

Résistance électrique de conducteurs quantiques unidimensionnels désordonnés

Christophe Deroulers

Institut de physique théorique, Université de Cologne

Séminaire du LPTMS, 15 mai 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

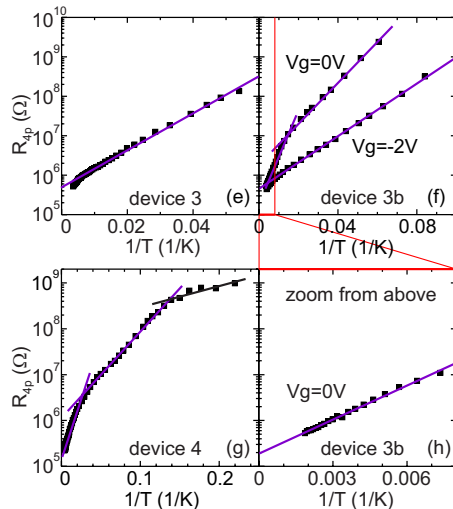
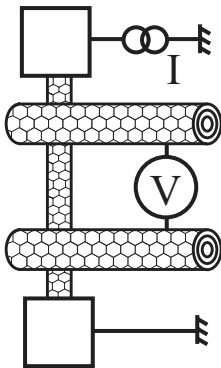
Conclusion

Cadre

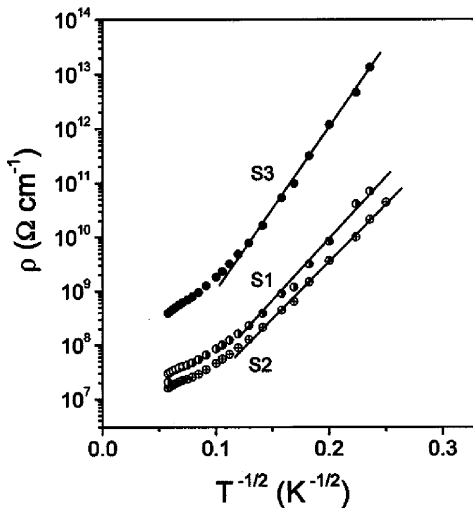
- ▶ But général : comprendre le transport de charge (et de chaleur) dans certains matériaux : semiconducteurs, nanotubes de carbone, ADN...
- ▶ Champ de recherches depuis les années 1950 — Mott, Anderson, Halperin, Matthew Fisher...
- ▶ Enjeux technologiques : miniaturisation, nouveaux composants ; fabrication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



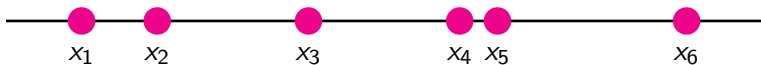
Expérience 1 : nanotubes de carbone



Expérience 2 : cristaux de polydiacétylène (quasi 1D)

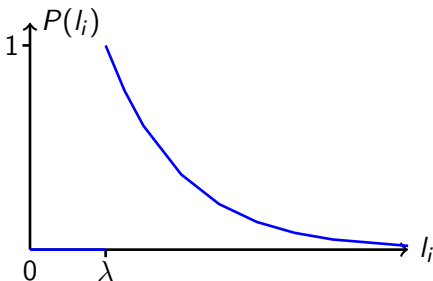


Modèle de désordre



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

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



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

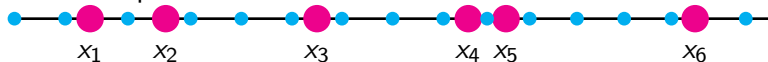
$$\forall i \quad l_i > \lambda$$

Points quantiques (1)

- Sans impuretés : densité n d'électrons uniforme.



- Avec impuretés :

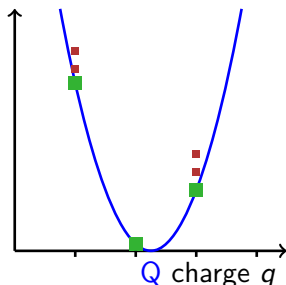


Points quantiques (2)

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 $\Delta := e^2 / (C l)$

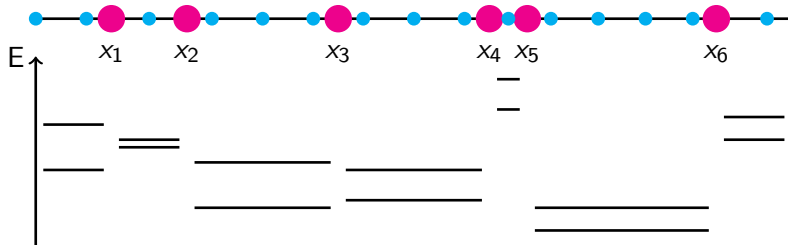
$$\text{Énergie } \frac{(q-Q)^2}{2C l}$$

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.

Excitations neutres (énergie $K\Delta$) devraient influencer peu.

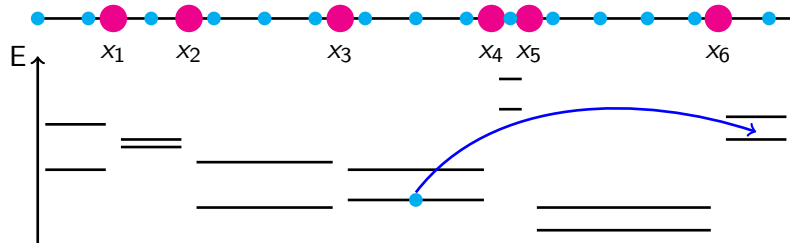
Chaîne de points quantiques



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

Transparence par effet tunnel

Du point j au point $j + 1$: $e^{-s_{j,j+1}}$ avec

$$s_{j,j+1} = 1 + (K^{-1} - 1)(\sigma_j + \sigma_{j+1})$$

où

$$\sigma_j = -\ln \frac{C\lambda_F}{K} \max(K\delta_j, T)$$

(rappel : $\delta_j = K\Delta_j = \frac{K}{Cl_j}$).

Du point j au point k :

$$\exp(-s_{j,j+1} - s_{j+1,j+2} - \dots - s_{k-1,k})$$

Courant entre deux points quantiques

A. Miller & E. Abrahams 1960

Courant net de l'état i à l'état j :

$$I_{i \rightarrow j} = f_i(1 - f_j)w_{ij} - f_j(1 - f_i)w_{ji}$$

où f_i est la proba d'occupation de l'état i par un électron (fermion) :

$$f_i = \left[\exp \frac{E_i - \mu_i}{k_B T} + 1 \right]^{-1}$$

et w_{ij} est la «fréquence de tentative» d'aller de i à j :

$$w_{ij} = \text{signe}(E_j - E_i) |\gamma| \underset{\text{effet tunnel}}{e^{-s|i-j|}} \left[e^{\frac{E_j - E_i}{k_B T}} - 1 \right]^{-1}$$

emprunt aux phonons

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 :

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



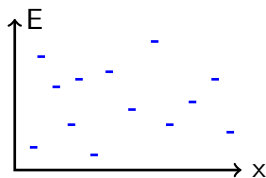
→ Réseau de résistances (qui dépendent de T) avec désordre

Perspectives :

- ▶ Étudier le réseau de résistances tout entier numériquement : voir plus loin
- ▶ Rôle des coupures à 1D

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

Modèle de semiconducteur amorphe 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).

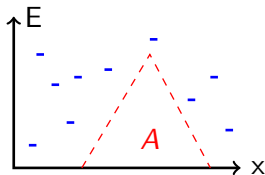
Kurkijärvi 1973, Raikh & Ruzin 1989

- ▶ Semiconducteurs cristallins et non amorphes : la répulsion de Coulomb diminue la densité d'états au voisinage de la surface de Fermi

→ $R \sim e \left(\frac{T_0}{T} \right)^{\frac{1}{2}}$ pour toute dimension D .

Shklovskii & Efros

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)

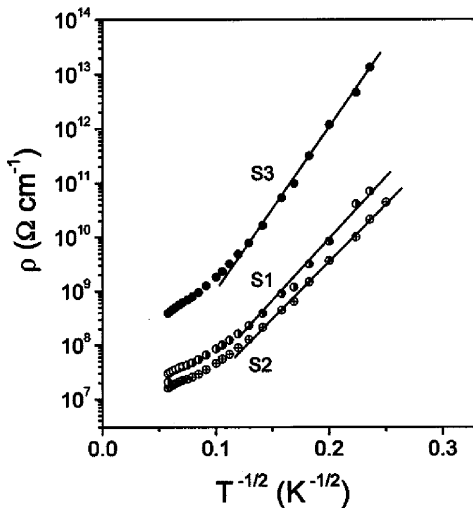
D'où

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

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

Fogler, Malinin & Nattermann 2006

Cristaux de polydiacétylène (quasi 1D)



Plan

Motivation

Modélisation

Techniques et résultats de simulations numériques

Statistiques des valeurs extrêmes et distribution de R

Conclusion

Principe des simulations

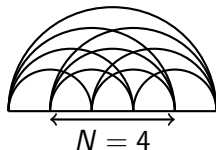
- ▶ Pour chaque valeur de T , du nombre d'impuretés N , de leur espacement moyen l, \dots
- ▶ On tire au sort un grand nombre (10000) de réalisations du désordre (positions des impuretés)...
- ▶ On calcule résistance R du fil...
- ▶ On la note. Quantités d'intérêt : $\langle \ln R \rangle$, distribution 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).

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).

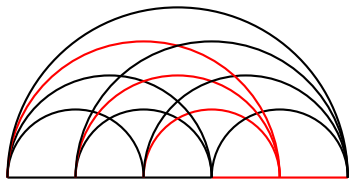
Facile en principe, mais très long ou complètement faux à basse température (pb. de stabilité numérique)

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.

Un échantillon — gradient de potentiel

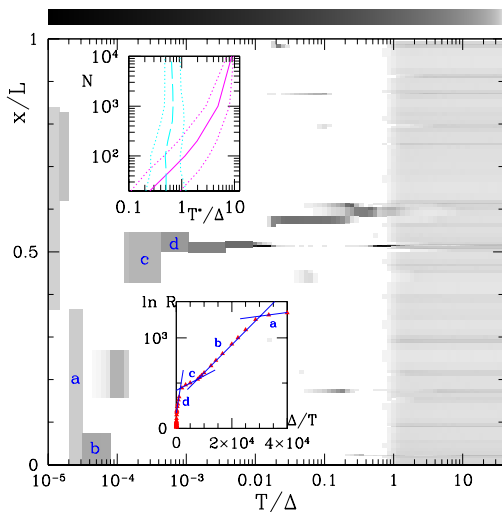
$K = 0.3$

$N = 100$ impuretés

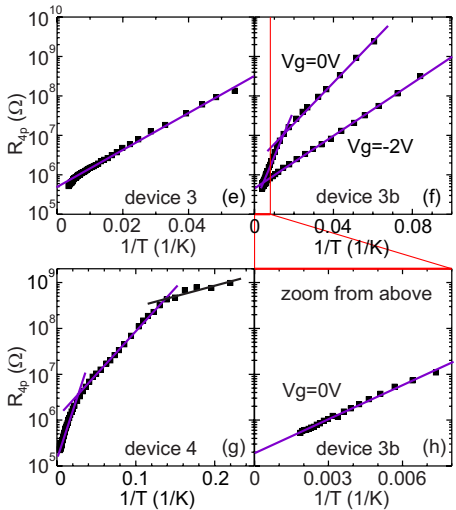
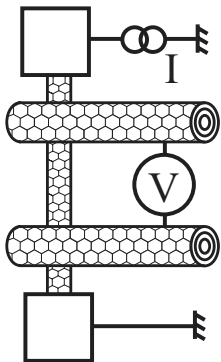
2 régimes : R

extensive / non

extensive



Expérience : nanotubes de carbone



Prédiction de Fogler *et al.*

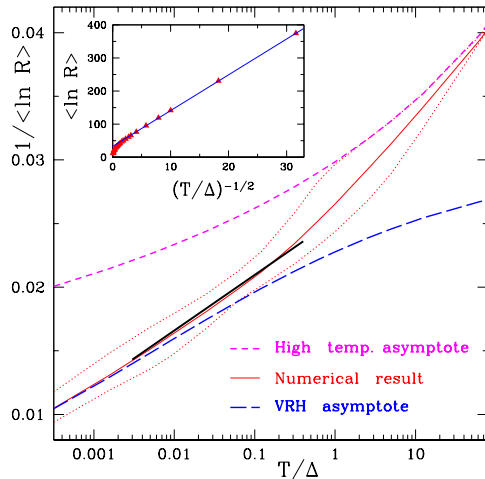
$$\ln R \approx \left\{ \begin{array}{ll} \sqrt{s \frac{\Delta}{T} \ln \frac{L}{l_0}} & \text{quand } \frac{T}{\Delta} \ll \frac{1}{s} \frac{1}{\ln \frac{L}{l_0}} \\ s \frac{\ln \frac{L}{l_1}}{\ln s Y \frac{T}{\Delta}} & \text{quand } \frac{1}{s} \frac{1}{\ln \frac{L}{l_0}} \ll \frac{T}{\Delta} \ll \frac{1}{s}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

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

Résultats pour $\langle \ln R \rangle$

$$K = 0.3$$

$N = 100$ impuretés



Premières conclusions

- ▶ Excellent accord entre $\ln R$ exact et $\ln R$ du meilleur chemin.
- ▶ Grandes fluctuations de $\ln R$ d'un échantillon à l'autre.
- ▶ Régime VRH observé à basses températures.
- ▶ Aux températures moyennes, VRH remplacé par \approx loi de puissance. Les deux sont difficiles à distinguer.

Plan

Motivation

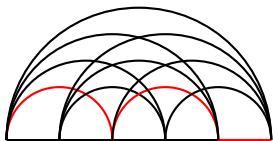
Modélisation

Techniques et résultats de simulations numériques

Statistiques des valeurs extrêmes et distribution de R

Conclusion

Approximation du meilleur chemin direct



Approximations :

1. $R_{\text{exacte}} \approx R_{\text{meilleur chemin}}$
2. Les sauts le long du meilleur chemin sont décorrélés.

Alors :

$$R_{\text{exacte}} \approx R_1 + R_2 + \dots + R_n \approx \max(R_i)$$

et R a une distribution de Gumbel + corrections de taille finie

Corrections de taille finie à la loi de Gumbel

▶ à basse T , $\ln P(u) \propto -\frac{1}{s} \frac{T}{\Delta} u^2$ (bien vérifié dans les simulations)

$$\Rightarrow \ln R \sim \sqrt{\ln L} \pm 1/\sqrt{\ln L}$$

connu dans le VRH habituel : Lee *et al.* 1984, 1986

$P(\ln R) = \text{Gumbel} + \text{corrections de t. f. en } 1/\ln L$ **nouveau**

Les corrections sont en désaccord avec le résultat de Raikh & Ruzin (1989)

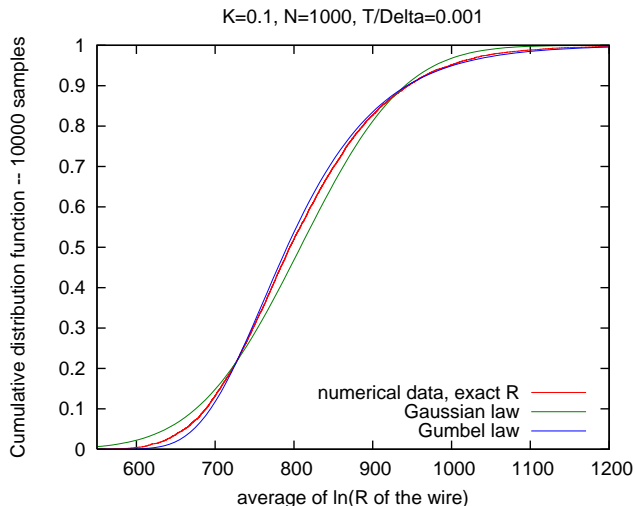
▶ à T moyenne, et si les interactions (K) ne sont pas trop intenses, $\ln P(u) \propto -\frac{1}{s} u \ln \frac{uT}{\Delta} \Rightarrow \ln R \sim \ln L / \ln \ln L \pm 1 / \ln \ln L$,

$P(\ln R) = \text{Gumbel} + \text{corrections de t. f. en } 1/\ln L / \ln(s \frac{T}{\Delta} \ln L)$

(nouveau).

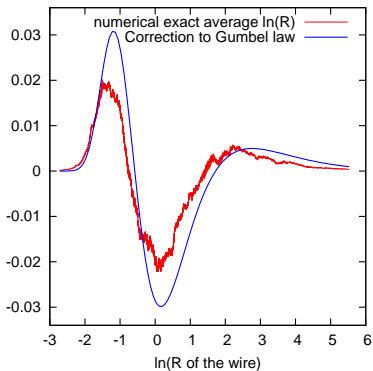
Suggestion aux expérimentateurs : utiliser les corrections de taille finie pour distinguer les deux régimes et tester si { liquide de Luttinger + impuretés fortes }

Distribution de $\ln R$: simulations à basse T

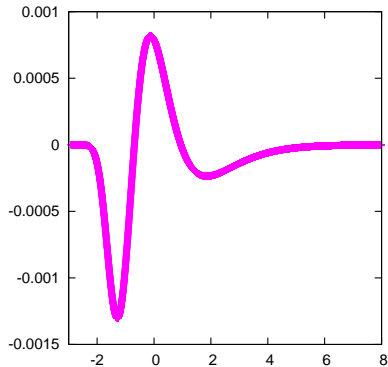


Distribution de $\ln R$: simulations à basse T — corrections de taille finie

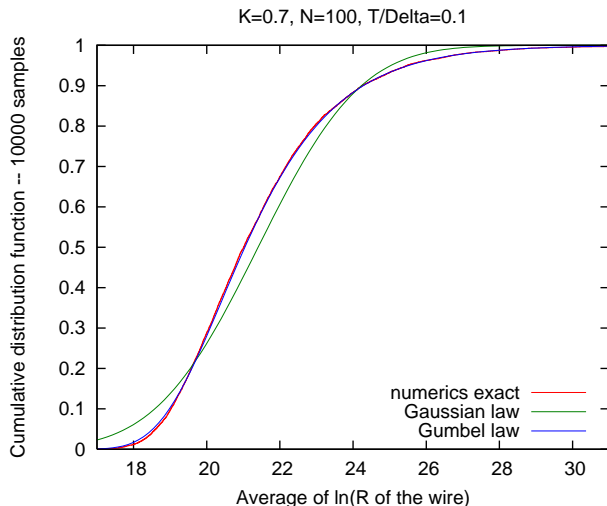
Finite-size corrections -- $K=0.1$ $N=100$ $T/\Delta=0.001$



finite-size corrections after Raikh & Ruzin's result



Distribution de $\ln R$: simulations à T moyenne



Plan

Motivation

Modélisation

Techniques et résultats de simulations numériques

Statistiques des valeurs extrêmes et distribution de R

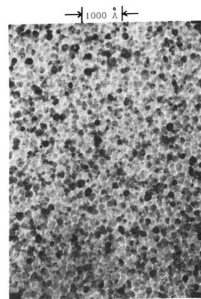
Conclusion

Conclusion

- ▶ Riche comportement des conducteurs quantiques 1D : plusieurs régimes de températures, statistiques non triviales
- ▶ Étudier la distribution de $\ln R$ peut permettre de mettre en évidence ces régimes dans des cas où $\langle \ln R \rangle$ ne suffit pas.

Perspectives

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

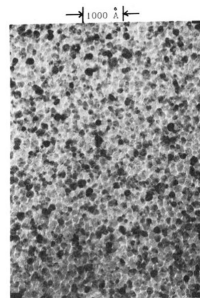


Conclusion

- ▶ Riche comportement des conducteurs quantiques 1D : plusieurs régimes de températures, statistiques non triviales
- ▶ Étudier la distribution de $\ln R$ peut permettre de mettre en évidence ces régimes dans des cas où $\langle \ln R \rangle$ ne suffit pas.

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 !