

Chapitre 1

Généralités sur les systèmes unidimensionnels aléatoires

Chapitre 1

Généralités sur les systèmes unidimensionnels aléatoires

I.	Introduction	15
II.	Le phénomène de localisation dans les systèmes désordonnés.....	16
	1. La localisation d'Anderson	16
	2. La théorie d'échelle de la localisation d'Anderson	21
III	La suppression de la localisation dans les systèmes unidimensionnels : effet dimer	24
	1. Le modèle des liaisons fortes.....	24
	2. Le modèle de Kronig-Penney : Description numérique des propriétés de transmission d'une distribution binaire dotée de la fonction delta de Dirac.	27
IV	Conclusion	37
V.	Bibliographie	38

I. Introduction

Peu après la découverte de la mécanique quantique, les physiciens ont commencé à l'appliquer aux électrons dans les solides. Ils se sont intéressés en premier lieu aux cristaux comportant peu de défauts structuraux dans lesquels, les électrons sont soumis en première approximation à un potentiel ayant la même périodicité de translation que le cristal. Grâce au théorème de Bloch [1], les états électroniques sont classés selon une structure de bandes, ce qui a permis d'expliquer le caractère isolant ou métallique de nombreux cristaux en fonction de l'appartenance ou pas du niveau de Fermi à la bande interdite [2]. Aussi à travers la théorie de Boltzmann, une approche semi-classique a été adoptée au transport électronique pour lequel les porteurs de charges sont analogues à des particules classiques subissant des collisions avec les défauts structuraux du cristal. Le transport dépendant des trois longueurs caractéristiques : la taille du système L , le libre parcours moyen l_e et la longueur d'onde de Fermi λ_F définit trois régimes de transmission : isolant lorsque $l_e < \lambda_F < L$, diffusif si $\lambda_F < l_e < L$ et balistique quand la condition $\lambda_F < L < l_e$ [3]

L'absence de la périodicité est due à la présence de défauts dans la structure. Lorsqu'il y a peu de défauts dans le cristal, les paquets d'ondes électroniques peuvent être considérés entre deux collisions consécutives comme des particules classiques. Mais, ce n'est plus le cas lorsque la densité de défauts augmente : la nature ondulatoire de l'électron se manifeste sur des distances de propagation supérieures à la distance moyenne (l_e) entre défauts. Ces effets d'interférences quantiques perturbent la propagation du paquet d'ondes et peuvent même arrêter totalement la propagation de l'onde électronique si le désordre est suffisamment important. La probabilité d'avoir un confinement d'électrons (dû au désordre) sur une distance caractéristique appelée longueur de localisation (notée ξ), a été démontrée par Anderson en 1958 [4]. Depuis, la théorie du transport dans les systèmes électroniques désordonnés s'est développée sur la base de la théorie d'échelle de la localisation pour décrire

la physique fondamentale de la propagation des ondes dans les structures aléatoires mésoscopiques [5,6].

Ce chapitre reprend d'une part les approches de base établies dans le modèle d'Anderson, relatif au phénomène de la localisation dans les systèmes désordonnés. Nous discuterons l'évolution des notions fondamentales vers la théorie d'échelle de la localisation et plus particulièrement vers le phénomène de la localisation dans les systèmes unidimensionnels (1d) désordonnés. Cependant, en présence de la corrélation à courte portée, le modèle du dimer aléatoire a constitué une exception à la règle déjà établie par la théorie d'échelle de la localisation. Les notions fondatrices de l'effet dimer sont décrites aussi bien dans le cadre d'une approche de liaisons fortes que celle du modèle de Kronig-Penney. Les propriétés de transmission conventionnelle sont ainsi présentées.

2. Le phénomène de la localisation dans les systèmes désordonnés

2.1 La localisation d'Anderson

La caractérisation des propriétés d'un matériau idéalement ordonné est relativement simple grâce à la présence d'une symétrie de translation à longue portée. Les objets quantiques sont des ondes de Bloch pouvant se déplacer librement, sans restriction dans toute structure ordonnée. Or en réalité, un système idéalement ordonné ne peut exister. Il se trouve que des distorsions apparaissent dans la structure ordonnée par la présence d'impuretés, de dislocations, de lacunes ou de défauts. Pour autant que la concentration de ces éléments reste faible, le principe de développement de la symétrie de translation reste aussi valable dans le cadre de la théorie des faibles perturbations (approximation du potentiel cohérent) [7]. Par contre, dès que la concentration de ces perturbations devient importante, il n'est plus question d'aborder l'aspect perturbation de la symétrie de translation. Une nouvelle approche pour les systèmes désordonnés est donc nécessaire [4].

En partant d'un cristal idéal, les modèles de désordre peuvent être construits de façons différentes. Les systèmes amorphes et verres peuvent être obtenus à partir de la relaxation des paramètres de la structure (désordre spatial) tandis que les alliages sont obtenus à partir de la distribution aléatoire de plusieurs types d'atomes sur un réseau (désordre compositionnel). D'une manière générale, le désordre structural est reproductif du désordre total. (Voir Fig. I.1).

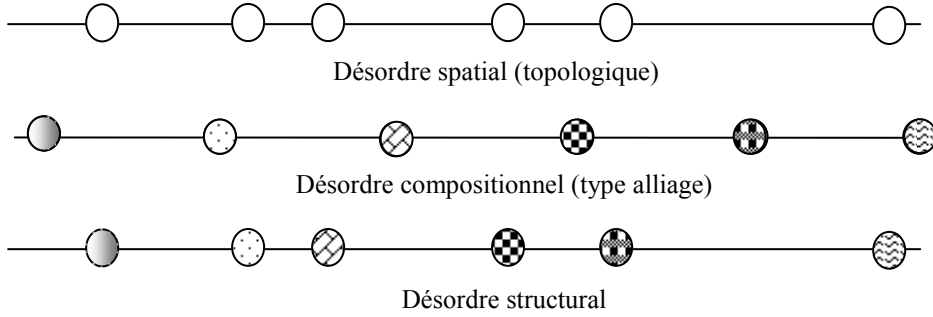


Fig. I.1 Types de désordre dans un système unidimensionnel

La localisation d'Anderson est un phénomène de propagation caractérisé par la présence d'un désordre statique (régime stationnaire) . En 1958, Anderson a montré dans son papier original intitulé : *Absence of diffusion in certain random lattices*, que dans le cas d'un potentiel suffisamment désordonné, les états électroniques relatifs à l'hamiltonien mono électronique stationnaire correspondant, ne pouvaient se propager le long de la structure désordonnée. Les fonctions propres étant confinées sur des régions finies de l'espace, la résistance augmente exponentiellement en fonction de la longueur du système [4].

A une ou à plusieurs dimensions, ce modèle est construit essentiellement sur une approche de la théorie électronique des liaisons fortes: Sur la base des états propres $|i\rangle$ relatifs aux états électroniques dans chaque atome (i), le hamiltonien du système mono électronique s'écrit

$$\hat{H} = \sum_i \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i,j} t_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (\text{I.1})$$

où ε_i , $t_{ij} = \langle i|U|j\rangle$ représentent l'énergie du site $|i\rangle$ et le terme de recouvrement entre sites voisins $|i\rangle$ et $|j\rangle$ respectivement. U étant le potentiel d'interaction entre atomes. Dans le système étudié (à symétrie spatiale cubique), un couplage constant entre premiers plus proches voisins est considéré. Les énergies de sites ε_i sont réparties aléatoirement suivant une distribution rectangulaire de largeur W tel que $-W/2 < \varepsilon_i < +W/2$.

Dans un cristal parfait, le théorème de Bloch permet de montrer que les états électroniques permis (qui reproduisent la périodicité du potentiel) sont étendus. Or dans le cas de systèmes désordonnés, ces états restent étendus en présence d'un faible désordre. La propagation de ces ondes prend un caractère diffusif conformément à la théorie de Bloch-Boltzmann dans les matériaux [2,3] (Figs I. 2 (a) et (b)).

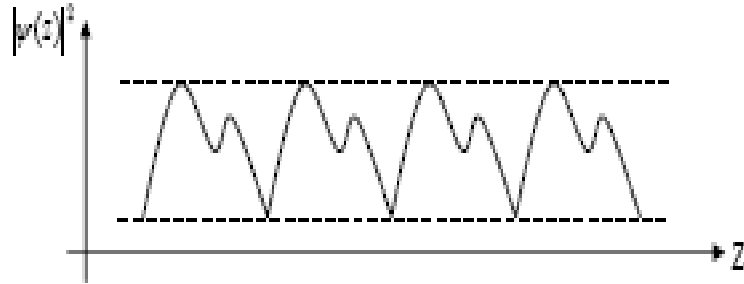


Fig. I. 2(a) Etat propre de Bloch [8]

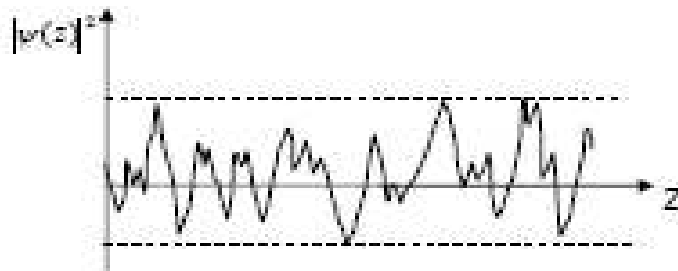


Fig. I. 2(b) Etat propre dans un système faiblement désordonné [8]

Par contre, ceci n'est plus valable dans un système fortement désordonné. Anderson a montré qu'en présence d'un désordre suffisamment fort, les états électroniques deviennent localisés et présentent en conséquence une propagation limitée dans l'espace[5]. Contrairement aux considérations précédentes (pour lesquelles une onde dans un milieu désordonné était vue comme une onde de Bloch ayant perdu sa cohérence spatiale sur des longueurs de l'ordre du libre parcours moyen), ces états propres ont une probabilité de présence importante dans une région finie de l'espace. La fonction enveloppe décroît exponentiellement à partir de certaines positions et devient négligeable au delà d'une longueur caractéristique ξ , appelée longueur de localisation (Fig. I. 2(c)). Dans ces conditions, la fonction enveloppe s'écrit :

$$f(r) \propto e^{-\frac{|r-r_0|}{\xi}} \quad (I.2)$$

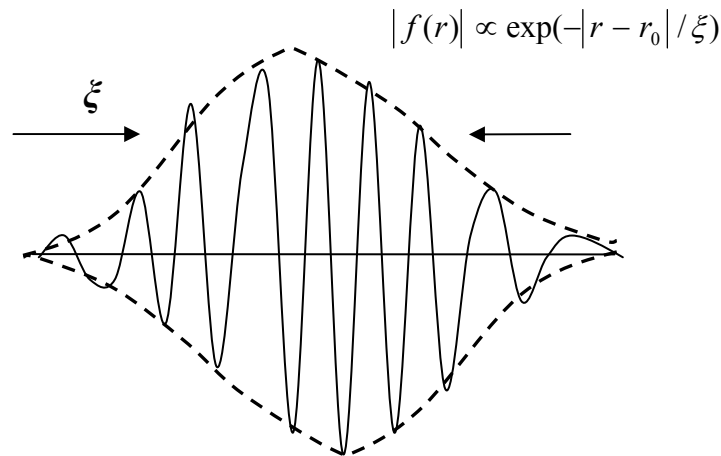


Fig. I. 2(c) Etat propre dans un système suffisamment désordonné. La fonction enveloppe est confinée dans une région finie de l'espace [8]

L'état électronique est d'autant plus localisé que ξ est petit. Ne pouvant surmonter les fluctuations aléatoires du potentiel désordonné et son incohérence spatiale, l'onde électronique se confine totalement sur une région finie de l'espace. Le caractère étendu ou localisé de l'onde dépend de trois paramètres principaux : La dimension spatiale du système, l'énergie de la particule ε_i et le taux de désordre W . Connaissant la nature de l'onde électronique dans les deux cas limites de l'ordre parfait et du désordre total, il est devenu intéressant de décrire les caractéristiques des ondes dans une situation intermédiaire. La nature des états se retrouvant affectée en passant d'un état localisé à un état étendu a permis l'émergence d'une conduction minimale σ_{\min} au front de mobilité. La présence d'états délocalisés dans cette zone à désordre intermédiaire est synonyme d'une transition de phase métal-isolant [9]. (Fig. I. 3)

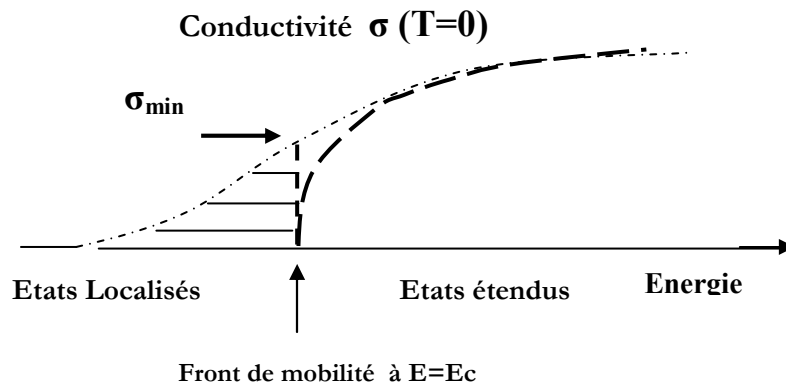


Fig. I. 3. Schéma représentant la notion de front de mobilité [9,10]. Apparition de la discontinuité dans la conductance à l'énergie critique $E=E_c$

Dans les systèmes 3d [10], la conductance minimale

$$\sigma_{\min}^{3D} \approx \left(\frac{1}{3\pi^2} \frac{e^2}{\hbar} \frac{1}{a} \right) \quad (I.3)$$

est définie via un paramètre a représentant une longueur microscopique, proche de l'inverse du vecteur d'onde de Fermi ($a \approx k_f^{-1}$). Quant aux systèmes bidimensionnels (2d) [10], l'observation intéressante a abouti un seuil de mobilité universel:

$$\sigma_{\min}^{2D} \approx 0.1 G_0 \quad (I.4)$$

$G_0 = \frac{e^2}{\hbar}$ est le quantum de conductance tandis que \hbar est la constante de Planck et e représente la charge de l'électron.

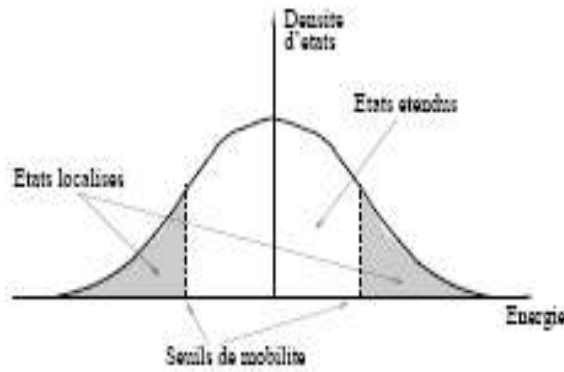


Fig. I. 4 Schéma représentant les seuils de mobilité [8]

Dans les systèmes tridimensionnels (3d), un taux de désordre critique $W_c = 16.3$ a été obtenu : Lorsque $W < W_c$, états localisés et états étendus coexistent. Sur le spectre de la densité d'états, ces états sont séparés par des seuils de mobilités: Les états de bords de bande étant localisés et les états du centre de la bande étendus. Quand W augmente, les bords de bandes se rapprochent vers le centre de la bande et l'atteignent pour $W = W_c$. Au delà, tous les états deviennent localisés. La notion de seuil de mobilité a été introduite par N.F. Mott [9] pour mieux comprendre la transition métal-isolant, telle que observée dans certains semi-conducteurs dopés désordonnés par le changement de la concentration du dopant. Le niveau de Fermi peut franchir le seuil de mobilité, d'où la transition de phase.

2.2 La théorie d'échelle de la localisation d'Anderson

Le concept de la conductance mésoscopique a été introduit par Thouless [9]. L'idée consistait à définir la conductance comme étant une réponse à la susceptibilité des énergies propres à changer en fonction de la variation des conditions aux limites sur des portions successives d'un système fini, suffisamment long [10,11] : Sur deux portions consécutives (voir Figs. I.5 et I.6), les états propres résultant d'une série de deux échantillons successifs sont des combinaisons linéaires des états propres appartenant à chaque échantillon, dépendant des intégrales d'échanges entre niveaux d'énergie des sous systèmes et de l'espacement énergétique moyen δW (en relation avec la densité d'état) dans chaque échantillon.

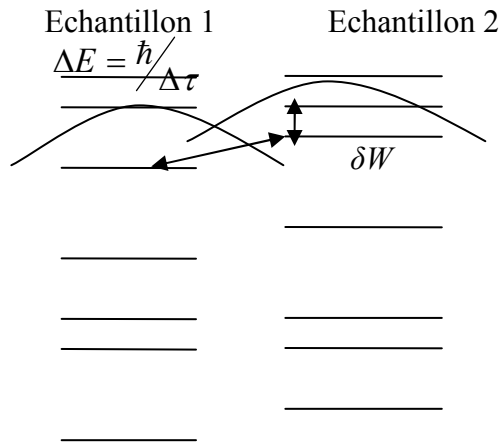


Fig. I. 5 La conductance selon les considérations de Thouless [11]

Partant de la définition de Thouless, la conductance est décrite par le nombre de Thouless conformément au rapport $\frac{\Delta E}{\delta W}$ (où ΔE est relatif au temps de transmission dans chaque échantillon et δW est représentatif de la granularité de la structure) [11]: En particulier, si l'état propre est localisé, ΔE sera insensible aux conditions aux limites et par conséquent $\frac{\Delta E}{\delta W}$ devient exponentiellement faible. Dans ce cas, cette valeur est tellement faible que l'état propre de la structure en série, est localisé dans son élément d'origine. Par ailleurs, si le taux de granularité δW est faible, le nombre de Thouless devient suffisamment important, pour reproduire une situation tendant vers l'ordre. L'état propre correspondant aux échantillons en série, se retrouve en conséquence étendu et projeté sur la base de chaque échantillon. De ce fait, la susceptibilité $\frac{\Delta E}{\delta W}$ aux changements des conditions aux limites

d'un échantillon à un autre, apparaît comme étant le seul paramètre pouvant contrôler la nature des états propres pouvant diffuser dans ces systèmes désordonnés. En introduisant la conductance g (sans dimension), Thouless montra que cette grandeur est mesurable sur des systèmes à longueurs finies. La conductance mésoscopique est directement exprimée par le nombre de Thouless via :

$$g = G / G_0 \propto \frac{\Delta E}{\delta W} = \frac{\Delta E}{dE/dN} \quad (I.5)$$

reliant ainsi la nature locale de l'état quasi-lié (à travers ΔE) et la granularité du spectre par le rapport dE/dN dans chaque échantillon. N représentant le nombre d'atome dans l'échantillon.

En 1979, Abrahams et al. [12] ont développé la théorie d'échelle de la localisation, basée essentiellement sur les considérations de Thouless [11]. Le problème consistait à décrire la variation de la conductance en fonction de la taille du système et de sa dimension linéaire pour décrire comment $g(bL)$ dépend de $g(L)$ lorsque la longueur du système passe de L à bL où b est le facteur d'échelle. Abrahams et al. [12] ont proposé une fonction $g(bL)$ dépendant uniquement de $g(L)$ et du facteur d'échelle b , telle que

$$g(bL) = f[(b, g(L))] \quad (I.6)$$

où f est une fonction universelle, dépendant uniquement de la dimension du système considéré. Cette équation, peut également être exprimée d'une manière différentielle en posant : $b = 1 + \varepsilon$ où ε est un paramètre faible devant l'unité.

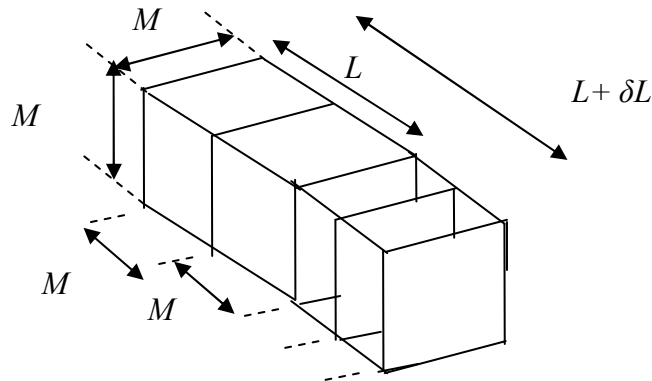


Fig. I. 6 Le principe de base de la théorie d'échelle de la localisation : la variation de la conductance en fonction de la longueur d'un système désordonné.

La théorie d'échelle est valable pour une propagation diffusive des électrons ($L > l_e$ où l_e est le libre parcours moyen). L'idée est que le changement de désordre effectif dans un système lorsque ce dernier devient plus grand, dépend de sa valeur précédente. La seule mesure de ce désordre effectif provient de la conductance sans dimension g . La fonction d'échelle $\beta(g)$ est définie par:

$$\frac{d \ln g(L)}{d \ln L} = \frac{[\partial f(bg) / \partial b]_{b=1}}{g(L)} = \beta[g(L)] \quad (I.8)$$

En supposant la fonction $\beta[g(L)]$ continue et monotone, son comportement qualitatif est déduit par extrapolation, à partir des réponses asymptotiques de la conductance g dans les structures métallique et isolante: Si le système est faiblement désordonné, les lois d'addition des conductances dans le régime métallique (loi d'Ohm) restent valables. La conductance varie en loi de puissance L^{d-2} . En conséquence :

$$\beta(g) = d - 2 \quad (I.9)$$

Par contre, dans le cas des isolants, avec la décroissance exponentielle de g , ($g \propto e^{-\frac{L}{\xi}}$ où ξ est la longueur de localisation), la fonction d'échelle s'écrit :

$$\beta(g) = \ln(g) \quad (I.10)$$

Conformément à ces considérations, la fonction d'échelle $\beta(g)$ est représentée sur Fig. I. 7

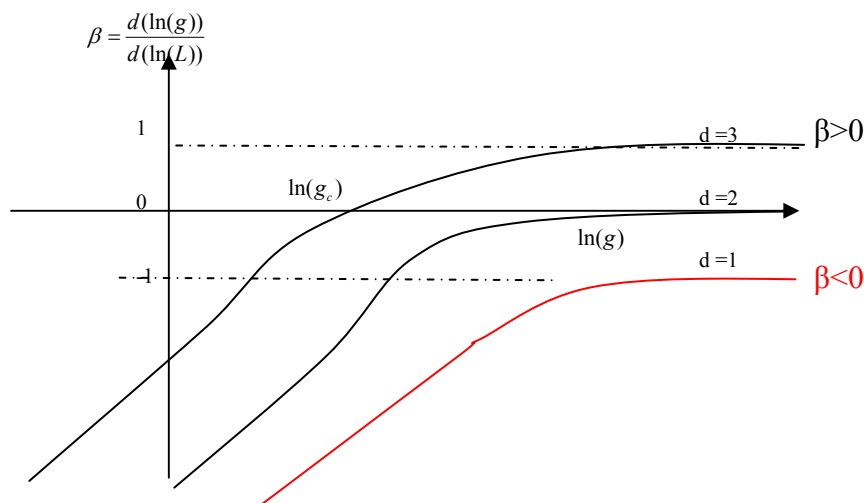


Fig. I. 7 Représentation schématique de la fonction d'échelle $\beta(g)$. L'apparition de la dimension critique $d^*=2$ au delà de laquelle la transition métal-isolant se produit à $g = g_c$. Les systèmes 1d sont localisés ($\beta < 0$) [12]

L'étude de la fonction d'échelle β a permis de mettre en évidence l'existence d'une dimension critique $d^* = 2$ au-delà de laquelle la transition de phase métal-isolant est réalisée. En effet, conformément à Fig. I. 7, la situation ($\beta < 0$) correspond à la décroissance de la conductance en fonction de la taille du système et à la présence uniquement d'états localisés dans toutes les structures désordonnées $1d$ et $2d$. La théorie d'échelle de la localisation à un seul paramètre g a ainsi présenté des arguments pour décrire les propriétés de transmission dans les systèmes désordonnés. En se basant sur l'approche de Landauer dans la description de la conductance à partir des propriétés de la transmission des ondes [13], d'autres travaux ont appuyé les résultats universels de la théorie d'échelle de la localisation d'Anderson à un paramètre (g) dans les systèmes désordonnés $1d$. [14].

II. La suppression de la localisation d'Anderson dans les systèmes unidimensionnels par effet dimer

Synonyme d'interférences destructives, le désordre est à l'origine du phénomène de la localisation. La localisation d'Anderson, telle introduite dans le cadre de l'approximation des liaisons fortes, prédit à travers la théorie d'échelle de la localisation l'absence du régime de transmission métallique dans les systèmes unidimensionnels suffisamment longs et désordonnés. Or en présence de corrélation de désordre, des interférences constructives peuvent apparaître. Cette violation des règles établies par la théorie d'échelle de la localisation est présentée à travers le modèle du dimer aléatoire dans les cadres respectifs de la théorie des liaisons fortes et du modèle de Kronig-Penney [15-21]. Une simulation numérique pour le dernier cas permettra de reproduire les réponses de transmission conventionnelles dans le modèle du dimer aléatoire [21].

1. Modèle des liaisons fortes

L'alliage binaire est le système le plus simple pouvant décrire les effets du désordre [15]. Partant du modèle des liaisons fortes, la propagation des ondes a été décrite dans le cas d'un système binaire pour lequel les énergies de site ε_A et ε_B sont réparties aléatoirement sur l'ensemble des sites du réseau. La fonction de distribution correspondante est donnée par :

$$P(\varepsilon) = c_A \delta(\varepsilon - \varepsilon_A) + c_B \delta(\varepsilon - \varepsilon_B) \quad (\text{I.11})$$

où c_A et $c_B=1-c_A$ représentent les concentration des éléments A et B respectivement. Le symbole δ décrit la distribution delta de Dirac.

Dans le modèle des liaisons fortes à interactions entre premiers plus proches voisins, l'équation de Schrödinger (Eq. I.1) est donnée par l'équation aux différences finies :

$$(E - \varepsilon_i)c_i - U_{i,i+1}c_{i+1} - U_{i,i-1}c_{i-1} = 0 \quad (\text{I.12})$$

où c_i et c_{i+1} sont les amplitudes de la décomposition de l'onde électronique sur les sites i et $i+1$ respectivement tandis que $U_{ij} = \langle i|U|j \rangle$ représente le terme d'interaction entre les états i et j . U étant le potentiel d'interaction. Cette équation se présente aussi sous la forme matricielle:

$$\begin{pmatrix} c_{i+1} \\ c_i \end{pmatrix} = P_i \begin{pmatrix} c_i \\ c_{i-1} \end{pmatrix} \quad (\text{I.13})$$

où

$$P_i = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_i}{U_{i,i+1}} & -\frac{U_{i-1,i}}{U_{i,i+1}} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{I.14})$$

est la matrice de passage qui relie les amplitudes des sites voisins $i-1$, i et $i+1$ respectivement.

Dans une série de travaux initiée par le papier original de D.H. Dunlap et al., un modèle non conformiste au point de vue d'Anderson sur la propagation des ondes électroniques dans les systèmes 1d désordonnés a été proposé [16,17] : En faisant apparaître le défaut par paires aléatoires dans toute la structure hôte, une corrélation à courte portée est ainsi imposée au désordre donnant lieu au modèle du dimer aléatoire.

Pour déterminer les réponses de localisation dans ce modèle, il était instructif d'analyser les propriétés de réflexion à travers ce défaut, telles que établies dans le cadre de la théorie des liaisons fortes [17]: En plaçant un défaut dimer aux sites d'indices $n = -1, 0$ sur une chaîne linéaire infinie, les conditions aux limites autour du motif permettent d'écrire :

$$c_n = \begin{cases} e^{ik_n} + r e^{-ik_n} & \text{pour } n < -1 \\ \tau e^{ik_n} & \text{pour } n \geq 1 \end{cases} \quad (\text{I.15})$$

k_n étant le vecteur d'onde sur chaque cellule d'indice n . En considérant une interaction avec seulement les premiers plus proches voisins ($\bar{U} = U_{i,i+1} = U_{i,i-1}$), les amplitudes de transmission τ et de réflexion r sont obtenues de l'application des conditions de continuité à travers le motif défaut dimer:

$$c_0 = 1 + r = \tau(\varepsilon_- e^{ik} + \bar{U}) / \bar{U} \quad (\text{I.16})$$

avec

$$\varepsilon_- = \varepsilon_A - \varepsilon_B \quad (\text{I.17})$$

Le coefficient de réflexion peut être déterminé à partir de la relation

$$R = |r|^2 = \frac{\varepsilon_-^2 (\varepsilon_- + 2\bar{U} \cos(k))^2}{\varepsilon_-^2 (\varepsilon_- + 2\bar{U} \cos(k))^2 + (2\bar{U}^2 \sin(k))^2} \quad (\text{I.18})$$

En conséquence, la transparence totale du dimer défaut est obtenue lorsque :

$$\varepsilon_- + 2\bar{U} \cos(k) = 0 \Rightarrow \varepsilon_b = \varepsilon_A + 2\bar{U} \cos(k) \quad (\text{I.19})$$

L'appartenance de l'énergie de site ε_B à la bande permise du réseau hôte (A) (Eq. (I.19)), montre l'existence d'un vecteur d'onde particulier k_0 (vérifiant $k_0 = \cos^{-1}(\varepsilon_B - \varepsilon_A / 2\bar{U})$) pour lequel le motif dimer est totalement transparent.

Par ailleurs, pour un tel défaut (noté d), la matrice de passage du dimer $P_d(E)$ se présente en fonction de celle du défaut $P_B(E)$ sous la forme:

$$P_d(E) = P_B^2(E) = \begin{pmatrix} \frac{E - \varepsilon_B}{\bar{U}} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 \quad (\text{I.20})$$

A un signe près, celle-ci est équivalente à la matrice identité:

$$P_d(E) = -I \quad \text{lorsque } E = \varepsilon_B \quad (\text{I.21})$$

L'équation (I.18) présente aussi un autre cas de transparence si $\varepsilon_- = 0$. Correspondant à une situation similaire à celle d'un ordre parfait ($\varepsilon_A = \varepsilon_B$), les matrices de passage relatives aux éléments hôte et défaut deviennent équivalentes:

$$P_B(E) = P_A(E) \quad (\text{I. 22})$$

Partant de ces deux cas possibles (Eqs. I.21 et I.22), la condition de transparence du motif défaut dimer, a été démontrée par H-L Wu et al. dans le cadre exclusif de l'approximation des liaisons fortes et puis généralisée à d'autres types de corrélations de désordre binaires. La condition généralisée des résonances est donnée par :

$$P_d(E) = \eta_1 P_A(E) + \eta_2 I \quad (\text{I. 23})$$

où η_1 et η_2 sont deux constantes numériques [17]. Partant de cette idée de décomposition sur l'ensemble des résonances probables, X.Q. Huang et al. ont obtenu analytiquement des expressions universelles représentant les énergies de résonance correspondant à des défauts présentant des symétries internes [18]. Les fonctions enveloppes pour des systèmes aperiodiques et autres aléatoires à désordre corrélé ont ainsi été décrites et utilisées comme critère de (dé)localisation dans ces structures 1d particulièrement désordonnés [18,19].

2. Modèle électronique de Kronig-Penney

Le modèle de Kronig-Penney est une autre approche mathématique permettant de déterminer la structure de bandes d'énergie dans un profil de potentiel periodique. Etabli sur une base de fonctions d'ondes planes, ce modèle exprime la reproduction periodique des conditions de continuité telles définies sur une cellule élémentaire. Une alternance de bandes permises et de bandes interdites est ainsi obtenue [20]. (voir Annexe I.A)

L'objectif de cette section consiste à définir la condition de la suppression de la localisation d'Anderson dans les systèmes unidimensionnels par la corrélation du désordre binaire à courte portée (effet dimer) dans le modèle de Kronig-Penney. Dans cette partie, nous reproduisons l'approche conventionnelle de l'effet dimer telle étudiée numériquement par E. Sanchez et al. [21].

a -Etude de la propagation des ondes électroniques dans un système binaire désordonné : L'effet dimer conventionnel

Considérons un électron de vecteur d'onde k se déplaçant dans une chaîne linéaire 1d ordonnée. Le réseau hôte dont la cellule unité (désignée par (A)) est de symétrie de translation de période d :

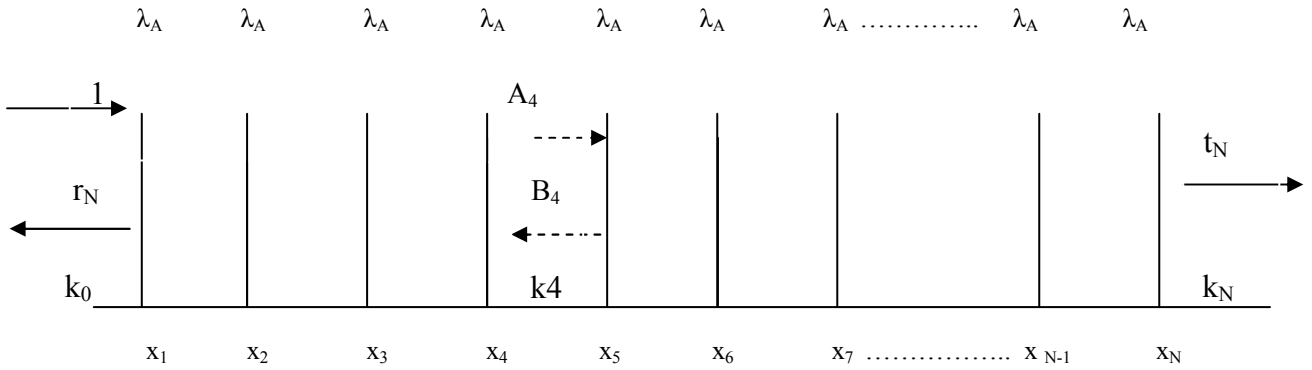


Fig. I.7(a) Représentation schématique du modèle de Kronig-Penney à distribution delta de Dirac

Dans ce système ordonné, le potentiel diffuseur est défini par une série de distribution delta de Dirac :

$$V(x) = \sum_n \lambda_n \delta(x - x_n) \quad (I. 24)$$

où le paramètre $\lambda_n = \lambda_A$ constitue l'intensité du pic, tandis que $x_n = nd$ représente les sites réguliers du réseau. Pour ce système totalement ordonné, le motif (caractérisé par λ_A et d) définit l'équation caractéristique du modèle de Kronig-Penney relative au motif (A). Celle-ci est décrite par :

$$\kappa_A(k) = \cos(kd) + \frac{\lambda_A}{2k} \sin(kd) \quad (I. 25)$$

où $\kappa_A(k)$ traduit la relation de dispersion correspondante (voir Annexe I). Ce modèle est une limite du modèle conventionnel à barrières rectangulaires lorsque les épaisseurs de celles-ci sont considérées nulles [20]

Les paramètres structuraux de la cellule conditionnent l'alternance des bandes permises et interdites dans la structure de bandes. La bande permise (interdite) est obtenue lorsque $|\kappa_A(k)| < 1$. ($|\kappa_A(k)| > 1$) tandis que la condition $\kappa_A(k) = \pm 1$ délimite les bords de bandes correspondantes.

Pour rendre compte d'un désordre structural, considérons l'alliage binaire désordonné (AB), construit à partir l'introduction dans le réseau hôte (A) d'un nombre fini d'éléments (B), défauts dont l'intensité du pic est λ_B , préservant la même périodicité d . Le désordre dans ce système binaire aléatoire peut être considéré selon deux configurations différentes :

- Le désordre binaire non corrélé est obtenu lorsque l'élément B est généré de manière totalement aléatoire sur le réseau hôte :

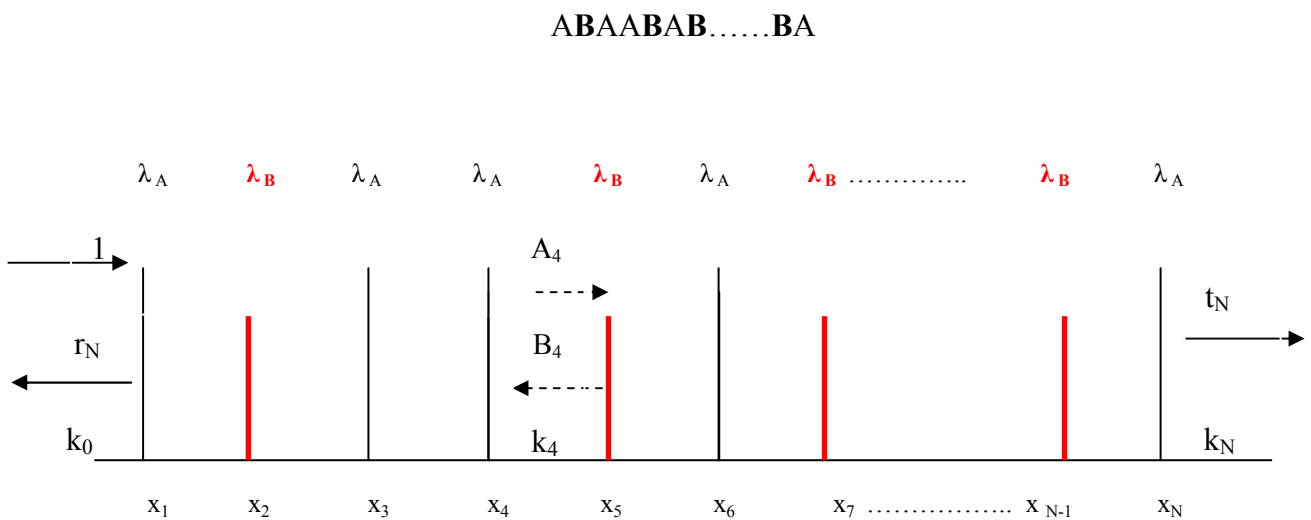


Fig. I.7(b) : Représentation schématique du désordre binaire non corrélé

- Le désordre binaire corrélé à courte portée (ou le modèle du dimer aléatoire) consiste à disposer l'élément B par paires aléatoires (sans effet d'agrégats) dans le sous-réseau hôte :

BBAAABBAAA

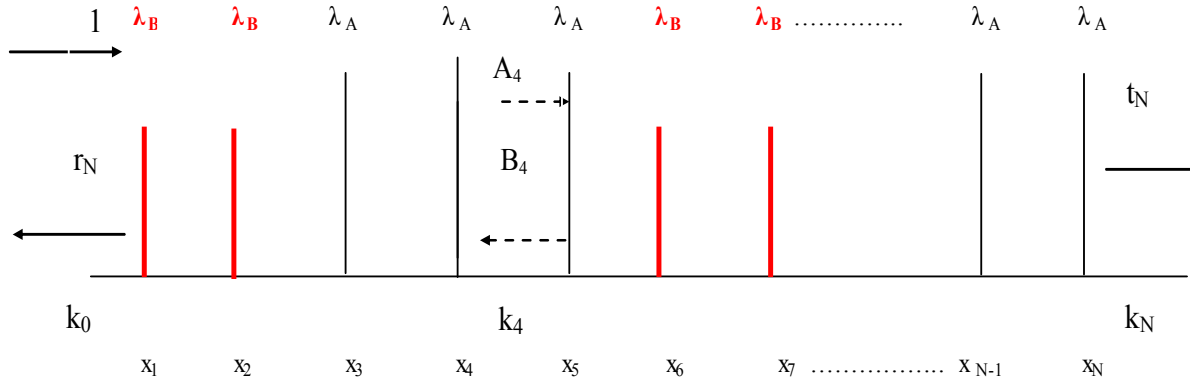


Fig. 7(c). Représentation schématique du désordre binaire corrélé à courte portée

1. Diffusion à travers un défaut dimer

Soit un électron de vecteur d'onde k appartenant à une bande permise du réseau hôte (A). Dans ce cas, l'équation caractéristique du modèle de Kronig-Penney doit vérifier :

$$\left| \cos(kd) + \frac{\lambda_A}{2k} \sin(kd) \right| \leq 1 \quad (\text{I.26})$$

A partir de l'équation de Schrödinger mono-électronique correspondante de potentiel $V(x)$,

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + \sum_n \lambda_n \delta(x - nd) \right] \psi(x) = E \psi(x) \quad (\text{I.27})$$

les conditions de continuité de la fonction d'onde $\psi(x)$ et de sa dérivée $\psi'(x)$ d'un site à un autre permettent de mettre en évidence la formule de Poincaré [21,23]. Apparaissant sous une forme tri-réursive :

$$\psi_{n+1}(x) = 2 \kappa_n \psi_n(x) - \psi_{n-1}(x) \quad \Leftrightarrow \quad \begin{pmatrix} \psi_{n+1}(x) \\ \psi_n(x) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 2\kappa_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n(x) \\ \psi_{n-1}(x) \end{pmatrix} \quad (\text{I.28})$$

l'évolution spatiale de l'onde électronique à travers les sites du réseau peut ainsi être décrite.

Dans le cas de la présence d'un motif dimer défaut (BB), situé sur deux sites successifs m et $m+1$:

$$\lambda_n = \begin{cases} \lambda_B & \text{si } n = m, m+1 \\ \lambda_A & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (\text{I.29})$$

l'application consécutive de la formule de Poincaré sur les trois sites successifs: $n = m-1, m, m+1$ et l'élimination des termes ψ_m et ψ_{m+1} relatifs à la position du motif dimer, aboutissent à l'expression :

$$-\psi_{m+2} = [2\kappa_A + 2\kappa_B + ((2\kappa_B)^2(2\kappa_A))] \psi_{m-1} + (1 - (2\kappa_B)^2) \psi_{m-2} \quad (\text{I.30})$$

A un signe près (dû au terme de déphasage de π), cette équation devient équivalente à celle d'une structure ordonnée (Eq. I. 28), indépendante de la présence du défaut dimer (situé sur les sites $n = m, m+1$) lorsque la condition de la transparence conventionnelle :

$$\kappa_B(E) = 0 \quad (\text{I.31})$$

est vérifiée. Par ailleurs, sachant que pour un motif dimer, la matrice de passage s'écrit :

$$P_d = \begin{pmatrix} 2\kappa_B & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 \quad (\text{I.32})$$

celle-ci se réduit à un signe près, à la matrice identité I:

$$P_d = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}^2 = -I \quad (\text{I.33})$$

Dans une représentation de produits successifs de matrices de passage, le défaut dimer est décrit par une matrice neutre. De ce fait, la condition conventionnelle

$$|\kappa_A(k_r)| \leq 1 \text{ et } \kappa_B(k_r) = 0 \quad (\text{I.34})$$

suffit pour réaliser une situation de transparence du défaut dans toute la structure, donnant lieu à un système désordonné dont la configuration est similaire (mais pas identique) à celle d'un système ordonné [16-19, 21].

2. Diffusion sur un réseau d'alliage binaire.

Dans cette section, nous nous intéressons à travers une simulation numérique à l'étude de la transmission d'une onde électronique d'énergie incidente E sur un système 1d de longueur L . Nous envisageons de résoudre l'équation de Schrödinger (Eq. I.27) et de décrire des propriétés de transmission pour un alliage binaire, dont la fonction de distribution est donnée par :

$$P(\lambda_n) = c_A \delta(\lambda_n - \lambda_A) + (1 - c_A) \delta(\lambda_n - \lambda_B) \quad (\text{I.35})$$

où λ_A et λ_B représentent les intensités de pics des cellules hôte et défaut respectivement. Les défauts B apparaissent dans la chaîne avec la concentration $c_B = 1 - c_A$. c_A étant la concentration des éléments hôtes.

Conformément au papier de E. Sacher et al.[21], les deux types du désordre binaires aléatoires sont considérés. L'effet dimer est examiné dans le but de montrer l'apport de la corrélation du désordre à courte portée sur les propriétés de transmission des systèmes binaires non corrélés. Le système d'unités atomiques a été considéré ($\frac{\hbar^2}{2m} = 1$).

Le système physique étudié contient $N = 10\,000$ éléments diffuseurs espacés d'un pas de réseau unité ($d = 1$). Les cellules hôte et défauts sont caractérisés par $\lambda_A = 1.0$ et $\lambda_B = 1.5$ respectivement alors que $c_B = 0.20$. Les réponses moyennes de la transmission $\langle T \rangle$ et de la longueur de localisation $\langle \xi \rangle$ (à travers le coefficient de Lyapunov réduit $\langle \frac{L}{\xi} \rangle$) sont déterminées à partir d'une procédure statistique qui impose un test de convergence des valeurs moyennes de la transmission $\langle T \rangle$ sur un nombre suffisamment grand de configurations équivalentes au même désordre [22]. Dans notre travail, le nombre maximum de configurations est déterminé par la condition de tolérance suivante :

$$\left| \frac{\langle T_n \rangle - \langle T_{n-1} \rangle}{\langle T_{n-1} \rangle} \right| < 0.01 \quad (\text{I.36})$$

où $\langle T_n \rangle$ définit la valeur moyenne du coefficient de transmission à la $n^{\text{ème}}$ itération.

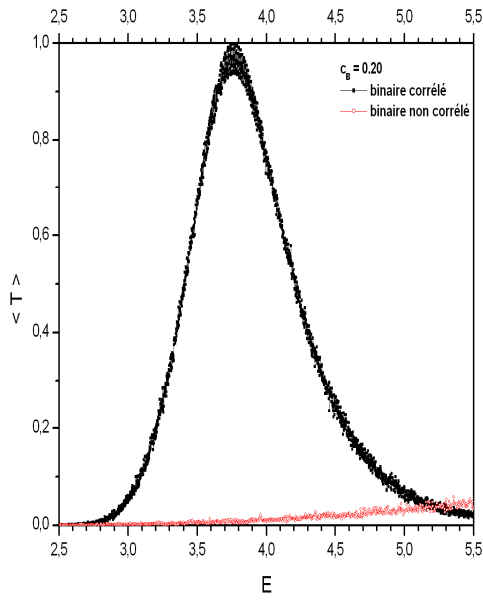
Fig. I.8(a), montre le comportement du coefficient de transmission moyen $\langle T(E) \rangle$ en fonction de l'énergie incidente E pour les désordres binaires corrélé et non corrélé. En tant que source d'interférences destructives sur l'onde incidente, l'effet du désordre non corrélé apparait à travers les faibles transmissions enregistrées sur l'ensemble du domaine d'énergie considéré. Le désordre non corrélé présent dans la structure ($N = 10\ 000$ et $c_B = 0.20$) est suffisamment contraignant pour la propagation des ondes électroniques. Tous les états sont localisés ($1 < \left\langle \frac{L}{\xi(E)} \right\rangle$) (voir Fig. I. 8(b).)

D'autre part, la présence de la corrélation dans le désordre binaire à courte portée, provoque l'apparition d'une mini-bande d'états délocalisés ($\left\langle \frac{L}{\xi(E)} \right\rangle < 1$) autour de l'énergie de résonance $E_r = 3.7626$ dont la transmission moyenne $\langle T(E_r) \rangle \approx 1$. La réponse du système montre une diminution du coefficient de transmission $\langle T(E) \rangle$ de part et d'autre de la résonance dimer E_r . En effet, au fur et à mesure que l'énergie incidente s'éloigne de la résonance, l'onde incidente se retrouve de plus en plus confrontée aux effets néfastes du désordre jusqu'à atteindre des transmissions quasi insignifiants aux bords de la mini-bande. A la résonance, l'état le plus étendu est obtenu ($\left\langle \frac{L}{\xi(E_r)} \right\rangle \approx 5.10^{-4}$)

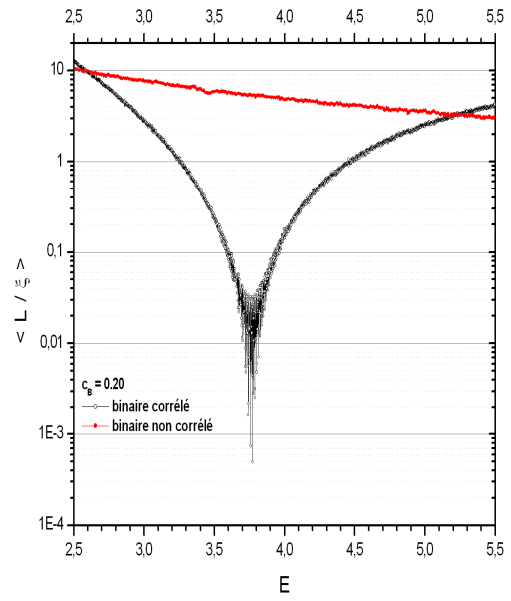
L'énergie de résonance qui vérifie la condition de résonance conventionnelle :

$$\kappa_B(E_r) = 0 \Leftrightarrow \frac{\tan(\sqrt{E_r})}{\sqrt{E_r}} = \frac{-2}{\lambda_B} \quad (\text{I.37})$$

est une grandeur intrinsèque au motif défaut B. De ce fait, la variation du taux du désordre, (la taille du système N et / ou la concentration des défauts c_B), n'influe que sur l'allure de la courbe de transmission autour de la résonance E_r . Comme indiqué sur Fig. I.9, l'augmentation du taux du désordre provoque plus de contraintes à la propagation de l'onde électronique au delà du domaine avoisinant l'énergie de résonance E_r , présentant des profils de transmission de plus en plus fins. La localisation d'Anderson est ainsi accentuée en dehors de la résonance avec des modes de transmission plus localisés.

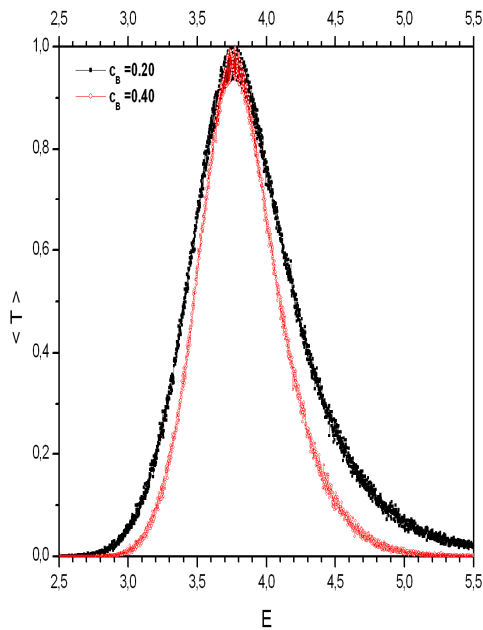


(a)

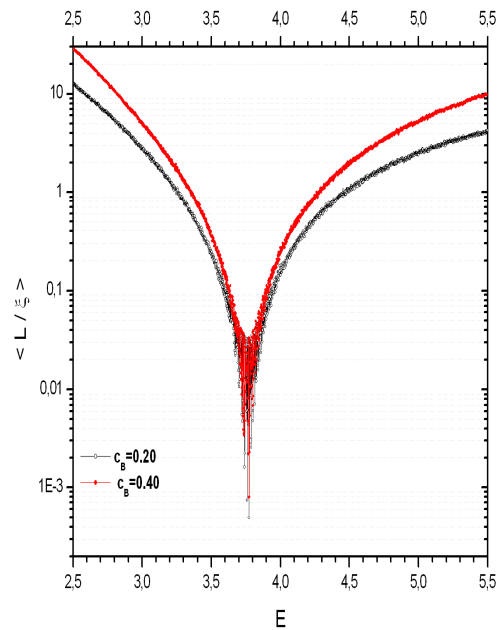


(b)

Fig. I.8 Réponses moyennes de la transmission et du coefficient de Lyapunov réduit pour les deux cas du désordre binaires : corrélé (noir) et non corrélé (rouge) [21]



(a)



(b)

Fig. I.9 Réponses moyennes de la transmission (a) et du coefficient de Lyapunov réduit (b) pour deux concentrations différentes : $c_B = 0,20$ (noir) et $c_B = 0,40$ (rouge) du désordre binaire corrélé [21].

Le comportement de l'onde incidente le long du milieu de propagation est aussi décrit à partir de la résistance de Landauer (mesurée en unité $(1/G_0)$) [13,23,24]:

$$\rho(E) = \frac{R(E)}{T(E)} = \frac{1-T(E)}{T(E)} \quad (I.38)$$

Définie à partir des réponses de la transmission, celle-ci permet aussi de traduire les effets de la diffusion de l'onde électronique à travers le milieu de propagation. A la résonance dimer, le milieu devient faiblement résistif ($\rho_{\text{dimer}}(E_r) \approx 10^{-4}$). Pour les paramètres utilisés, ceci correspond à $\rho_{\text{dimer}}(E_r) \approx 10^{-11} \rho_{nc}(E_r)$. L'indice nc correspond au cas du désordre binaire non corrélé (voir Fig. I.10).

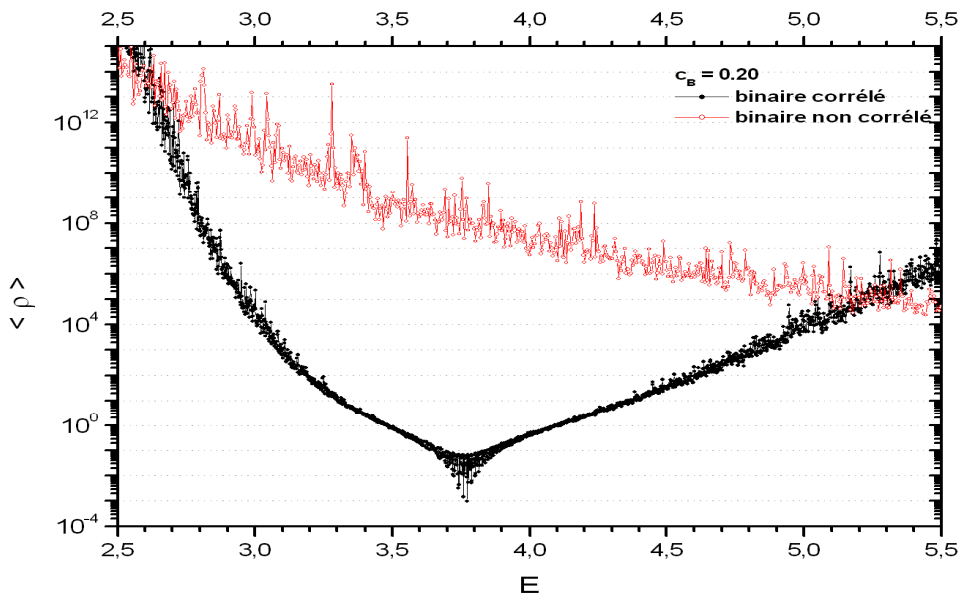


Fig. I.10 Réponses moyennes de la résistance de Landauer pour les deux cas du désordre binaires corrélé (noir) et non corrélé (rouge) [21].

Dans le but de consolider la nature étendue de l'état propre résonant, rappelons que le comportement du coefficient de transmission $\langle T(N) \rangle$ en fonction de la taille du système (mesurée en nombre totale de défauts N) permet de décrire qualitativement la fonction enveloppe de l'onde électronique. A la résonance ($E_r = 3.7626$), la fonction enveloppe prend l'allure d'une fonction périodique à amplitude uniforme, similaire à celle d'une onde de Bloch (Fig. I. 11). La transparence de motif dimer dans toute la structure, reproduit une situation semblable (mais pas identique) à celle d'un ordre parfait (à un signe près dans Eq. I.30). Le caractère diffusif de l'onde électronique est ainsi reproduit dans ces systèmes particulièrement désordonnés.

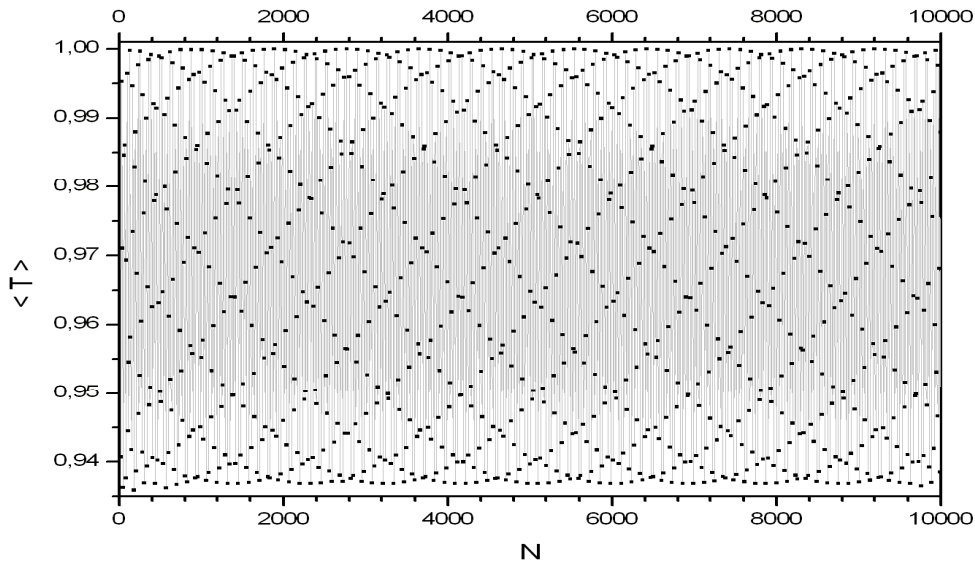


Fig. I.11. Réponse moyenne de la fonction enveloppe à la résonance dimer conventionnelle ($E_r = 3.7626$).

Ce comportement périodique semblable à celui d'une onde de Bloch se reflète aussi sur la réponse moyenne de la résistance en fonction de la taille du système $\langle \rho(N) \rangle$. On note qu'à l'énergie de la résonance, la résistance est assez sensible à la variation de la taille du système. La résistance va de la faible valeur maximale $\rho_{\max} = 0.07$ (dépendant de l'intensité du motif hôte λ_A) et peut atteindre des valeurs minimales singulières allant jusqu'à $\rho_{\min} \approx 1.0 \cdot 10^{-7}$, sur des longueurs régulières.

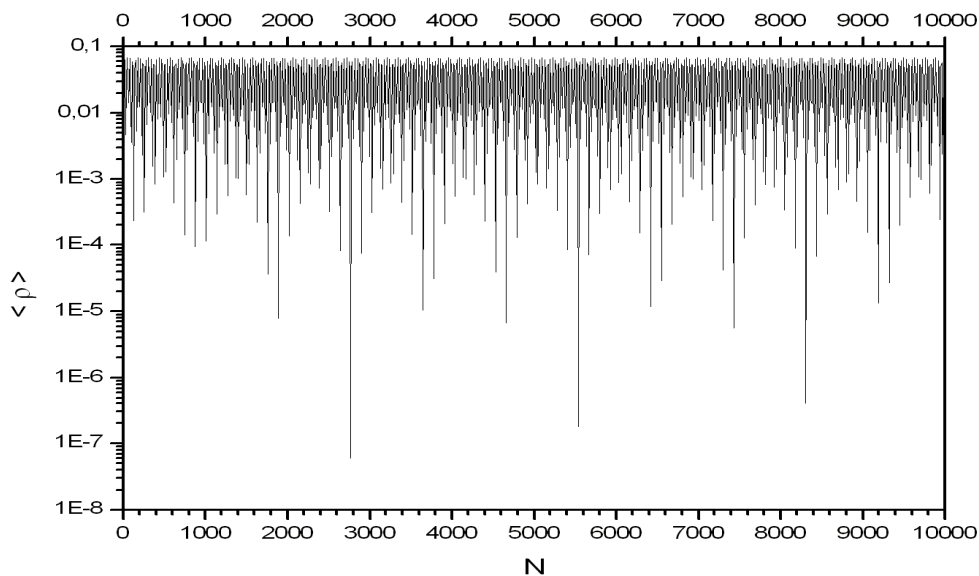


Fig. I.12. Réponse moyenne de la résistance de Landauer en fonction de la taille du système à la résonance dimer conventionnelle ($E_r = 3.7626$)

Des modes similaires à ceux de Bloch peuvent ainsi caractériser ces systèmes particulièrement désordonnés à la résonance de transparence du motif dimer . Pour des longueurs de systèmes particulières, le dispositif devient tellement conducteur que la transmission est susceptible de se produire de manière quasi-balistique.

4. Conclusion

Un aperçu historique sur l'évolution des notions fondamentales des propriétés de transmission dans les systèmes désordonnés a été présenté. En se basant sur la théorie d'échelle de la localisation à un paramètre (la conductance sans dimension g), il a été postulé que dans la limite thermodynamique, tous les modes de transmission 1d sont localisés.

Or avec l'apparition de mini-bandes d'états délocalisés dans le modèle du dimer aléatoire, des états étendus sont restaurés autour de résonances dont les énergies sont caractéristiques au motif défaut considéré. A la résonance dimer, des états semblables aux ondes de Bloch sont ainsi obtenus.

5. Bibliographie

1. F. Bloch , *Z. phys.* **52**, 555 (1928)
2. M.P. Marder, *Condensed Matter physics*, Wiley Interscience publication, New York (1999)
3. M. Di Vantra , *Electrical transport in Nanoscale systems*, Cambridge university press, New York (2008)
4. P.W. Anderson, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958)
5. I. M. Lifchitz, S.A. Gradeskul, L.A. Pastur , *Introduction to the theory of disordered systems*, Wiley interscience publication, New York (1988)
6. P. Sheng, *Scattering and localization of classical waves in random media*, World Scientific, Singapore, (1990).
7. R.Elliot, J.A. Krumhansl and P.L.Leath, *Rev. Mod. Phys.* **46**, 465 (1974)
8. P.A. Lee, and T.V. Ramakrishnan , *Rev. Mod. Phys.* **57**, 287 (1985); B. Kramer and A. MacKinnon, *Rep. Prog. Phys.* **56**, 1469 (1993)
9. N.F..Mott, *J. Non-Crys. Solids* **1**, 1(1968); in *Electronics and Structural Properties of Amorphous Semi Conductors*, p1, Academic Press, London (1973). N.F. Mott and E.A.Davids, *Electrical Process in Non-Crystalline Materials* , 2nd Ed., Calrendon, Oxford (1979)
10. T. Edwards and D.J. Thouless, *J. Phys. C* **5**, 807 (1972], D.C. Licciardello and D.J. Thouless, *J. Phys. C* **8**, 4157 (1975); *Phys. Rev. Lett.* **35**, 1475 (1975).
11. D.J. Thouless, *Phys. Rev. Lett.***39**, 1167 (1977).
12. E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello and T.V. Ramakrishnan, *Phys. Rev. Lett.* **42**, 673 (1979).
13. R. Landauer, *Philo. Mag.* **21**, 863 (1970); A. Douglas Stone and A. Szafer, *IBM J. Res. Develop.***33**, 384 (1988); Y. Imry and R. Landauer, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 306 (1999).
14. P.W. Anderson, D.J. Thouless, E. Abrahams and D.S. Fisher, *Phys. Rev. B* **22**, 3519 (1980) , P.W. Anderson, *Phys. Rev. B* **23**, 4828 (1981).
15. E..N. Economou, C.M. Soukoulis and M.H. Cohen, *Phys. Rev. B* **37**, 4399 (1988)
16. D. H. Dunlap, H-L Wu and P. Phillips, *Phys. Rev. Lett.***65**, 88 (1990), H-L Wi and P. Phillips , *J. Chem. Phys.***93**, 7369 (1990), *Science* **252**, 1805 (1991)
17. H-L Wu , W. Goff and P. Phillips , *Phys. Rev. B* **45**, 1623 (1992)
18. X.Q. Huang, S.S. Jiang, R.W. Peng, Y.M. Liu, F. Qiu and A. Hu , *Mod. Phys. Lett. B.* **17**, 1461(2003)

19. M. Hilke, J.C. Flores, and F. Dominguez-Adame, *phys. Rev. B* **58**, 8837 (1998);
X. Huang, X. Wu and C. Gong, *Phys. Rev. B* **55**, 11018 (1997)
20. H. Mathieu, *Physique des semi-conducteurs et composants électroniques*, édition Masson, Paris, France(1996) ; J. Cazaux, *Initiation à la physique du solide. Exercices commentés*, édition Masson, Paris, France (1981) ; C. Kittel, *Introduction à la physique du solide*, Editions Dunod, Paris, France (1996)
21. A. Sanchez, E. Macia and F. Dominguez-Adame, *Phys. Rev. B* **49**, 147 (1994).
22. J.M.Luck, *Systèmes désordonnés unidimensionnels*, Alea-Saclay collection, Paris, (1992).
23. S. Datta, *Electronic transport in mesoscopic systems*, Cambridge university press, Cambridge, England (1995)
24. Y. Imry, *Introduction to mesoscopic physics*, Oxford university press, Oxford England (2000).