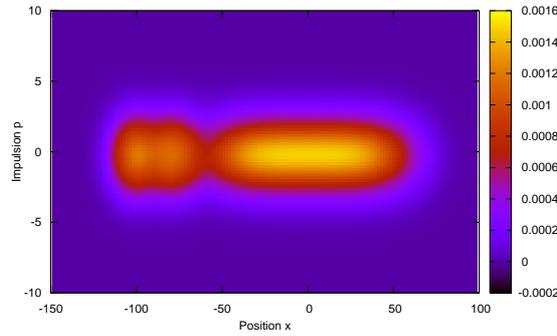


FIGURE E.1 – Projection de la densité de probabilité  $\mathcal{P}^{stat}$  sur la grille de calcul  $\{x, p\}$ , pour la situation  $\tilde{\alpha} = 10^{-6}$ ,  $\delta = 0$ ,  $x_{min} = -190$ ,  $x_{max} = 150$ ,  $|p_{min}| = p_{max} = 20$ ,  $\omega_0 = 1.0$ ,  $\gamma_e = 10^{-2}$ ,  $\Gamma/2 = \Gamma_L = \Gamma_R$ ,  $v/\Delta_v = 1$  et avec un couplage séquentiel à  $\tilde{T}/\Delta_v = 0.1$ .

Cette méthode de résolution de l'équation de Fokker-Planck est valable quelque soit le couplage. Les termes de plus haut ordre en tunneling étant des corrections par rapport à la considération séquentielle du problème, ainsi il est judicieux de commencer une recherche de paramètres de grille optimum en régime résonant par des paramètres séquentiels correspondant à une situation similaire, et de les affiner ensuite, par exemple via la visualisation de la forme de  $\mathcal{P}^{stat}$ .

# Bibliographie

- [1] Dittrich T., Hänggi P., Ingold G.-L., Kramer B., Schön G., Zwirger W., Quantum transport and dissipation, Wiley-VCH, Weinheim, Germany (1998)
- [2] Steele G. A., Hüttel A. K., Witkamp B., Poot M., Meerwaldt H., B., Kouwenhoven L. P., van der Zant H. S. J., Strong coupling between single-electron tunneling and nano-mechanical motion, *Science* **325**, 1103 (2009)
- [3] Lassagne B., Tarakanov Y., Kinaret J., Garcia-Sanchez D., Bachtold A., Coupling Mechanics to Charge Transport in Carbon Nanotube Mechanical Resonators, *Science* **325**, 1107 (2009)
- [4] Pistolesi F., Labarthe S., Current blockade in classical singleelectron nanomechanical resonator, *Phys. Rev. B*, **76**, 165317 (2007)
- [5] Weick G., von Oppen F., Pistolesi F., Euler buckling instability and enhanced current blockade in suspended single-electron transistors, *Phys. Rev. B*. **83**, 035420 (2011)
- [6] Landau L.D. et Lifschitz E.M. Physique théorique tome 7, Théorie de l'élasticité, éditions Mir (Moscou), 2nd éd. (1990)
- [7] Pistolesi F., Blanter Ya. M., Martin I., Self-consistent theory of molecular switching, *Phys. Rev. B*. **78** 085127 (2008)
- [8] Weick G., Pistolesi F., Mariani E., von Oppen F., Discontinuous Euler instability in nanoelectromechanical systems, *Phys. Rev. B*. **81**, 121409 (2010)
- [9] Mahan G. D., Many particles Physics, Springer Verlag 2nd edition, Heidelberg (1998)
- [10] Elste F., Weick G., Carsen T., Current-induced conformational switching in single-molecule junctions, *Appl. Phys. A* **93**, p.345-354, (2008)
- [11] Hussein R., Metelmann A., Zedler P., Brandes T., Semiclassical dynamics of nanomechanical systems, *Phys. Rev. B*. **82**, 165406 (2010)
- [12] Cohen-Tannoudji C., Diu B., Laloë F., Mécanique quantique vol.2, Chap. 13 : Problèmes dépendant du temps, p.1291, Hermann, Paris (2007)
- [13] Bönig L., Schönhammer K., Zwirger W., Influence-functional theory for a heavy particle in a Fermi gaz, *Phys. Rev. B*, **46** 2 (1992)
- [14] Mozyrsky D., Hastings M. B., Martin I., Intermittent polaron dynamics : Born-Oppenheimer approximation out of equilibrium, *Phys. Rev. B*, **73** 035104 (2006)
- [15] Press W. H., Teukolsky S., Vetterling W., Flannery B., Numerical Recipes in Fortran 77 : The Art of Scientific Computing, Cambridge University Press (1992)