



**MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA
RECHERCHE SCIENTIFIQUE**

Université Abdelhamid Ibn Badis de Mostaganem

Faculté Des Sciences Exactes et de l'Informatique

Domaine des Sciences de la Matière

Département de physique

Projet de Fin d'Études

Pour obtenir le diplôme de Master en Physique

Option : Modélisation et Caractérisation des Matériaux

Présenté par :

Mlle BENHADJOUJA Fatma

Sujet :

« Etude des statistiques de l'exposant de Lyapunov dans les systèmes unidimensionnels désordonnés »

Soutenu le : 23/05/2017

Devant le jury composé de :

Mr Benotsmane Ahmed	MCA	Université de Mostaganem	Président
Mme Bencherif Yamina	MCB	Université de Mostaganem	Examineur
Mr Senouci Khaled	Professeur	Université de Mostaganem	Encadreur

Année Universitaire: 2016/2017

Introduction générale :

Les matériaux désordonnés présentent des phénomènes physiques qui, jusqu'à présent, ne sont pas complètement maîtrisés, comme les phénomènes de localisation, les fluctuations de conductances, l'effet hall quantique... etc. Il est bien connu que la localisation des états électroniques dans les systèmes désordonnés est due aux interférences destructives des électrons induit par le désordre car ce dernier peut avoir des effets dramatiques sur les systèmes quantiques. Un exemple paradigmatique est la localisation d'Anderson des particules "quantique" pouvant se localiser pour présenter une fonction d'onde qui décroît exponentiellement.

En 1958, P.W. Anderson s'intéresse à la propagation des électrons dans un milieu désordonné. Il montre que le désordre peut localiser spatialement les fonctions d'onde électriques et rendre un matériau isolant, par le seul effet des interférences entre les fonctions d'onde. Ce résultat porte le nom de localisation d'Anderson [1].

Au début des années 1960, Mott [2] a introduit le concept de front de mobilité, c'est-à-dire l'énergie de transition séparant les états étendus des états localisés, pour comprendre les transitions métal-isolant observées dans certains semi-conducteurs dopés désordonnés.

En 1979, Abrahams et al [3] ont montré grâce à une théorie d'échelle de la localisation, à température nulle et en l'absence d'interaction, que l'état fondamental d'un système désordonné est un isolant à une et à deux dimensions et peut être métallique à trois dimensions. La dimension critique de cette théorie est $d=2$ au-dessous de laquelle tous les états sont localisés quelque soit le degré de désordre.

Dans le chapitre I, on abordera les notions fondamentales des systèmes désordonnés. Nous rappellerons la théorie d'échelle qui prédit une dimension critique $d=2$ en dessous de laquelle tous les états sont localisés. Aussi, on présentera les principaux travaux qui ont contribué à l'établissement de cette théorie ainsi que deux modèles théoriques tels que le modèle de liaisons fortes et le modèle de Kronig-Penney.

Le chapitre deux introduit les principes de bases du transport en mécanique quantique. Le modèle choisi est le modèle standard de Kronig-Penney considérant une chaîne de potentiels atomiques périodiques sous forme soit de barrières rectangulaire soit des pics Delta. Pour calculer les coefficients de transmission et de réflexion on prend l'équation de Schrödinger. Aux solutions de cette équation on applique les conditions de continuités ainsi que la méthode de la matrice de transfert.

Le troisième chapitre présente les résultats trouvés pour le coefficient de transmission et l'exposant de Lyapunov dans le cas d'un système désordonné pour deux modèles : le potentiel de largeur finie et potentiel de pic δ avec désordre vertical et spatial.

TABLE DES MATIERES

Introduction générale	1
------------------------------------	---

Chapitre I : Généralités sur les systèmes désordonné

I.1 Introduction	2
I.2 Les systèmes ordonnés	3
I.2.1 Théorème de Bloch	3
I.2.2 Théorie des bandes	4
I.3 Les systèmes désordonnés	5
I.3.1 Etats étendus	5
I.3.2 Etats localisés	5
I.4 Les type de désordre	6
I.4.1 Désordre spatial	6
I.4.2 Désordre compositionnel	6
I.4.3 Désordre structural (spatial et compositionnel)	6
I.5 Localisation d'Anderson	7
I.6 Thérie d'échelle de la localisatio	9
I.7 Critères de localisation	10
I.7.1 Rapport de participation inverse	10
I.7.2 Longueur de localisation	11
I.7.3 Coefficient de transmission	11
I.8 Modèles théoriques	12
I.8.1 Modèles des Kronig-Penney	12
I.8.2 le modèle de liaisons fortes (The tight-binding)	12
II.9 conclusion	13

Chapitre II : Technique de la matrice de transfert

II.1 Introduction	14
--------------------------------	----

II.2 Une expérience de diffusion	14
II.3 Matrice de diffusion et matrice de transfert	16
II.4 Transmission et la réflexion Amplitudes	17
II.5 Multiplication des matrices de transfert	18
II.6 Potentiels rectangulaires	19
II.6.1 matrice de transfert	19
II.7 Transmission dans un système périodique $E > V_0$	22
II.7.1 Matrice de Transfert	23
II.7.2 Coefficient de transmission	24
II.8 Le modèle de Kronig-Penney dans la limite du potentiel de fonction delta.....	25
II.9 conclusion	27

Chapitre III : Etude des statistiques de l'exposant de Lyapunov dans les systèmes unidimensionnels désordonnés

III.1 Introduction	28
III.2 Formalisme	29
III.2.1 Modèle A	29
III.2.2 Modèle B	30
III.3 Résultats et discussion	32
III.3.1 Structures de bande	32
III.3.2 Désordre vertical	33
III.3.2.a Effet du désordre sur la transmission	33
III.3.2.b Effet du désordre sur l'exposant de Lyapunov	35
III.3.2.c Effet de l'énergie	37
III.3.2.d Comparaison des deux modèles	38
III.3.3 Désordre spatial	40
III.3.4 Propriétés statistique de l'exposant de Lyapunov	40
III.3.5 Distribution de probabilité de l'exposant de Lyapunov	43
III.3.5.a Effet de la taille	43
III.3.5.b Effet du désordre	44
III.3.5.c Effet de l'énergie	44
III.3.5.d Effet du type de potentiel	45
III.3.6 La variance de l'exposant de Lyapunov	46
III.3.6.a Effet du désordre sur la variance de γ	49

III.3.6.b Effet de l'énergie sur la variance de γ	49
III.3.6.c Effet du type de potentiel	50
III.7 conclusion	52
Conclusion générale	53
Bibliographie	54

Liste des figures

Chapitre I : Généralités sur les systèmes désordonnés

Figure I.1 Représentation d'état étendu de Bloch d'un système ordonné	4
Figure I.2 Représentation de la structure de bande. La partie blanche représente les énergies permises alors que la partie grise représente les énergies interdites (bande interdite)	5
Figure I.3 Etat électronique. a) Etats étendus. b) Etats localisés	6
Figure I.4 Types de désordre dans un système unidimensionnel	7
Figure I.5 Densité d'états pour le modèle d'Anderson à trois dimensions. E_{m1} et E_{m2} sont les fronts de mobilité	8
Figure I.6 Evolution de la fonction d'échelle β en fonction de la conductance g , pour différentes dimensionnalités d du système	10
Figure I.7 Potentiel périodique de Kronig-Penney	12

Chapitre II : Technique de la matrice de transfert

Figure II.1 Potentiel périodique de Kronig-Penney	14
Figure II.2 Expérience typique de diffusion	15
Figure II.3 Représentation du processus de diffusion	18
Figure II.4 Barrière de potentiel rectangulaire de largeur b et la hauteur V	19
Figure II.5 Modèle de Kronig-Penny : potentiel non périodique unidimensionnel	22
Figure II.6 Modèle de Kronig-Penney, potentiel rectangulaire(en haut) modèle de Kronig Penney potentiel delta (en bas)	25
Figure II.7 Le modèle de Kronig-Penney pour une chaîne en pics delta de hauteurs désordonnées et de position fixe. La hauteur des pics est V_n	26
Figure II.8 Le modèle de Kronig-penney pour une chaîne de potentiels en pic delta placés aléatoirement La hauteur des pics est V_0	27

Chapitre III : Etude des statistiques de l'exposant de Lyapunov dans les systèmes unidimensionnels désordonnés

Figure III.1 Modèle A : potentiel de pic δ avec désordre vertical (a) et désordre spatial (b)	30
Figure III.2 Modèle B : potentiel de largeur finie avec désordre vertical (a) et désordre spatial (b)	31
Figure III.3 $\ln(T)$ en fonction du vecteur d'onde k ($k = \sqrt{E}$) pour $N = 500$. Cas d'un système ordonné pour le potentiel en barrières	32

Liste des figures

Figure III.4 $\langle -\ln T \rangle$ en fonction de la taille du système pour $E=5$ et différents valeur du désordre W pour différent types des potentiels (a) barrière, (b) puits, (c) mixte	34
Figure III.5 Comparaison le coefficient de transmission entre barrière, puits et mixte en fonction de la taille de système L pour $E=5$, $W=1$	35
Figure III.6 L'exposant de Lyapunov γ en fonction du degré du désordre W pour $E=5$ pour les 3 types de potentiels	36
Figure III.7 La longueur de localisation ξ en fonction de degré du désordre W pour $E=4$...	36
Figure III.8 L'exposant de Lyapunov γ en fonction d'énergie pour $W=1$ pour les 3 types de potentiels	37
Figure III.9 La longueur de localisation ξ en fonction d'énergie pour $W=1$	38
Figure III.10 Comparaison le coefficient de transmission entre modèle A et modèle B en fonction de la taille de système L pour potentiel en barrière, $W=1$	39
Figure III.11 Comparaison de l'exposant de Lyapunov γ entre modèle A et modèle B en fonction de degré désordre W pour (cas de désordre vertical)	39
Figure III.12 L'exposant de Lyapunov γ en fonction du degré du désordre spatial pour deux valeurs d'énergie $E=4$ et $E=12$	40
Figure III.13 τ en fonction de degré du désordre W pour différents valeurs de la taille du système L pour un potentiel en barrière pour le désordre vertical	41
Figure III.14 τ en fonction de la taille du système pour différents valeurs de degré désordre W pour un potentiel en barrière	42
Figure III.15 τ en fonction de la taille du système pour différents valeurs de d'énergie pour un potentiel en barrière	42
Figure III.16 La distribution de $P(\gamma)$ de l'exposant de Lyapunov pour différentes valeurs de la taille de système L avec $W=1$ et $E=4$ dans le cas de désordre vertical	43
Figure III.17 Distribution de probabilité $P(\gamma)$ de l'exposant de Lyapunov pour différentes valeurs de désordre W avec $E=4$ et $L=2000$	44
Figure III.18 La distribution de $P(\gamma)$ en fonction de l'exposant de Lyapunov pour différent valeur d'énergie E , $W=1$ et $L=2000$ dans le cas barrière.....	45
Figure III.19 Comparaison de la distribution de $P(\gamma)$ de l'exposant de Lyapunov entre trois types de potentiel : la barrière, puits et mixte pour $W=1$, $E=4$ et $L=2000$	46
Figure III.20 La variance σ en fonction de la taille du système L pour $W=1$ et $E=4$ dans le cas de potentiel en barrière	47

Liste des figures

Figure III.21 La variance σ en fonction de degré désordre W pour $L= 4000$ et $E=6$ Dans le cas de potentiel en barrière	47
Figure III.22 La variance σ de γ en fonction de la taille du système L pour différent du degré désordre	48
Figure III.23 La variance σ en fonction de la taille du système L pour différentes valeurs d'énergie E	48
Figure III.24 $\ln(\sigma(\gamma))$ en fonction $\ln(L)$, pour différentes valeurs du désordre W et $E=4$ dans avec potentiel en barrière	49
Figure III.25 $\ln(\sigma(\gamma))$ en fonction $\ln(L)$, pour différentes valeurs de l'énergie E avec $W=1$ 50	
Figure III.26 L'exposant de la loi en puissance β en fonction de degré du désordre pour les deux types de potentiel : barrières et puits	51
Figure III.27 β en fonction de l'énergie pour les deux types de potentiel : la barrière et le puits	51

I.1 Introduction :

Les matériaux cristallins ont été largement étudiés depuis la naissance de la mécanique quantique. Le système parfaitement ordonné permet de classer les fonctions d'onde correspondantes en ondes de Bloch traduisant la périodicité du potentiel cristallin. Ces états permis sont uniformément étendus le long de toute la structure [4].

En réalité, l'état cristallin est plutôt une exception. Dans la nature, le désordre existe à différents degrés : de la présence aléatoire de quelques impuretés dans un réseau hôte, à la génération intentionnelle de défauts dans les alliages et autres structures amorphes [5]. La présence d'un désordre dans le milieu de propagation, brise la symétrie de translation du système ordonné et peut provoquer en conséquence le confinement spatial de certains états de Bloch dans une région finie de l'espace. Le nombre d'états localisés dans le milieu désordonné est autant grand que le taux du désordre est grand. Pour un désordre suffisamment important, tous les états de Bloch disparaissent donnant lieu à des états localisés dans des régions finies de l'espace. Initialement un conducteur à l'ordre parfait, le matériau perd ses propriétés de conduction métalliques à partir d'un seuil critique de désordre et devient isolant. C'est la localisation d'Anderson [1].

Ce chapitre est consacré à la description des notions de base concernant les systèmes désordonnés. Nous rappelons les différents types de désordre qui peuvent exister, les états électroniques, la transition d'Anderson, la théorie d'échelle et quelques critères de localisation qui permettent de distinguer entre état localisé et état étendu, comme le coefficient de transmission et l'exposant de Lyapunov.

I.2 Les systèmes ordonnés :

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 [4] pouvant se déplacer librement, sans restriction dans toute la structure ordonné. Or en réalité, un système idéalement ordonné ne peut exister. Il se trouve que des distorsions apparaissent dans la structure ordonné par la présence d'impuretés, de dislocation, de lacunes ou de défauts.

I.2.1 Théorème de Bloch :

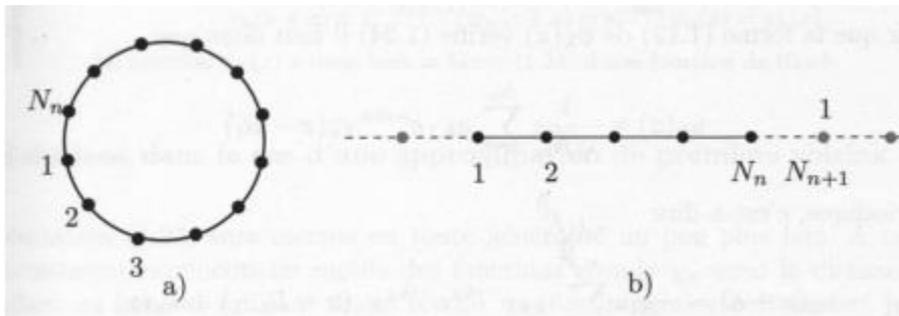
Le potentiel cristallin dans lequel évolue l'électron est périodique :

$$U(\vec{r}) = U(\vec{r} + \vec{R}) \quad (I.1)$$

De même que la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger est une onde plane $\sim e^{i\vec{k}\vec{r}}$ multipliée par la fonction $u_k(\vec{r})$ possédant le périodique du potentiel.

$$\varphi_k(\vec{r}) = u_k(\vec{r}) \cdot e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (I.2)$$

Dans le cas d'états non dégénéré $\varepsilon_k \rightarrow \varphi_k$. Soit une chaîne linéaire de $L= N+1$ atome.



Avec les conditions aux limites périodiques (CLP): $\varphi(x + L) = \varphi(x + Na) = \varphi(x)$.
On choisit la forme de $\varphi(x)$ pour satisfaire aux «CLP».

$$\varphi(x + a) = C\varphi(x)$$

$$\varphi(x + 2a) = C^2 \varphi(x)$$

$$\varphi(x + Na) = C^N \varphi(x) = \varphi(x) \Rightarrow C^N = 1 \Rightarrow C = e^{-\frac{2\pi}{N}s}$$

$$s = 0, 1, 2, \dots, N - 1$$

Cela conduit au choix suivant des solutions de l'équation de Schrödinger :

$$\varphi_k(x) = u_k(x) \cdot e^{i[\frac{2\pi}{Na}n \cdot x]} = u_k(x) \cdot e^{ik \cdot x} \quad (I.3)$$

Avec : $k = \frac{2\pi}{Na}n$ $n = 0, \pm 1, \dots$

Sans oublier que u_k est périodique, telle que : $u_k(x + a) = u_k(x)$

$$\Rightarrow \varphi_k(x + a) = u_k(x + a)e^{ik(x+a)} = u_k(x)e^{ikx}e^{ika} \tag{I.4}$$

$$\Rightarrow \varphi_k(x) = u_k(x)e^{ikx}$$

$$\Rightarrow \varphi_k(x + a) = \varphi_k(x)e^{ika} = \varphi_k(x)e^{i\frac{2\pi}{N}n} = C\varphi_k(x) \tag{I.5}$$

Et c'est bien le Bloch pour la chaîne linéaire.

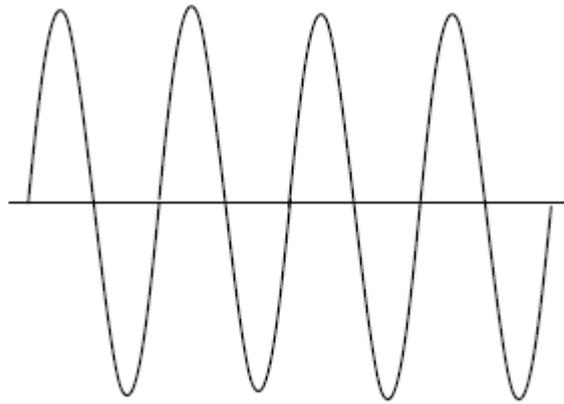


Figure I. 1 : représentation d'état étendu de Bloch d'un système ordonné.

I.2.2 Théorie des bandes :

La théorie des bandes n'est qu'une modélisation des valeurs d'énergies permises pour les électrons dans un solide ne pouvant occuper que certains intervalles qui sont eux même séparées par d'autres dites interdites. Cette modélisation nous amène à ce qu'on appelle les bandes d'énergie ou les structures de bandes. Cette modélisation explique clairement la différence de comportement entre les différents matériaux [6].

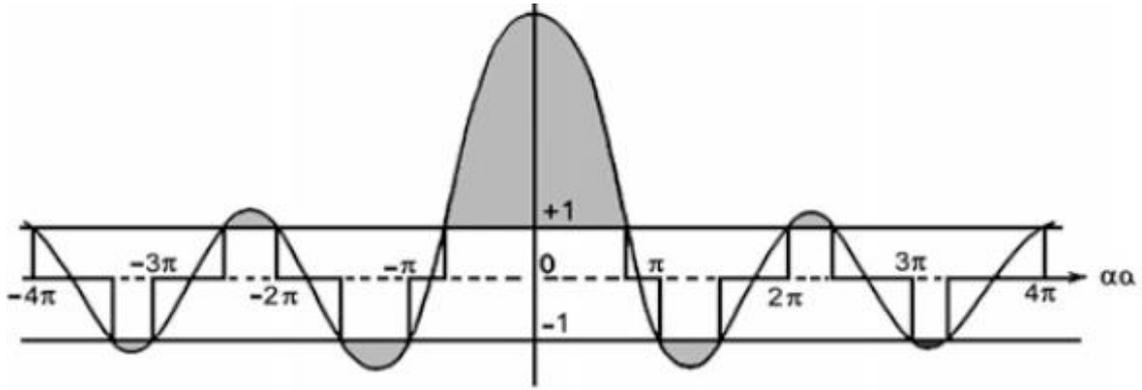


Figure I. 2 : représentation de la structure de bande. La partie blanche représente les énergies permises alors que la partie grise représente les énergies interdites (bande interdite).

I.3 Les systèmes désordonnés :

La description d'un cristal à partir d'un réseau parfaitement périodique auquel est associé un motif correspond à une situation idéale, jamais rencontré dans la vie. Les cristaux présentent toujours les défauts. On peut distinguer deux types d'états électroniques :

I.3.1 Etats étendus :

Le cas du désordre zéro décrit un cristal parfait, mais en réalité il existe des défauts « déformations géométriques » ou des impuretés faibles qui influent sur la nature des états électroniques qui changent un peu mais reste sous la forme de fonctions de Bloch « étendus » (Figure I.1).

$$\Psi(L) = \exp(ikr) \quad (I.6)$$

I.3.2 Etats localisés :

Quand le désordre est introduit, la symétrie est perdue, et l'électron perd sa phase à cause des interférences quantiques. Sa fonction d'onde devient localisée et prend la forme :

$$\Psi(L) = \exp\left(-\frac{L}{\xi}\right) \quad (I.7)$$

Où ξ est la longueur de localisation, au-delà de laquelle l'amplitude de la probabilité devient négligeable.

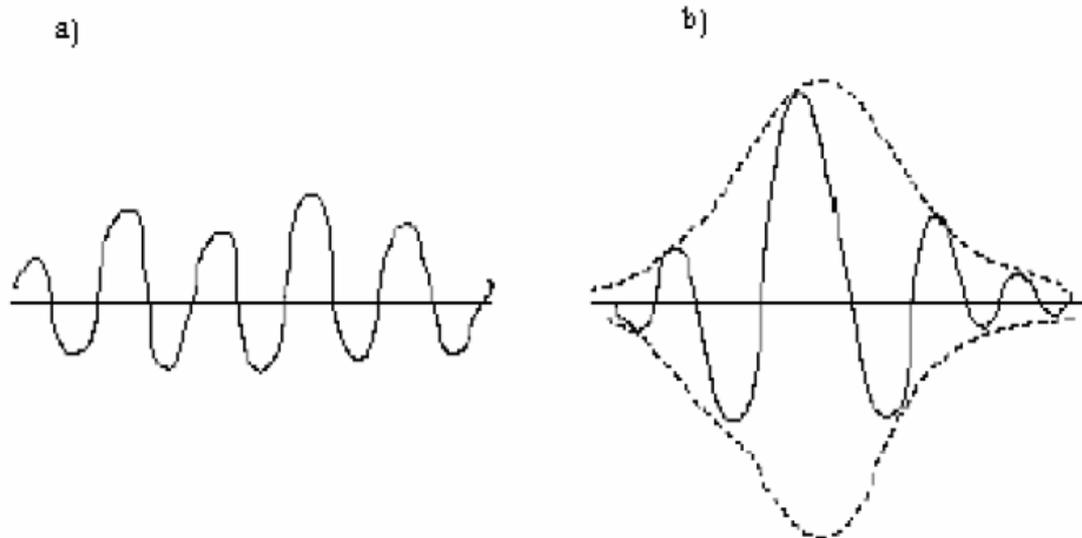


Figure I. 3 : Etat électronique. a) Etats étendus. b) Etats localisés.

I.4 Les types de désordre :

Les matériaux désordonnés qui se trouvent abondamment dans la nature en phases amorphes et qui se sont caractérisés par l'absence apparente de l'ordre géométrique Peuvent être construits de façon différente (voir figure I.5).

I.4.1 Désordre spatial :

Dans ce cas, des atomes identiques se situent en des positions aléatoires.

I.4.2 Désordre compositionnel :

Dans ce cas de désordre, on a plusieurs types d'atomes différents positionnés sur les sites d'un réseau parfaitement ordonné. Ceci représente le cas le plus simple d'un désordre.

I.4.3 Désordre structural (spatial et compositionnel) :

Désordre structural est synonyme aux deux types de désordre spatial et compositionnel. Il est obtenu à partir de la distribution aléatoire de plusieurs types d'atomes sur un réseau.

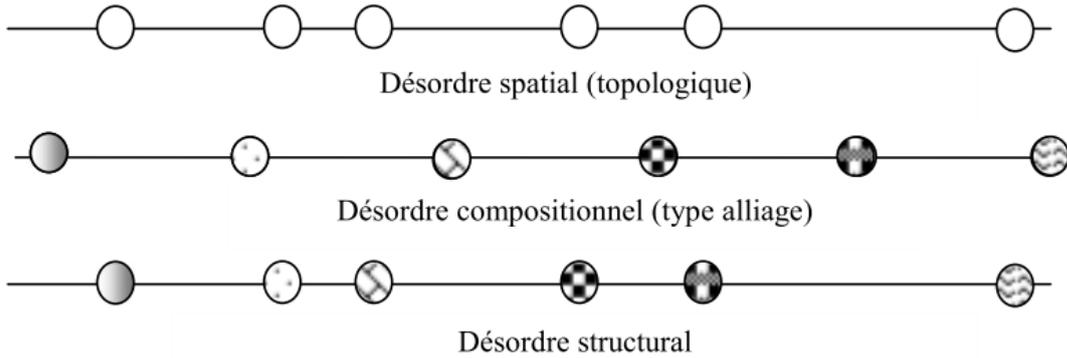


Figure I. 4 : types de désordre dans un système unidimensionnel.

I.5 Localisation d'Anderson :

Le modèle d'Anderson (1958) [1] a été introduit pour décrire les systèmes électroniques désordonnés sans interaction. Son Hamiltonien est une variante du modèle de liaisons fortes (modèle Tight-binding) avec énergies aléatoire sur site. Ces énergies aléatoires modélisent les fluctuations énergétiques introduites par les impuretés du système. L'Hamiltonien d'Anderson s'écrit de la manière suivante :

$$H_A = \sum_n \varepsilon_n |n\rangle \langle n| + \sum_{\langle n,m \rangle} V_{nm} |n\rangle \langle m| \quad (I.8)$$

Les vecteurs n et m indexent les différents sites du réseau de volume L^d avec des conditions aux bords périodiques. Les énergies aléatoires sur site ε_n sont uniformément distribuées dans l'intervalle énergétique $[-W/2, W/2]$. W est alors l'intensité des fluctuations énergétiques dues au désordre. V est potentiel de probabilité pour une particule de sauter sur un des sites les plus proches et la notation $|n\rangle, \langle m|$ signifie que les sites n et m sont " plus proches voisins".

Anderson a montré qu'en présence d'un désordre suffisamment fort, tous les états électroniques sont spatialement localisés et on a par conséquent une propagation dans une région limitée de l'espace. Elles décroissent exponentiellement en de hors de cette région sur une longueur caractéristique appelée « longueur de localisation ».

L'existence des états localisés peut s'expliquer physiquement en termes de puits de potentiel où les électrons restent piégés dans les puits.

Le caractère étendu ou localisé des états dans le modèle d'Anderson dépend de trois paramètres : le degré du désordre W , l'énergie et la dimension d du modèle.

Ce modèle conduit pour des systèmes à une ou deux dimensions à des états exponentiellement localisés quelque soit le désordre introduit sauf que la localisation à 2D est moins prononcée qu'en 1D. La longueur de localisation diminue lorsque le désordre augmente ou lorsque l'énergie de l'état est plus proche du bord de bande.

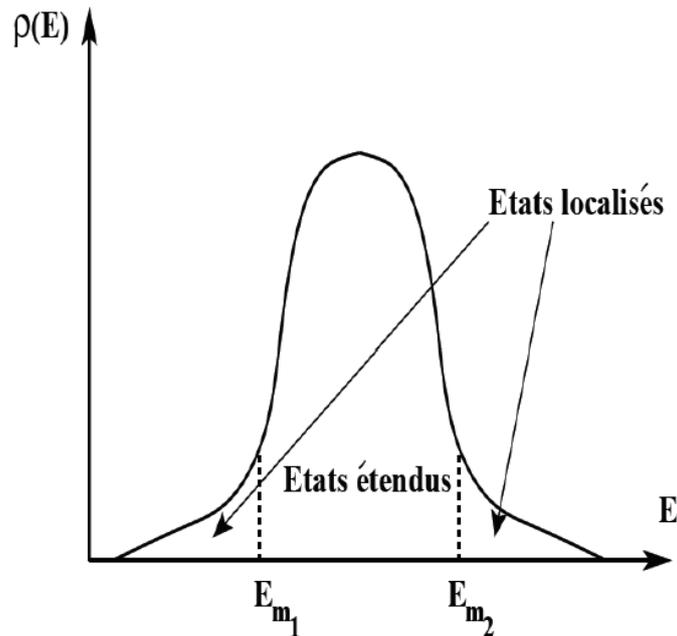


Figure I. 5 : densité d'états pour le modèle d'Anderson à trois dimensions. E_{m1} et E_{m2} sont les fronts de mobilité.

La notion de Front de mobilité a été introduite par MOTT et a permis de comprendre les transitions métal-isolant observées dans certains semi-conducteurs dopés désordonnés [7]. Par changement de la concentration de dopant, le niveau de Fermi peut franchir le front de mobilité, d'où la transmission.

Plus tard, en 1979, Abrahams, Anderson, Licciardello et Ramakrishnan [3] introduisirent une théorie d'échelle de la conductance de systèmes métalliques désordonnés sans interactions, démontrant le caractère universel de l'absence d'états étendus à une et à deux dimensions et de la possibilité d'avoir un caractère métallique pour des systèmes à trois dimensions. La section suivante présente les principaux résultats de cette théorie d'échelle.

I.6 Théorie d'échelle de la localisation :

Les travaux de Thouless dans les années 70 ont permis de relier les propriétés de conduction macroscopique d'un système à l'échelle à laquelle elles sont déterminées [8]. Cette idée a ensuite été reprise pour formaliser une théorie générale de la «la bande des quatre» [3].

Pour un système de taille L^d , de conductance sans dimensions

$g(l) = h/e^2 G(L)$, ne dépendant que de L , Thouless montre que cette conductance $g(L)$ est proportionnelle à la ration E_T/δ , ou E_T est l'énergie de Thouless, et δ l'espacement moyen entre les niveaux d'énergie du système, donnée par $\delta = (VL_{in}^d)^2$ avec V la densité d'états par unité de volume.

L'énergie de Thouless E_T est l'énergie caractéristique reliée à la diffusion d'un électron jusqu'au bord du système, à la distance L , et correspond donc à l'élargissement énergétique de l'état électronique, du à son temps de vie fini Γ_T . E_T Est donnée par l'équation suivante :

$$E_T = \frac{h}{\Gamma_T} = \frac{hD}{L^2} \quad (I.9)$$

•pour $g > 1$, l'énergie de Thouless E_T est supérieure à l'espacement δ entre les niveaux électronique. On a donc un recouvrement entre ces états, ce qui correspond à un régime délocalisé.

•pour $g < 1$, l'espacement entre les niveaux d'énergie δ est supérieurs à leur largeur E_T , les états ne se recouvrent pas et restent donc localisés.

En 1979, Abrahams et al. Ont étendu l'approche de Thouless et ont élaboré une théorie d'échelle de la localisation en se posant sur l'évolution de la conductance g avec la taille du système L [3]. Ils considéraient pour cela l'évolution de la fonction d'échelle β définie par l'équation (I. 10), en fonction de la conductance g .

$$\beta = \frac{d \ln g}{d \ln L} \quad (I.10)$$

En suivant l'idée de Thouless, la conductance g peut être pondérée comme une mesure du désordre effectif du système : $g \gg 1$ correspond à un faible désordre. $g \ll 1$ à un fort désordre. La fonction d'échelle β ne dépend que de la conductance $g(L)$. Selon son signe, deux comportements sont à distinguer :

- Si $\beta > 0$, la conductance augmente avec la taille du système, les états électroniques sont donc étendus et le système est métallique.
- Si $\beta < 0$, la conductance diminue à mesure que la taille du système augmente : le système évolue vers un régime de localisation forte, et donc un état isolant.

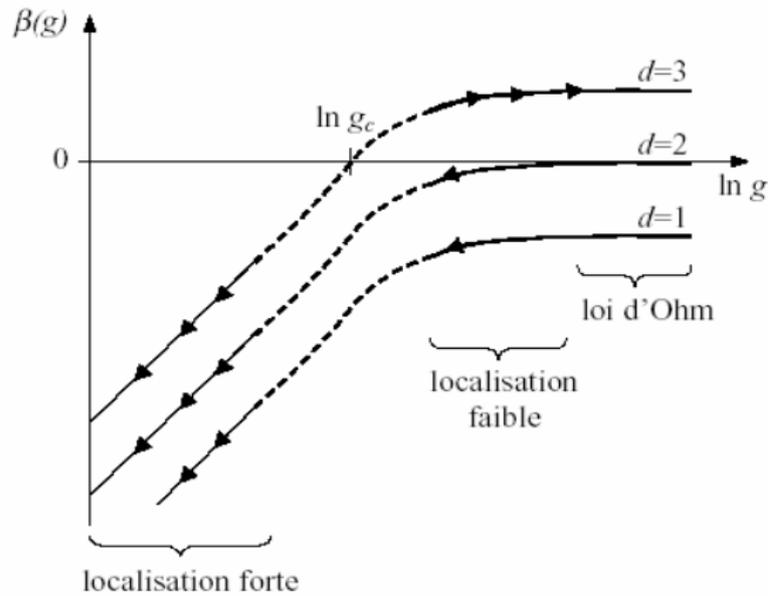


Figure I. 6 : évolution de la fonction d'échelle β en fonction de la conductance g , pour différentes dimensionnalités d du système [3].

Pour $d \leq 2$, la fonction β est toujours négative. Donc, un système électronique 1D ou 2D, sans interaction, ne peut donc être métallique, et quelque soit le degré du désordre.

I.7 Critères de localisation :

I.7.1 Rapport de participation inverse :

Le rapport de participation inverse (RPI) a été introduit par Bell et Dean [9]. Il est donné par l'expression suivante :

$$R.P.I = \frac{1}{L} \frac{\sum_{i=1}^L |\Psi_i|^4}{(\sum_{i=1}^L |\Psi_i|^2)^2} \leq 1 \quad (I.11)$$

Où ψ_i est l'amplitude au site i de l'état propre ψ et L est la longueur du système électronique.

Cette grandeur est utilisée pour étudier l'étendu spatial des états dominants de la fonction d'onde [10, 11]. En effet, ces états dominants dans le cas des états localisés sont centrés sur une petite région du système, alors que pour le cas étendu, les états sont étalés sur tous le système. Le RPI se comporte comme :

$$\text{Si : } \begin{cases} R.P.I \sim 0 (L^{-1}) & \text{états étendus} \\ R.P.I \sim 0 (L^0) & \text{états localisés} \end{cases} \quad (I.12)$$

I.7.2 Longueur de localisation :

Les systèmes désordonnés à une dimension (1D) sont caractérisés par des fonctions d'onde dominantes uniquement dans l'espace de dimension caractéristique ξ appelé « la longueur de localisation ».

La fonction d'onde décroît exponentiellement en fonction de la taille du système avec un taux de décroissance $\gamma = 1/\xi$ appelé « l'exposant de Lyapunov ».

L'exposant de Lyapunov [12, 13] est défini par l'expression suivante :

$$\xi^{-1} = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \langle \log(|\Psi_{N+1}|^2 + |\Psi_N|^2)^{\frac{1}{2}} \rangle \quad (I.13)$$

$\langle \dots \rangle$ représente la moyenne et L la taille du système. Les états sont localisés pour $\xi^{-1} L \gg 1$ et étendus pour $\xi^{-1} L \ll 1$.

La longueur de localisation peut aussi être obtenue à partir de la pente du coefficient de transmission en fonction de la taille du système. En utilisant le modèle Kronig-Penney pour des systèmes désordonnés à 1D et en absence du champ électrique, la longueur de localisation dépend de l'énergie d'électron E et du degré de désordre W [14].

I.7.3 Coefficient de transmission :

Le coefficient de transmission est le paramètre le plus utilisé dans l'étude des propriétés de transport électronique dans les super-réseaux [15] et le phénomène de localisation dans les systèmes désordonnés [14, 16, 17, 9, 18]. Cette quantité physique est définie comme la probabilité de transfert de l'onde électronique à l'autre extrémité du système. A 1D le coefficient de transmission se comporte comme suit : (pour un système désordonné à une dimension).

$$T \propto e^{-2\gamma L} \quad (I.14)$$

Où γ et L étant l'exposant de Lyapunov et la longueur du système respectivement. Dans le cas des états localisés, l'électron se trouve confiné dans une région limitée du système, par conséquent, le coefficient de transmission décroît rapidement.

I.8 Modèles théoriques :

Synonyme d'interférence 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 dimère aléatoire dans les cadres respectifs de la théorie des liaisons fortes et du modèle de Kronig-Penney [19-20].

I.8.1 Modèles des Kronig-Penney :

Le modèle de Kronig-Penney [21] est l'exemple le plus simple de potentiel périodique. Considérons d'abord un réseau unidimensionnel de puits de potentiel carrés (figure I.8). Le potentiel est donné par :

$$V(x) = \begin{cases} -V_0 & na < x < na + b \\ 0 & na + b < x < (n+1)a \end{cases} \quad V_0 > 0 \quad n \in Z \quad (I.15)$$

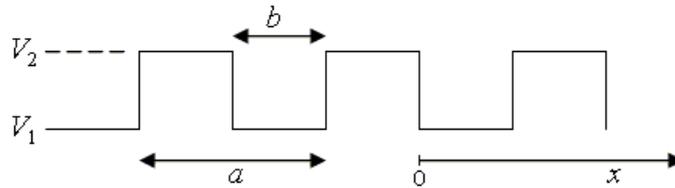


Figure I. 8 potentiel périodique de Kronig-Penney.

Nous cherchons les états liés ($E < 0$) du système. Une façon peu réaliste de résoudre le problème consisterait à écrire la solution générique de l'équation de Schrödinger dans chaque région de l'axe x dans lequel le potentiel est constant et puis utiliser les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivé entre deux régions voisines.

I.8.2 le modèle de liaisons fortes (The tight-binding) :

Le modèle des liaisons fortes "Tight-Binding" consiste à développer les fonctions d'onde électroniques (c'est-à-dire chacun des électrons du cristal) sous forme de combinaison linéaire d'orbitales atomiques. La fonction d'onde associée à l'état k est donnée par :

$$\Psi(k, r) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \exp(ik \cdot r_j) \quad (I.16)$$

Où N est le nombre de cellules et r le vecteur de position.

L'Hamiltonien de liaisons fortes s'écrit :

$$H = \sum_i^N \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j}^N V_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (I.17)$$

Où ε_i sont les énergies de sites et V_{ij} les interactions d'échange entre les sites voisins. Les valeurs propres sont donc donnés par :

$$E(k) = \frac{1}{N} \sum_i \langle i|H|i\rangle + \frac{1}{N} \sum_{j,i} \langle i|H|j\rangle \exp(ik \cdot r) \quad (I.18)$$

I.9 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 quel que soit le degré du désordre.

II.1 Introduction :

Dans cette section nous allons discuter les problèmes élémentaires de la mécanique quantique impliquant la propagation d'une particule en une dimension, à travers des puits et des barrières de potentiel. Dans ce type de situation, l'énergie potentielle est une constante sauf en un nombre fini de points (interfaces abruptes). Le rôle des conditions aux limites et de continuité est alors essentiel.

Dans ce chapitre on examinera le comportement du coefficient de transmission et du coefficient de réflexion T et R en fonction de la largeur L du système dans le cas désordonné d'une particule (ex. un électron) de masse m , d'énergie E se propageant vers la droite à travers une structure à puits et barrières de potentiel. On utilisera pour cela l'équation de Schrödinger indépendante du temps dans l'étude de la propagation de l'onde électronique. En plus on discutera les résultats trouvés pour la structure de bandes dans le cas d'une infinité de barrières et de puits de potentiel. Les calculs se basent sur la méthode de la matrice de transfert.

II.2 Une expérience de diffusion :

Avant d'aborder le problème avec un potentiel complexe, on donne brièvement quelques généralités en mécanique quantique dans le cas simple de la diffusion d'une particule libre par un potentiel réel qui s'accompagne de propriétés particulières.

On considère le problème à une dimension (1D) et le mouvement d'une «particule» de masse m spatialement caractérisée par la variable x , et évoluant dans un potentiel réel $V(x)$ donné qui ne dépend pas de temps. En notant $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ l'énergie de cette particule, ou k est le vecteur d'onde et $\varphi(x, t)$ sa fonction d'onde à la position x .

L'équation de Schrödinger [20] indépendante du temps décrivant son mouvement dans la représentation en coordonnées (x) prend la forme suivante :

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (II.1)$$

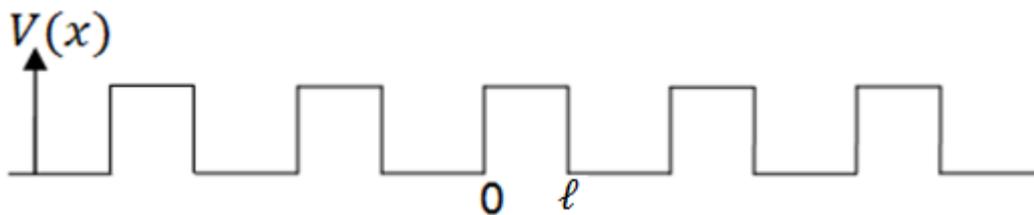


Figure II. 1 : Potentiel périodique de Kronig-Penney.

Pour plus de simplicité, nous supposons que le potentiel $V(x)$ est non nul seulement à l'intérieur d'une région finie (Figure II.1).

$$V(x) = \begin{cases} V(x), & 0 \leq x \leq \ell \\ 0, & x < 0 \text{ et } x \geq \ell \end{cases} \quad (II.2)$$

Un électron se rapproche de l'échantillon représenté par le potentiel $V(x)$. Des moyens de diffusion de l'électron qui est soit réfléchis ou transmis à travers l'échantillon, nous avons mesurer la transmission et de réflexion amplitudes, t et r , respectivement. Nous pouvons extraire des informations sur les propriétés physiques de l'échantillon.

Nous supposons que l'équation de Schrödinger en dehors de la région de potentiel est connue et que la fonction d'onde peut être écrite comme une superposition d'ondes planes:

$$\begin{cases} \psi_L(x) = \psi_L^+(x) + \psi_L^-(x) & x < 0 \\ \psi_R(x) = \psi_R^+(x) + \psi_R^-(x) & x > \ell \end{cases} \quad (II.3)$$

Ici, les indices L indique la (Gauche) et R la (Droite) du potentiel et les indices supérieurs + (-) représentent la direction de propagation : + indique que l'électron propage dans la direction positive (de gauche à droite) et - indique que l'électron déplace de droite à gauche (figure II.2).

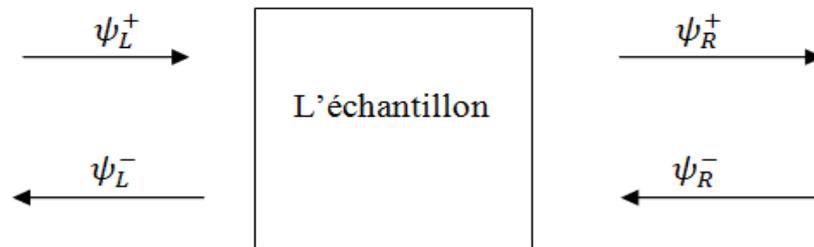


Figure II. 2 : Expérience typique de diffusion.

Les composantes de la fonction d'onde peuvent être exprimées comme :

$$\psi_L^+(x) = A_1 e^{+ikx}, \quad \psi_L^-(x) = B_1 e^{-ikx} \quad (II.4)$$

$$\psi_R^+(x) = A_2 e^{+ikx}, \quad \psi_R^-(x) = B_2 e^{-ikx}$$

Ici, k est le vecteur d'onde liée à l'énergie à travers la relation de dispersion :

$$E = E(k) \quad (II.5)$$

La relation de dispersion (II.5) détermine les propriétés physiques de l'électron dans la région à l'extérieur de l'échantillon ($x < 0$ et $x > \ell$).

II.3 Matrice de diffusion et matrice de transfert :

La solution générale $\psi(x)$ de l'équation de Schrödinger:

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + (V(x) - E)\psi(x) = 0 \quad (II.6)$$

Doit être une fonction continue de la position x . La même chose doit être vraie pour la première dérivée $\frac{d\psi(x)}{dx}$. L'énergie E est exprimée ici en unités de $\frac{\hbar^2}{2m}$.

En particulier, l'exigence de la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivé aux bornes de potentiel $V(x)$ donne :

$$\psi_L(x = 0^-) = \Phi(x = 0^+), \frac{\partial\psi_L(x)}{\partial x} = \frac{\partial\Phi(x)}{\partial x} \quad (II.7)$$

Sur la limite gauche de l'échantillon, et

$$\Phi(x = \ell^-) = \psi_R(x = \ell^+), \frac{\partial\Phi(x)}{\partial x} = \frac{\partial\psi_R(x)}{\partial x} \quad (II.8)$$

Sur la limite droite. Ici, $\Phi(x)$ est la solution de l'équation de Schrödinger à l'intérieur de la région de potentiel $0 \leq x \leq \ell$. Généralement, $\Phi(x)$ ne peut pas être exprimée comme une superposition simple, de propagation d'ondes. Les relations linéaires en générale entre les ondes entrantes et sortantes peuvent être écrites comme :

$$\begin{pmatrix} \psi_L^-(0) \\ \psi_R^+(\ell) \end{pmatrix} = \mathbf{S} \begin{pmatrix} \psi_L^+(0) \\ \psi_R^-(\ell) \end{pmatrix} \quad (II.9)$$

Où la matrice \mathbf{S} ,

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} \quad (II.10)$$

Est appelé la matrice \mathbf{S} qui relie les ondes sortantes aux ondes entrantes comme le montre la (figure II.2). Ses éléments caractérisent complètement les propriétés de diffusion et de transmission du potentiel $V(x)$ à une dimension.

On peut aussi définir la matrice de transfert \mathbf{M} par la relation :

$$\begin{pmatrix} \psi_R^+(\ell) \\ \psi_R^-(\ell) \end{pmatrix} = \mathbf{M} \begin{pmatrix} \psi_L^+(0) \\ \psi_L^-(0) \end{pmatrix} \quad (II.11)$$

La matrice M exprime les coefficients de la fonction d'onde sur le côté droit de l'échantillon en fonction des coefficients de la fonction d'onde sur le côté gauche.

En comparant les équations linéaires (II.9) et (II.11), il est facile d'exprimer les éléments de la matrice de transfert M en fonction des éléments de la matrice de diffusion S [22] :

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_{21} - \frac{S_{22}S_{11}}{S_{12}} & \frac{S_{22}}{S_{12}} \\ -\frac{S_{11}}{S_{12}} & \frac{1}{S_{12}} \end{pmatrix} \quad (II.12)$$

De façon équivalente, on peut exprimer les éléments de la matrice de diffusion S en fonction des éléments de la matrice de transfert:

$$\mathbf{S} = \begin{pmatrix} S_{11} & S_{12} \\ S_{21} & S_{22} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\frac{M_{21}}{M_{22}} & \frac{1}{M_{22}} \\ M_{11} - \frac{M_{12}M_{21}}{M_{22}} & \frac{M_{12}}{M_{22}} \end{pmatrix} \quad (II.13)$$

II.4 Amplitudes de transmission et de réflexion:

Pour trouver la signification physique des éléments de la matrice de diffusion S , nous revenons à l'expérience de diffusion précédente. Considérons une particule qui approche l'échantillon de la droite. Comme aucune particule ne vient de la gauche, nous avons

$$\psi_L^+ = 0 \quad (II.14)$$

On normalise également l'onde incidente à l'unité,

$$|\psi_R^-|^2 = 1 \quad (II.15)$$

De l'équation (II.10), on trouve que l'onde émise ψ_R^- est donnée par:

$$\psi_L^-(x=0) = S_{12}\psi_R^-(x=\ell) \quad (II.16)$$

Et l'onde réfléchi :

$$\psi_L^+(x=0) = S_{22}\psi_R^-(x=\ell) \quad (II.17)$$

Nous appelons S_{12} l'amplitude de transmission t et S_{22} l'amplitude de réflexion:

$$t = S_{12}, r = S_{22} \quad (II.18)$$

De la même manière, nous ne considérons que la diffusion de la particule provenant de la partie gauche du potentiel. Nous obtenons l'amplitude de la réflexion $r' = S_{11}$, et l'amplitude de transmission $t' = S_{21}$.

Nous pouvons écrire la matrice de diffusion S sous la forme :

$$S = \begin{pmatrix} r' & t \\ t' & r \end{pmatrix} \quad (II.19)$$

En utilisant la relation entre la matrice de diffusion et la matrice de transfert (équation (II.13)), nous pouvons exprimer la matrice de transfert sous la forme :

$$M = \begin{pmatrix} t' - rt^{-1}r' & rt^{-1} \\ -t^{-1}r' & t^{-1} \end{pmatrix} \quad (II.20)$$

II.5 Multiplication des matrices de transfert :

A chaque interface, la fonction d'onde doit satisfaire les deux conditions de continuité (CC) : la fonction d'onde Ψ et sa dérivé $\frac{\partial \Psi}{\partial x}$ doivent être continus. En appliquant ces (CC) aux deux interfaces x_1 et x_2 , il est possible d'obtenir une relation linéaire homogène entre les amplitudes (A_1, B_1, A_3, B_3) des différentes ondes se trouvant à gauche et à droite de la région de potentiel $V(x)$ réel et fini de la figure ci-après [23].

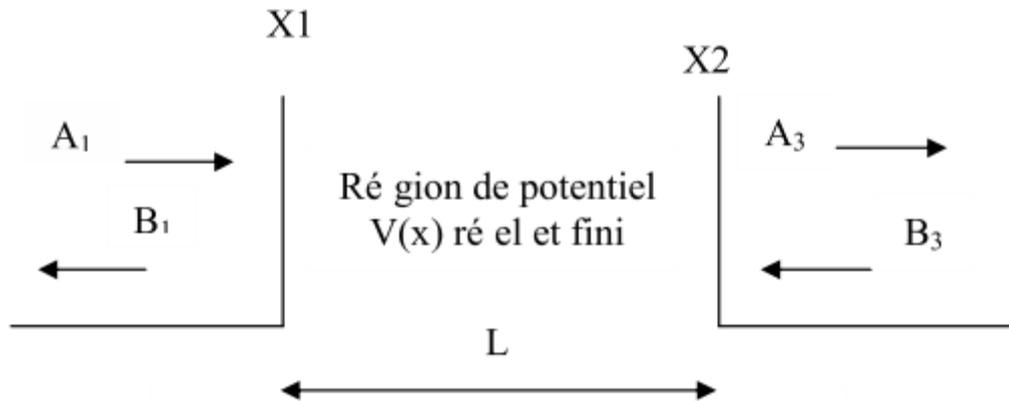


Figure II. 3 : Représentation du processus de diffusion.

$$A_3 = M_{11}A_1 + M_{12}B_1 \quad \text{Et} \quad B_3 = M_{21}A_1 + M_{22}B_1$$

Cette relation peut être convenablement exprimée en termes d'une matrice de transfert.

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (II.21)$$

Dans le cas d'une structure à n barrières, les amplitudes à gauche et à droite du système sont reliées comme.

$$\begin{pmatrix} A_{n+1} \\ B_{n+1} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} = M \begin{pmatrix} A_1 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (II. 22)$$

Ou $M = M_n \times M_{n-1} \times \dots \times M_1$ est le produit de n matrices M_k . M_k est la matrice qui correspond à la k ième barrière

$$M = M_n M_{n-1} \times \dots \times M_2 M_1 = \prod_i^N M_i \quad (II. 23)$$

Les éléments M_{ij} ($i = 1,2$ et $j = 1,2$) de la matrice M sont généralement complexes et dépendent du potentiel $V(x)$. La technique de la matrice de transfert est la méthode standard pour le calcul des coefficients de transmission et de réflexion à 1D.

II.6 Potentiels rectangulaires :

La barrière de potentiel rectangulaire schématisé sur la (figure II. 4) est discontinue en deux points $x_1 = -\frac{b}{2}$ et $x_2 = +\frac{b}{2}$

Ce potentiel permet d'étudier le principe de la résonance de diffusion.

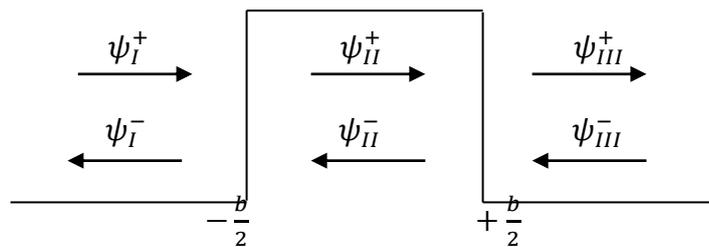


Figure II. 4 : barrière de potentiel rectangulaire de largeur b et la hauteur V.

II.6.1 matrice de transfert :

La solution de l'équation de Schrödinger (II. 1), dans chaque région sera :

. Dans la région I ou $V(x) = 0$

$$\Psi_I = A_1 e^{ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} \quad (II. 24)$$

Où A_1 et B_1 sont les amplitudes des ondes se trouvant à gauche du potentiel ($x \leq \frac{b}{2}$)

. Dans la région II ou $V(x) = V_0$

$$\Psi_{II} = A_2 e^{ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} \quad (II. 25)$$

Où A_2 et B_2 sont les amplitudes des ondes propage à l'intérieur de cette région

$$\left(-\frac{b}{2} \leq x \leq \frac{b}{2}\right)$$

. Dans la région III ou $V(x) = 0$

$$\Psi_{III} = A_3 e^{ik_3 x} + B_3 e^{-ik_3 x} \quad (II. 26)$$

Où A_3 et B_3 sont respectivement les amplitudes des ondes se trouvant à droite du potentiel

$$\left(x > +\frac{b}{2}\right)$$

$$\text{Avec } k_1 = k_3 = \sqrt{E} \quad \text{et } k_2 = \sqrt{E - V_0}$$

$$\text{Eprend } \frac{2m}{\hbar^2} = 1$$

En appliquant les conditions de continuité (CC) de la fonction d'onde aux deux interfaces $x_1 = -\frac{b}{2}$ Et $x_2 = +\frac{b}{2}$, il est possible d'obtenir deux matrices.

Les conditions de continuité en $x_1 = -\frac{b}{2}$ permettent d'obtenir

$$\begin{cases} \Psi_I(x_1) = \Psi_{II}(x_1) \\ \Psi'_I(x_1) = \Psi'_{II}(x_1) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_1 e^{ik_1 x_1} + B_1 e^{-ik_1 x_1} = A_2 e^{ik_2 x_1} + B_2 e^{-ik_2 x_1} \\ ik_1 A_1 e^{ik_1 x_1} - ik_1 B_1 e^{-ik_1 x_1} = ik_2 A_2 e^{ik_2 x_1} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 x_1} \end{cases} \quad (II. 27)$$

La résolution de ces équations nous permet d'obtenir :

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{k_1 + k_2}{2k_2}\right) e^{i(k_1 - k_2)x_1} & \left(\frac{k_2 - k_1}{2k_2}\right) e^{-i(k_1 + k_2)x_1} \\ \left(\frac{k_2 - k_1}{2k_2}\right) e^{i(k_1 + k_2)x_1} & \left(\frac{k_1 + k_2}{2k_2}\right) e^{i(k_2 - k_1)x_1} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (II. 28)$$

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (II. 29)$$

Les conditions de continuité en $x_2 = +\frac{b}{2}$ permettent d'obtenir

$$\begin{cases} \Psi_{II}(x_2) = \Psi_{III}(x_2) \\ \Psi'_{II}(x_2) = \Psi'_{III}(x_2) \end{cases} \Rightarrow \begin{cases} A_2 e^{ik_2 x_2} + B_2 e^{-ik_2 x_2} = A_3 e^{ik_3 x_2} + B_3 e^{-ik_3 x_2} \\ ik_2 A_2 e^{ik_2 x_2} - ik_2 B_2 e^{-ik_2 x_2} = ik_3 A_3 e^{ik_3 x_2} - ik_3 B_3 e^{-ik_3 x_2} \end{cases} \quad (II.30)$$

La résolution de ces équations nous permet d'obtenir

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{k_2 + k_3}{2k_3}\right) e^{i(k_2 - k_3)x_2} & \left(\frac{k_3 - k_2}{2k_3}\right) e^{-i(k_2 + k_3)x_2} \\ \left(\frac{k_3 - k_2}{2k_3}\right) e^{i(k_2 + k_3)x_2} & \left(\frac{k_2 + k_3}{2k_3}\right) e^{i(k_3 - k_2)x_2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (II.31)$$

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (II.32)$$

En recombinaison les équations (II. 28) et (II. 31) obtenons

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = M_1 M_2 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (II.33)$$

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (II.34)$$

Tel que les éléments de la matrice M sont définies par :

$$\begin{cases} M_{11} = \frac{1}{4k_3 k_2} [(k_2 + k_3)(k_1 + k_2) e^{ik_2 b} + (k_3 - k_2)(k_2 - k_1) e^{-ik_2 b}] e^{-i(k_1 + k_3)\frac{b}{2}} \\ M_{12} = \frac{1}{4k_3 k_2} [(k_2 + k_3)(k_2 - k_1) e^{ik_2 b} + (k_3 - k_2)(k_2 + k_1) e^{-ik_2 b}] e^{i(k_1 - k_3)\frac{b}{2}} \\ M_{21} = \frac{1}{4k_3 k_2} [(k_3 - k_2)(k_2 + k_1) e^{ik_2 b} + (k_2 + k_3)(k_2 - k_1) e^{-ik_2 b}] e^{i(k_3 - k_1)\frac{b}{2}} \\ M_{22} = \frac{1}{4k_3 k_2} [(k_3 - k_2)(k_2 - k_1) e^{ik_2 b} + (k_2 + k_3)(k_1 + k_2) e^{-ik_2 b}] e^{i(k_1 + k_3)\frac{b}{2}} \end{cases} \quad (II.35)$$

Et puisque dans ce cas, $k_1 = k_3$ donc on trouve :

$$M = \begin{pmatrix} \left[\cos k_2 b + \frac{i}{2} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2 b \right] e^{-ik_1 b} & \frac{i}{2} \left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2 b \\ -\frac{i}{2} \left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2 b & \left[\cos k_2 b - \frac{i}{2} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2 b \right] e^{+ik_1 b} \end{pmatrix} \quad (II.36)$$

On peut facilement vérifier que M satisfait à l'exigence de la conservation du courant. En outre, nous constatons que

$$M_{22} = M_{11}^* \quad , \quad M_{21} = M_{12}^* \quad (II.37)$$

De sorte que la matrice de transfert est de la forme donnée par l'équation :

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{12}^* & M_{11}^* \end{pmatrix} \quad (II.38)$$

Défini :

$$\alpha_{21} = 1 + \frac{k_1}{k_2}, \alpha_{32} = 1 + \frac{k_3}{k_2}, \alpha'_{21} = 1 - \frac{k_1}{k_2}, \alpha'_{32} = 1 - \frac{k_3}{k_2}, k'_{13} = (k_1 - k_3)$$

$$\text{Et } k_{13} = (k_1 + k_3). [24]$$

$$\begin{cases} M_{11} = \frac{1}{4k_3} [\alpha_{21}\alpha_{32}e^{ik_2b} + \alpha'_{21}\alpha'_{32}e^{-ik_2b}]e^{-ik'_{13}\frac{b}{2}} \\ M_{12} = \frac{1}{4k_3} [\alpha'_{21}\alpha'_{32}e^{ik_2b} + \alpha_{21}\alpha_{32}e^{-ik_2b}]e^{ik'_{13}\frac{b}{2}} \\ M_{21} = -\frac{1}{4k_3} [\alpha'_{21}\alpha_{32}e^{ik_2b} + \alpha_{21}\alpha'_{32}e^{-ik_2b}]e^{ik'_{13}\frac{b}{2}} \\ M_{22} = -\frac{1}{4k_3} [\alpha_{21}\alpha'_{32}e^{ik_2b} + \alpha'_{21}\alpha_{32}e^{-ik_2b}]e^{-ik'_{13}\frac{b}{2}} \end{cases} \quad (II.39)$$

II.7 Transmission dans un système non périodique $E > V_0$

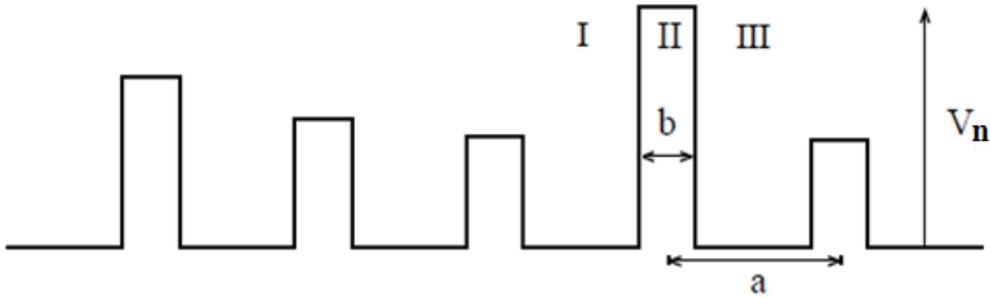


Figure II. 5 : Modèle de Kronig–Penney : potentiel unidimensionnel non périodique.

Le modèle considéré ici est constitué d'un seul électron d'énergie E se déplaçant le long d'un réseau périodique unidimensionnel de N potentiels de barrières rectangulaires équidistantes avec un paramètre de maille à [25]. L'équation de Schrödinger correspondant est

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (II.40)$$

Ici, E est l'énergie de l'électron est mesurée en unités atomiques, et ψ est la fonction d'onde.

La forme générale de potentiel $V(x)$ est [26] :

$$V(x) = \begin{cases} V_n & na - \frac{b}{2} \leq x \leq na + \frac{b}{2} \\ 0 & x < na - \frac{b}{2} \text{ et } x > na + \frac{b}{2} \end{cases} \quad (II.41)$$

II.7.1 Matrice de Transfert :

La solution de l'équation de Schrödinger (II.40) représentées sur la (figure II.5) dans la nième cellule peut être écrite en général:

$$\psi_j(x) = A_j e^{+ik_j x} + B_j e^{-ik_j x} \quad (II.42)$$

A_j et B_j sont les amplitudes des fonctions d'onde et k_j sont les vecteurs d'onde dans trois régions différentes. La construction de la matrice de transfert M_n dans la nième cellule est faite en imposant la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée aux points de discontinuité du potentiel. Explicitement, par une barrière de potentiel donnée, comme illustré sur la (figure. II.5), on obtient:

Pour $x = na - \frac{b}{2}$

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{k_1 + k_2}{2k_2}\right) e^{i(k_1 - k_2)(na - \frac{b}{2})} & \left(\frac{k_2 - k_1}{2k_2}\right) e^{-i(k_1 + k_2)(na - \frac{b}{2})} \\ \left(\frac{k_2 - k_1}{2k_2}\right) e^{i(k_1 + k_2)(na - \frac{b}{2})} & \left(\frac{k_1 + k_2}{2k_2}\right) e^{i(k_2 - k_1)(na - \frac{b}{2})} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (II.43)$$

Et pour $x = na + \frac{b}{2}$

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{k_2 + k_3}{2k_3}\right) e^{i(k_2 - k_3)(na + \frac{b}{2})} & \left(\frac{k_3 - k_2}{2k_3}\right) e^{-i(k_2 + k_3)(na + \frac{b}{2})} \\ \left(\frac{k_3 - k_2}{2k_3}\right) e^{i(k_2 + k_3)(na + \frac{b}{2})} & \left(\frac{k_2 + k_3}{2k_3}\right) e^{i(k_3 - k_2)(na + \frac{b}{2})} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (II.44)$$

Selon notre définition de la matrice de transfert, des équations (II.6), (II.43) et (II.44), nous pouvons écrire les éléments M_n de la matrice de transfert de la cellule unique comme :

$$\begin{cases} M_{n11} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_2 + k_3)(k_1 + k_2)e^{ik_2b} + (k_3 - k_2)(k_2 - k_1)e^{-ik_2b}] e^{i[(k_1 - k_3)na - (k_1 + k_3)\frac{b}{2}]} \\ M_{n12} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_2 + k_3)(k_2 - k_1)e^{ik_2b} + (k_3 - k_2)(k_2 + k_1)e^{-ik_2b}] e^{-i[(k_1 + k_3)na + (k_3 - k_1)\frac{b}{2}]} \\ M_{n21} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_3 - k_2)(k_2 + k_1)e^{ik_2b} + (k_2 + k_3)(k_2 - k_1)e^{-ik_2b}] e^{i[(k_1 + k_3)na + (k_3 - k_1)\frac{b}{2}]} \\ M_{n22} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_3 - k_2)(k_2 - k_1)e^{ik_2b} + (k_2 + k_3)(k_1 + k_2)e^{-ik_2b}] e^{-i[(k_1 - k_3)na - (k_1 + k_3)\frac{b}{2}]} \end{cases} \quad (II. 45)$$

Avec

$$k_2 = \sqrt{E - V_0} \quad (II. 46)$$

Si on prend

$$k_1 = k_3 = \sqrt{E} \quad (II. 47)$$

Nous observe que : $M_{22} = M_{11}^*$ et $M_{21} = M_{12}^*$

$$\begin{cases} M_{n11} = \frac{k_1}{4k_3} [\alpha_{21}\alpha_{32}e^{ik_2b} + \alpha'_{21}\alpha'_{32}e^{-ik_2b}] e^{i[k'_{13}na - k_{13}\frac{b}{2}]} \\ M_{n12} = \frac{k_1}{4k_3} [\alpha'_{21}\alpha_{32}e^{ik_2b} + \alpha_{21}\alpha_{32}e^{-ik_2b}] e^{-i[k_{13}na + k'_{13}\frac{b}{2}]} \\ M_{n21} = \frac{k_1}{4k_3} [\alpha'_{21}\alpha_{32}e^{ik_2b} + \alpha_{21}\alpha'_{32}e^{-ik_2b}] e^{i[k_{13}na + k'_{13}\frac{b}{2}]} \\ M_{n22} = \frac{k_1}{4k_3} [\alpha'_{21}\alpha'_{32}e^{ik_2b} + \alpha_{21}\alpha_{32}e^{-ik_2b}] e^{-i[k'_{13}na - k_{13}\frac{b}{2}]} \end{cases} \quad (II. 48)$$

Ici, nous avons défini

$$\alpha_{21} = 1 + \frac{k_1}{k_2}, \alpha_{32} = 1 + \frac{k_3}{k_2}, \alpha'_{21} = 1 - \frac{k_1}{k_2}, \alpha'_{32} = 1 - \frac{k_3}{k_2}, k'_{13} = (k_1 - k_3) \text{ et } k_{13} = (k_1 + k_3).$$

On trouve la matrice

$$M_n = \begin{pmatrix} \left[\cos k_2b + \frac{i}{2} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2b \right] e^{-ik_1b} & \left[\frac{i}{2} \left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2b \right] e^{-2ik_1na} \\ \left[-\frac{i}{2} \left(\frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2b \right] e^{2ik_1na} & \left[\cos k_2b - \frac{i}{2} \left(\frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2b \right] e^{+ik_1b} \end{pmatrix} \quad (II. 49)$$

III.7.2 Coefficient de transmission :

Le coefficient de transmission peut être obtenu soit à partir de la matrice de diffusion S, ou à partir de la matrice de transfert, en tant que

$$T = |t|^2 = |S_{12}|^2 = \frac{1}{|M_{22}|^2} \quad (II. 50)$$

$$T = \frac{1}{|M_{22}|^2} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left(\frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} \right)^2 \sin^2(k_2b)} \quad (II. 51)$$

II.8 Le modèle de Kronig-Penney dans la limite du potentiel en pic delta :

On considère une chaîne de longueur L constituée d'un ensemble N de barrières de potentiel actives en forme de pics delta donné par :

$$V(x) = \sum_n^N V_n \delta(x - x_n) \quad (II.52)$$

L'équation de Schrödinger correspondante à cette chaîne s'écrit :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \sum_n^N V_n \delta(x - x_n)\right] \Psi(x) = E \Psi(x) \quad (II.53)$$

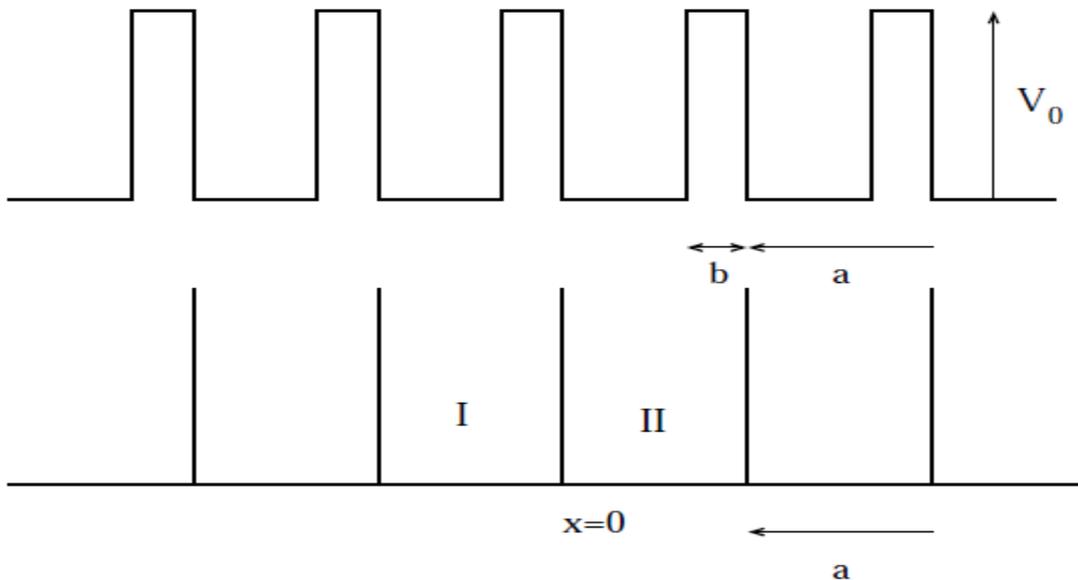


Figure II. 6 : Modèle de Kronig-Penney, potentiel rectangulaire(en haut, modèle B) modèle de Kronig-Penney potentiel delta (en bas, modèle A).

Pour évaluer les propriétés de transmission, il est commode d'utiliser la technique de la matrice de transfert. L'amplitude relative des fonctions d'onde des cellules voisines est obtenue pour un système de N sites par le produit des matrices de transfert pour chaque cellule individuelle.

Comme il n'y a pas de potentiel dans la région entre deux barrières voisins, $x_n < x < x_{n+1}$, la fonction d'onde d'un électron dans cette région peut être écrite comme une superposition d'ondes planes d'une particule libre:

$$\psi_n(x) = A_n e^{ik_1 x} + B_n e^{-ik_1 x} \quad (II.54)$$

Où $\psi_n(x)$ sont les fonctions d'onde dans un ensemble discret de points spatiaux $x_n = na$ [6], et $k_1 = \sqrt{E}$ représente le vecteur d'onde de la particule libre.

En utilisant les formules (II. 33) pour la matrice de transfert de modèle de Kronig-penney avec potentiels rectangulaires et effectuer la procédure limite donnée à la section précédente [4]. Nous pouvons immédiatement écrire la matrice de transfert, M_n concernant les amplitudes (A_n, B_n) et (A_{n+1}, B_{n+1}) pour le transfert d'un électron d'une cellule à l'autre [27]:

$$M_n = \frac{1}{2ik_1} \begin{pmatrix} -2ik_1 - V_n & V_n e^{-2ik_1 x_n} \\ V_n e^{2ik_1 x_n} & -2ik_1 + V_n \end{pmatrix} \quad (II.56)$$

La matrice de transfert totale M pour un réseau avec N cellules est obtenue à partir de:

$$M = \prod_n M_n \quad (II.57)$$

Dans ce qui suit, on considérera deux types de désordre : le désordre vertical où la hauteur des barrières de potentiel V_r est aléatoire et leurs positions restent fixes (leur disposition est périodique) (figure II. 7) et le désordre spatial où la position des barrières est aléatoire (varie) mais la hauteur des barrières de potentiel reste fixe (figure II. 8).

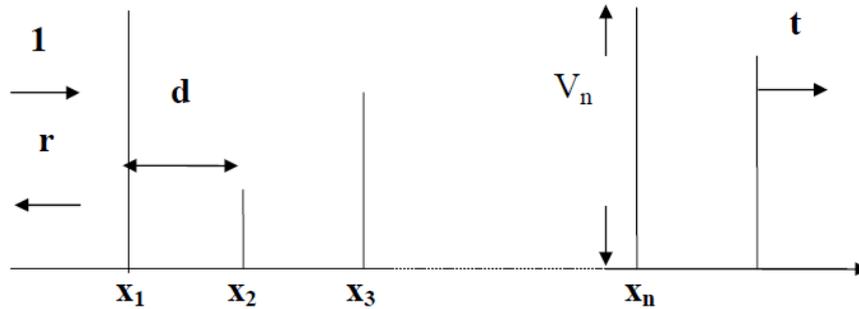


Figure II. 7 : le modèle de Kronig-Penney pour une chaîne en pics delta de hauteurs désordonnées et de position fixe. La hauteur des pics est V_n .

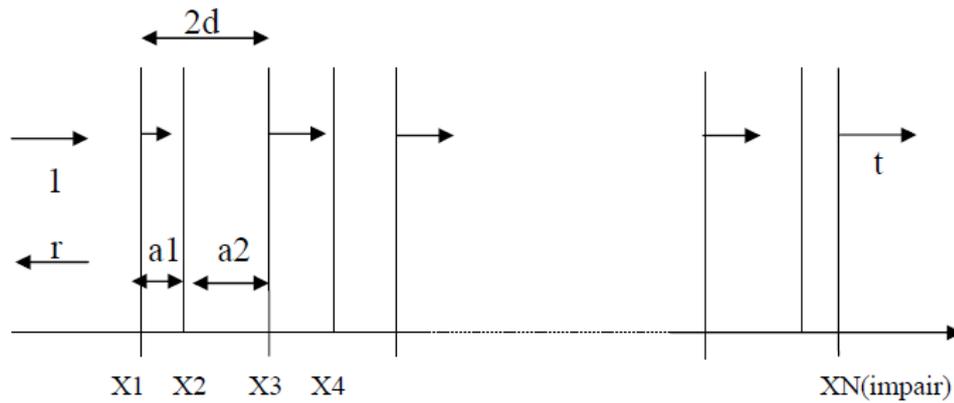


Figure II. 8 : le modèle de Kronig-penney pour une chaîne de potentiels en pic delta placés aléatoirement La hauteur des pics est V_0 .

II.9 conclusion :

Nous avons utilisé la technique de la matrice de transfert comme outil pour calculer la transmission dans un système unidimensionnel ordonné ou désordonné. Cette technique nous permet d'étudier la structure de bande pour un système ordonné et voir le comportement de la transmission en fonction des paramètres microscopiques de l'échantillon désordonné étudié : énergie, degré du désordre. etc.

III.1 Introduction :

Quand le désordre est introduit dans les systèmes ordonnés, la symétrie du réseau est brisée et le théorème de Bloch [4] n'est plus valable. La fonction d'onde doit être calculée pour plusieurs échantillons et les quantités physiques sont évaluées en prenant les moyennes. Anderson [7] montra que la présence du désordre dans un système électronique conduit à la présence d'états énergétiques localisés, c'est-à-dire la fonction d'onde est restreinte à une région donnée de l'espace. Dans ce cas les particules sont piégées dans des régions de taille fini et la probabilité de les trouver en dehors de ces régions décroît à 1D exponentiellement en s'éloigne de ces régions (états fortement localisés : $\Psi(x) = \exp\left(-\frac{x}{\xi}\right)$ où ξ est la longueur de localisation), alors qu'à 2D, cette probabilité décroît en puissance $\Psi(x) = L^{-\beta}$ (états faiblement localisés).

Dans ce chapitre on étudie numériquement le comportement du coefficient de transmission et les statistiques de l'exposant de Lyapunov d'un système unidimensionnel désordonnés. Nous examinerons les effets de taille du système, de degré du désordre et de l'énergie en utilisant le modèle de Kronig-Penney, avec les deux types de potentiel : le potentiel de pic δ (modèle A) et le potentiel de largeur finie (modèle B).

III.2 Formalisme :

On considère le modèle de Kronig-Penney appliqué à un système 1D de potentiels $V(x)$ désordonné. L'équation des Schrödinger correspondant s'écrit comme :

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \Psi(x) = E\Psi(x) \quad (III.1)$$

Où E est l'énergie de l'électron mesurée unité de $\frac{2m}{\hbar^2}$. Le paramètre de réseau a et la charge de l'électron sont pris comme unité. La longueur de la chaîne est donc identique au nombre d'atomes ($L=N$)

Les deux extrémités du système sont connectées à des fils parfaits où l'électron se déplace librement). La force de potentiel peut être uniformément répartie entre :

0 et W pour les barrières

$-W$ et 0 pour les puits

$-W/2$ et $W/2$ pour le cas mixte

Où W est le paramètre du désordre.

Deux types de potentiels seront traités : potentiel de pic δ (modèle A) et potentiel de largeur finie (modèle B).

Deux types de désordre sont étudiés: le désordre vertical où la force du potentiel est aléatoire et le paramètre de réseau constant, et le désordre spatial où la distance interatomique est aléatoire et le potentiel est constant.

III.2.1. Modèle A :

Dans ce modèle le potentiel a la forme générale

$$V(x) = \sum_{n=1}^N V_n \delta(x - x_n) \quad (III.2)$$

L'équation différentielle de second ordre (III.1) peut être en utilisant la représentation de Poincaré. Ceci consiste à relier les vecteurs fonctions d'onde (Ψ_{n+1}, Ψ_n) et (Ψ_n, Ψ_{n-1}) aux différents sites du réseau. La fonction d'onde entre les sites n et $n+1$ est de la forme :

$$\psi_n(x) = A_n e^{+ikx} + B_n e^{-ikx} \quad (III.3)$$

En utilisant les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée, on obtient l'équation récursive suivant [28].

$$\Psi_{n+1} = \left[2 \cos(k) + V_n \frac{\sin k}{k} \right] \Psi_n - \Psi_{n-1} \quad (III.4)$$

Avec $k = \sqrt{E}$

Et le coefficient de transmission aura pour expression :

$$T = \frac{|\exp(-2ik) - 1|^2}{|\Psi_{N+2} - \Psi_{N+3}\exp(-ik)|^2} \quad (III.5)$$

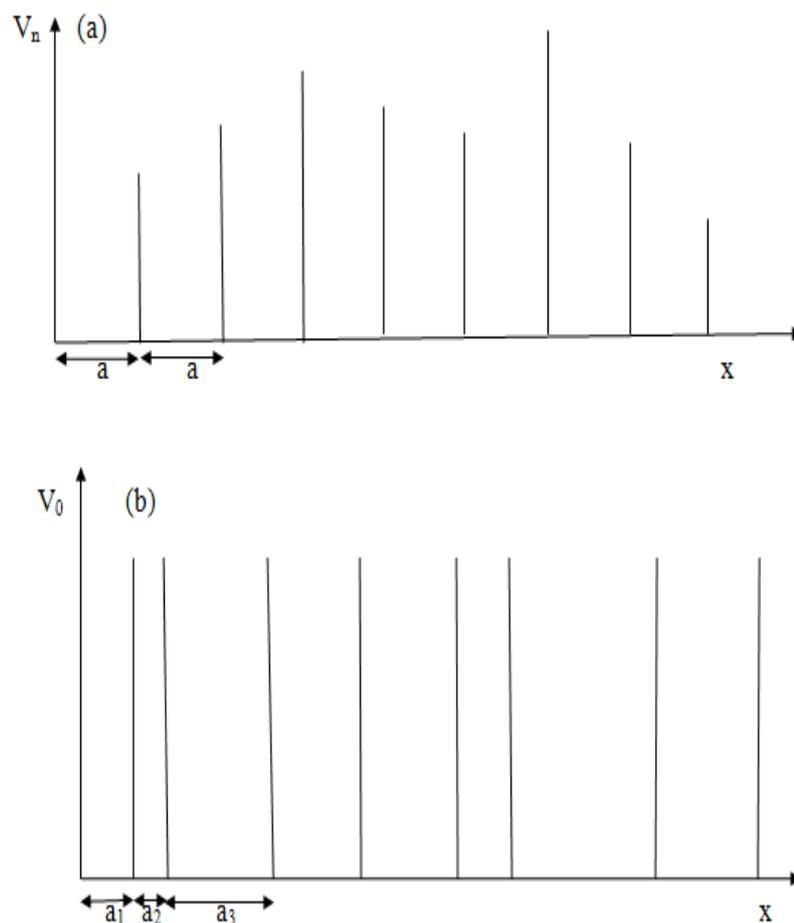


Figure III. 1 : modèle A : potentiel de pic δ avec désordre vertical (a) et désordre spatial (b).

III.2.2 Modèle B :

Dans ce modèle le potentiel a la forme

$$V(x) = \sum_{n=1}^N V(x - x_n) \quad (III.6)$$

Avec

$$V = \begin{cases} V_n, & \text{pour } |x - x_n| \leq \frac{b}{2} \\ 0 & \text{ailleurs} \end{cases} \quad (III.7)$$

Ici V_n est le potentiel sur le site au centre à x_n et N est le nombre total de barrières (voir figure III. 1). On prend le paramètre de réseau $a=1$ et la largeur de la barrière moitié $b = \frac{1}{2}$ [29]

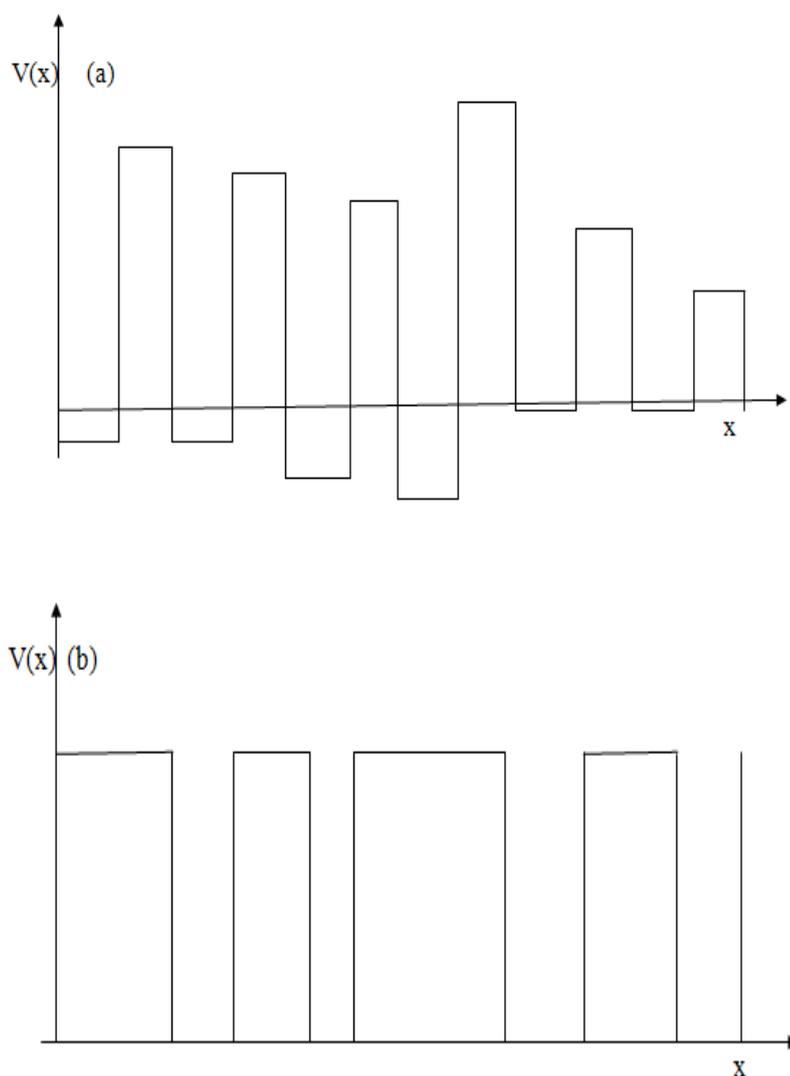


Figure III. 2 : modèle B : potentiel de largeur finie avec désordre vertical (a) et désordre spatial (b).

On utilise le formalisme de la matrice de transfert. Le détail des calculs est mentionné au chapitre II. La matrice de transfert totale s'écrit comme :

$$M = \prod_{n=1}^N m(na) \quad (III. 8)$$

Avec :

$$M_{11} = \frac{k_1}{4k_3} \left(\alpha_{12} \alpha_{32} \exp(ik_2 b) + \alpha'_{21} \alpha'_{32} \exp(-ik_2 b) \right) \exp(i(k'_{13} - k_{13})b) \quad (III. 9)$$

$$M_{12} = \frac{k_1}{4k_3} \left(\alpha'_{21} \alpha_{32} \exp(ik_2 b) + \alpha_{21} \alpha'_{32} \exp(ik_2 b) \right) \exp \left(-i(k_{13} na - k'_{13} b_1) \right) \quad (III. 10)$$

Et $M_{22} = M_{11}^*$, $M_{21} = M_{12}^*$

Ici les paramètres k_{ij} , k'_{ij} , α_{ij} et α'_{ij} sont définis par :

$$\alpha_{12} = 1 + \frac{k_1}{k_2}, \quad \alpha_{32} = 1 + \frac{k_3}{k_2}, \quad \alpha'_{21} = 1 - \frac{k_1}{k_2}, \quad \alpha'_{32} = 1 - \frac{k_3}{k_2},$$

$$k'_{13} = (k_1 - k_3) \text{ et } k_{13} = (k_1 + k_3)$$

Et le coefficient de transmission est donné par :

$$T = \frac{1}{|M_{11}|^2} \quad (III. 11)$$

III.3 Résultats et discussion :

III.3.1 Structures de bande :

Pour un système ordonné on a calculé la transmission en fonction du vecteur d'onde (spectre d'énergie avec $k=\sqrt{E}$) dans le cas d'un système parfaitement ordonné.

Cette figure (III. 3) montre deux bandes permises (pour un système infini) où la transmission est égale à l'unité séparées par une bande interdite où la transmission est nulle.

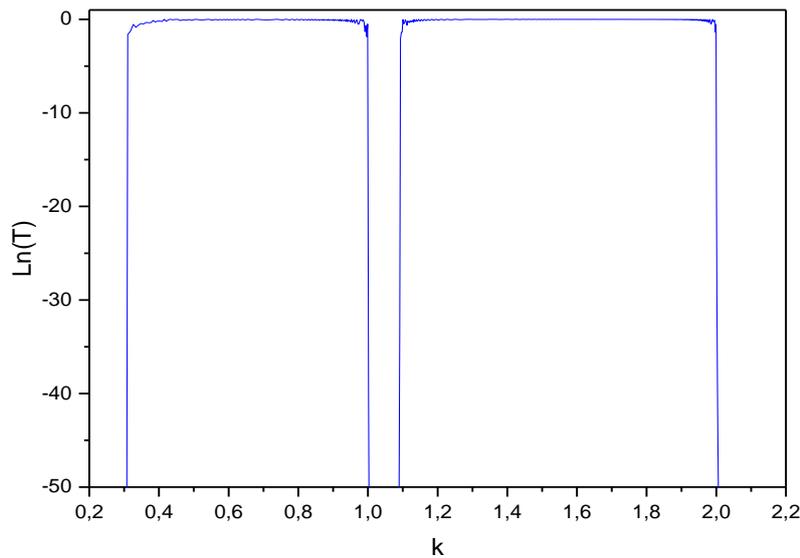


Figure III. 3 : $\ln(T)$ en fonction du vecteur d'onde k ($k = \sqrt{E}$) pour $N= 500$. Cas d'un système ordonné de potentiel en barrières.

III.3.2 Désordre vertical :

III.3.2.a Effet du désordre sur la transmission:

Nous présentons les résultats de l'effet du désordre W sur les propriétés de transport électronique dans les systèmes unidimensionnels. Nous avons pris pour nos calculs la valeur de l'énergie $E=5$ et le nombre d'échantillons de 1000.

On commence par étudier l'effet désordre sur différent types de potentiel : barrière, puits et mixte (mélange de barrières et de puits) pour le modèle A.

Les résultats sont montrés sur la figure (III. 4). Cette figure montre $\langle -\ln T \rangle$ en fonction de la taille du système L . On confirme le comportement général de la transmission c'est à dire la décroissance exponentielle avec la taille du système : $T = \exp(-L/\xi)$ quelque soit le degré du désordre pour les 3 types de potentiel : barrière (figure III. 4a), puits (figure III. 4b) et mixte (figure III. 4c).

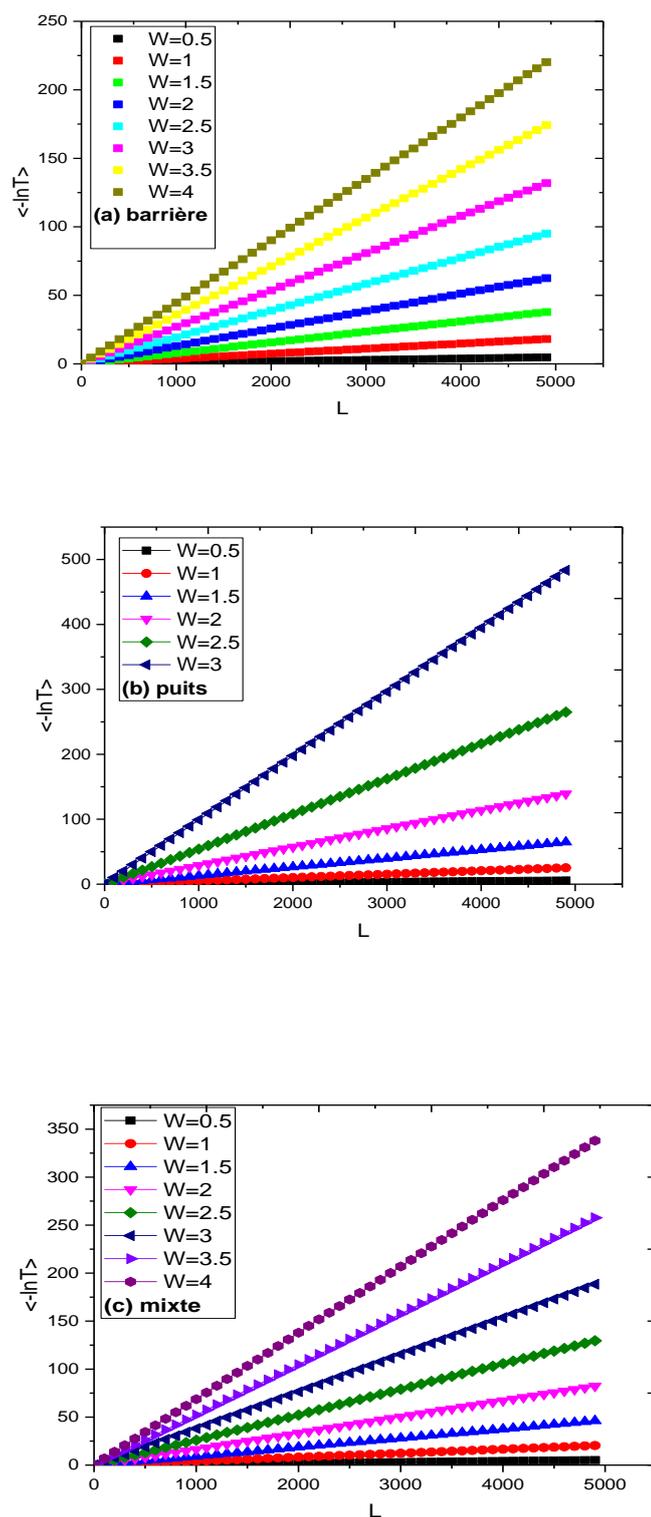


Figure III. 4 : $\langle -\ln T \rangle$ en fonction de la taille du système pour $E=5$ et différents valeur du désordre W pour différent types des potentiels (a) barrière, (b) puits, (c) mixte.

Pour mieux voir l'effet du type de potentiel sur le transport électronique, nous avons tracé sur la figure (III. 5) le coefficient de transmission $\langle -\ln T \rangle$ en fonction de la taille de système pour les 3 types de potentiel : barrière, puits et mixte pour comparer son comportement.

Les systèmes dont le potentiel est en puits présentent des états plus localisés (avec un exposant de Lyapunov représentant la pente de courbe : $(\gamma=0.02839)$ que les systèmes à barrière de potentiel ($\gamma=0.01276$). Ceci est dû à la forte attraction des puits de potentiel en comparaison avec les systèmes en barrière pour lesquels la transmission est plus facile en raison de l'effet tunnel. Evidemment pour les systèmes mixtes l'attraction forte de puits est compensée avec l'effet tunnel dans les systèmes en barrières ($\gamma=0.01684$).

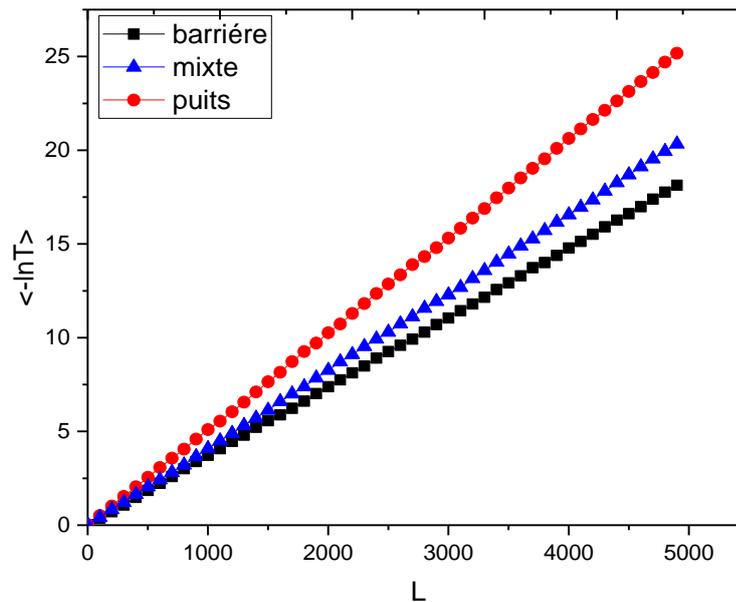


Figure III. 5 : comparaison du comportement du coefficient de transmission entre barrière, puits et mixte en fonction de la taille de système L pour $E=5$, $W=1$.

III.3.2.b Effet du désordre sur l'exposant de Lyapunov:

Nous rappelons que la longueur de localisation est l'inverse de l'exposant de Lyapunov qui présente la pente des graphes $\langle -\ln T \rangle$ en fonction de la taille de système.

La figure (III. 6) montre le comportement de l'exposant de Lyapunov γ en fonction de degré désordre W pour différents types de potentiel. On remarque que l'exposant de Lyapunov γ croît exponentiellement avec le degré du désordre quel que soit le type de potentiel. On remarque que γ est plus petit pour les potentiels en barrières que celui des potentiels en puits ce qui confirme la forte localisation des états électroniques pour les puits en comparaison avec ceux des barrières.

Le comportement de la longueur de localisation est montré sur la figure (III. 7). On voit bien que ξ décroît avec le degré du désordre puisque $\xi = \frac{1}{\gamma}$.

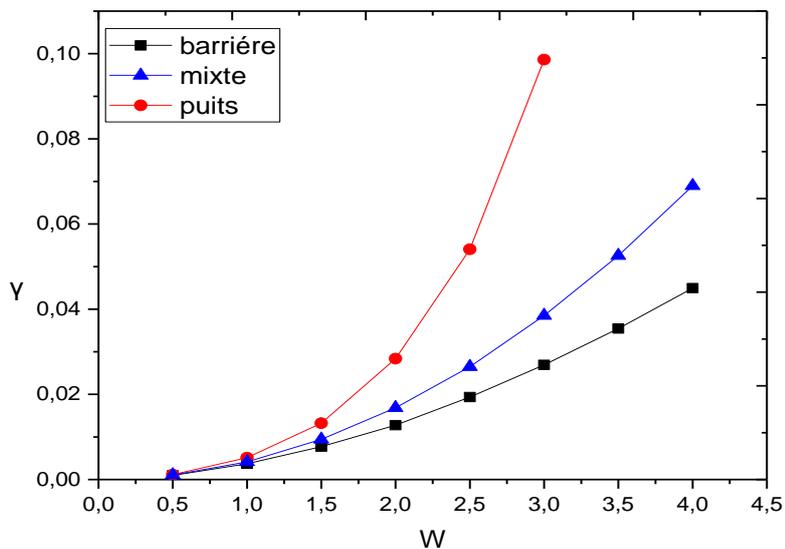


Figure III. 6: L'exposant de Lyapunov γ en fonction du degré du désordre W pour $E=5$ pour les 3 types de potentiels.

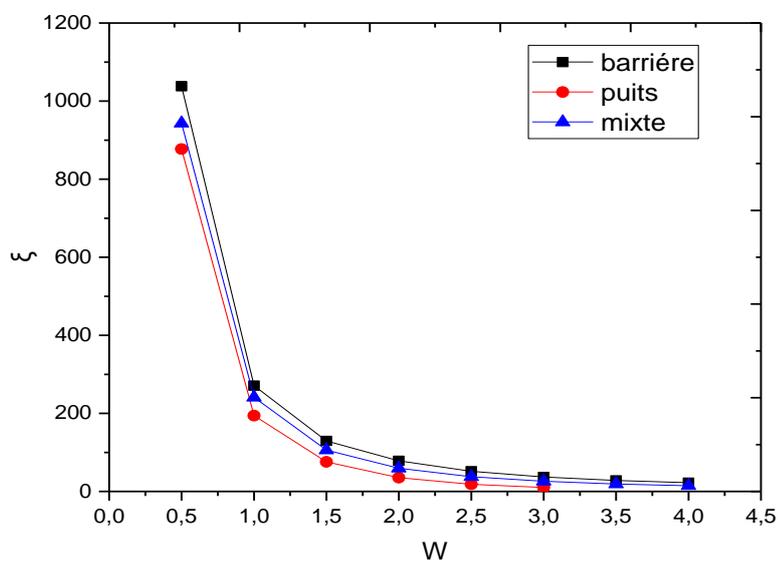


Figure III. 7 : la longueur de localisation ξ en fonction de degré du désordre W pour $E=4$.

III.3.2.c Effet de l'énergie :

Examinons maintenant l'effet de l'énergie sur l'exposant de Lyapunov pour différents types de potentiel.

La figure (III. 8) représente l'exposant de Lyapunov γ en fonction de l'énergie E pour différents types de potentiel : barrière, puits et mixte pour $W=1$ et une taille du système $L=4000$. Nous remarquons que l'exposant de Lyapunov diminue quand l'énergie augmente pour W et L fixes indiquant que la transmission devient plus facile pour les hautes énergies. Pour la longueur de localisation (figure III. 9) on observe le comportement inverse. ξ augmente en fonction de l'énergie.

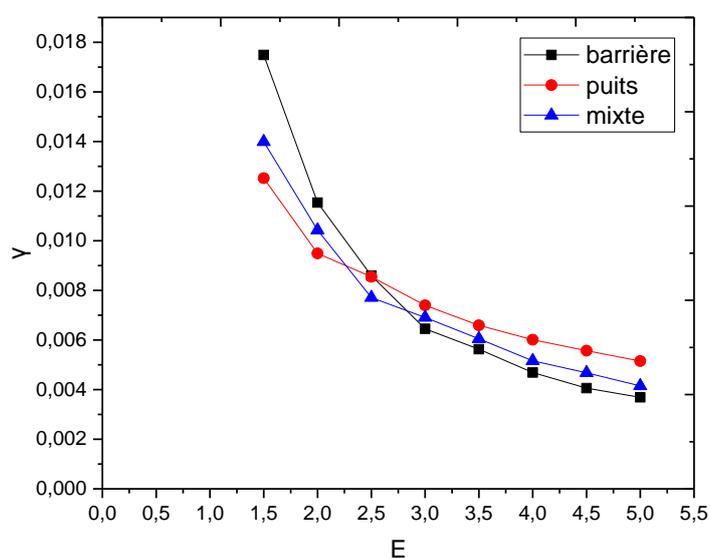


Figure III. 8: L'exposant de Lyapunov γ en fonction d'énergie pour $W=1$ pour les 3 types de potentiels.

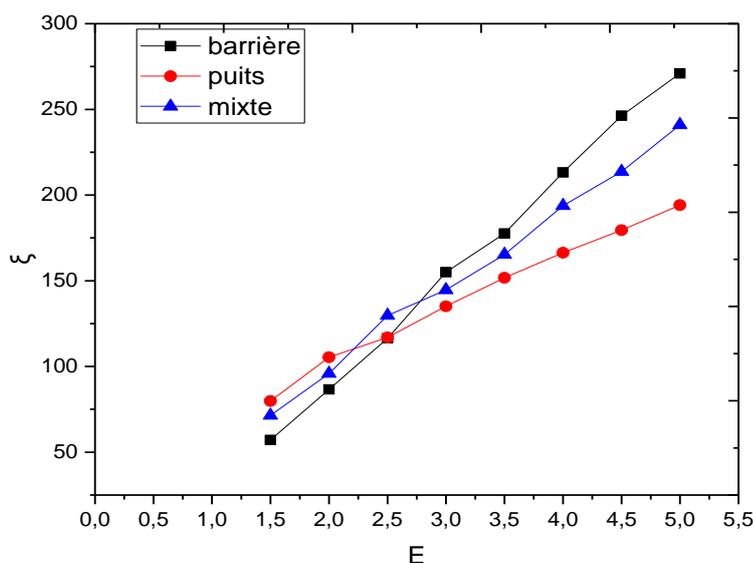


Figure III. 9: la longueur de localisation ξ en fonction d'énergie pour $W=1$.

III.3.2.d Comparaison des deux modèles :

Essayons maintenant de comparer le comportement de la transmission pour les deux modèles A et B en utilisant le désordre vertical.

La figure (III. 10) montre la transmission $\langle -\ln T \rangle$ en fonction de la taille de système pour les deux modèles A et B. Le coefficient de transmission montre une décroissance exponentiellement avec la taille de système. Cette figure montre que la transmission est plus facile pour le modèle B (barrière de largeurs finies) que pour le modèle A (qui simule les interactions à courtes distances).

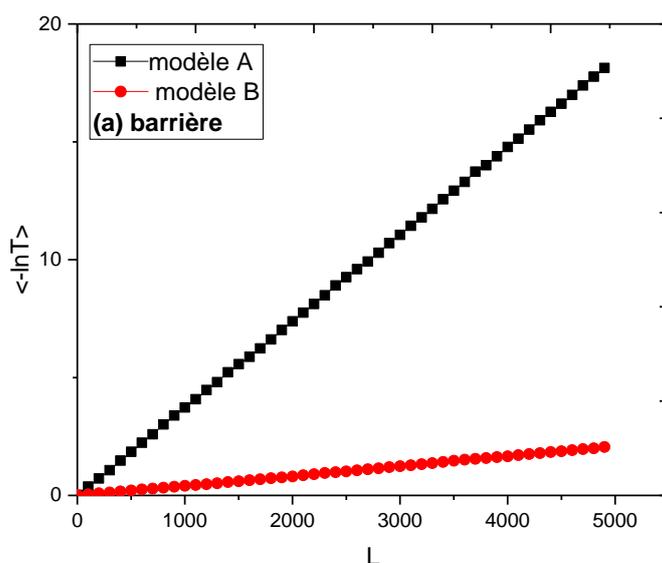


Figure III. 10: comparaison le coefficient de transmission entre modèle A et modèle B en fonction de la taille de système L pour potentiel en barrière, $W=1$.

La figure (III. 11) représente le comportement de l'exposant de Lyapunov γ en fonction du degré du désordre W pour les deux modèles A et B dans le cas du désordre vertical. On observe que cet exposant augmente avec le désordre pour les deux modèles mais pour le modèle B γ est plus petit indiquant la faible localisation des états électroniques.

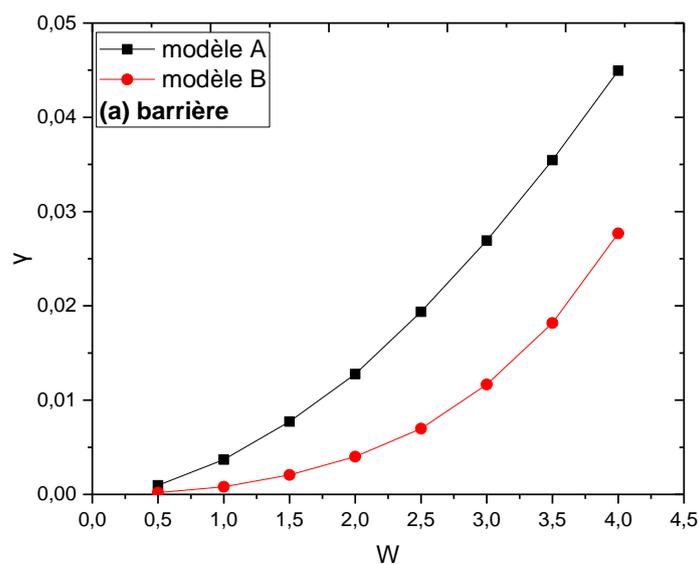


Figure III. 11: comparaison de l'exposant de Lyapunov γ entre modèle A et modèle B en fonction de degré désordre W pour (cas de désordre vertical).

III.3.3 Désordre spatial :

Pour le désordre spatial, nous avons calculé $\langle -\ln(T) \rangle$ en fonction de la taille du système pour différentes valeurs du désordre et pour deux énergies différentes $E=4$ (ce qui correspond à une énergie dans la bande interdite de système ordonné) et $E=12$ (ce qui correspond à une énergie dans la bande permise de système ordonné) (voir figure III.3). Le même comportement de la transmission a été observé : T décroît exponentiellement avec la taille L du système. A partir de ces courbes on a calculé l'exposant de Lyapunov. La figure (III. 12) montre le comportement de cet exposant en fonction de degré du désordre pour les deux énergies $E=4$ et $E=12$.

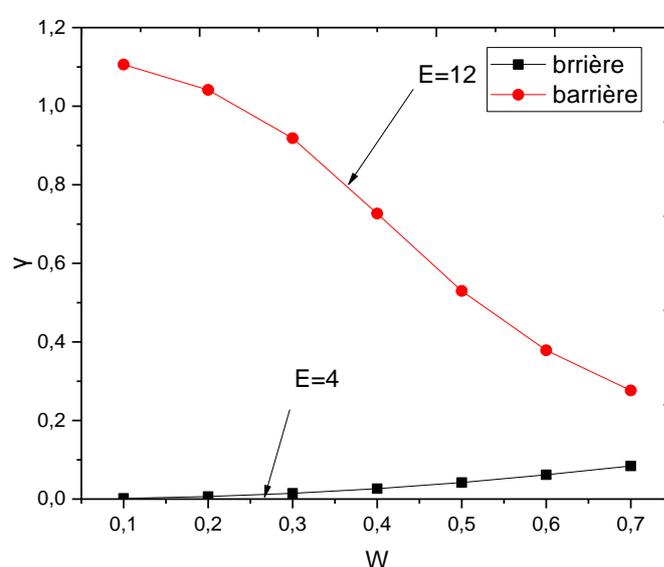


Figure III. 12 : L'exposant de Lyapunov γ en fonction du degré du désordre spatial pour deux valeurs d'énergie $E=4$ et $E=12$.

On remarque de cette figure que pour ce type de désordre (spatial), l'exposant de Lyapunov dépend de l'énergie de l'électron. Pour $E=4$ (correspondant à une énergie dans la bande interdite du système ordonné), γ augmente avec le degré du désordre comme le cas du désordre vertical. Par contre, pour $E=12$ (correspondant à une énergie dans la bande permise du système ordonné), γ décroît avec le degré du désordre. Ce dernier comportement a été observé dans le cas de super-réseaux avec le désordre spatial [30]

III.3.4 Propriétés statistique de l'exposant de Lyapunov :

Il a été trouvé [31] que dans les systèmes désordonnés, où les états sont localisés, que l'exposant de Lyapunov montre une distribution de probabilité normale (gaussienne) et que sa valeur moyenne $\langle \gamma \rangle$ est reliée sa variance σ par :

$$\tau = \frac{\sigma L}{\langle \gamma \rangle} \quad (III. 12)$$

Où τ est le simple paramètre d'échelle de l'exposant de Lyapunov, $\langle \dots \rangle$ représente la moyenne statistique de réalisations du potentiel aléatoire et L étant la taille du système. Le simple paramètre d'échelle τ a été trouvé qu'il tend vers l'unité quand les états électroniques sont localisés.

La figure (III. 13) montre le paramètre d'échelle τ en fonction de degré du désordre W pour $E=$ et différents valeurs de la taille du système. On remarque que le paramètre d'échelle est indépendant de la taille de système et qu'il tend vers l'unité pour les grandes valeurs du degré du désordre confirmant le comportement général des systèmes fortement localisés.

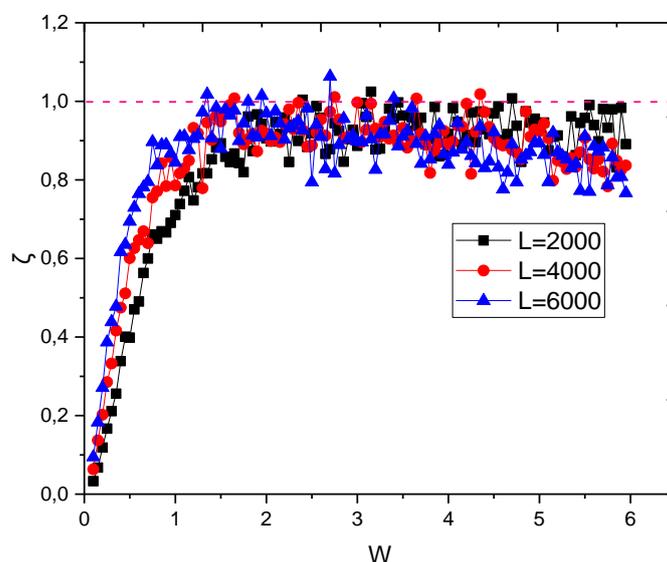


Figure III. 13: τ en fonction de degré du désordre W pour différents valeurs de la taille du système L pour un potentiel en barrière pour le désordre vertical.

La figure (III. 14) montre le paramètre d'échelle τ en fonction de la taille du système pour différentes valeurs du degré de désordre. Cette figure confirme la validation de la théorie du simple paramètre d'échelle pour les forts désordres seulement $\tau = 1$ pour $W=3$ et $\tau < 1$ quand $W < 1$.

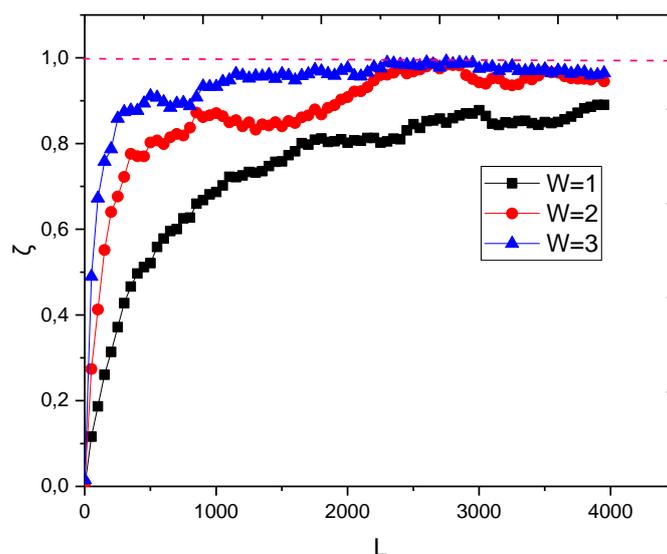


Figure III. 14: Le simple paramètre d'échelle τ en fonction de la taille du système pour différents valeurs de degré désordre W pour un potentiel en barrière.

La figure (III. 15) représente τ en fonction de la taille du système pour différentes valeurs de l'énergie E et un désordre fixe $W=1$. On remarque que τ tend vers 1 pour les faibles énergies indiquant la forte localisation des états électroniques et confirmant le comportement de l'exposant de Lyapunov en fonction de l'énergie (figure III.8).

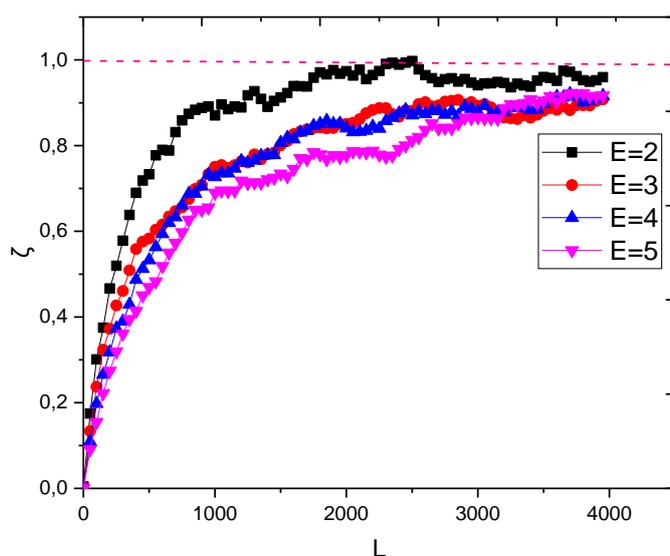


Figure III. 15: τ en fonction de la taille du système pour différents valeurs de l'énergie pour un potentiel en barrière.

III.3.5 Distribution de probabilité de l'exposant de Lyapunov :

En général, une distribution gaussienne est définie par l'expression suivante :

$$P(\gamma) = A \exp \left[- \left(\frac{(\gamma - \bar{\gamma})^2}{2\sigma} \right) \right] \quad (III. 13)$$

Elle est caractérisée par sa moyenne $\langle \gamma \rangle$ et sa variance σ . Il sera intéressant de voir le comportement de la distribution de probabilité de l'exposant de Lyapunov suivant les différents paramètres : taille de système L , degré désordre W et l'énergie E .

III.3.5.a Effet de la taille :

Il a été montré que l'exposant de Lyapunov présente une distribution gaussienne dans le régime isolant.

La figure (III. 16) montre la distribution de la probabilité de l'exposant de Lyapunov $P(\gamma)$ pour différentes tailles du système. Cette figure montre que $P(\gamma)$ est gaussien confirmant le comportement général dans le régime isolant pour d'autres modèles.

Cette figure montre aussi que la variance (largeur à mi-hauteur de la distribution) décroît avec la taille du système montrant que l'exposant Lyapunov obéit au théorème de la limite centrale.

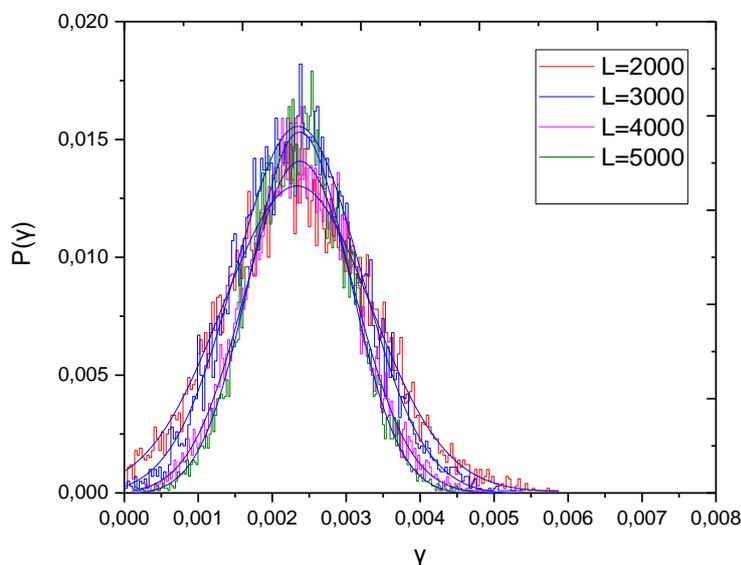


Figure III. 16 : la distribution de $P(\gamma)$ de l'exposant de Lyapunov pour différentes valeurs de la taille de système L avec $W=1$ et $E=4$ dans le cas de désordre vertical.

III.3.5.b Effet du désordre :

Examinons l'effet du désordre sur la distribution de probabilité de l'exposant de Lyapunov dans le cas de potentiel en barrière. En variant le degré du désordre W , nous remarquons d'après la figure (III. 17) que la variance σ ainsi que la moyenne $\langle \gamma \rangle$ augmentent en augmentant avec le degré du désordre W indiquant la forte localisation des états électroniques.

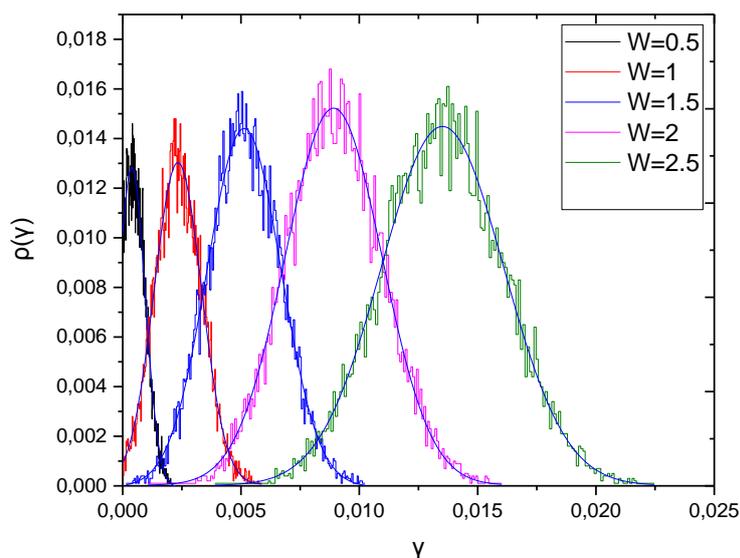


Figure III. 17 : la distribution de probabilité $P(\gamma)$ de l'exposant de Lyapunov pour différentes valeurs de désordre W avec $E=4$ et $L=2000$.

III.3.5.c Effet de l'énergie :

La figure (III. 18) représente la distribution $P(\gamma)$ de l'exposant de Lyapunov pour différentes valeurs de l'énergie E , pour $L=2000$ et $W=1$. Nous observons que la variance σ la moyenne $\langle \gamma \rangle$ de l'exposant de Lyapunov augmentent avec l'énergie E .

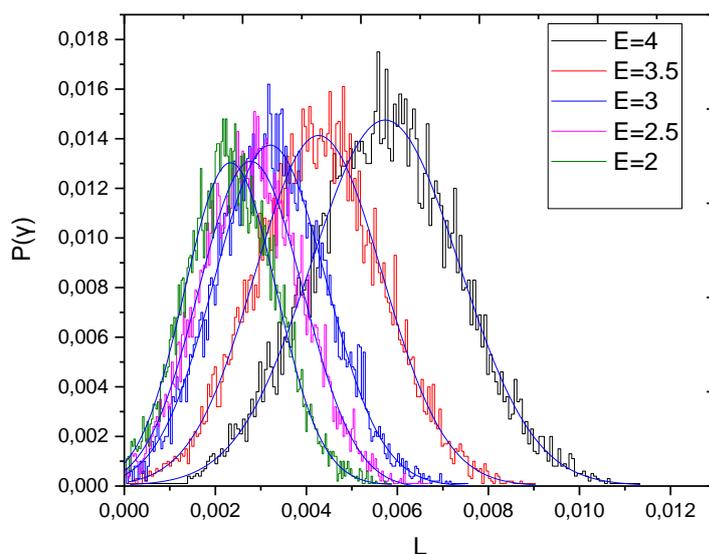


Figure III. 18 : la distribution de $P(\gamma)$ en fonction de l'exposant de Lyapunov pour différentes valeurs d'énergie E , $W=1$ et $L=2000$ dans le cas barrière.

III.3.5.d Effet du type de potentiel :

Nous avons calculé la distribution de probabilité de l'exposant de Lyapunov pour le cas du désordre vertical avec les trois types de potentiel : barrière, puits et mixte pour $W=1$, $L=2000$ et $E=4$.

La figure (III. 19) montre que la variance σ et la moyenne $\langle \gamma \rangle$ augmentent avec l'augmentation de l'exposant de Lyapunov. Cette figure confirme le comportement du coefficient de transmission déjà observé. On remarque que le puits présente une variance et une moyenne plus grande que pour les barrières, elles sont plus petites. Dans le cas mixte elles prennent des valeurs intermédiaires. Ce qui signifie que les états électroniques sont fortement localisés pour les potentiels en puits et faiblement localisés pour les potentiels en barrières.

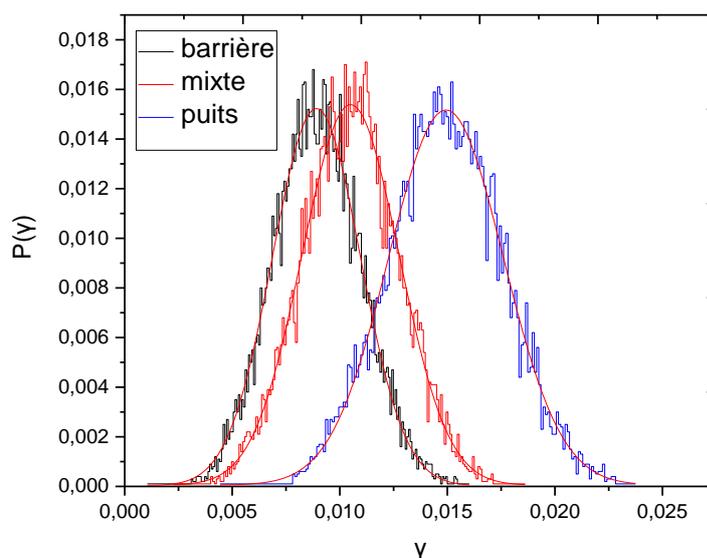


Figure III. 19 : Comparaison de la distribution de $P(\gamma)$ de l'exposant de Lyapunov entre trois types de potentiel : la barrière, puits et mixte pour $W=1$, $E=4$ et $L=2000$.

III.3.6 La variance de l'exposant de Lyapunov :

A partir des figures précédentes, on a trouvé que la variance de γ diminue en fonction de la taille de système (figure III. 16) et qu'elle augmente en fonction de degré désordre (figure III. 17) ou de l'énergie (figure III. 18).

Nous avons calculé la variance $\sigma(\gamma)$ de l'exposant de Lyapunov en fonction du degré du désordre et de la taille du système.

La figure (III. 20) montre que $\sigma(\gamma)$ décroît avec la taille du système et tend vers zéro à la limite thermodynamique. Ceci indique que l'exposant de Lyapunov obéit au théorème de la limite centrale.

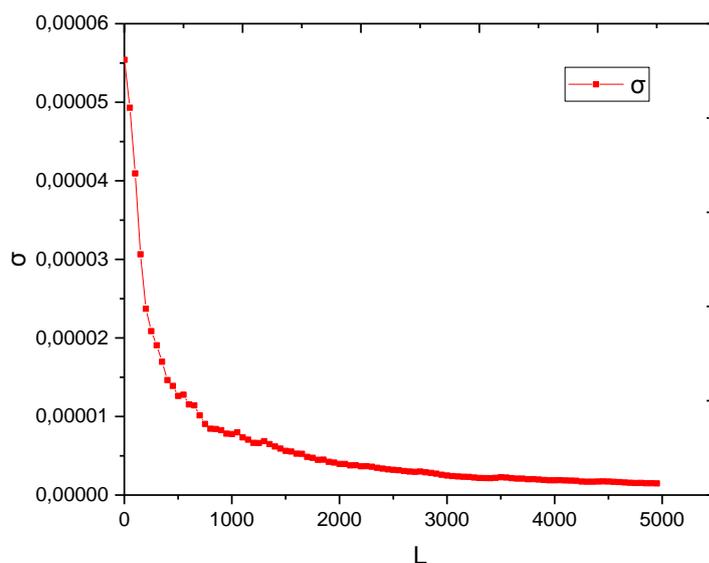


Figure III. 20 : la variance σ en fonction de la taille du système L pour $W= 1$ et $E=4$ dans le cas de potentiel en barrière.

La figure (III. 21) confirme que l'exposant de Lyapunov γ croit avec de degré du désordre dans le potentiel en barrière.

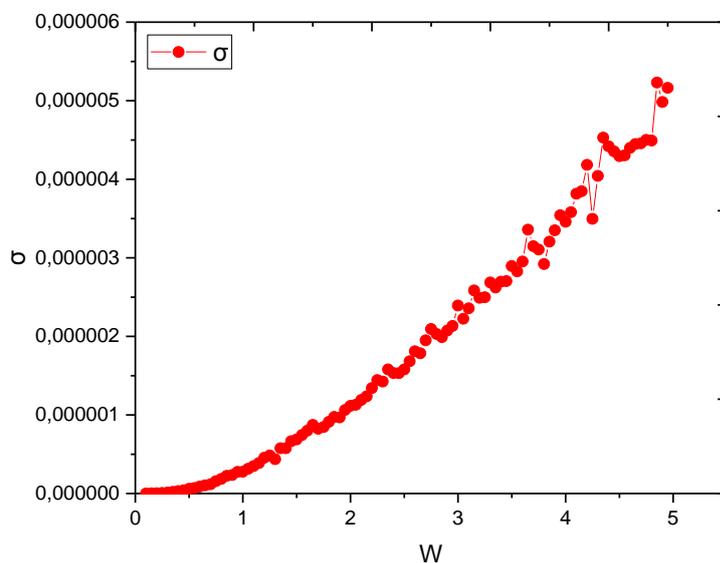


Figure III. 21 : la variance σ en fonction de degré désordre W pour $L= 4000$ et $E=6$ Dans le cas de potentiel en barrière.

La figure (III. 22) présente la variation de γ en fonction de la taille du système L avec différentes valeurs du degré désordre W pour $E=4$ et $L=4000$. Nous remarquons que la variance augmente quand le désordre W augmente pour les petites tailles L du système.

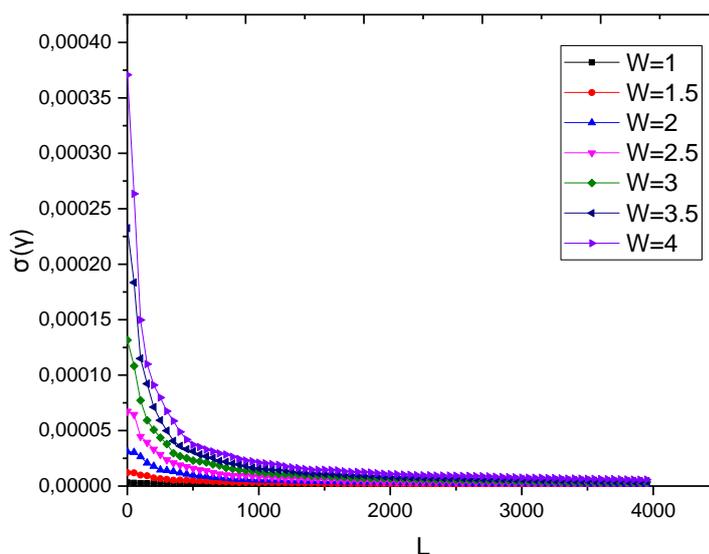


Figure III. 22 : la variance σ de γ en fonction de la taille du système L pour différent du degré désordre.

On observe de la figure (III. 23) que la variance de γ diminue lorsque l'énergie augmente pour un désordre W et une taille L donnés.

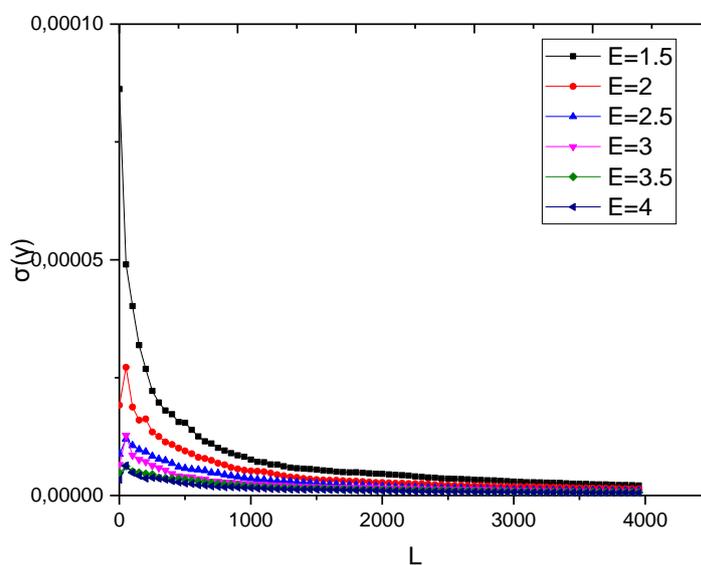


Figure III. 23 : la variance σ en fonction de la taille du système L pour différentes valeurs d'énergie E .

III.3.6.a Effet du désordre sur la variance de γ :

Pour voir le comportement de la variance de γ en fonction de la taille de système L , on a tracé la courbe $\ln(\sigma(\gamma))$ en fonction de $\ln(L)$, pour différentes valeurs du désordre W et $E=4$, dans le cas de potentiel en barrière.

La figure (III. 24) montre une variation linéaire indiquant que la variance $\sigma(\gamma)$ de l'exposant de Lyapunov γ décroît en puissance suivant la loi :

$$\sigma(\gamma) \sim L^{-\beta} = \frac{1}{L^\beta} \quad (III. 14)$$

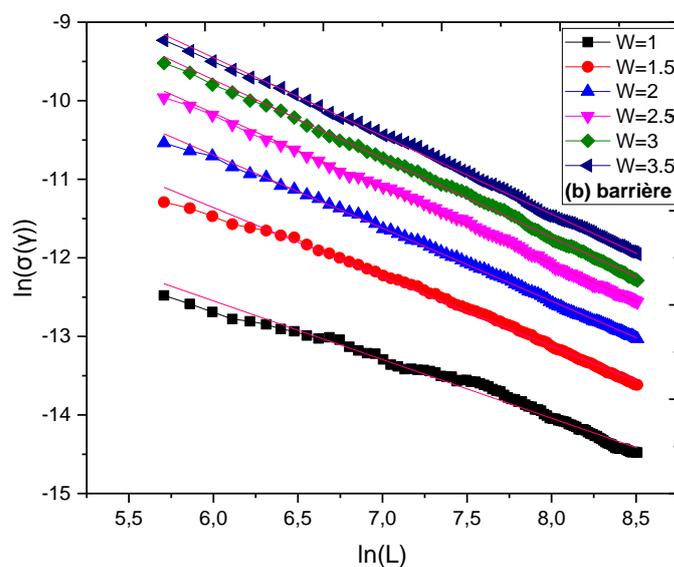


Figure III. 24 : $\ln(\sigma(\gamma))$ en fonction $\ln(L)$, pour différentes valeurs du désordre W et $E=4$ dans avec potentiel en barrière.

III.3.6.b Effet de l'énergie sur la variance de γ :

La figure (III. 25) montre le comportement $\ln(\sigma(\gamma))$ en fonction $\ln(L)$, pour différentes valeurs de l'énergie E pour un désordre fixe, dans le cas de potentiel en barrière. Le même comportement est observé : une décroissance en puissance.

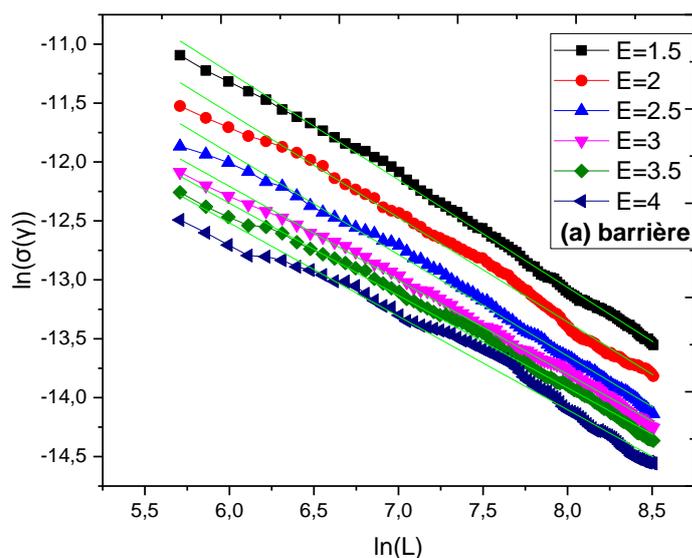


Figure III. 25 : $\ln(\sigma(\gamma))$ en fonction $\ln(L)$, pour différentes valeurs de l'énergie E avec $W=1$.

III.3.6.c Effet du type de potentiel

Pour voir l'effet du désordre nous avons calculé l'exposant de la loi en puissance β de l'équation (III.14) différentes valeurs du degré du désordre W .

La figure (III. 26) montre l'exposant β en fonction de degré du désordre pour les deux types de potentiel : la barrière et le puits. Nous remarquons que β augmente en augmentant le désordre W et semble être plus grand pour les potentiels en barrières que pour les potentiels en puits.

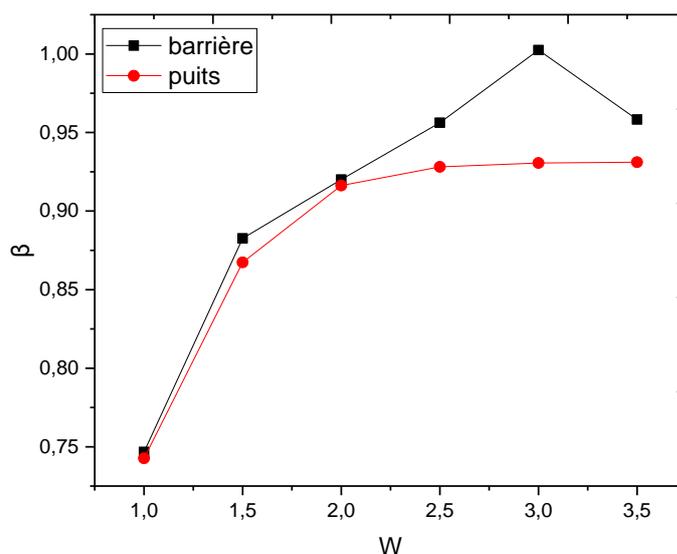


Figure III. 26 : L'exposant de la loi en puissance β en fonction de degré du désordre pour les deux types de potentiel : barrières et puits.

Le même travail est fait pour voir l'effet de l'énergie. La figure (III. 27) montre que l'exposant de la loi en puissance β diminue en fonction de l'énergie E. Il semble que cet exposant n'est pas affecté par le type de potentiel.

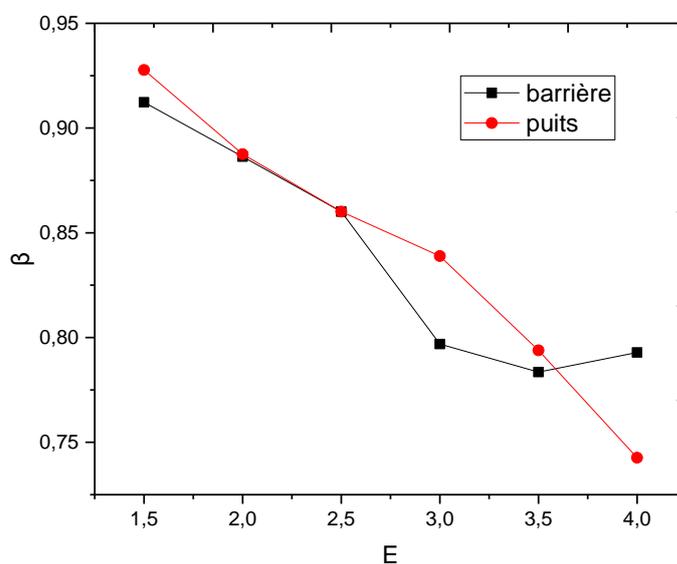


Figure III. 27 : L'exposant de la loi en puissance β en fonction de l'énergie pour les deux types de potentiel : barrières et puits.

III.7 Conclusion :

Dans ce travail, nous avons utilisé le modèle Kronig-Penney à une dimension pour étudier l'effet désordre, de la taille du système et de l'énergie sur la nature des états électronique du système désordonné.

Nous avons utilisé deux modèles: le modèle de potentiel de pic δ (modèle A) et le modèle de potentiel de largeur finie (modèle B). Nous avons montré que la transmission est plus facile pour le modèle B que dans le modèle A. Nous avons aussi trouvé que l'exposant de Lyapunov est plus grand dans le modèle A indiquant la forte localisation des états électroniques.

Nous avons aussi étudié l'effet du désordre, de la taille du système et de l'énergie sur les statistiques de l'exposant de Lyapunov (moyenne, variance et distribution de probabilité). Nous avons montré que sa variance décroît en puissance avec la taille du système en se comportant comme :

$$\sigma(\gamma) \sim L^{-\beta} = \frac{1}{L^{\beta}} \quad (III. 15)$$

Où l'exposant décroît avec l'énergie E de la particule et augmente avec le degré du désordre W.

Plusieurs résultats ont été trouvés et commentés.

Conclusion générale :

Au cours de ce travail, nous avons étudié la nature des états électroniques des systèmes désordonnés à une dimension. Pour cela, nous avons utilisé le modèle de Kronig-Penney et la technique de la matrice de transfert.

En première lieu, nous avons étudié le comportement du coefficient de transmission et de l'exposant de Lyapunov pour les trois types de potentiel (barrière, puits et mixte) avec les deux modèles : modèle A (potentiel de pic δ) et modèle B (potentiel de largeur finie) pour voir l'effet du désordre et de l'énergie. Nous avons trouvé que le coefficient de transmission décroît exponentiellement avec la taille de système quelque soit le degré désordre et l'énergie en conséquence la transmission dans le potentiel en barrière est plus facile en comparaison avec celle du système de potentiel en puits. Nous avons aussi montré que l'exposant de Lyapunov augmente exponentiellement avec le degré du désordre avec une forte localisation pour les puits de potentiel. Nous avons constaté que le modèle B (potentiel de largeur finie) favorise la transmission en comparaison avec le modèle A (potentiel de pic δ) qui simule les interactions à courtes distances.

En utilisant un autre type de désordre : le désordre spatial, nous avons montré la délocalisation des états électroniques (décroissance de l'exposant de Lyapunov) en présence du désordre.

Dans le cas ordonné, nous avons confirmé le spectre d'énergie donnant les bandes permises séparées par la bande interdite.

Dans un deuxième lieu, nous avons étudié les propriétés statistiques de l'exposant de Lyapunov pour voir les effets du désordre, de la taille du système et du type de potentiel. Nous avons confirmé la nature des états électroniques qui sont fortement localisés pour le potentiel en puits et faiblement localisés pour le potentiel en barrière. Nous avons ensuite étudié les statistiques de l'exposant de Lyapunov : sa moyenne, sa variance et sa distribution de probabilité. Nous avons confirmé le comportement général pour un isolant pour la distribution probabilité qui est gaussienne.

Nous avons confirmé la théorie du simple paramètre d'échelle qui relie la variance de de l'exposant de Lyapunov et sa moyenne à la taille du système. Nous avons aussi montré que la variance de de l'exposant de Lyapunov γ augmente avec le degré du désordre indiquant la forte localisation des états électroniques. Cette variance décroît en puissance avec la taille du système en se comportant comme :

$$\sigma(\gamma) \sim L^{-\beta} = \frac{1}{L^\beta}$$

Où l'exposant décroît avec l'énergie E de la particule et augmente avec le degré du désordre W.

- [1] P.W. Anderson, Phys. Rev. 109, 1492 (1958).
- [2] N. F Mott et W. D. Twose : Adv. Phy. 10, 107 (1061).
- [3] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. 42, 673 (1979).
- [4] F. Bloch , Z. phys. 52, 555 (1928)
- [5] I. M. Lifchiz, S. A. Gradeskul, I. A. Pastur, Introduction to the theory of disordered systems, wiley interscience publication, (1988).
- [6] Henri Allol, '' physique des électrons dans les solides, structure de bande'', sep 200.
- [7] N. F. Mott : J. Non-Cryst. Solide 1, 1 (1968)
- [8] Thouloless, D. (1974). Electrons in désordre systems and the theory of localization. Phy. 13, 93 (1973).
- [9] R. Ouasti, N. Zekri, A. Brezini et C. Depollier : J. Phys. Conds. Matt. 7, 811 (1995).
- [10] R. J. Bell et P. Deam : Discus. Faraday Soc. 50, 55 (1970)
- [11] B. Kramer, D. Weaire : Amorphous semiconductors, P. 9. M. H. Brodsky, (ed). Berlin Heisenberg, New york : Springer (1974).
- [12] Belisand, A. Formoso, R. Lima et D. Testard : phys. Rev. B26, 3024 (1982).
- [13] M. O. Robbins et B. Kooiller : Phys. Rev. B32, 4576 (1985).
- [14] C. M. Soukoulis, J. V. Jose, E. N. Economou et P. Sheng : Phys. Rev. Lett. 50, 764 (1983).
- [15] Comme. Ref : G. Bastard, E. Emendez, L.L.Chang et L. Esaki , Phys.Rev.B28,3241 (1983).
- [16] E. Cota, J.V. José et M.Y. Azbel : Phys. Rev. B 32, 6157 (1985).
- [17] N. Zekri, M. Schreiber, R. Ouasti, R. Bouamrane et A. Brezini : Z. Phys. B 99, 381(1996).
- [18] N. Zekri, M.Schreiber et R.Ouasti : J. Phys.Conds. Matt.7, L275(1995).
- [19] A. R. Gonzalez, Quantum wires in one dimension: disorder, electronic transport and dissipation, Tesis Doctoral, Universidad de Salamanca (2005).
- [20] Cohen-Tannoudji, C. B. Diu, and F. Lalce, Quantum Mechanics. John Wiley & Sons, New York (1977).

- [21] R. de L et W G Penny, Proc, Roy, Soc. (Londres) 130, 499 (1931) ; D. A. MC Quarrie, the Educator chemical, vol ; 1S 1430, 4171 (1996).
- [22] Peter Markos, costas M. Soukoulis. Wave propagation (from electrons to photonic crystals and left-handed materials).
- [23] BENNABI yamina. These Doctorant. USTO (2012).
- [24] 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).
- [25] Landau, L. D. and E. M. Lifshitz, Quantum Mechanics. Pergamon, Oxford (1984)
- [26] Flügge, S, Practical Quantum Mechanics. Springer, Berlin (1994, reprinted 1999).
- [27] Yeh, P., *Optical Waves in Layered Media*, 2nd ed. Wiley Series in Pure and Applied Optics. John Wiley & Sons, New York (2005).
- [28] Rabah Benhenni, Khaled Senouci, Rachid Bouamrane, Nouredine Zekri Physica A 389 (2010) 1002-1008
- [29] K. Senouci, N. Zekri, R. Ouasti, Physica A 234 (1996) 23.
- [30] S.M.A. Nimour, R. Ouasti, and N. Zekri, phys. stat. sol. (b) 209, 311 (1998).
- [31] Yoichi Asada, Keith Slevin, Tomi Ohtsuki, Lev I. Deych, Alexander A, Lisyansky, et Boris L. Altshuler, J. Phys Soc. Vol. 72 (2003) Suppl. A pp. 173-174.