

# Résistance électrique de conducteurs quantiques unidimensionnels désordonnés

Christophe Deroulers

Institut de physique théorique, Université de Cologne

Séminaire du LPS-ENS, 13 décembre 2006

# Plan

Motivation

Modélisation

Techniques et résultats de simulations numériques

Statistiques des valeurs extrêmes et distribution de  $R$

Conclusion

# Plan

Motivation

Modélisation

Techniques et résultats de simulations numériques

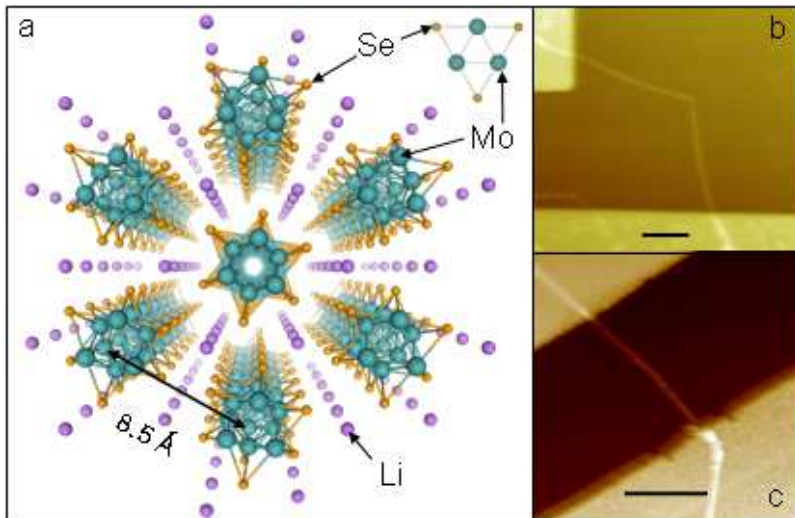
Statistiques des valeurs extrêmes et distribution de  $R$

Conclusion

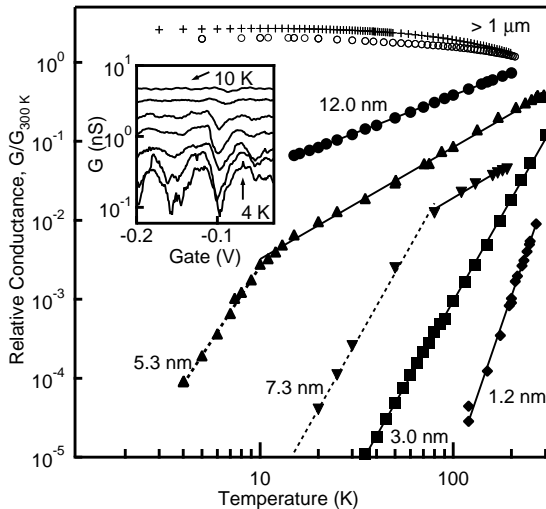
## Cadre

- ▶ But général : comprendre le transport de charge (et de chaleur) dans certains matériaux : semiconducteurs, nanotubes de carbone, ADN...
- ▶ Champ de recherches depuis les années 1950 — Mott, Anderson, Halperin, Mat. Fisher...
- ▶ Enjeux technologiques : miniaturisation, nouveaux composants ; fabrication en série
- ▶ Effets quantiques bien sûr, mais effets statistiques cruciaux et intéressants

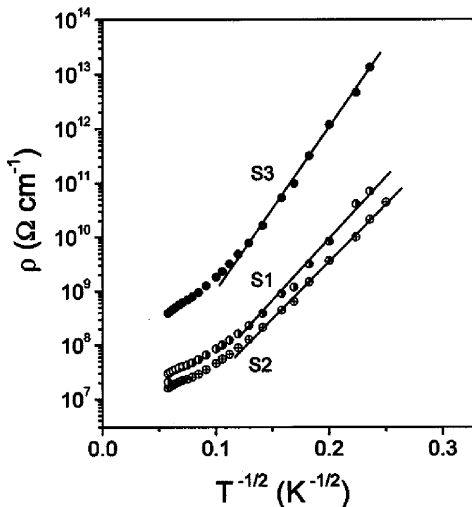
# Expérience 1 : nanofils MoSe



# Expérience 1 : nanofils MoSe



## Expérience 2 : cristaux de polydiacétylène (quasi 1D)



# Plan

Motivation

**Modélisation**

Techniques et résultats de simulations numériques

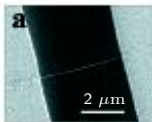
Statistiques des valeurs extrêmes et distribution de  $R$

Conclusion



# Hypothèses

- ▶ Spin ignoré
- ▶ Courant continu
- ▶ Interactions électrostatiques à longue portée mais ici écrantage :

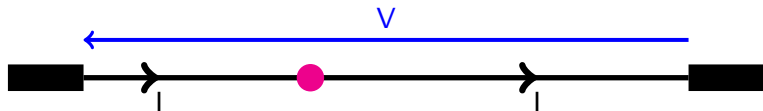


Y. Huang *et al.*

Capacité par unité de longueur :  $C$

## Effet d'une seule impureté

...ou d'impuretés faibles ou peu denses :



$$I \propto \begin{cases} V^{b+1} & V \gg 1 \\ T^a V & V \ll 1 \end{cases}$$

avec

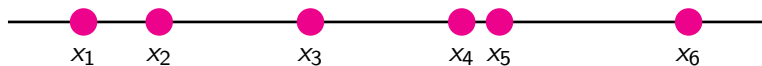
$$a = b.$$

Kane & Fisher 1992

Vérifié expérimentalement sur des fils avec peu d'impuretés (CNT) ou des fils courts ( $L < 1\mu\text{m}$ ).

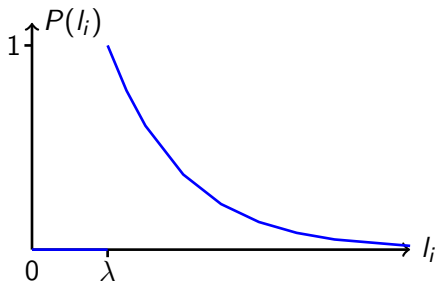
Sur fils longs ( $L > 10\mu\text{m}$ ),  $a/b$  est entre 2 et 5 : effet d'impuretés fortes ?

## Modèle de désordre



Impuretés ponctuelles fortes distribuées selon processus de Poisson.  
Entre deux : système pur.

Proba de la distance  $l_i = x_{i+1} - x_i$  :



$$\langle l_i \rangle = l \gg \lambda$$

$$\forall i \quad l_i > \lambda$$

# Points quantiques (1)


- ▶ Sans impuretés : densité  $n$  d'électrons uniforme.



- ▶ Avec impuretés :

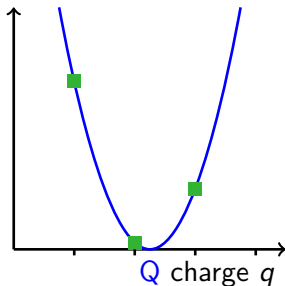


## Points quantiques (2)

Limite quasiclassique pour un *point quantique*  :

livre de T. Giamarchi 2003, Nattermann *et al.* 2003, Fogler *et al.* 2004,  
Malinin *et al.* 2004

niveaux  
d'énergie



Longueur  $l$ , potentiel électrochimique  $\xi$   
"Capacité"  $C l$

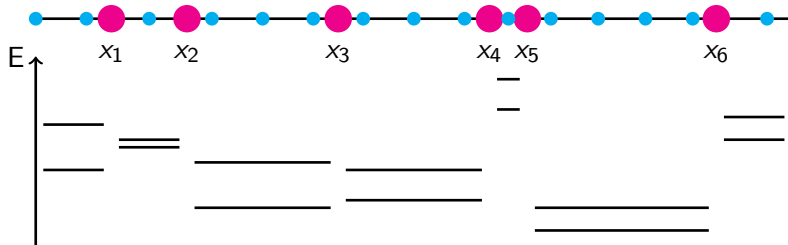
Échelle d'énergie  $\Delta := e^2/(C l)$

$$\text{Énergie } \frac{(q-Q)^2}{2C l}$$

Le point voudrait avoir la charge  
moyenne  $Q = e n l + C l \xi / e$  mais  $q$   
entier  $\rightarrow$  état fondamental :  $q =$  entier  
le plus proche de  $Q$ .

*Nous considérons seulement les 3 premiers niveaux.*

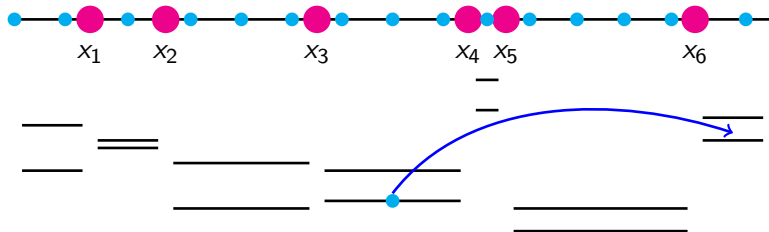
## Chaîne de points quantiques



niveaux excités ( $q = q_{\text{fond}} \pm 1$ ) par rapport au fondamental  
de chaque point = coût pour enlever ou ajouter 1 électron

## Chaîne de points quantiques : mécanisme de la conduction

Quand un électron quitte un point pour un autre :



- ▶ Il doit emprunter la différence d'énergie au bain thermique  
 $\rightarrow P \sim e^{-(E_j - E_i)/T}$  ;
- ▶ Il doit traverser des impuretés par effet tunnel. Calcul  $\rightarrow$   
 transparence  $e^{-s}$  par impureté, donc  $(e^{-s})^n$  si cotunnel à  
 travers  $n$  impuretés.
- ▶ Décohérence à chaque arrêt de l'électron (dissipation).

Compétition entre effet tunnel et activation

## Courant de saut entre deux états

A. Miller & E. Abrahams 1960

Dans le régime ohmique (linéaire) où  $I$  proportionnel au champ  $F$ , ou à la d.d.p., on peut définir des résistances :

$$R_{ij} := \frac{\xi_i - \xi_j}{I_{i \rightarrow j}} \approx R_0 e^{\frac{E_{ij}}{T} + s|j-i|} .$$

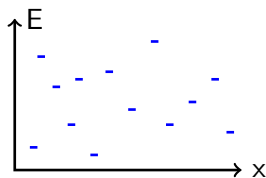


→ Réseau de résistances (qui dépendent de  $T$ ) avec désordre



## Les sauts à portée variable (VRH) selon Mott (1)

Modèle de semiconducteur dopé :



États localisés (ÉL) uniformément aléatoires  
en position ( $x$ ) et énergie ( $E$ )  
Longueur de localisation  $a$

Conductivité *typique*  $G = G_0 e^{-\frac{|x_j - x_i|}{a} - \frac{\Delta E}{T}}$  (avec  
 $\Delta E = E_j - E_i > 0$ ) :

dans la boule de rayon  $r$ , si densité d'états  $\rho$ , il y a typiquement  
 $\rho r^D$  états  $\rightarrow \Delta E$  minimal  $\sim 1/(\rho r^D)$  en dimension  $D$ .

Optimisation sur  $r \rightarrow G \sim e^{-\left(\frac{T_0}{T}\right)^{\frac{1}{1+D}}}$ .

À 3D, résultat expérimental bien connu  $R \sim e^{\left(\frac{T_0}{T}\right)^{\frac{1}{4}}}$ .

## Les sauts à portée variable (VRH) – percolation (2)

- ▶ Critique :  $G$  gouvernée par chemin percolant, pas par  $G$  typique

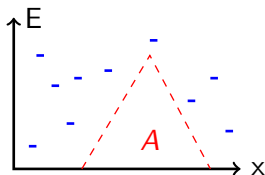
*Ambegaokar et al. 1971, P. Lee et al. 1984, 1986*

→ à 2D, 3D, ne change que les préfacteurs

- ▶ À 1D, résistance de l'échantillon pas fixée par résistance typique entre points mais par événements rares (coupures).

*Kurkijärvi 1973, Raikh & Ruzin 1989*

## Variable Range Hopping (3) : coupures 1D



Une coupure de résistance  $R_0 e^u$  a une proba  $\propto e^{-Tu^2}$  d'être observée en chaque lieu.

Plus forte coupure vue dans un fil de longueur  $L$  :

$$L e^{-Tu^2} \approx 1 \rightarrow u \approx \sqrt{\ln(L)/T}$$

donc résistance totale  $R_0 e^{\sqrt{\ln(L)T^{-\frac{1}{2}}}}$ , ce qui fait mieux que VRH typique :  $R_0 e^{T^{-\frac{1}{2}}}$ .

Limite de fils longs ou de hautes températures :  $R = R_0 L \sqrt{\frac{T_0}{T}} e^{\frac{T_0}{2T}}$  (Arrhenius).

## Coupures pour nous (1)

Différence avec semiconducteurs : corrélation entre  $x$  et  $E$  [et interactions fortes entre électrons].

Probabilité d'une coupure de résistance  $R_0 e^u$  :

$$\ln P(u) \approx \begin{cases} -\frac{1}{s} \frac{T}{\Delta} u^2 & \text{quand } u \ll \frac{\Delta}{T} \\ -\frac{1}{s} u \ln \frac{uT}{X\Delta} & \text{quand } u \gg \frac{\Delta}{T}. \end{cases}$$

Plus forte coupure vue dans un fil de longueur  $L$  :  $u_0$  tel que

$$L \int_u^{+\infty} P(u) \approx 1.$$

## Coupures pour nous (2)

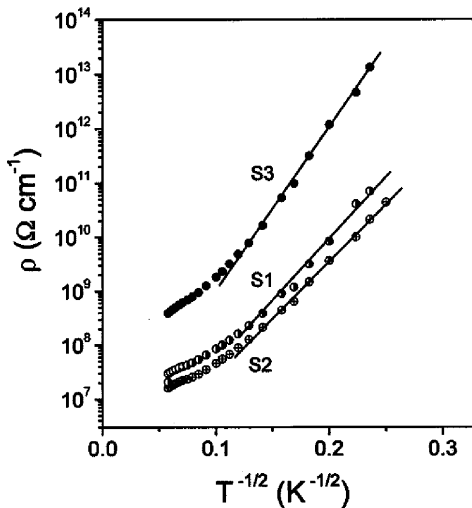
D'où

$$\ln R \approx \begin{cases} \sqrt{s \frac{\Delta}{T} \ln \frac{L}{l_0}} & \text{quand } \frac{T}{\Delta} \ll \frac{1}{s} \frac{1}{\ln \frac{L}{l_0}} \\ s \frac{\ln \frac{L}{l_1}}{\ln s Y \frac{T}{\Delta}} & \text{quand } \frac{1}{s} \frac{1}{\ln \frac{L}{l_0}} \ll \frac{T}{\Delta} \ll \frac{1}{s} \frac{L}{\lambda} \end{cases}$$

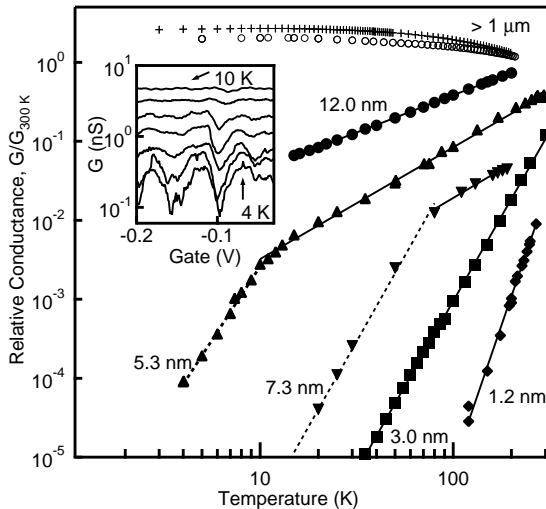
$X$ ,  $Y$ ,  $l_0$ ,  $l_1$  : constantes ou dépendances logarithmiques en  $T$ .

Fogler, Malinin & Nattermann 2006

# Cristaux de polydiacétylène (quasi 1D)



# Nanofilms MoSe



# Plan

Motivation

Modélisation

**Techniques et résultats de simulations numériques**

Statistiques des valeurs extrêmes et distribution de  $R$

Conclusion



## Principe des simulations

- ▶ Pour chaque valeur de  $T$ , du nombre d'impuretés  $N$ , de leur espacement moyen  $l, \dots$
- ▶ On tire au sort un grand nombre (10000) de réalisations du désordre (positions des impuretés)...
- ▶ On calcule résistance  $R$  du fil...
- ▶ On la note. Quantités d'intérêt :  $\langle \ln R \rangle$ , distribution de  $\ln R$ .  
On n'étudie pas  $\langle R \rangle$  car mauvais comportement (dominé par le  $R$  maximal vu lors de la série de simulations).

Remarque : les expérimentateurs mesurent  $R$ .

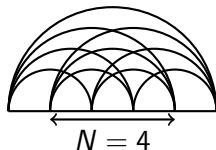
- ▶ Serait nécessaire de faire des statistiques sur beaucoup d'échantillons.
- ▶ Plusieurs fils en parallèle  $\rightarrow$  meilleur comportement ?

## Principe des simulations : meilleur chemin direct

Prescription pour étudier VRH à basse température : chercher le chemin percolant.

Ambegaokar, Halperin, & Langer 1971 P. A. Lee *et al.* 1984, 1986

Algorithme pour le meilleur chemin direct (meilleure suite de sauts sans dérivations) :



- ▶ Partir de  $V_0 = 0$ .
- ▶ Itérativement : connaissant  $V_0, V_1, \dots, V_{i-1}$ , calculer les potentiels  $V_i$  en supposant un chemin direct de  $j < i$  à  $i$  et en choisissant  $j$  qui minimise  $V_j$ .
- ▶  $V_N \rightarrow$  résistance du fil complet dans cette approximation.

Très rapide : en pratique,  $i$  est connecté à quelques points  $j$ , temps de calcul  $\approx N$ .

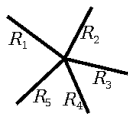
## Principe des simulations : calcul exact (1)

Calcul exact de  $R$  d'un fil : il suffit de résoudre le système linéaire des lois de mailles et lois des nœuds ( $N$  potentiels  $V_i$  inconnus).

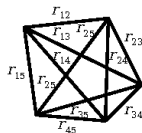
Facile en principe, mais très long ou complètement faux à basse température (pb. de stabilité numérique)

## Principe des simulations : calcul exact (2)

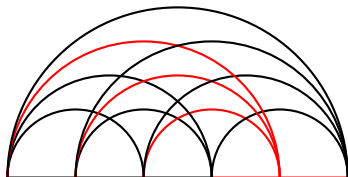
Mieux : simplifier le circuit avec la transformation topologique :



≡



$$r_{ij} = R_i R_j \left( \frac{1}{R_1} + \frac{1}{R_2} + \dots + \frac{1}{R_n} \right)$$



→ Pas de problème de stabilité, résultats corrects.

Rapide : en principe  $N^3$  opérations, en pratique  $\approx N$  car chaque  $i$  connecté à quelques  $j$  seulement.

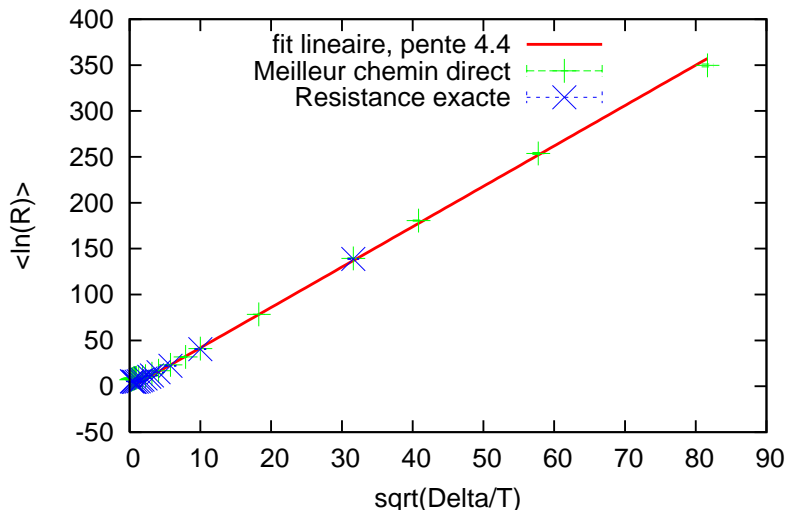
## Prédiction de Fogler *et al.*

$$\ln R \approx \begin{cases} \sqrt{s \frac{\Delta}{T} \ln \frac{L}{l_0}} & \text{quand } \frac{T}{\Delta} \ll \frac{1}{s} \frac{1}{\ln \frac{L}{l_0}} \\ s \frac{\ln \frac{L}{l_1}}{\ln s Y \frac{T}{\Delta}} & \text{quand } \frac{1}{s} \frac{1}{\ln \frac{L}{l_0}} \ll \frac{T}{\Delta} \ll \frac{1}{s} \frac{L}{\lambda} \end{cases}$$

$X, Y, l_0, l_1$  : constantes ou dépendances logarithmiques en  $T$ .

## Résultats pour $\langle \ln R \rangle$ : VRH (1)

transparence  $s=3$ ,  $N=1000$  impuretes



## Passage de VRH à Arrhenius ?

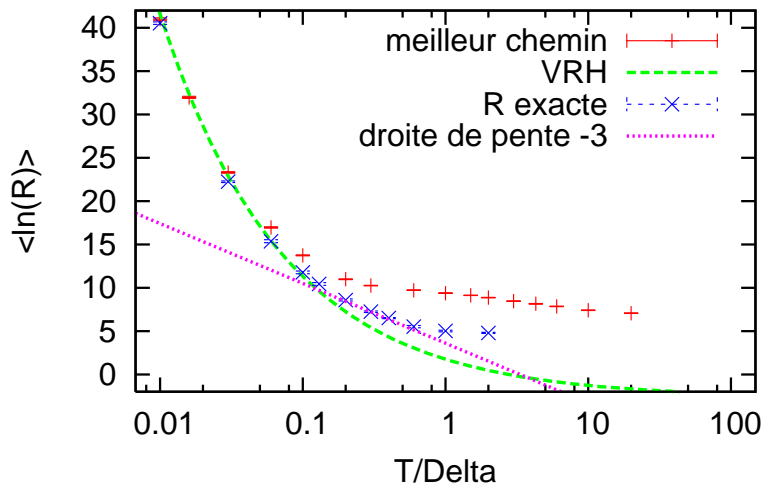
On trouve la loi d'Arrhenius si

$$\ln \frac{L}{l} \approx e^{\frac{s-1}{T/\Delta}}$$

A.N. :  $s = 3$ ,  $T/\Delta = 1$ ,  $l = 1\mu\text{m} \rightarrow L \approx 10^{697}\text{m}...$

## Résultats pour $\langle \ln R \rangle$ : limites de VRH (1)

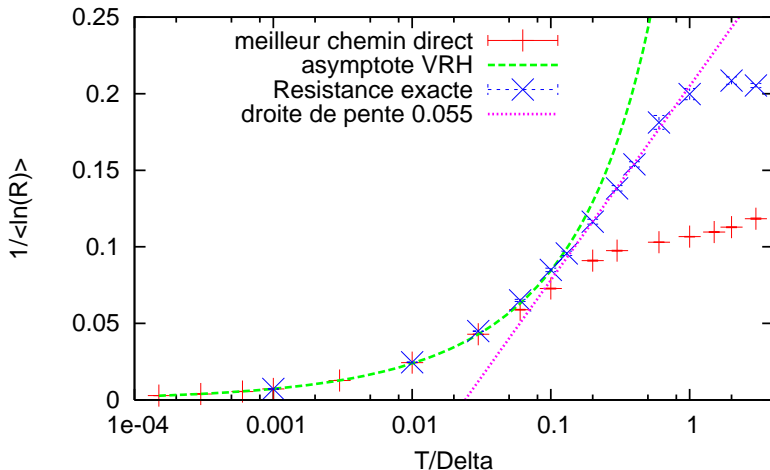
transparence  $s=3$ ,  $N=1000$  impuretes





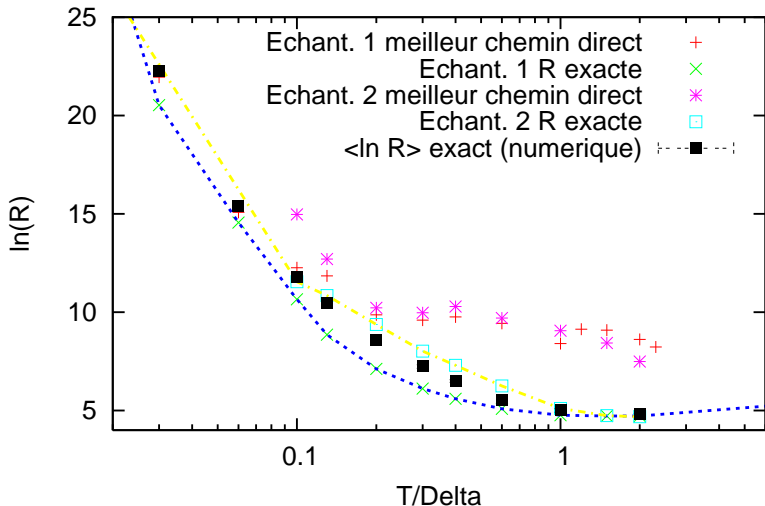
## Résultats pour $\langle \ln R \rangle$ : limites de VRH (2)

transparence  $s=3$ ,  $N=1000$  impuretes



# Résultats pour $\langle \ln R \rangle$ : fluctuations

$s=3$ ,  $N=1000$  impuretes



## Premières conclusions

- ▶ Régime VRH observé à basses températures. Dans ce régime, argument de percolation correct — le meilleur chemin direct domine la conductance.
- ▶ Mais, aux températures moyennes, VRH remplacé par  $\approx$  loi de puissance ; argument de percolation plus valable.
- ▶ Forte variation de la résistance avec l'échantillon (attendu). Mais résistance beaucoup plus régulière en température que l'argument de percolation ne prédit.

# Plan

Motivation

Modélisation

Techniques et résultats de simulations numériques

Statistiques des valeurs extrêmes et distribution de  $R$

Conclusion

## Statistiques des valeurs extrêmes – loi de Gumbel

Soit  $X_1, X_2, \dots, X_N$  des variables aléatoires i.i.d.

Théorème central limite, loi des grands nombres renseignent sur valeur typique, moyenne et écart-type de la *somme*  $\sum_{i=1}^N X_i$ .  
Statistiques des valeurs extrêmes s'occupent des *maxima* (ou minima).

Ex. : pour beaucoup de distributions  $P(X_i)$

( $P(X_i) \sim e^{-X_i^2}, e^{-X_i} \dots$ ),  $\max_{i=1}^N X_i$  a, pour grand  $N$ , la distribution de Gumbel :

$$P[\max \geq m] = e^{-e^{\frac{m-\mu}{\sigma}}}.$$

Gumbel, Fréchet, Fisher-Tippett 1928, Gnedenko 1941

Applications physiques : rupture d'une chaîne, événements géologiques...

## Statistiques des valeurs extrêmes – convergence lente

En général convergence lente : la loi du max est la loi de Gumbel  
*plus une correction* en  $1/\ln N$ .

de Haan & Resnick 1996, Gomes & de Haan 1999

## Statistiques des valeurs extrêmes – crossover

Comportement de

$$Z = \sum_{i=1}^N e^{X_i/T}$$

pour  $N$  grand et  $T$  petit? ( $\leftrightarrow$  R. E. M.)

Crossover : si  $N \gg e^{\langle X_i \rangle / T}$ , théorème central limite marche. Si  $N \ll e^{\langle X_i \rangle / T}$  (et  $T \rightarrow 0$ ), somme dominée par le  $X_i$  maximal  $\rightarrow$  statistique des valeurs extrêmes.

Ben Arous *et al.* 2005

## Réseau de résistances

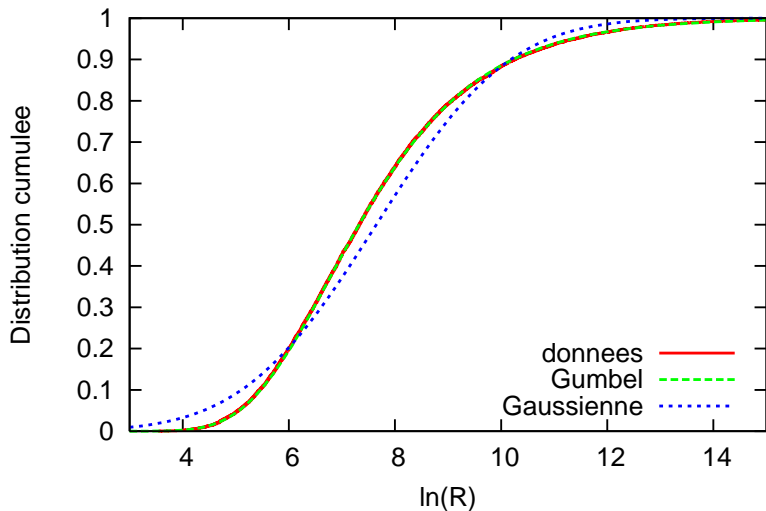


Ici, ni maximum des  $X_i$ , ni somme des  $e^{X_i/T}$ .  
Pourtant...



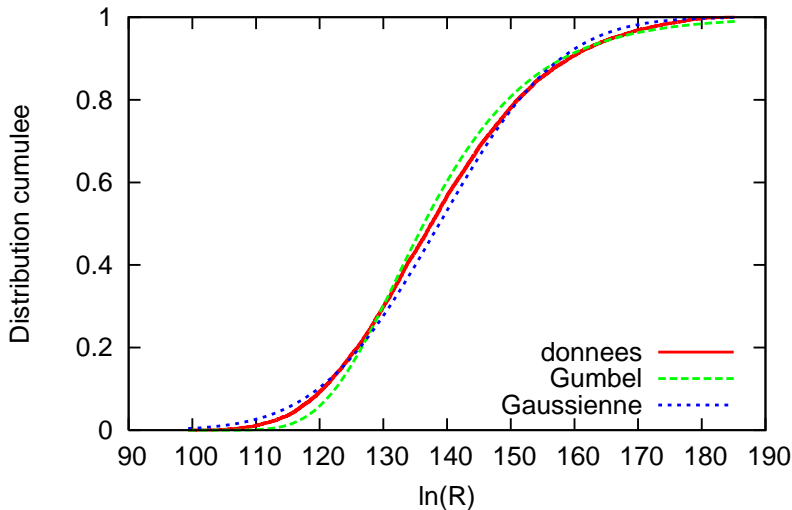
# Résultats de simulations : $P(\ln R)$ (1)

$s=3$   $N=100$   $T/\Delta=0.1$



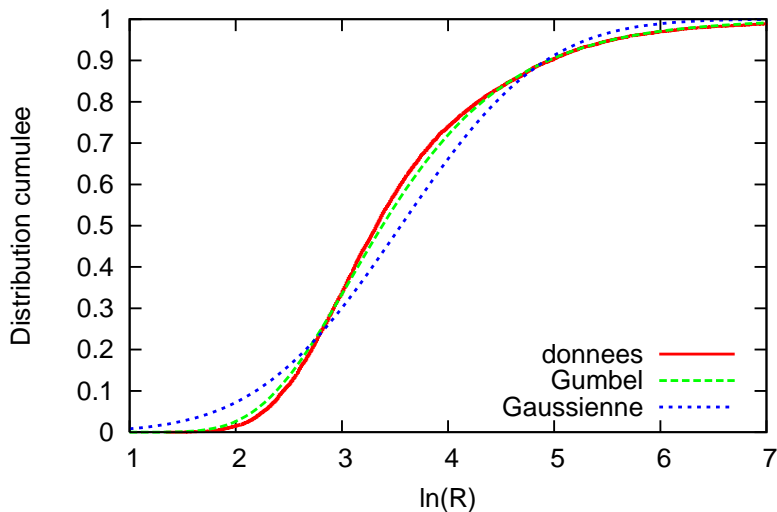
## Résultats de simulations : $P(\ln R)$ (2)

$s=3$   $N=1000$   $T/\Delta=0.001$



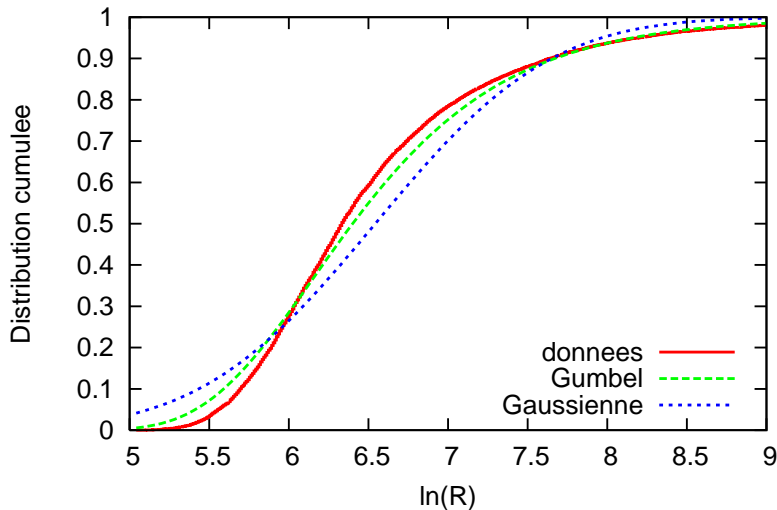
## Résultats de simulations : $P(\ln R)$ (3)

$s=3$   $N=100$   $T/\Delta=0.4$



## Résultats de simulations : $P(\ln R)$ (4)

$s=3$   $N=1000$   $T/\Delta=0.4$



## Résultats de simulations : conclusions, perspectives sur $P(\ln R)$

- ▶ Distributions non Gaussiennes, de type Gumbel.
- ▶ Convergence avec  $N$  semble rapide.
- ▶ Raikh & Ruzin ont prédit une loi de Gumbel pour le régime VRH à basse température. Ici, pas de loi de Gumbel à basse  $T$  :  $N$  trop petit ?
- ▶  $P(\ln R)$  *exactement* Gumbel seulement pour certaines températures ( $T = 0.1$ ). Peut-on prédire la loi pour les autres ( $T = 0.4$ ) ?

# Plan

Motivation

Modélisation

Techniques et résultats de simulations numériques

Statistiques des valeurs extrêmes et distribution de  $R$

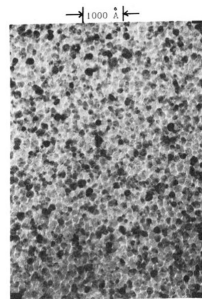
Conclusion

## Conclusion

- ▶ Riche comportement des conducteurs quantiques 1D : plusieurs régimes de températures, statistiques non triviales
- ▶ Des impuretés fortes peuvent expliquer certains résultats expérimentaux

## Perspectives

- ▶ Régime non ohmique (non linéaire, champ fort)
- ▶ Chaînes couplées → disparition du VRH ?
- ▶ Extension aux métaux granulaires ?
- ▶ Distribution du courant, bruit de grenaille

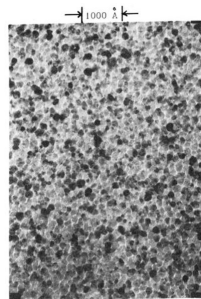


## Conclusion

- ▶ Riche comportement des conducteurs quantiques 1D : plusieurs régimes de températures, statistiques non triviales
- ▶ Des impuretés fortes peuvent expliquer certains résultats expérimentaux

## Perspectives

- ▶ Régime non ohmique (non linéaire, champ fort)
- ▶ Chaînes couplées → disparition du VRH ?
- ▶ Extension aux métaux granulaires ?
- ▶ Distribution du courant, bruit de grenaille



Merci à T. Nattermann et M. Fogler !