

Résistance électrique de conducteurs quantiques unidimensionnels désordonnés

Christophe Deroulers

Institut de physique théorique, Université de Cologne

Séminaire du LPT-Toulouse, 9 janvier 2007

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

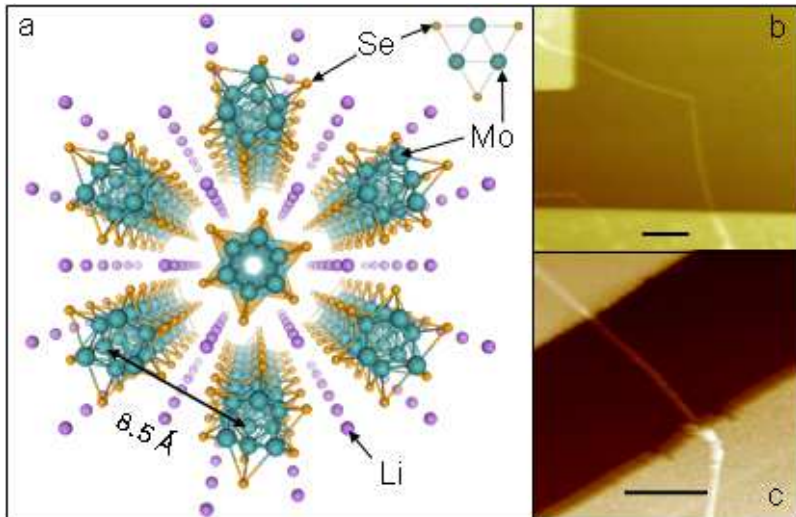
Statistiques des valeurs extrêmes et distribution de R

Conclusion

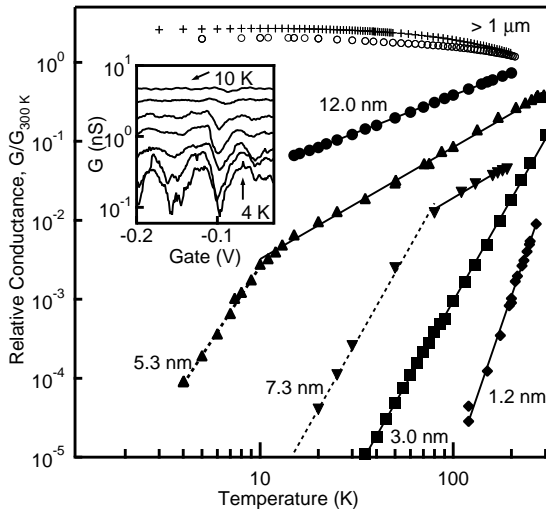
Cadre

- ▶ 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, Matthew Fisher...
- ▶ Enjeux technologiques : miniaturisation, nouveaux composants ; fabrication en série
- ▶ Effets quantiques bien sûr, mais effets statistiques cruciaux et intéressants

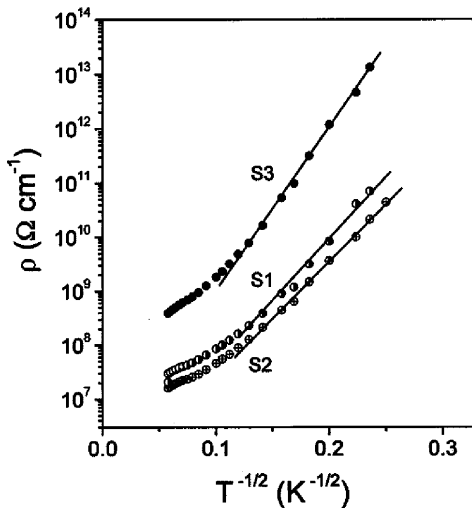
Expérience 1 : nanofils MoSe



Expérience 1 : nanofils MoSe



Expérience 2 : cristaux de polydiacétylène (quasi 1D)



Plan

Motivation

Modélisation

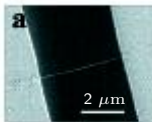
Techniques et résultats de simulations numériques

Statistiques des valeurs extrêmes et distribution de R

Conclusion

Hypothèses

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

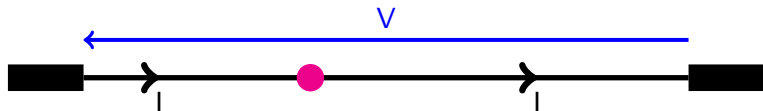


Y. Huang *et al.*

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

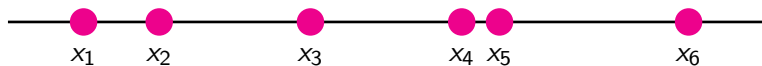
$$a = b.$$

Kane & Fisher 1992

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

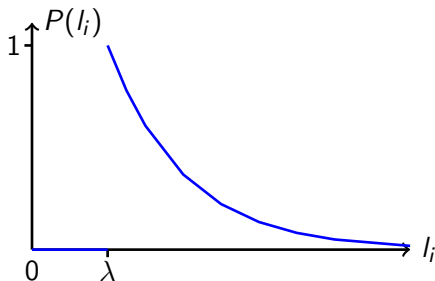
Sur fils longs ($L > 10\mu\text{m}$), a/b est entre 2 et 5 : effet d'impuretés fortes ?

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 :

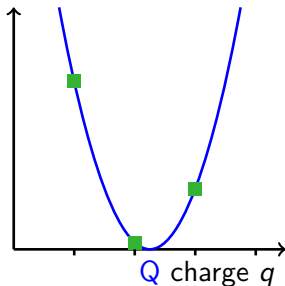


Points quantiques (2)

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 ξ
"Capacité" $C l$

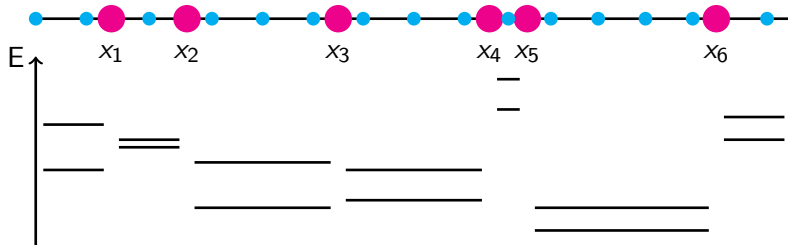
Échelle d'énergie $\Delta := e^2 / (C l)$

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

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.

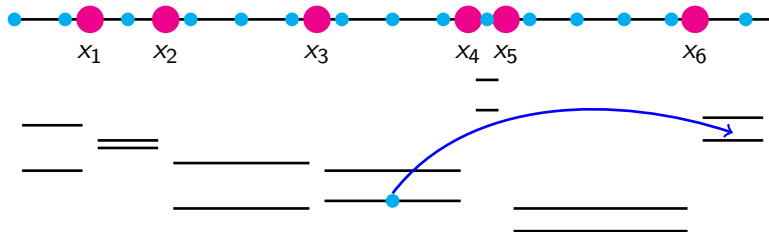
Chaîne de points quantiques



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 :

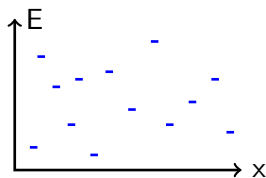
$$R_{ij} := \frac{\xi_i - \xi_j}{I_{i \rightarrow j}} \approx R_0 e^{\frac{E_{ij}}{T} + s|j-i|} .$$



→ 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 ρ , il y a typiquement
 ρr^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

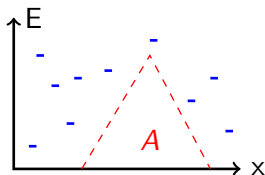
Ambegaokar et al. 1971, P. Lee et al. 1984, 1986

→ 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)

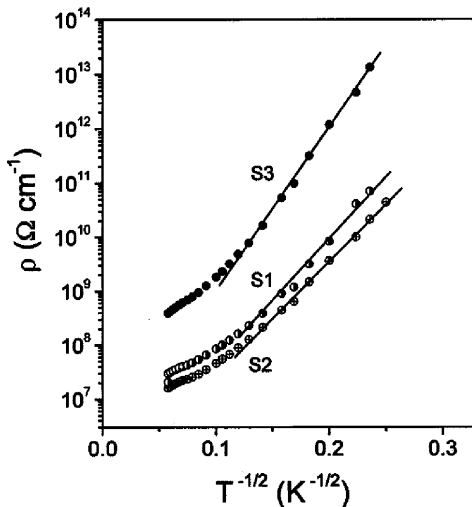
D'où

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

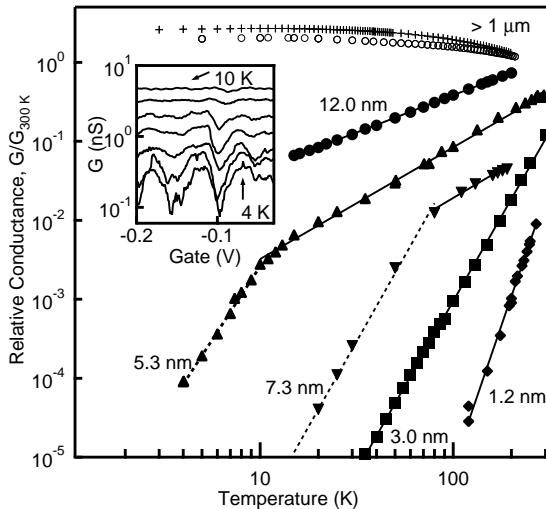
X , Y , l_0 , l_1 : constantes ou dépendances logarithmiques en T .

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 .

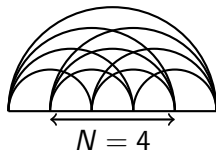
- ▶ Serait nécessaire de faire des statistiques sur beaucoup d'échantillons.
- ▶ Plusieurs fils en parallèle \rightarrow meilleur comportement ?

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).

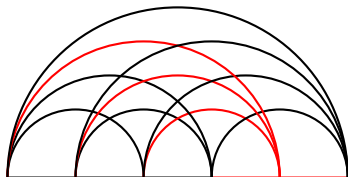
Facile en principe, mais très long ou complètement faux à basse température (pb. de stabilité numérique)

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.

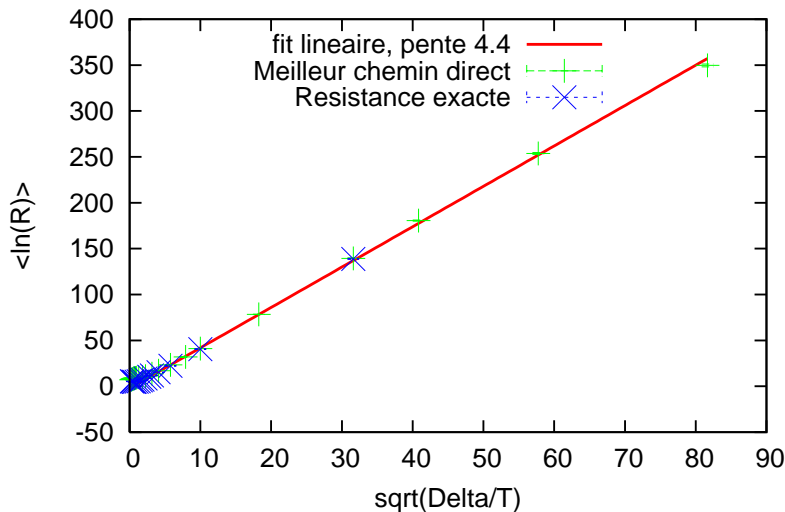
Prédiction de Fogler *et al.*

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

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 ?

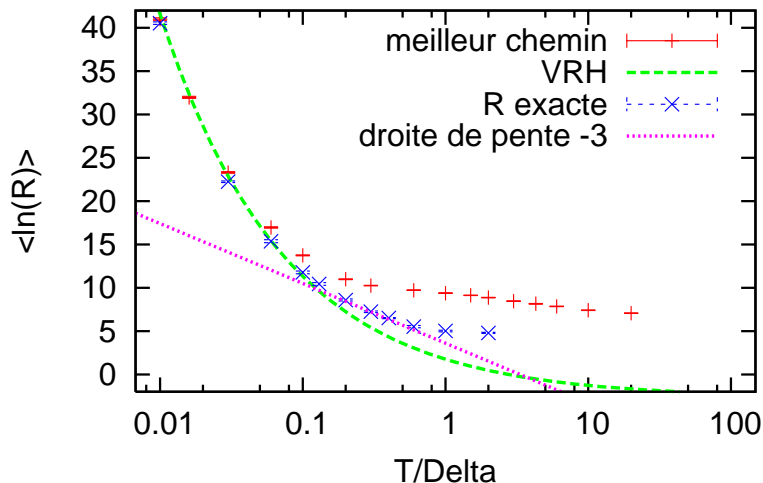
On trouve la loi d'Arrhenius si

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

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

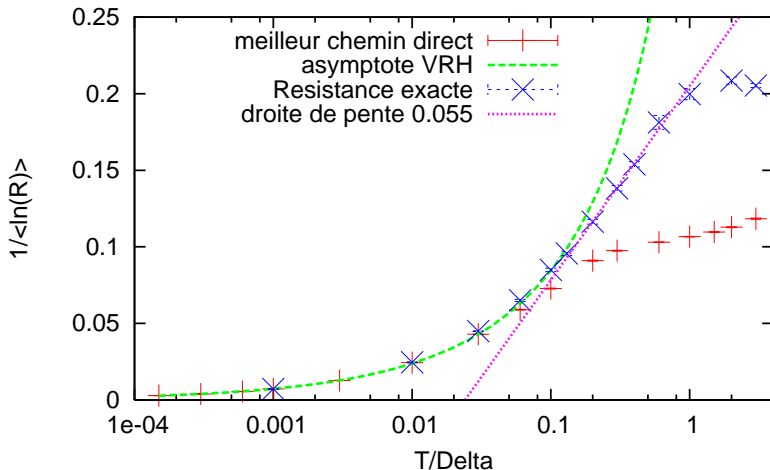
Résultats pour $\langle \ln R \rangle$: limites de VRH (1)

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



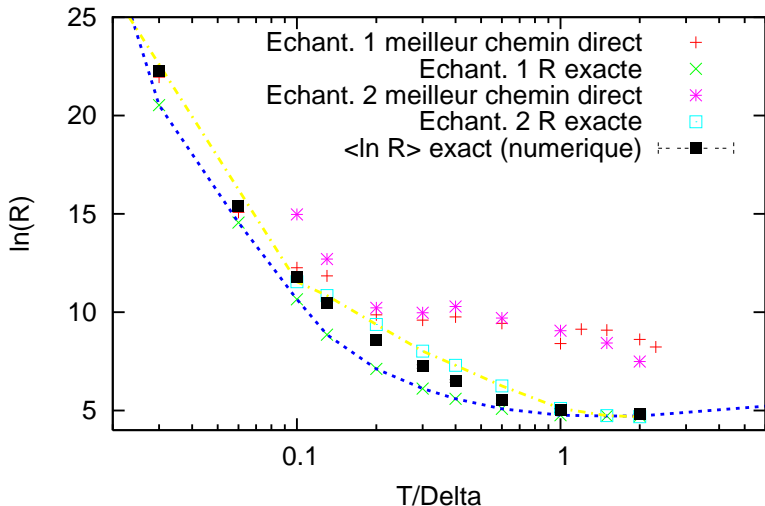
Résultats pour $\langle \ln R \rangle$: limites de VRH (2)

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.
- ▶ Mais, aux températures moyennes, VRH remplacé par \approx loi de puissance.
- ▶ Argument de percolation semble faux aux températures moyennes (le meilleur chemin direct détermine la conductance uniquement à basse température), mais peut-être artefact dû à une approximation.
- ▶ 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

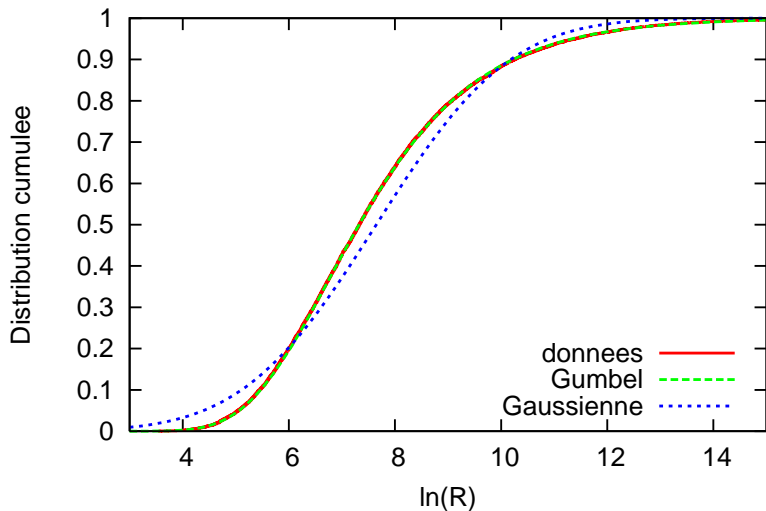
Réseau de résistances



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

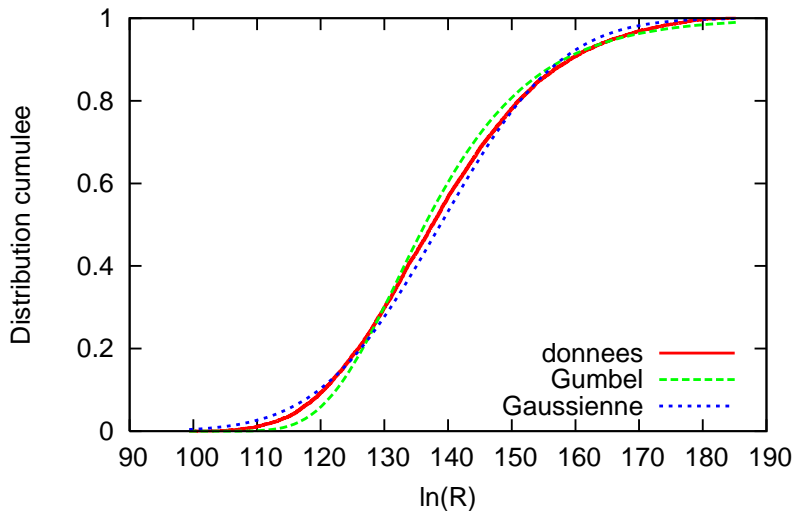
Résultats de simulations : $P(\ln R)$ (1)

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



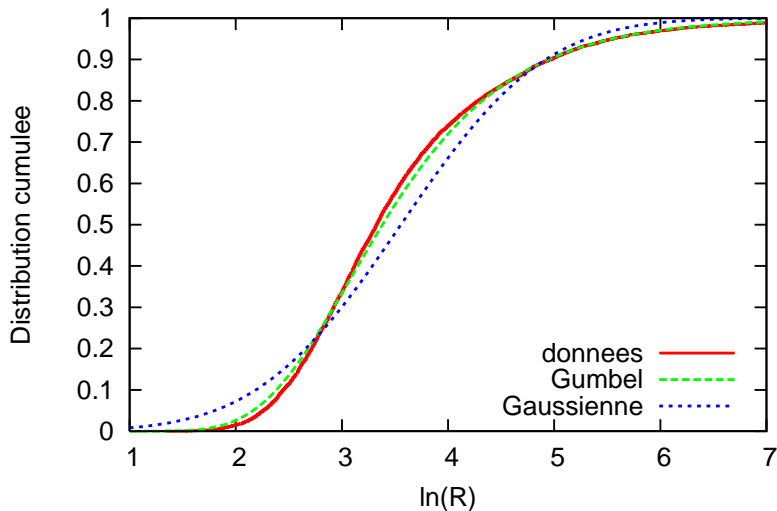
Résultats de simulations : $P(\ln R)$ (2)

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



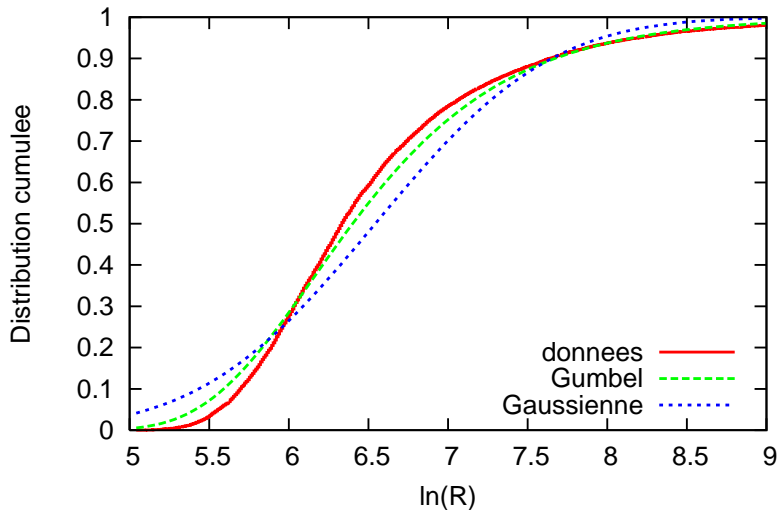
Résultats de simulations : $P(\ln R)$ (3)

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



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

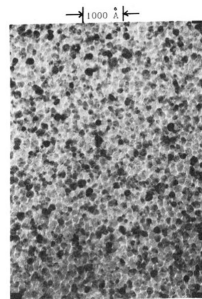
Conclusion

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

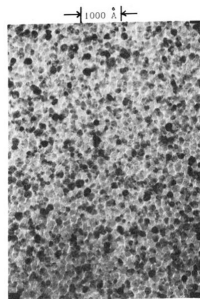


Conclusion

- ▶ 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 !