



MINISTÈRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPÉRIEUR ET DE LA  
RECHERCHE SCIENTIFIQUE

Université Abdel Hamid Ibn Badis de Mostaganem  
Faculté des Sciences Exactes et l'Informatique

Domaine Sciences de la Matière

Département de Physique

**Projet de Fin d'Etudes**

**Pour l'obtention du Master en Physique**

Option : Modélisation et Caractérisation des Matériaux

Présenté Par :

**Belabd Abdelkader**

Sujet :

**Etudes des propriétés statistiques des systèmes désordonnés .**

Soutenue le : 30/05/2016

Devant le jury composé de :

Mr. M. Beghdad	Professeur	Université de Mostaganem	Président
Mme. R. Melati	M.C.B	Université de Mostaganem	Examineur
Mr. K. Senouci	Professeur	Université de Mostaganem	Encadreur

Année universitaire : 2015-2016

**Table des matières**

Introduction générale : ..... I

**CHAPITRE I : Généralités sur les systèmes désordonnés**

I. Introduction .....1

II. Les systèmes ordonnés .....2

III. Les systèmes désordonnés .....2

IV. Les différents types de désordre .....3

    b. Désordre structural ou spatial .....3

    c. Désordre topologique .....3

    d. Désordre compositionnel .....3

V. Les régimes de transport:.....4

    1. Régime balistique ( $l > L$ ).....4

    2. Régime métallique ( $g \gg 1, L \ll \lambda$ ).....4

    3. Régime localisé (isolant) ( $g \ll 1, L \gg \lambda$ ).....5

VI. Modèle d'Anderson.....5

VII. Théorie d'Echelle.....7

VIII. Localisation d'Anderson.....8

IX. Critères de localisation.....10

    a. Rapport de participation inverse.....10

    b. Exposant de Lyapunov.....10

    c. Longueur de localisation .....10

    d. Le coefficient de transmission.....11

X. Etats électroniques des systèmes désordonnés.....11

X. a. Etats électroniques des systèmes désordonnés sans interactions.....	11
➤ Délocalisation des états électroniques.....	11
➤ Localisation des états électroniques.....	12
X. b. Etats électroniques des systèmes désordonnés en présence des interactions non linéaire.....	13
XI. Transition Métal-Isolant.....	13
XII. Le modèle Kronig – Penney.....	14
XIII. Le modèle de tight-binding.....	15

## CHAPITRE II : Technique de la matrice de transfert

I. Introduction .....	16
II. Une expérience de diffusion .....	17
III. Matrice de diffusion et matrice de transfert .....	18
IV. Transmission et la réflexion Amplitudes.....	20
V. Multiplication des matrices de transfert.....	21
VI. Potentiels rectangulaires .....	22
VI. a. matrice de transfère.....	22
VII. Transmission dans un système périodique $E > V_0$ .....	24
VII. a. Application de la matrice de transfert.....	25
VII. b. Coefficient de transmission.....	27
VIII. La conductance.....	28
VIII. 1. Fluctuations de conductance dans le régime isolant.....	28
VIII. 2. Distribution de probabilité de conductance.....	29
VIII. 2. a. Régime métallique.....	29
VIII. 2. b. Régime isolant.....	29
VIII. 2. c A la transition.....	30

## CHAPITRE III : Etude des propriétés statistiques

I. Introduction.....	31
II. Formalisme.....	32
III. Résultats et discussion .....	33
III. 1. Etats électroniques d'un système 1D désordonné .....	33
III. 1. a. Effet du type potentiel sur la longueur de localisation et l'exposant de Lyapunov.....	36
III. 1.b. Effet de l'énergie sur la longueur de localisation et l'exposant de Lyapunov..	38
III. 2. Statistique de la conductance.....	39
III. 2. a. L'effet du désordre sur la conductance.....	39
III. 2.b. L'effet du désordre sur les fluctuations de la conductance.....	40
III.2.c. Distribution de probabilité de conductance .....	43
III.2.c.1 Effet du désordre.....	43
III.2.c.2. Effet de la taille.....	44
III.2.c.3 Effet de l'énergie.....	45
IV. Résumé.....	46
Conclusion:.....	47
Bibliographie:.....	48

Liste des figures

**Chapitre I : Généralités sur les systèmes désordonnés**

**figure I.1** : Forme de la fonction d'onde. (a) état étendu, (b) état localisé..... 3

**Figure I.2** : Différents types de désordre dans le cas d'un système (a) ordonne, (b) avec désordre structural, (c) avec désordre topologique, (d) désordre compositionnel.....4

**Figure I.3** : (a) Ondes de Bloch, (b) localisation d'Anderson.....6

**Figure I.4** : Evolution du coefficient  $\beta(g)$  en fonction de la conductance à différentes.....8

**Figure I.5** : Représentation d'état étendu d'un système faiblement désordonné.....12

**Figure I.6** : Représentation d'état localisé d'un système totalement désordonné.....13

**Figure I.7** : Densité d'états pour un système avec désordre intermédiaire. Les états localisés et étendus sont séparés par le front de mobilité  $E_c$ .....14

**Figure I.8** : potentiel périodique de Kronig-Penney.....15

**Figure I.9**: les fonctions d'onde atomiques de solide cristallin unidimensionnel.....15

**Chapitre II : Technique de la matrice de transfert**

**Figure II.1** : Potentiel périodique de Kronig-Penney.....17

**Figure II.2** : Expérience typique de diffusion.....18

**Figure II.3** : Schématique explication du calcul de la transmission par l'intermédiaire de deux barrières.....21

**Figure II.4** : Translation des électrons à travers l'ensemble du système consistant en deux échantillons 1-2.....22

**Figure II.5** : Barrière de potentiel rectangulaire de largeur  $b$  et la hauteur  $V_0$ .....22

**Figure II.6** : Modèle de Kronig-Penny : potentiel non périodique unidimensionnel.....24

**Figure II.7** : potentiel aléatoire rectangulaire dans un champ électronique: (a) avec une rampe de potentiel ; (b) avec son approximation.....25

**Figure II. 8**: Principe de mesure d'une conductance d'un système conservatif de taille  $L$ , à  $T=0$ .....28

**Chapitre III : Etude des propriétés statistiques**

**Figure III.1** : Coefficient de transmission  $\langle -\ln T \rangle$  en fonction de la taille de système  $L$  pour  $E=4$  et différentes valeurs du désordre  $W$  pour le cas des potentiels en barrières.....34

**Figure III.2** Coefficient de transmission  $\langle -\ln T \rangle$  en fonction de la taille de système  $L$  pour  $E=4$  et différentes valeurs du désordre  $W$  pour le cas des potentiels en puits.....34

**Figure III.3** : Coefficient de transmission  $\langle -\ln T \rangle$  en fonction de la taille de système  $L$  pour  $E=4$  et différentes valeurs du désordre  $W$  pour le cas des potentiels en mixte.....35

## Liste des figures

<b>Figure III.4</b> : Coefficient de transmission $\langle -\ln T \rangle$ en fonction de la taille de système $L$ pour $E=4$ , $w=2$ et différents types de potentiel.....	35
<b>Figure III.5</b> : Exposant de Lyapunov $\gamma$ en fonction du degré du désordre $w$ pour $E=4$ .....	37
<b>Figure III.6</b> : longueur de localisation $\xi$ en fonction du degré du désordre $w$ pour $E=4$ .....	38
<b>Figure III.7</b> : Exposant de Lyapunov $\gamma$ en fonction du degré du désordre $w$ pour différentes valeurs du $E$ et le cas de potentiels en barrières.....	38
<b>Figure III.8</b> : longueur de localisation $\xi$ en fonction du degré du désordre $w$ pour différentes valeurs du $E$ et le cas de potentiels en barrières.....	39
<b>Figure III.9</b> : la conductance moyenne $\langle -\ln g \rangle$ en fonction de la taille de système $L$ pour $E=5$ , $w=3$ et différents types de potentiel.....	40
<b>Figure III.10</b> : la variance de la conductance $\text{var}(-\ln g)$ en fonction la conductance moyenne $\langle -\ln g \rangle$ pour $w=3$ , $E=5$ et différents types de potentiel.....	41
<b>Figure III.11</b> : le coefficient $(A)$ en fonction différents valeurs du degré du désordre $w$ pour $E=5$ et le cas de potentiel en barrière.....	42
<b>Figure III.12</b> : la distribution de $P(-\ln(g))$ en fonction de $-\ln(g)$ , pour des différentes valeurs du désordre $w$ , $L=500$ et $E=4$ dans le cas de potentiel en barrière.....	44
<b>Figure III.13</b> : la distribution de $P(-\ln(g))$ en fonction des différentes valeurs de taille pour $w=2$ , $E=4$ et le cas de potentiel en barrière.....	44
<b>Figure III.14</b> : la distribution de $P(-\ln(g))$ en fonction de différentes valeurs des énergies pour $w=2$ et le cas de potentiel en barrière.....	45

**Liste des tableaux**

**Chapitre I : Généralités sur les systèmes désordonnés**

**Tableau I.1 :** Comparaison des différents régimes de transport.  $L$  taille du système, conductance,  $l$  libre parcours moyen et  $\lambda$  longueur de localisation.....5

**Chapitre III : Etudes de propriétés statistiques**

**Tableau III.1 :** Exposant de Lyapunov  $\gamma$  et longueur de localisation  $\xi$  en fonction du degré du désordre  $W$  et  $E=4$  pour le cas de potentiels en barrières.....36

**Tableau III.2 :** Exposant de Lyapunov  $\gamma$  et longueur de localisation  $\xi$  en fonction du degré du désordre  $W$  et  $E=4$  pour le cas de potentiels en puits.....36

**Tableau III.3 :** Exposant de Lyapunov  $\gamma$  et longueur de localisation  $\xi$  en fonction du degré du désordre  $W$  et  $E=4$  pour le cas de potentiels en mixte.....36

**Tableau III.4 :** le coefficient  $(A)$  en fonction de différentes valeurs du désordre  $w$  pour le cas de potentiel en barrière et  $E=5$ .....41

### Introduction générale

La mécanique quantique est une mécanique des ondes. Une des propriétés des ondes est leur capacité à interférer. Comme en optique ondulatoire, les effets d'interférence, par exemple la diffraction, sont visibles lorsque la longueur caractéristique du milieu interférentiel, par exemple la taille d'une fente, est comparable à la longueur d'onde considérée. La mécanique quantique traite donc des particules dont l'extension spatiale considérée sous la forme d'une onde d'amplitude de probabilité de présence appelée fonction d'onde est comparable à la longueur caractéristique du potentiel avec lequel elles interagissent.

Dans l'établissement des fondements de la mécanique quantique, F. Bloch (1928) en étudiant la propagation des électrons d'un milieu cristallin parfait [1], a posé les prémices de la théorie quantique des solides. Cette théorie permet d'expliquer l'existence de matériaux conducteurs dans lesquels les fonctions d'onde électroniques sont délocalisées dans l'ensemble du cristal.

Plus tard 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 électroniques 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 [2].

Depuis l'établissement de la théorie d'échelle en 1979 par Abrahams et al [3], il est bien connu que tous les états électroniques des systèmes désordonnés à température nulle à une dimension sont localisés.

Le travail que nous présentons dans ce mémoire comprend les parties suivantes :

Le premier chapitre est consacré à la description des notions de base concernant les systèmes désordonnés et système ordonné. Nous rappelons les différents types de désordre qui peuvent exister, les régimes de transport, le modèle d'Anderson, la localisation d'Anderson, la théorie d'échelle et quelques critères de la localisation qui permettent de distinguer entre état localisé et état étendu, comme le coefficient de transmission, l'exposant de Lyapunov... . A la fin du chapitre défini le modèle de Kronig Penney et Le modèle de tight-binding.

## **Introduction générale**

Dans le deuxième chapitre, nous introduisons certains modèles pour étudier les systèmes désordonnés et en particulier le modèle d'Anderson. Nous présentons la méthode de la matrice de diffusion et la matrice de transfert.

Dans le troisième chapitre, nous introduisons certains modèles pour étudier les systèmes désordonnés à une dimension. Ce Chapitre est consacré aux résultats numériques obtenus lors de notre étude et leurs interprétations.

## I. Introduction

Le cas du cristal parfait n'est en général jamais rencontré dans les systèmes réels. Il y a toujours des distorsions dans les systèmes complètement ordonnés dues à la présence du désordre de type impuretés, dislocations, trous et d'autres défauts qui perturbent l'arrangement du potentiel cristallin. Ce désordre est causé par l'environnement de l'élaboration du matériau. D'autre part, la mise en œuvre d'une nouvelle génération de matériaux tels que les composites, les alliages amorphes et les polymères dopés fait apparaître de nouveaux phénomènes physiques [4,5].

Ce chapitre est consacré à la description des notions de base concernant les systèmes désordonnés et système ordonné. Nous rappelons les différents types de désordre qui peuvent exister, les régimes de transport, le modèle d'Anderson, la localisation d'Anderson, la théorie d'échelle et quelques critères de la localisation qui permettent de distinguer entre état localisé et état étendu, comme le coefficient de transmission, l'exposant de Lyapunov... . A la fin du chapitre défini le modèle de Kronig Penney et Le modèle de tight-binding.

## II. Les systèmes ordonnés

Le cas du désordre zéro décrit un cristal infini parfait. Bien que l'électron soit influencé par le potentiel du réseau. La fonction d'onde de l'électron est donnée sous la forme d'une onde de Bloch:

$$\psi_{n,k}(\vec{r}) = U_{n,k}(\vec{r}) \exp i\vec{k}\vec{r} \quad (\text{I.1})$$

L'onde de Bloch est solution de l'équation de Schrödinger dans l'espace libre avec les conditions aux limites périodiques. La symétrie de la solution signifie que nous pouvons trouver la fonction d'onde de tout l'échantillon en répétant la solution d'une cellule unité[2].

## III. Les systèmes désordonnés

Quand le désordre est introduit, la symétrie est perdue et des quantités physiques deviennent aléatoirement distribuées. La fonction d'onde doit être calculée pour plusieurs réalisations d'une petite cellule et des grandeurs physiques sont évaluées en prenant les moyennes sur les valeurs prévues.

La théorie semi-classique du transport à  $T=0^\circ\text{K}$  pour un petit désordre utilise les états de Bloch.

La distance moyenne que l'électron traverse entre événement de diffusion est appelé le libre parcours moyen  $l$  et dans le régime métallique, cette quantité est une bonne mesure de la force du désordre. Durant chaque événement de diffusion élastique, l'énergie de l'électron est conservée, bien que la phase de l'électron puisse changer.

La cohérence d'événement de diffusion multiple résulte dans l'interférence quantique de la fonction d'onde de l'électron qui mène à plusieurs propriétés intéressantes que l'approche semi-classique ne révèle pas. Peut-être le résultat le plus surprenant est l'apparition d'états localisés partout dans la bande d'énergie quand le désordre est suffisamment fort [2]. Par opposition avec les ondes étendues de Bloch, un état localisé a la forme générale:

$$\psi(\vec{r}) = f(\vec{r}) \exp(-\vec{r}/\lambda) \quad (\text{II. 2})$$

$f(r)$  est une fonction variant aléatoirement et l'enveloppe de la fonction d'onde décroît exponentiellement dans l'espace avec un rapport caractérisé par la longueur de localisation

λfigure1.



**figure I.1** : Forme de la fonction d'onde. (a) état étendu, (b) état localisé.

## IV. Les différents types de désordre

En physique de la matière condensée les matériaux peuvent être classés en deux types :

Les matériaux ordonnés qui sont les cristaux dont toutes les molécules sont disposées dans un ordre géométrique précis, Voir le fig .I.2. (a).

Les matériaux désordonnés qui se trouvent abondamment dans la nature dans les phases amorphes caractérisés par l'absence apparente de l'ordre, présentent différents types de désordre :

### b. Désordre structural ou spatial

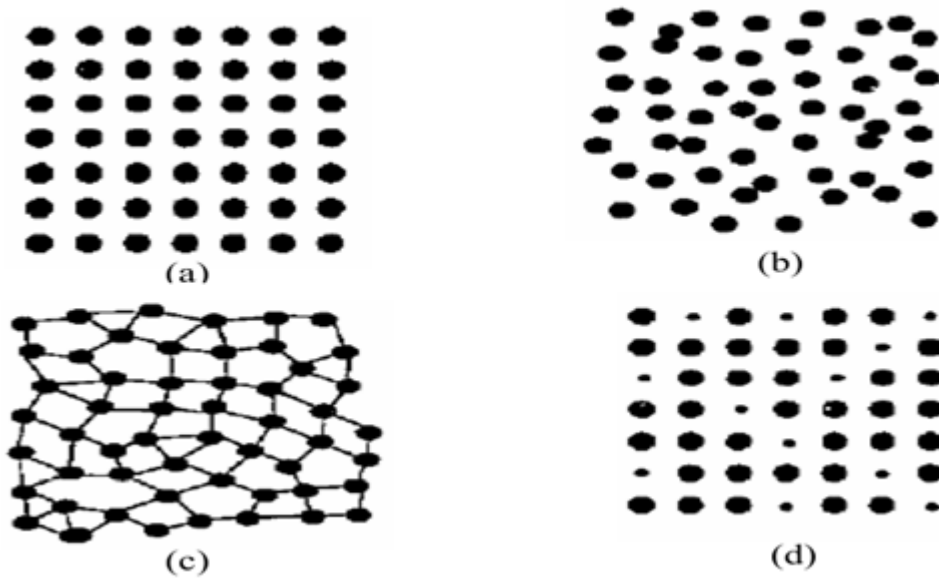
Dans ce cas de désordre, les atomes sont de même type mais disposés aléatoirement. Ce type de désordre est typique aux atomes en mouvement thermique aléatoire ou des matériaux amorphes. Voir le fig.I.2. (b).

### c. Désordre topologique :

Quand les atomes sont disposés aléatoirement sur des sites fixes et le nombre de plus proches voisins est constant. Voir le fig .I.2. (c).

### d. Désordre compositionnel :

Dans ce cas de désordre, on a deux types d'atomes ou plus disposés sur des sites qui forment un arrangement régulier. Voir le fig .I.2. (d).



**Figure 1.2 :** Différents types de désordre dans le cas d'un système (a) ordonné, (b) avec désordre structural, (c) avec désordre topologique, (d) désordre compositionnel.

### V. Les régimes de transport

Il existe plusieurs régimes qui sont caractérisés par leurs propriétés de transport uniques (tableau (I.1)).

#### 1. Régime balistique ( $l > L$ ) :

Le libre parcours moyen  $l$  excède la taille du système  $L$ , donc l'électron traversera d'une barrière à l'autre sans diffusion. Par conséquent, les propriétés de transport sont seulement déterminées par la géométrie du système. Par exemple, dans un système 2D fin le confinement transverse résulte dans un vecteur d'onde transverse quantifié et restreint la propagation à un nombre fini de canaux de conduction indépendants. Chaque canal occupé contribue avec un degré égal à la conductance et le total est une conductance quantifiée en unités de  $2e^2/h$ . Cet effet a été expérimentalement observé [6].

#### 2. Régime métallique ( $g \gg 1, L \ll \lambda$ ) :

Dans ce régime le libre parcours moyen est plus petit que la longueur du système ( $k_f l \gg 1$ ) à la différence du régime balistique, l'électron diffuse plusieurs fois à travers le système. Tous les états sont étendus et la loi d'Ohm est applicable  $g \propto L^{d-2}$ . Pour un désordre petit, le libre parcours moyen  $l$  est beaucoup plus grand que la longueur d'onde  $\lambda$  et le transport peut être décrit par l'approximation semi-classique.

## Généralités sur les systèmes désordonnés

Effectivement, le réseau cristallin est traité par la mécanique quantique et la diffusion classique. L'interférence entre ondes partielles diffusées des différentes impuretés est ignorée.

### 3. Régime localisé (isolant) ( $g \ll 1, L \gg \lambda$ ) :

Dans ce régime la taille du système excède la longueur de localisation. La conductance  $g$  d'échantillons finis dans le régime fortement localisé est petite mais non nulle, elle décroît exponentiellement avec la taille du système  $\langle g \rangle \propto \exp(-L/\lambda)$ .

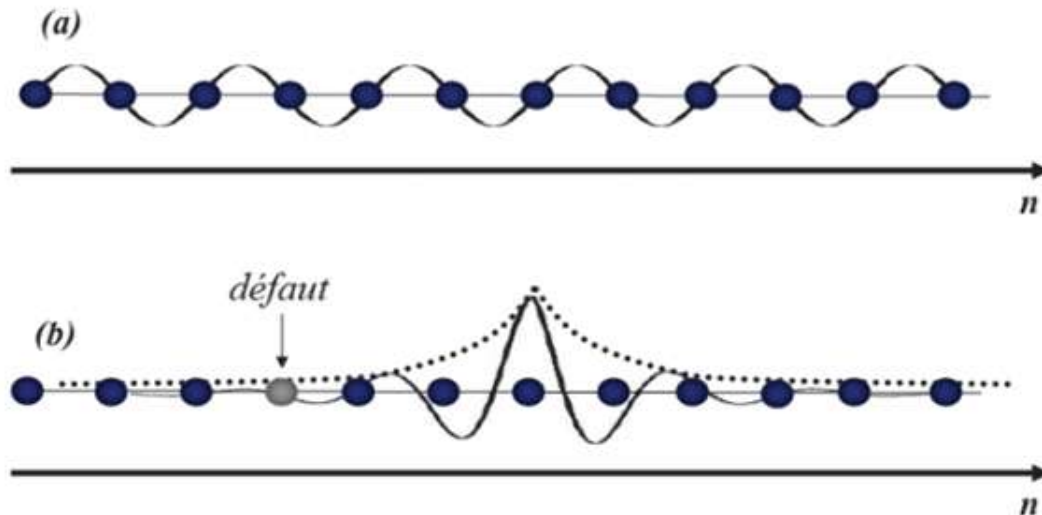
Régimes	Echelle de longueur	Conductance
Balistique	$l > L$	quantifiée
Métallique	$\lambda \gg L > l$	$\langle g \rangle \gg 1$
Localisé (isolant)	$L \gg \lambda > l$	$\langle g \rangle \propto \exp(-L/\lambda)$

**Tableau I.1** : Comparaison des différents régimes de transport.  $L$  taille du système, conductance,  $l$  libre parcours moyen et  $\lambda$  longueur de localisation.

## VI. Modèle d'Anderson

En 1958, Anderson [2] s'intéresse à la propagation des électrons dans un milieu désordonné. Des défauts introduits dans la matrice cristalline (par exemple des défauts compositionnels comme l'ajout d'impuretés dans le cristal), jouent le rôle du désordre. Si l'intensité du désordre est suffisamment importante, les fonctions d'onde électroniques vont se localiser spatialement (figure I.3).

Ce résultat, qui porte le nom de localisation d'Anderson, est un phénomène ondulatoire tout à fait général qui affecte aussi la propagation des ondes classiques (ondes sonores, lumineuses etc).



**Figure I.3 :** (a) Ondes de Bloch, (b) localisation d'Anderson.

Dans un réseau cristallin parfait. Les fonctions d'ondes électroniques sont délocalisées en ondes de Bloch (a). L'ajout d'un défaut (l'atome de couleur claire) localise les fonctions d'ondes : localisation d'Anderson.

Dans cette section, nous allons introduire brièvement le modèle d'Anderson pour les solides désordonnés à une dimension. Le modèle d'Anderson est un terme générique qui regroupe diverses variantes de l'équation de Schrödinger pour un potentiel aléatoire à une dimension. Son origine physique est l'étude de la propagation des électrons dans un métal qui contient des impuretés. A faible température, nous pouvons éliminer les collisions inélastiques électrons-phonons qui deviennent négligeables, seules les collisions élastiques électrons-électrons et les interactions des électrons avec le potentiel du réseau cristallin subsistent. Les électrons se trouvent alors dans un état quantique cohérent et les effets d'interférence sont importants. En négligeant les interactions Coulombiennes entre les électrons, nous pouvons écrire l'équation de Schrödinger stationnaire (équation aux valeurs propres) à un électron et à une dimension :

$$H\psi = -\frac{\hbar^2}{2m}\psi''(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (I.3)$$

Où le potentiel  $V(x)$  représente l'interaction entre un électron et les atomes du réseau. Si  $V(x)$  est périodique, on retrouve le résultat des ondes de Bloch. Pour le modèle d'Anderson,  $V(x)$  est une fonction aléatoire dont les corrélations sont à courte portée. L'équation de Schrödinger (I.3) se prête mal à des investigations analytiques ou numériques.

## Généralités sur les systèmes désordonnés

Une discrétisation va nous simplifier la tâche en remplaçant la variable continue, par une variable discrète  $n$ , indice des sites du réseau. Pour ce la, nous décomposons la fonction d'onde sur les états de Wannier [7] du réseau :

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^n \Phi_i |i\rangle \quad (I.4)$$

Les états de Wannier  $|i\rangle$  sont des états localisés sur chaque site  $n$  du réseau.

En projetant l'équation (I.3) sur les états de Wannier, on obtient l'hamiltonien des liaisons fortes (Tight-Binding) :

$$H\Phi_i = \sum_{i,j} t_{ij} \Phi_{i+j} + \varepsilon_i \Phi_i = E\Phi_i \quad (I.5)$$

Où les termes diagonaux  $\varepsilon_i$  sont les énergies de sites, ils constituent une moyenne du potentiel  $V(x)$  pour des valeurs de  $x$  proches du site  $n$ . Les termes non diagonaux  $t_{ij}$  sont les taux de transition (hopping rates) entre sites. Il s'agit de quantités complexes proportionnelles aux amplitudes de transitions quantiques d'un site  $i$  à un site  $j$ , ces taux de transition décroissent rapidement avec  $|i-j|$ . De plus, le caractère hermitien de l'hamiltonien impose  $t_{ij} = t_{ji}^*$ .

On peut alors simplifier l'équation (I.5) par une approximation aux premiers voisins.

$$E\Phi_i = t_{i,1}\Phi_{i+1} + t_{i,-1}\Phi_{i-1} + \varepsilon_i\Phi_i \quad (I.6)$$

## VII. Théorie d'Echelle

Le comportement de la conductivité d'un système dépend du niveau de désordre et de sa taille. C'est le but de la théorie d'échelle qui essaye de comprendre la localisation en tenant compte des considérations faites.

En 1979, Abrahams et Al introduisent une théorie d'échelle de la localisation [3] qui fournit une vision de l'effet du désordre selon la dimensionnalité  $d$  de l'espace considéré.

Dans cette théorie on s'intéresse au coefficient  $\beta$ :

## Généralités sur les systèmes désordonnés

$$\beta = L \frac{d \ln g}{dL} \quad (I.7)$$

Où  $g$  est la conductance  $G$  en unités de  $\frac{e^2}{h}$ . Il est possible de déterminer  $\beta$  dans deux cas limites :  $g \gg 1$  et  $g \ll 1$ .

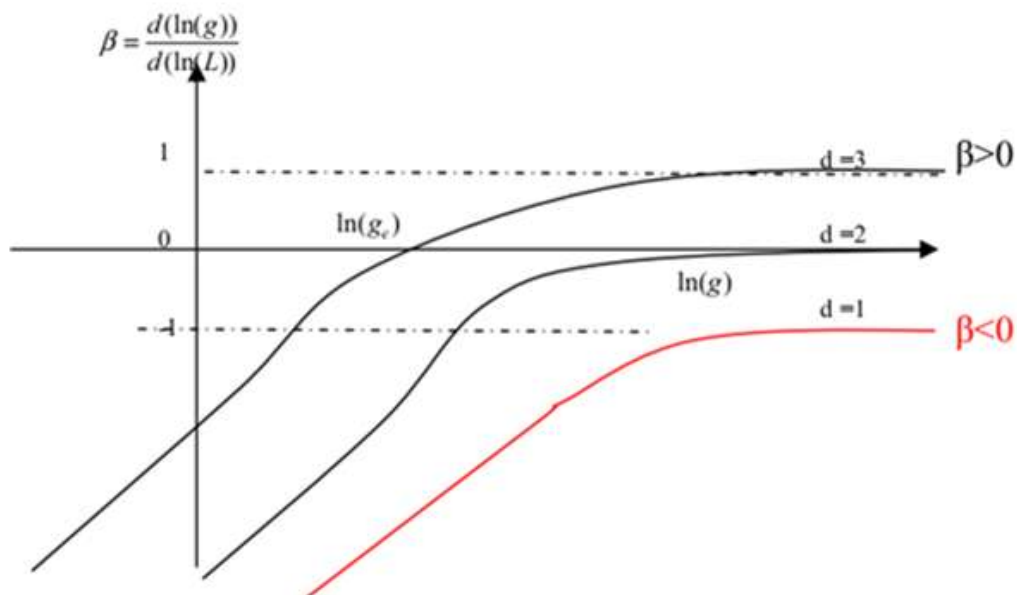
Dans le cas  $g \gg 1$ , le désordre est faible et la loi d'Ohm est vérifiée. Dans le cas d'un hyper-cube de dimension  $d$  :

$$G = \sigma L^{d-2} \quad (I.8)$$

Ce qui donne dans cette limite  $\beta = d - 2$ .

Dans la limite  $g \ll 1$ , on est dans le régime localisé et la conductance décroît exponentiellement avec  $L$ , de sorte que  $\text{const} + \ln g$ .

En supposant qu'aucun autre effet ne se passe dans le régime intermédiaire et en sachant que la correction de localisation faible est négative et proportionnelle à  $1/(g)$ , on arrive au comportement schématisé sur la.



**Figure I.4 :** Evolution du coefficient  $\beta(g)$  en fonction de la conductance différente.

### VIII. 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) [8]. 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 donc nécessaire [9].

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). Le désordre structural est synonyme aux deux types de désordre (spatial et compositionnel).

La localisation d'Anderson est un phénomène de propagation caractérisé par la présence d'un désordre statique. En 1958, Anderson a montré dans son papier original potentiel. Anderson of diffusion in certain treillis aléatoires, que dans le cas d'un suffisamment désordonné, les états électroniques le long de la structure désordonnée. Les fonctions propres étant confinées sur des régions de l'espace, la résistance augmente exponentiellement en fonction de la longueur du système [10].

La localisation d'Anderson, telle introduite dans le cadre de l'approximation des liaisons fortes, prédit à travers la théorie de la localisation l'absence du régime de transmission métallique dans les systèmes unidimensionnel suffisamment long et désordonnés.

## IX. Critères de localisation

### a. Rapport de participation inverse

Pour distinguer les états localisés des états étendus, il est parfois suffisant de considérer le second membre de la probabilité appelé le rapport de participation inverse R.P.I a été introduit par Bellet Dean [11] et donné par l'expression suivante :

$$R.P.I = \frac{1}{L} \frac{\sum_{i=1}^L |\Psi_i|^4}{(\sum_{i=1}^L |\Psi_i|^2)^2} \leq 1 \quad (I.9)$$

Où  $\psi_i$  est l'amplitude au site  $i$  de l'état propre  $\psi$  et  $L$  est la longueur du système électronique. Cette grandeur physique se comporte comme suit.

$$\text{Si } \begin{cases} R.P.I \propto 0(L^{-1}) \\ R.P.I \propto 0(L^0) \end{cases}$$

Son inverse est appelé le rapport de participation (R.P) qui représente l'extension spatiale des états électronique dominants de la fonction d'onde. Effectivement ces états dominants, dans le cas des états localisés sont centrés sur une petite région du système, alors que dans le cas des états étendus, tout les états ont la même importance et sont étalés sur tout le système.

### b. Exposant de Lyapunov

L'exposant de Lyapunov  $\gamma$  représente l'un des principaux outils dans l'étude des systèmes désordonnés, il est obtenu à partir du formalisme de la matrice de transfert et permet de déterminer, par exemple, la longueur de localisation  $\ell_c$ . Il est défini comme

$$\gamma = -\frac{1}{2L} \ln T \quad (I.10)$$

Ce paramètre est toujours positif et décrit les propriétés d'échelle spatiale d'un système désordonné.

### c. Longueur de localisation

Les systèmes désordonnés sont caractérisés par des fonctions d'onde dominantes uniquement dans l'espace de dimension caractéristique  $\xi$  appelé « la longueur de localisation », elle est définie comme étant la mesure de la prolongation spatiale de l'état localisé. Cette

## Généralités sur les systèmes désordonnés

longueur décroît quand on se rapproche du bord de la bande où les états sont localisés et elle diverge quand on se rapproche du front de mobilité où les états sont étendus.

Alors c'est un concept fondamental pour comprendre l'existence des métaux et des isolants et en particulier pour expliquer la transition métal-isolant du système. En dimension 1, la conductance disparaît quand  $L \rightarrow \infty$ . Les électrons sont exponentiellement localisés sur une longueur de localisation  $l_{loc}^{1D}$  de l'ordre du libre parcours moyen  $l$ . Ce résultat était déjà connu antérieurement grâce au travail Dermott et Thouless (1956). [12]

### d. Le 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 [13] et le phénomène de localisation dans les systèmes désordonnés [14,15]. Cette quantité physique est définie comme la probabilité de transfert de l'onde électron à l'autre extrémité du système.

A 1D le coefficient de transmission se comporte comme suit :

$$T = e^{-2\gamma L} \quad (\text{I. 11})$$

Où  $\gamma$  et  $L$  étant l'exposant de Lyapunov et la longueur du système respectivement.

Dans le cas des états localisés l'électron se trouve confiner dans une région limitée du système, par conséquent, le coefficient de transmission décroît rapidement.

## X. Etats électroniques des systèmes désordonnés

### X. a. Etats électroniques des systèmes désordonnés sans interactions

En réalité, il n'y a pas de système idéalement ordonné, il y a toujours des déformations dues à la présence d'impuretés, dislocations, lacunes et d'autres défauts. A cause de l'existence de ces derniers dans les cristaux le théorème de Bloch n'est plus vérifié, les fonctions d'onde perdent leur périodicité et le matériau devient désordonné. On distingue deux types d'états électroniques : état délocalisé (étendu) et état localisé.

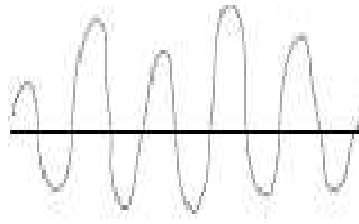
#### ➤ Délocalisation des états électroniques

En présence d'un désordre faible, on peut utiliser les concepts de translation développés pour les systèmes ordonnés, les états propres restent sous la forme de fonction de Bloch « étendus » mais non périodiques :

$$\psi(r) \propto \exp i\vec{k}\vec{r} \quad (\text{I.12})$$

## Généralités sur les systèmes désordonnés

Dans les systèmes désordonnés, les états étendus n'existent que pour la dimension 3 [16,17].



**Figure I.5 :** Représentation d'état étendu d'un système faiblement désordonné.

### ➤ Localisation des états électroniques

Si le désordre est assez fort, on a perdu toutes les symétries par translation, et l'électron perd sa phase à cause des interférences destructives. Sa fonction d'onde devient localisée dans une région bien précise. Le comportement asymptotique des états localisés est décrit par une décroissance exponentielle en fonction de la taille du système sous la forme :

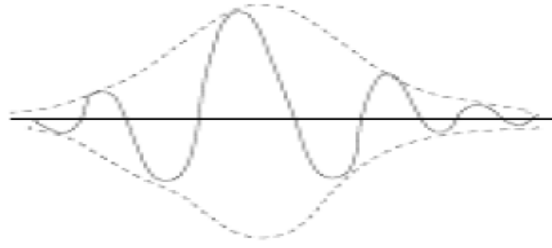
$$\psi(L) \propto \exp(-L/\xi) \quad (\text{I.13})$$

Où  $L$  est la taille du système et  $\xi$  la longueur de localisation, elle tend vers l'infinie lorsque les états sont étendus. Les états localisés peuvent s'expliquer physiquement par le fait que les électrons restent piégés dans les puits de potentiel. Le caractère étendu et localisé dépend de trois paramètres : le degré du désordre, l'énergie et la dimension  $d$  du système; à 1D et 2D, tous les états sont localisés même pour des valeurs intermédiaires du désordre [18].

En présence des excitations extérieures comme la température [19] et le champ électrique [20] il existe les deux types d'états (étendus et localisés) séparés par des fronts de mobilité. Ces états n'existent qu'en dimension 3, pour  $d = 2$  et  $d = 1$  seule la phase isolante existe. Un autre type d'états a été observé [21] dans les systèmes désordonnés à 1D en présence de champ électrique. Les fonctions d'onde correspondantes à ces états prennent la forme :

$$\psi(L) \propto \exp(L^\beta) \text{ avec } \beta > 1 \quad (\text{I.14})$$

Ce comportement a été observé aussi dans les milieux fractals [22] et les états correspondants sont dits « états super-localisés ».



**Figure I.6 :** Représentation d'état localisé d'un système totalement désordonné.

### **X. b. Etats électroniques des systèmes désordonnés en présence des interactions non linéaire**

Dans les systèmes réels le non linéarité traduit l'effet des interactions électron-électron et électron-phonon qu'on modélise par un terme non linéaire  $\alpha$  dans l'équation de Shrodinger, connue par l'équation de Shrodinger non linéaire (NL) [23]. L'origine du non linéarité peut correspondre aux différents phénomènes physiques. Dans les systèmes électroniques, elle devrait correspondre à l'interaction coulombienne entre électrons confinés alors que dans un superfluide, elle correspond à l'équation de Gross-Pitaevsky qui a plus d'intérêt ces dernières années dans le domaine de la condensation Bose-Einstein des atomes bosniaques piégés [24]. Quand le désordre et le non linéarité coexistent dans un système unidimensionnel, leurs effets combinés conduit dans certain cas à la suppression de la localisation et dans d'autre cas à la localisation partielle [25].

Plusieurs travaux ont été faits sur le non linéarité, la présence du non linéarité dans un système unidimensionnel change la décroissance exponentielle du coefficient de transmission.

Observé dans le régime linéaire vers une décroissance en loi en puissance [26], ce résultat donne lieu à une délocalisation faible due au non linéarité.

### **XI. Transition Métal-Isolant**

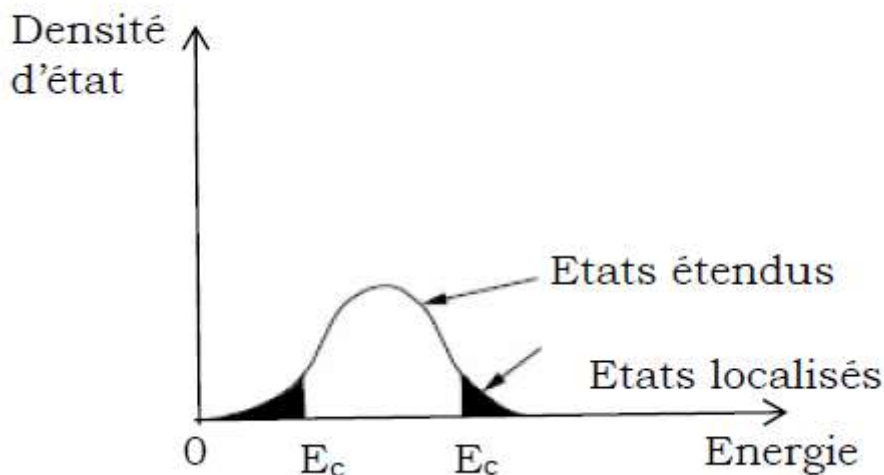
Dans les limites de faible désordre et de fort désordre, les états au centre de la bande sont étendus ou localisés respectivement. Pour les systèmes avec un degré intermédiaire de désordre, on prévoit l'existence à la fois des états localisés et des états étendus. Cependant, l'opinion dominant est qu'un système ne peut soutenir les états localisés et étendus à la même énergie.

Un simple argument à supporter cette conjecture propose que si les deux états coexistent à la même énergie alors l'état localisé doit complètement se mélanger avec l'état étendu et la superposition résultante sera elle-même qualifiée comme un état étendu. Un autre caractère important est la tendance des états localisés à apparaître dans les queues de bande plutôt qu'au

## Généralités sur les systèmes désordonnés

centre. Ces deux considérations mènent naturellement à la division de la bande en des régions entièrement séparées composées d'états soit localisés ou étendus (figure I.7). Dans la limite  $T = 0^0K$ , le couplage aux phonons est négligeable et seulement les électrons dans les états étendus contribuent à la conductance dans la limite thermodynamique. La limite entre les deux régions est appelée le front de mobilité  $E_c$  et elle marque le changement des états étendus à ceux localisés. Le concept de front de mobilité aide à expliquer la transition du métal à l'isolant.

Quand le désordre augmente, la région localisée s'étend et le front de mobilité se déplace vers l'intérieur. A un désordre critique  $W_c$ , le front de mobilité se croise à l'énergie de Fermi et la transition métal-isolant existe.

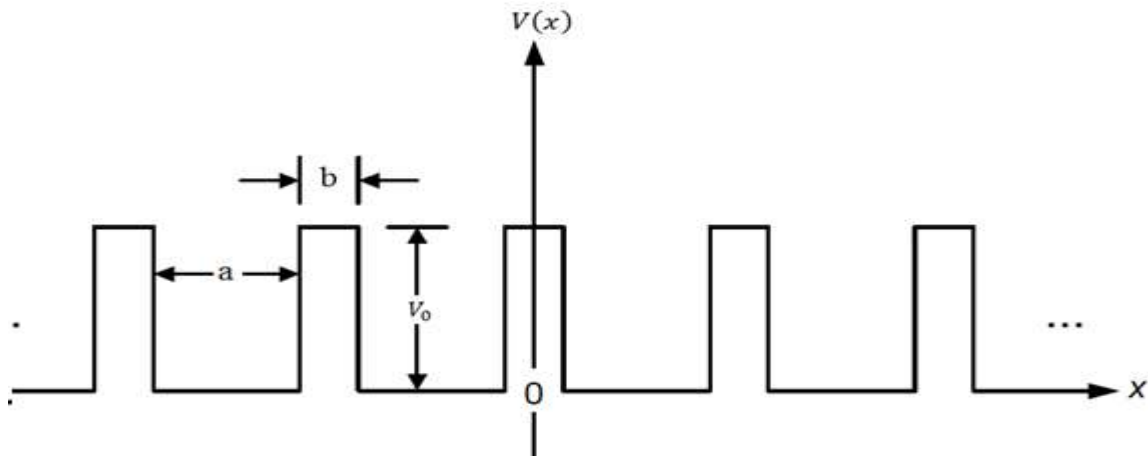


**Figure I.7 :** Densité d'états pour un système avec désordre intermédiaire.

Les états localisés et étendus sont séparés par le front de mobilité  $E_c$ .

## XII. Le modèle Kronig – Penney

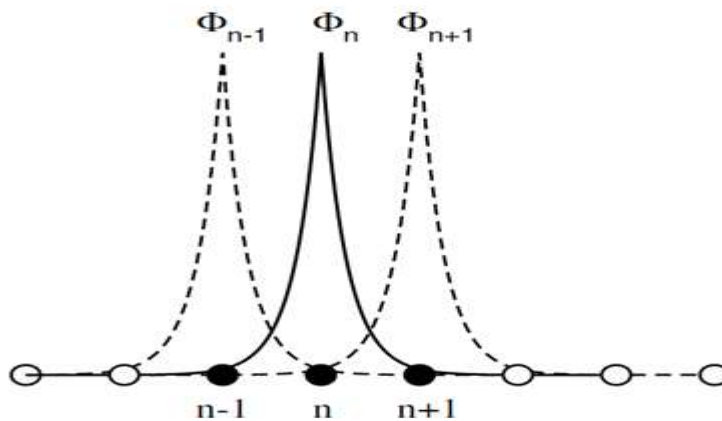
Représente le modèle le plus simple d'un système périodique. L'analyse des propriétés de transmission du modèle Kronig - Penney permet de comprendre les principales propriétés de transport électronique dans les solides. Les solides ont généralement une structure cristalline, qui est, les ions sont agencés d'une manière qui présente une périodicité espace. Alors, quand une particule libre se propage dans un tel potentiel périodique, son mouvement sera touché par la périodicité spatiale.



**Figure I.8 :** potentiel périodique de Kronig-Penney

### XIII. Le modèle de tight-binding

Dans cette section, nous présentons les idées les plus importantes de la propagation des électrons dans un réseau périodique unidimensionnel [26]. Appelée l'approximation liaisons fortes. Nous commençons par noter que les solides sont constitués d'atomes. La méthode est illustrée en considérant d'abord un électron qui se déplace localement dans l'état le plus bas de l'énergie, ou s-orbitale atomique, d'un atome isolé. La structure électronique d'un réseau périodique de ces atomes est ensuite développée en permettant un faible recouvrement des fonctions d'ondes électroniques entre atomes voisins.



**Figure I.9:** les fonctions d'onde atomiques de solide cristallin unidimensionnel.

Les atomes sont placés dans des sites du réseau  $x_n = na$ , où  $n$  est un nombre entier et  $a$  est la distance entre les atomes du plus proche voisin.

Le potentiel de l'atome  $n$  ième à la position  $x_n = na$  est  $V(x - x_n)$ , le potentiel total pour le cristal est la somme sur les potentiels un seul atome.

## I. Introduction

Dans ce chapitre, nous présentons et discutons une méthode mathématique pour l'analyse de la propagation des ondes dans les systèmes unidimensionnels. La méthode utilise la matrice de transfert et est généralement connu comme la méthode de matrice de transfert [27, 28].

La méthode de la matrice de transfert peut être utilisée pour l'analyse de la propagation de l'onde de particules quantiques [29]. Une fois que cette technique est développée pour un type d'onde, elle peut facilement être appliquée à d'autres problèmes d'onde.

L'invariance par renversement du temps et la conservation de la densité de courant imposent des conditions fortes sur la forme de la matrice de transfert  $M$ , indépendamment de la forme spécifique du potentiel. Par l'intermédiaire du formalisme de la matrice de transfert, les amplitudes de transmission et de réflexion peuvent être facilement définis et évalués. Une fois que la matrice de transfert est calculée pour un potentiel, elle peut être facilement étendue pour calculer analytiquement la matrice de transfert pour  $N$  potentiels identiques [30].

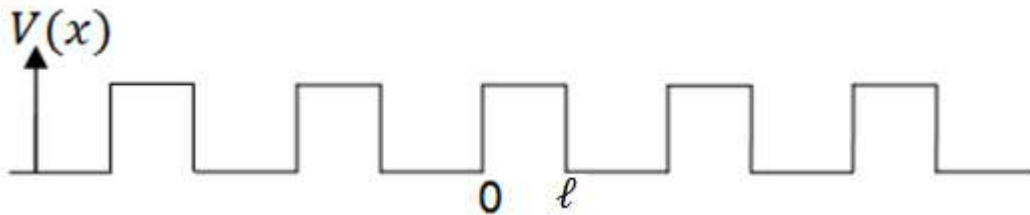
## II. Une expérience de diffusion

Peut-être le problème le plus simple de la mécanique quantique est la propagation à une dimension d'un électron en présence d'un potentiel localisé. Le mouvement d'une particule quantique de masse  $m$ , en présence d'un potentiel  $V(x)$  dans une dimension est régie par l'équation de Schrödinger [27].

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

Ici,  $\psi(x)$  est la fonction d'onde et  $E$  l'énergie de l'électron (en unit é de Rydberg  $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$ ).

Dans l'absence d'une possibilité, l'électron est une onde qui se déplace le long d'une particulière direction. Dans la présence d'une possibilité, nous aimerions savoir comme la propagation de l'électron change. Est-ce que l'électron peut refléter en arrière? Est-ce que l'électron peut traverser le potentiel ?



**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.

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

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

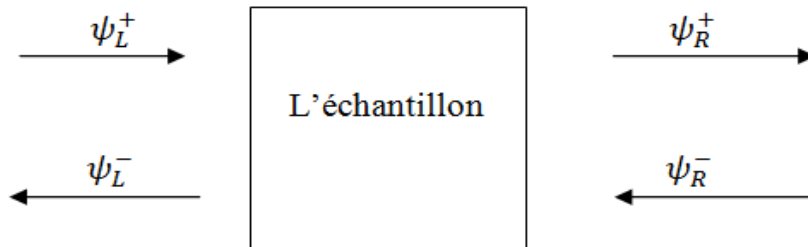
Nous supposons que l'équation de Schrödinger en dehors de la région de potentiel est connue et que la fonction d'onde peut être écrite comme une superposition d'ondes planes:

## Technique de la matrice de transfert

$$\psi_L(x) = \psi_L^+(x) + \psi_L^-(x) \quad x < 0 \quad (II.3)$$

$$\psi_R(x) = \psi_R^+(x) + \psi_R^-(x) \quad x > \ell$$

Ici, les indices L (Gauche) et R (Droit) indiquent la région potentielle, et les indices supérieurs + (-) déterminent la direction de propagation : + indique que l'électron propage dans la direction positive (de gauche à droite) et - indique que l'électron se déplace de droite à gauche (figure II.2). Nous appelons  $\psi_L^+(x)$  l'onde incidente, alors que  $\psi_L^-(x)$  la fonction d'onde de l'électron qui propage loin de l'échantillon vers le côté gauche.



**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 lié à l'énergie à travers la relation de dispersion :

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

La relation de la dispersion (II.4) détermine les propriétés physiques de l'électron dans la région à l'extérieur de l'échantillon ( $x < 0$  et  $x > \ell$ ).

### III. Matrice de diffusion et matrice de transfert

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

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

## Technique de la matrice de transfert

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

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

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

Sur la limite gauche de l'échantillon, et

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

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 :

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

Où la matrice  $\mathbf{S}$ ,

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

Est appelé la matrice  $\mathbf{S}$  concerne le son des 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 :

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

La matrice  $\mathbf{M}$  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 à exprimer les éléments de la matrice de transfert  $\mathbf{M}$  en ce qui concerne les éléments de la matrice de diffusion  $\mathbf{S}$  [31] :

## Technique de la matrice de transfert

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

De façon équivalente, on peut exprimer les éléments de la matrice de diffusion S en ce qui concerne les éléments de la matrice de transfert:

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

### IV. Transmission et la réflexion Amplitudes

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

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

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

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

De l'équation (II.10), on obtient que l'onde émise  $\psi_R^-$  est donnée par

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

Et l'onde réfléchie

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

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

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

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

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

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

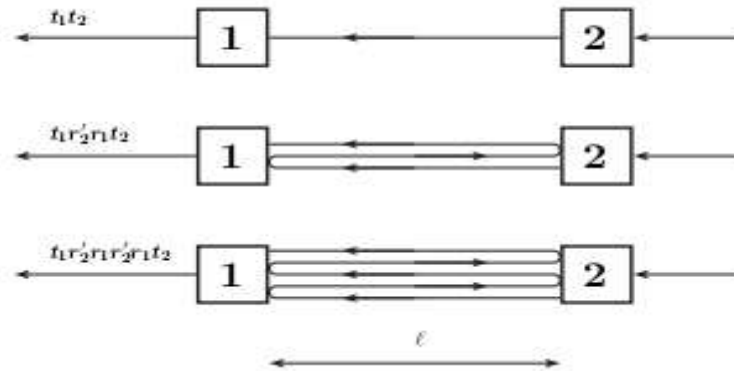
## Technique de la matrice de transfert

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

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

### V. Multiplication des matrices de transfert

Considérons une expérience plus complexe dans lequel la particule est diffusée par deux échantillons individuels. Le premier échantillon est donnée par le potentiel  $V_1(x)$ , situé à  $(a < x \leq b)$ , et le second échantillon est déterminé par le potentiel  $V_2(x)$ , Situé à  $(b \leq x < c)$ . Le problème de la transmission et de la réflexion à travers un tel système peut être traité de deux façons: soit nous pouvons utiliser les matrices de transfert  $M_1$  et  $M_2$ , qui déterminent les propriétés de diffusion de potentiels individuels  $V_1$  et  $V_2$ , ou nous pouvons considérer le potentiel  $V_{12}(x)$  définie sur l'intervalle  $a \leq x \leq c$  et utiliser la matrice de transfert correspondant  $M_{12}$ .



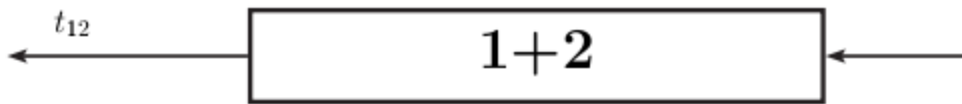
**Figure II.3 :** Schématique expliquant le calcul de la transmission par l'intermédiaire de deux barrières.

Deux échantillons sont représentés schématiquement à la (figure II.3). Puis, à partir de la définition de la matrice de transfert  $M$ , l'équation (II.12), nous avons.

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = M_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 21})$$

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = M_2 \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 22})$$

## Technique de la matrice de transfert



**Figure II.4** : Translation des électrons à travers l'ensemble du système consistant en deux échantillons 1-2.

En combinant les équations (II.21) et (II.22), nous obtenons.

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1 \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 23})$$

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \mathbf{M}_{12} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 24})$$

A partir de la formule cette forme (II.23) et (II.24) la loi de composition est donnée par :

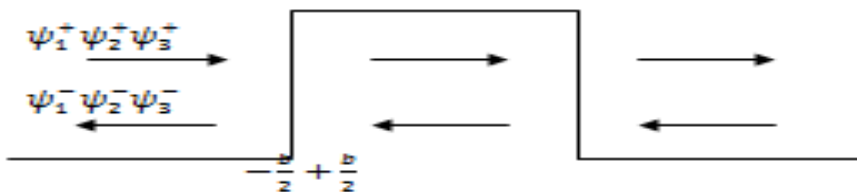
$$\mathbf{M}_{12} = \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1 \quad (\text{II. 25})$$

La relation de composition (II.25) peut être facilement généralisée pour le cas de N obstacles, conduisant à la matrice de transfert M donnée par :

$$\mathbf{M} = \mathbf{M}_N \mathbf{M}_{N-1} \dots \mathbf{M}_2 \mathbf{M}_1 = \prod_i^N \mathbf{M}_i \quad (\text{II. 26})$$

### VI. Potentiels rectangulaires

La barrière de potentiel rectangulaire, comme le montre la figure (II.5), représente l'un des plus simples problèmes de mécanique quantique. Nous allons utiliser notre formalisme de la matrice de transfert.



**Figure II.5** : Barrière de potentiel rectangulaire de largeur b et la hauteur  $V_0$ .

#### VI. a. Matrice de transfert

La solution de l'équation de Schrödinger (II.1) dans trois régions différentes représentées dans la figure (II.5) peut être exprimée comme une superposition d'ondes planes.

## Technique de la matrice de transfert

$$\psi(x) = \begin{cases} \psi_1(x) = A_1 e^{+ik_1 x} + B_1 e^{-ik_1 x} , & x \leq -\frac{b}{2} \\ \psi_2(x) = A_2 e^{+ik_2 x} + B_2 e^{-ik_2 x} , & -\frac{b}{2} < x < \frac{b}{2} \\ \psi_3(x) = A_3 e^{+ik_3 x} + B_3 e^{-ik_3 x} , & x > +\frac{b}{2} \end{cases} \quad (\text{II.27})$$

Ici,  $k$  est donnée à

$$k_1 = \sqrt{E} \quad \text{et} \quad k_2 = \sqrt{E - V_0} \quad (\text{II.28})$$

En prend  $\frac{2m}{\hbar^2} = 1$ .

On utilise la continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée première au niveau des bords de la barrière de potentiel,  $x = -\frac{b}{2}$  et  $x = +\frac{b}{2}$ , après des petits calculs, on obtient deux matrices.

Pour  $x = -b/2$ :

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{k_1 + k_2}{2k_2}\right) e^{i(k_2 - k_1)\frac{b}{2}} & \left(\frac{k_2 - k_1}{2k_2}\right) e^{i(k_1 + k_2)\frac{b}{2}} \\ \left(\frac{k_2 - k_1}{2k_2}\right) e^{-i(k_1 + k_2)\frac{b}{2}} & \left(\frac{k_1 + k_2}{2k_2}\right) e^{i(k_1 - k_2)\frac{b}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II.29})$$

Et pour  $x = +b/2$ :

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{k_2 + k_3}{2k_3}\right) e^{i(k_2 - k_3)\frac{b}{2}} & \left(\frac{k_3 - k_2}{2k_3}\right) e^{-i(k_2 + k_3)\frac{b}{2}} \\ \left(\frac{k_3 - k_2}{2k_3}\right) e^{i(k_2 + k_3)\frac{b}{2}} & \left(\frac{k_2 + k_3}{2k_3}\right) e^{i(k_3 - k_2)\frac{b}{2}} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II.30})$$

En recombinaut les équations (II.29) et (II.30), obtenons

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{21} & M_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II.31})$$

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

$$\begin{cases} M_{11} = \frac{1}{4k_3 k_2} [(k_2 + k_3)(k_1 + k_2)e^{ik_2 b} + (k_3 - k_2)(k_2 - k_1)e^{-ik_2 b}] e^{-i(k_1 + k_3)\frac{b}{2}} \\ M_{12} = \frac{1}{4k_3 k_2} [(k_2 + k_3)(k_2 - k_1)e^{ik_2 b} + (k_3 - k_2)(k_2 + k_1)e^{-ik_2 b}] e^{i(k_1 - k_3)\frac{b}{2}} \\ M_{21} = \frac{1}{4k_3 k_2} [(k_3 - k_2)(k_2 + k_1)e^{ik_2 b} + (k_2 + k_3)(k_2 - k_1)e^{-ik_2 b}] e^{i(k_3 - k_1)\frac{b}{2}} \\ M_{22} = \frac{1}{4k_3 k_2} [(k_3 - k_2)(k_2 - k_1)e^{ik_2 b} + (k_2 + k_3)(k_1 + k_2)e^{-ik_2 b}] e^{i(k_1 + k_3)\frac{b}{2}} \end{cases} \quad (\text{II.32})$$

## Technique de la matrice de transfert

En prend  $k_1 = k_3$  donc on trouve :

$$M = \begin{pmatrix} \left[ \cos k_2 b + \frac{i}{2} \left( \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2 b \right] e^{-ik_1 b} & \frac{i}{2} \left( \frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2 b \\ -\frac{i}{2} \left( \frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2 b & \left[ \cos k_2 b - \frac{i}{2} \left( \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2 b \right] e^{+ik_1 b} \end{pmatrix} \quad (\text{II.33})$$

On peut facilement vérifier que M satisfait à l'exigence de la conservation du courant.

En outre, nous constatons que

$$M_{22} = M_{11}^* \quad , \quad M_{21} = M_{12}^* \quad (\text{II.34})$$

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

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} M_{11} & M_{12} \\ M_{12}^* & M_{11}^* \end{pmatrix} \quad (\text{II.35})$$

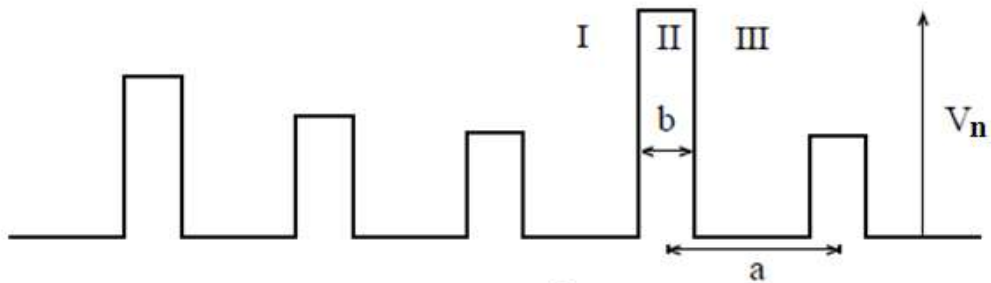
Défini :

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

Et  $k_{13} = (k_1 + k_3)$ . [32]

$$\begin{cases} M_{11} = \frac{1}{4k_3} [\alpha_{21} \alpha_{32} e^{ik_2 b} + \alpha'_{21} \alpha'_{32} e^{-ik_2 b}] e^{-i k_{13} \frac{b}{2}} \\ M_{12} = \frac{1}{4k_3} [\alpha'_{21} \alpha'_{32} e^{ik_2 b} + \alpha_{21} \alpha_{32} e^{-ik_2 b}] e^{i k_{13} \frac{b}{2}} \\ M_{21} = -\frac{1}{4k_3} [\alpha'_{21} \alpha_{32} e^{ik_2 b} + \alpha_{21} \alpha'_{32} e^{-ik_2 b}] e^{i k_{13} \frac{b}{2}} \\ M_{22} = -\frac{1}{4k_3} [\alpha_{21} \alpha'_{32} e^{ik_2 b} + \alpha'_{21} \alpha_{32} e^{-ik_2 b}] e^{-i k_{13} \frac{b}{2}} \end{cases} \quad (\text{II.36})$$

### VII. Transmission dans un système périodique $E > V_0$



**Figure II.6** : Modèle de Kronig–Penny : potentiel non périodique unidimensionnel.

## Technique de la matrice de transfert

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 [33]. L'équation de Schrödinger correspondant est

$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + V(x)\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{II. 37})$$

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

La forme générale de potentiel  $V(x)$  est [34].

$$V(x) = \begin{cases} V_n, & na - \frac{b}{2} \leq x \leq na + \frac{b}{2} \\ 0, & x < na - \frac{b}{2} \text{ et } x > na + \frac{b}{2} \end{cases} \quad (\text{II.38})$$

### VII. a. Application de la matrice de transfert

En présence d'un champ électrique extérieur, le potentiel dans l'équation (II.37) devient :

$$V(x) = V_n - eFx \quad (\text{II.39})$$

L'équation de Schrödinger correspondant est :

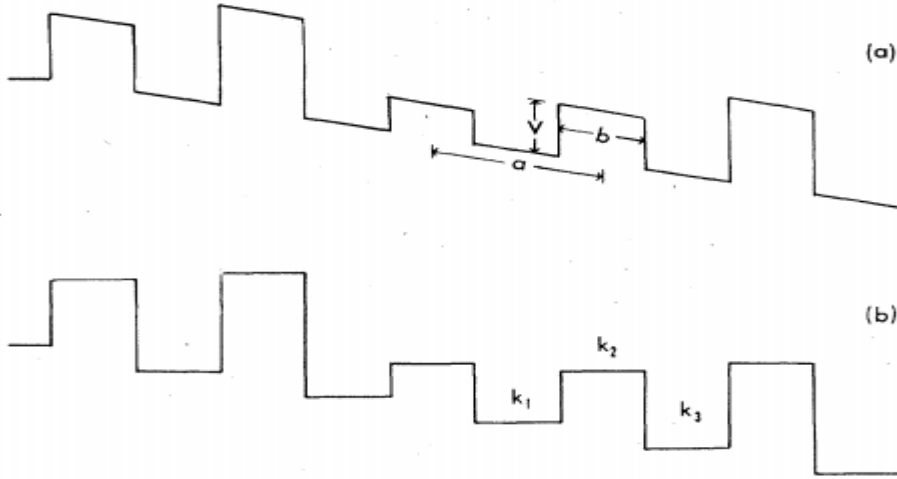
$$-\frac{d^2}{dx^2}\psi(x) + (V_n - eFx)\psi(x) = E\psi(x) \quad (\text{II. 40})$$

La solution de l'équation de Schrödinger (II.40) dans trois régions différentes représentées sur la figure (II.6) ( $k_1 \neq k_2 \neq k_3$ ) dans la cellule nième peut être écrite en général:

$$\psi_n(x) = A_n e^{+ik_n x} + B_n e^{-ik_n x} \quad (\text{II. 41})$$

Avec:  $n = 1, 2, 3$

## Technique de la matrice de transfert



**Figure II.7** : potentiel aléatoire rectangulaire dans un champ électronique extérieur : (a) avec une rampe de potentiel ; (b) avec son approximation.

$A_n$  et  $B_n$  sont les amplitudes des fonctions d'onde et  $k_n$  sont les vecteurs d'onde dans trois régions différentes. La construction de la matrice de transfert  $M_n$  dans la  $n$ ème 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.7), on obtient:

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

$$\begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{k_1 + k_2}{2k_2}\right) e^{i(k_1 - k_2)(na - \frac{b}{2})} & \left(\frac{k_2 - k_1}{2k_2}\right) e^{-i(k_1 + k_2)(na - \frac{b}{2})} \\ \left(\frac{k_2 - k_1}{2k_2}\right) e^{i(k_1 + k_2)(na - \frac{b}{2})} & \left(\frac{k_1 + k_2}{2k_2}\right) e^{i(k_2 - k_1)(na - \frac{b}{2})} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_1 \\ B_1 \end{pmatrix} \quad (\text{II. 42})$$

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

$$\begin{pmatrix} A_3 \\ B_3 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left(\frac{k_2 + k_3}{2k_3}\right) e^{i(k_2 - k_3)(na + \frac{b}{2})} & \left(\frac{k_3 - k_2}{2k_3}\right) e^{-i(k_2 + k_3)(na + \frac{b}{2})} \\ \left(\frac{k_3 - k_2}{2k_3}\right) e^{i(k_2 + k_3)(na + \frac{b}{2})} & \left(\frac{k_2 + k_3}{2k_3}\right) e^{i(k_3 - k_2)(na + \frac{b}{2})} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} A_2 \\ B_2 \end{pmatrix} \quad (\text{II.43})$$

Selon notre définition de la matrice de transfert, l'équation (II.6), et les deux dernières équations (II.42) et (II.43), nous pouvons écrire la matrice des éléments de transfert  $M_n$  de la cellule unique comme:

## Technique de la matrice de transfert

$$\begin{cases} M_{n11} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_2 + k_3)(k_1 + k_2)e^{ik_2b} + (k_3 - k_2)(k_2 - k_1)e^{-ik_2b}] e^{i[(k_1 - k_3)na - (k_1 + k_3)\frac{b}{2}]} \\ M_{n12} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_2 + k_3)(k_2 - k_1)e^{ik_2b} + (k_3 - k_2)(k_2 + k_1)e^{-ik_2b}] e^{-i[(k_1 + k_3)na + (k_3 - k_1)\frac{b}{2}]} \\ M_{n21} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_3 - k_2)(k_2 + k_1)e^{ik_2b} + (k_2 + k_3)(k_2 - k_1)e^{-ik_2b}] e^{i[(k_1 + k_3)na + (k_3 - k_1)\frac{b}{2}]} \\ M_{n22} = \frac{1}{4k_3k_2} [(k_3 - k_2)(k_2 - k_1)e^{ik_2b} + (k_2 + k_3)(k_1 + k_2)e^{-ik_2b}] e^{-i[(k_1 - k_3)na - (k_1 + k_3)\frac{b}{2}]} \end{cases} \quad (\text{II.44})$$

Avec

$$k_2 = \sqrt{E + Fe - V_0} \quad (\text{II.45})$$

Si on prendre

$$k_1 = k_3 = \sqrt{E + Fe} \quad (\text{II.46})$$

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

$$\begin{cases} M_{n11} = \frac{k_1}{4k_3} [\alpha_{21}\alpha_{32}e^{ik_2b} + \alpha'_{21}\alpha'_{32}e^{-ik_2b}] e^{i[k'_{13}na - k_{13}\frac{b}{2}]} \\ M_{n12} = \frac{k_1}{4k_3} [\alpha'_{21}\alpha_{32}e^{ik_2b} + \alpha_{21}\alpha'_{32}e^{-ik_2b}] e^{-i[k_{13}na + k'_{13}\frac{b}{2}]} \\ M_{n21} = \frac{k_1}{4k_3} [\alpha'_{21}\alpha_{32}e^{ik_2b} + \alpha_{21}\alpha'_{32}e^{-ik_2b}] e^{i[k_{13}na + k'_{13}\frac{b}{2}]} \\ M_{n22} = \frac{k_1}{4k_3} [\alpha'_{21}\alpha'_{32}e^{ik_2b} + \alpha_{21}\alpha_{32}e^{-ik_2b}] e^{-i[k'_{13}na - k_{13}\frac{b}{2}]} \end{cases} \quad (\text{II.47})$$

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

$$\mathbf{M}_n = \begin{pmatrix} \left[ \cos k_2b + \frac{i}{2} \left( \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2b \right] e^{-ik_1b} & \left[ \frac{i}{2} \left( \frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2b \right] e^{-2ik_1na} \\ \left[ -\frac{i}{2} \left( \frac{k_2}{k_1} - \frac{k_1}{k_2} \right) \sin k_2b \right] e^{2ik_1na} & \left[ \cos k_2b - \frac{i}{2} \left( \frac{k_1}{k_2} + \frac{k_2}{k_1} \right) \sin k_2b \right] e^{+ik_1b} \end{pmatrix} \quad (\text{II.48})$$

### VII. b. 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 M, en tant que

$$T = |t|^2 = |S_{12}|^2 = \frac{1}{|M_{22}|^2} \quad (\text{2.49})$$

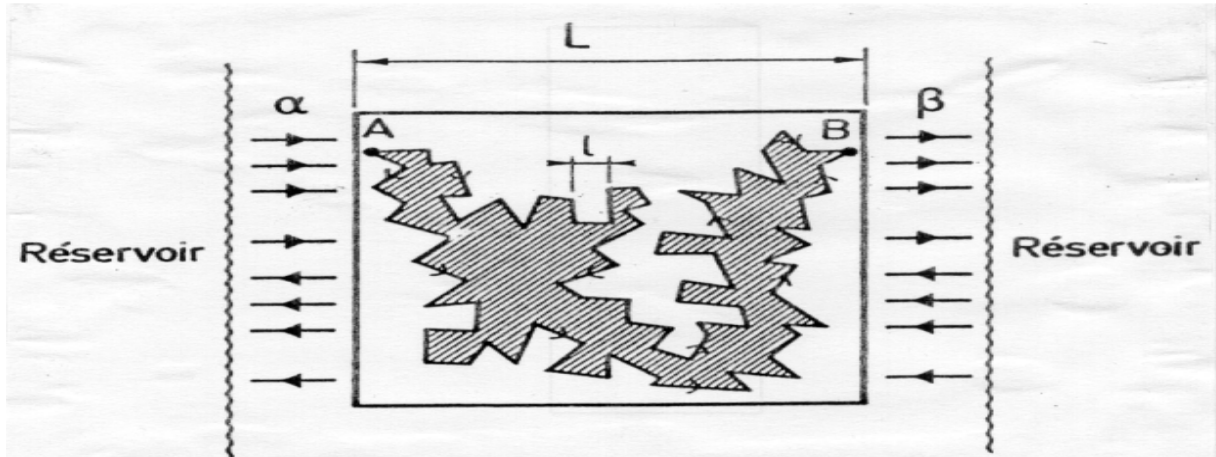
$$T = \frac{1}{|M_{22}|^2} = \frac{1}{1 + \frac{1}{4} \left( \frac{k_1}{k_2} - \frac{k_2}{k_1} \right)^2 \sin^2(k_2b)} \quad (\text{2.50})$$

## VIII. La conductance

La conductance à une dimension est donnée par Landauer [35]:

$$g = \frac{T}{1-T} \tag{II.51}$$

Où T est le coefficient de transmission.



**Figure II. 8:** Principe de mesure d'une conductance d'un système conservatif de taille L, à T=0.

### VIII. 1. Fluctuations de conductance dans le régime isolant

Les effets d'interférences quantiques ne sont pas bien compris dans les isolants désordonnés. La conductance moyenne dans ce régime dans un grand échantillon est donnée par Mott [36] par:

$$g = \exp\left(\frac{-T_0}{T}\right)^{\frac{1}{d+1}} = \exp\left(\frac{-2r_0}{\xi}\right) \tag{II.52}$$

$$r_0 = \frac{\xi}{2} \left(\frac{-T_0}{T}\right)^{\frac{1}{d+1}} = \langle r_M \rangle \tag{II.53}$$

$r_M$  Est la longueur de cohérence de phase dans le régime isolant. Dans ce régime, la conductance montre de grandes fluctuations qui tendent à diverger pour des grands systèmes. Le logarithme de la conductance elle-même montre ces grandes fluctuations [37].

La taille de ces fluctuations à T=0 a été calculée par la théorie des matrices aléatoires dans la limite quasi-1D donnant:

## Technique de la matrice de transfert

$$\text{var}(\ln g) = \frac{L}{\xi} \langle \ln g \rangle \quad (\text{II.54})$$

Où  $L$  est la taille de l'échantillon et  $\xi$  la longueur de localisation. Donc l'amplitude des fluctuations de conductance dépend de  $L/\xi$  et non pas de  $L$ . En étudiant un modèle à deux dimensions, Markoš [38] a montré le comportement linéaire:

$$\text{var}(\ln g) = \alpha \langle \ln g \rangle + \beta \quad (\text{II.55})$$

### VIII. 2. Distribution de probabilité de conductance

#### VIII. 2. a. Régime métallique

Puisque la variance de  $g$  ne s'annule pas asymptotiquement, la distribution de probabilité de conductance  $P(g)$  ne peut être caractérisée par la conductance moyenne. Un travail analytique d'Heinrichs [39] a montré que la distribution de conductance métallique tend vers une forme gaussienne pour  $L \rightarrow \infty$ :

$$P_g^{(d)} \sim (2\pi L^{\epsilon-1})^{-\frac{1}{2}} \exp\left[-\frac{(g-L^\epsilon)^2}{2L^{\epsilon-1}}\right] \quad (\text{II.56})$$

Avec :

$$\epsilon = d - 2$$

$d$  : étant la dimension.

#### VIII. 2. b. Régime isolant

On a vu que la conductance s'auto-moyenne classiquement quelque soit la dimension. Ceci est remis en cause par les interférences quantiques. Par conséquent, il est nécessaire de considérer les moments à tous les ordres au lieu des deux premiers seulement ( $\langle g \rangle$  et  $\text{var}(g)$ ), c-à-d toute la distribution de probabilité  $P(g)$ .

Dans régime isolant les fluctuations de conductance deviennent très grandes et tendent à diverger pour des grands systèmes. Il devient donc nécessaire d'étudier la distribution  $P_L(g)$  pour un ensemble d'échantillons macroscopiquement identiques.

Pour une chaîne désordonnée ( $d=1$ ), et d'après Shapiro [40], la variable statistiquement pertinente, dans la limite asymptotique est  $U = \log(1+\rho)$ . Où  $\rho$  est la résistance.

La loi de distribution de  $U$  est alors gaussienne.

## Technique de la matrice de transfert

$$P(U) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\Delta\overline{U}_L^2}} \exp \left[ -\frac{(U-\overline{U})^2}{2\Delta\overline{U}_L^2} \right] \quad (\text{II.57})$$

Où la moyenne  $\overline{U}_L$  et la variance  $\overline{U}_L^2$  s'expriment simplement en fonction des deux premiers moments de la distribution.

Pour une dimension  $d > 1$  dans le régime isolant, Shapiro [39] utilise une transformation de type Migdal-Kadanof qui consiste à considérer un cube de taille  $(bL)^{d-1}$  comme étant formé de  $(b)^{d-1}$  chaînes supposées découplées en première approximation. Chaque chaîne, constituée de  $b$  cubes de taille  $L$ , est étudiée de la même manière que le paragraphe précédent. Cette approximation n'est pas valable dans le régime métallique, mais peut donner une bonne idée de  $P(g)$  dans le régime isolant.

Donc la distribution de conductance de  $\ln(g)$  dans ce régime,  $P(\ln(g))$  est gaussienne. Cette distribution montre des queues anormales. Certaines propriétés physiques sont liées aux queues de la distribution comme par exemple le claquage des diélectriques.

### VIII.2.c A la transition

En 1990, B. Shapiro [39] a montré que la distribution de conductance à la transition est une fonction universelle absolue :  $\lim_{L \rightarrow \infty} P_L(g) = P_g^*(g)$  qui dépend seulement de la dimension. Pour un désordre local faible, la transition d'Anderson existe seulement pour  $d = 2 + \epsilon$  où  $\epsilon$  est un nombre petit et la distribution à la transition est:

$$P^*(g) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp \left[ -\frac{g(g-N)^2}{2} \right] \quad (\text{II.58})$$

Avec

$$N = 1/\epsilon$$

En étudiant le modèle d'Anderson à 2D et à 3D, Markos et Kramer [41] ont confirmé cette universalité de la distribution de conductance aux points critiques de la transition métal-isolant. Ils ont montré qu'elle est indépendante des détails microscopiques des modèles (énergie, désordre).

## I. Introduction

La théorie de la localisation avait permis la compréhension de nombreux phénomènes en physique de la matière condensée, liés à la présence des impuretés ou à d'autres formes de désordre structural à l'échelle microscopique. Nous citons en particulier la transition métal isolant qui peut être due à des effets purement géométriques tels que la percolation ou à un phénomène d'interférence quantique tel que la localisation d'Anderson.

Des études sur les propriétés optiques et électroniques sur les systèmes non cristallins ont suscité ces dernières années un vif intérêt surtout dans les composants tels que les polymères, les semi-conducteurs dopés, les alliages binaires et les amorphes. Récemment, l'introduction d'une corrélation dans les systèmes désordonnés unidimensionnels délocalise les états électroniques et l'apparition des états étendus [42]. Les états obtenus ne sont pas des ondes de types de Bloch mais l'enveloppe des fonctions d'ondes est périodique [43,44]. D'autre part, des travaux ont été faits théoriquement et expérimentalement sur les systèmes désordonnés à 1D en présence d'un champ électrique avec un grand choix d'intérêt aussi bien scientifique que technologique.

Dans notre travail nous présentons une étude numérique et analytique sur les propriétés électronique des systèmes désordonnés. Les études ont été faites sur une chaîne linéaire de  $N$  potentiels en pics delta régulièrement espacés avec un paramètre du réseau  $a$  en présence de désordre vertical (topologique). Plusieurs résultats ont montré l'existence de différents états : états fortement localisés, états faiblement localisés. Pour la résolution numérique nous utilisons la représentation de Poincaré. Cette transformation consiste à relier les fonctions d'ondes en différents sites du réseau en utilisant la technique de la matrice de transfert, précisément la matrice de propagation et la matrice de transfert à travers des potentiels de pics delta pour calculer la transition d'un état électronique à un autre.

## II. Formalisme

On considère un modèle de Kronig-Penny appliqué à un système de potentiels  $v(x)$  avec des forces aléatoires. L'équation de Schrödinger correspondant s'écrit:

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

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

Les deux extrémités de la chaîne sont ohmiquement connectées à des fils parfaits

(Où l'électron est libre). La force de potentiel est uniformément distribuée 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 degré du désordre.

Le coefficient de transmission, qui est relié à la fonction d'onde, est aussi utilisé ici pour distinguer entre les différents états de phase valables.

Nous considérons ici le modèle de potentiel de pic  $\delta$ .

Dans ce modèle le potentiel prend la forme générale :

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

Où  $V_n \delta(x - x_n)$  désigne le potentiel du site au centre  $x_n = na$  et  $N$  est le nombre total des barrières de potentiel à une chaîne de longueur  $L$ .

L'équation différentielle (III.1) du second ordre peut être simplifiée par l'utilisation de la représentation de Poincaré. Ceci consiste à relier les vecteurs fonctions d'onde  $(\Psi_{n+1}, \Psi_n)$  et  $(\Psi_n, \Psi_{n-1})$  aux différents sites du réseau. La fonction d'onde entre le site  $n$  et le site  $n+1$  est de la forme:

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

En utilisant les conditions de continuité de la fonction d'onde et de sa dérivée, on obtient l'équation récursive suivante[45]:

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

Avec  $k = \sqrt{E}$

Le coefficient de transmission :

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

Où  $k = \sqrt{E}$

Nous utilisons la conductance  $g$  sans dimension, qui est relié au le coefficient de la transmission par formule Landauer pour les systèmes 1D [35]:

$$g = \frac{T}{1-T} \quad (\text{III.6})$$

Où le facteur deux survient des deux états possibles du rotation de l'électron et la variance de la conductance est :

$$\text{var}(\ln(g)) = \langle \ln(g)^2 \rangle - \langle \ln(g) \rangle^2 \quad (\text{III.7})$$

où  $\langle \dots \rangle$  dénote une moyenne sur les différentes réalisations du potentiel aléatoire.

### III. Résultats et discussion

Nous avons étudié analytiquement puis numériquement la transmission d'une onde électronique dans un système désordonné à une dimension.

#### III. 1. Etats électroniques d'un système 1D désordonné

Dans ce travail l'énergie est fixée à  $E=4$ , la taille de système  $L=5000$  et le degré du désordre est varié pour voir son effet.

Nous avons d'abord étudié le comportement du coefficient de transmission  $\langle -\ln T \rangle$  en fonction de la taille de système  $L$  pour différents types de potentiel (barrière :Fig III.1, puits :Fig III.2, mixte :Fig III.3). Le coefficient de transmission montre une décroissance exponentielle avec la taille du système.

$$T \sim \exp(-\gamma L) = \exp\left(-\frac{L}{\xi}\right) \quad (\text{III.8})$$

Où  $\gamma$  l'exposant de Lyapunov et  $\xi$  est la longueur de localisation.

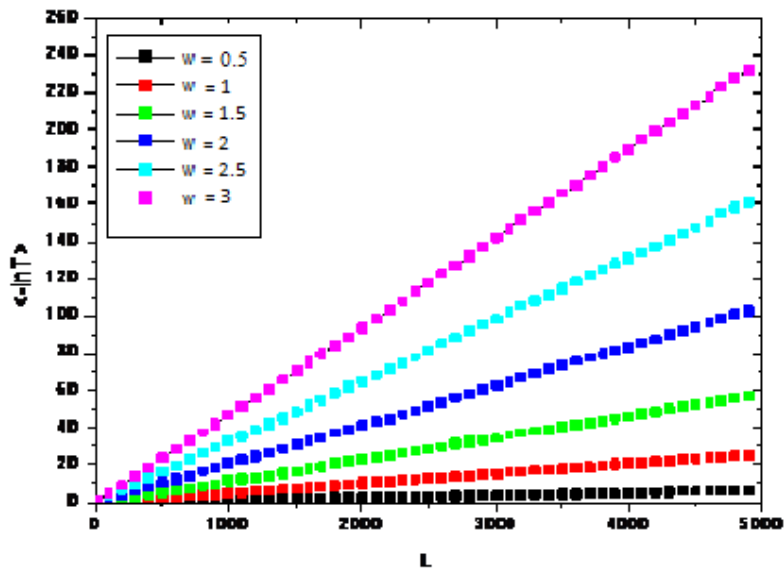


Figure III.1 : Coefficient de transmission  $\langle -\ln T \rangle$  en fonction de la taille de système  $L$  pour  $E=4$  et différentes valeurs du désordre  $W$  pour le cas des potentiels en barrières.

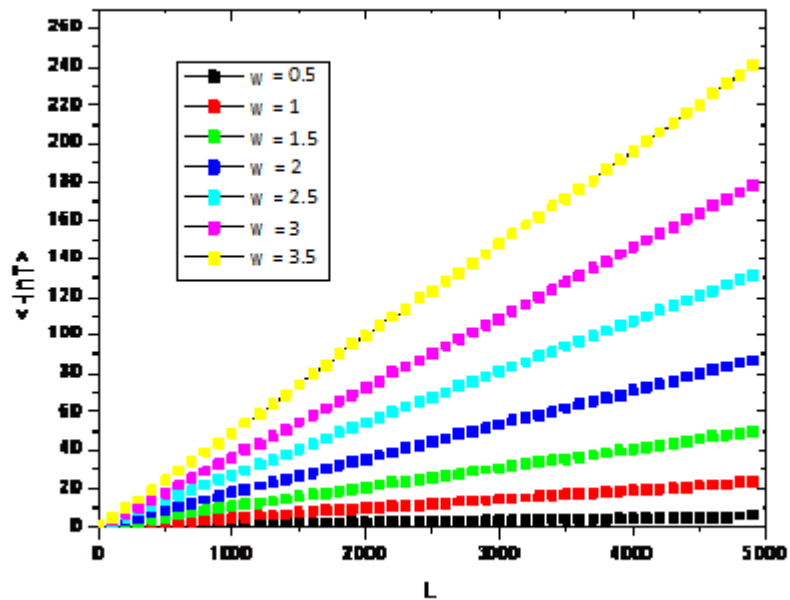
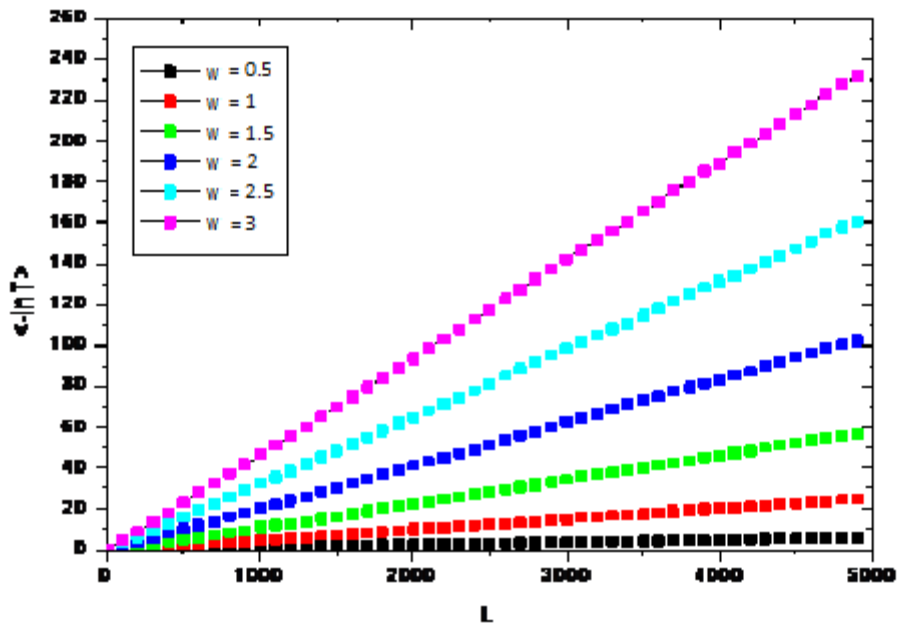
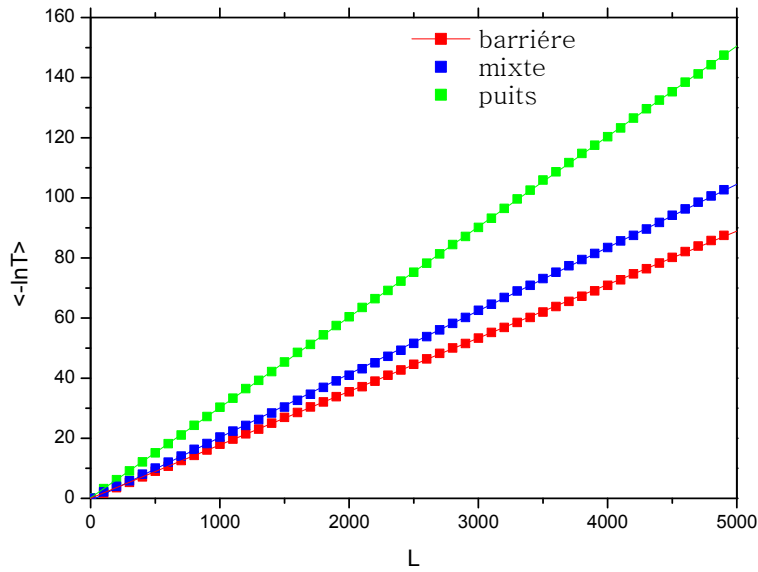


Figure III.2 Coefficient de transmission  $\langle -\ln T \rangle$  en fonction de la taille de système  $L$  pour  $E=4$  et différentes valeurs du désordre  $W$  pour le cas des potentiels en puits.



**Figure III. 3** : Coefficient de transmission  $\langle -\ln T \rangle$  en fonction de la taille de système  $L$  pour  $E=4$  et différentes valeurs du désordre  $W$  pour le cas des potentiels en mixte.

Cette figure(III. 4) montre le comportement localisé des états électronique quelque soit le degré du désordre. Le coefficient de transmission montre une décroissance exponentielle avec la taille du système.



**Figure III.4 :** Coefficient de transmission  $\langle -\ln T \rangle$  en fonction de la taille de système  $L$  pour  $E=4$ ,  $w=2$  et différents types de potentiel.

**III. 1. a. Effet du type potentiel sur la longueur de localisation et l'exposant de Lyapunov**

Tous les états sont localisés quelque soit le degré du désordre. A partir des graphes  $\langle -\ln T \rangle$  en fonction de la taille de système  $L$ , on peut déduire l'exposant de Lyapunov ( $\gamma$ ) qui représente la pente et la longueur de localisation ( $\xi$ ) pour différents valeurs du désordre  $w$ .

$$\gamma = \frac{1}{\xi} \tag{III.9}$$

Les résultats sont montrés sur les tableaux (III.1,2,3), pour les cas de potentiels.

W	0.5	1	1.5	2	2.5	3	3.5
$\gamma$	0.00122	0.00477	0.01008	0.01778	0.02682	0.0365	0.04906
$\xi$	819.67213	209.6436	99.20634	56.24	37.2856	27.397	20.3832

**Tableau III.1 :** Exposant de Lyapunov  $\gamma$  et longueur de localisation  $\xi$  en fonction du degré du désordre  $W$  et  $E=4$  pour le cas de potentiels en barrières.

## Etude des propriétés statistiques

W	0.5	1	1.5	2	2.5	3
$\gamma$	0.0015	0.00583	0.01505	0.03006	0.05404	0.09266
$\xi$	666.6666	171.5265	66.44518	33.26679	18.50481	10.79214

**Tableau III.2 :** Exposant de Lyapunov  $\gamma$  et longueur de localisation  $\xi$  en fonction du degré du désordre W et E=4 pour le cas de potentiels en puits.

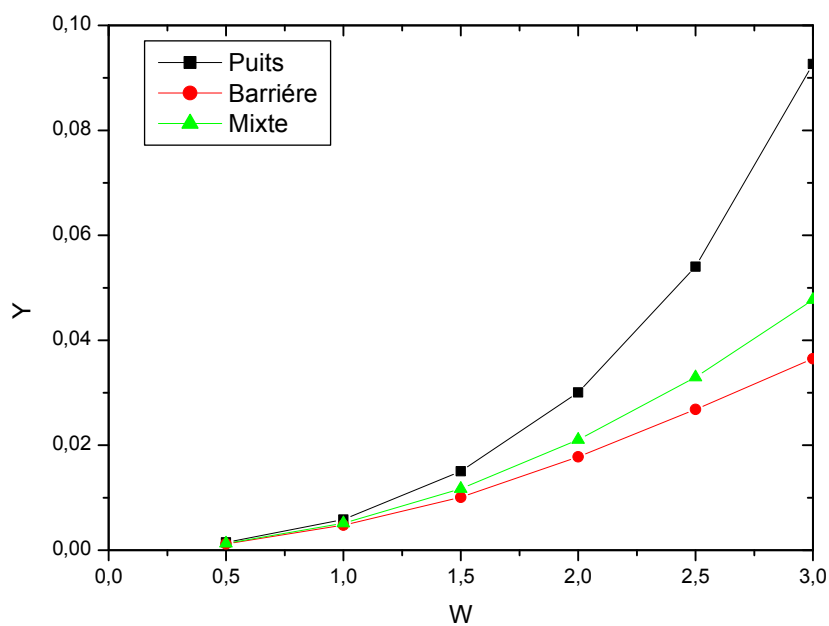
W	0.5	1	1.5	2	2.5	3	3.5
$\gamma$	0.00129	0.00513	0.01169	0.02105	0.03296	0.0476	0.06489
$\xi$	775.19379	194.93177	85.5432	47.50093	30.3398	21.0084	15.4106

**Tableau III.3 :** Exposant de Lyapunov  $\gamma$  et longueur de localisation  $\xi$  en fonction du degré du désordre W et E=4 pour le cas de potentiels en mixte.

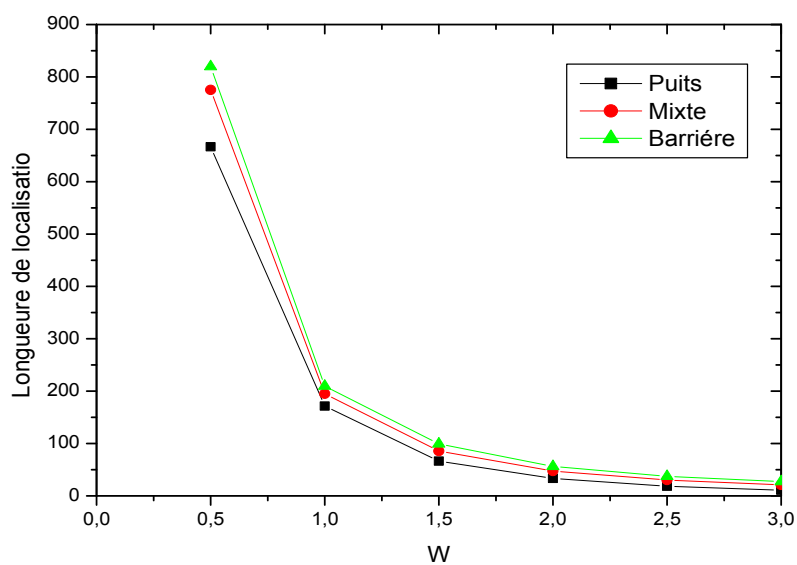
On observe que pour un désordre donné ( $w=2$ ), les puits présentent une longueur de localisation plus petite (34.0136), alors que les barrière ont une plus grande longueur de localisation (55.46311) et pour le cas mixte la longueur de localisation (47.7554) est intermédiaire. Ceci indique que les puits ont tendance à plus localiser les états électroniques.

Ceci est du à la forte attraction des puits de potentiel, que dans les système à barrières de potentiel. Evidemment, dans les systèmes mixtes, la forte attraction des puits est en concurrence avec l'effet tunnel dans les barrières.

Sur la figure (III.5), nous avons tracé l'exposant de Lyapunov en fonction du degré du désordre. On observe que cet exposant augmente avec le désordre pour les trois types de potentiel. Le désordre localise les électroniques. Par conséquent la longueur de localisation diminue avec le désordre (Figure III.6). La figure (III.5) montre aussi que l'exposant de Lyapunov est plus petit dans le cas de potentiel en barrière. LA transmission est facilitée par effet tunnel.



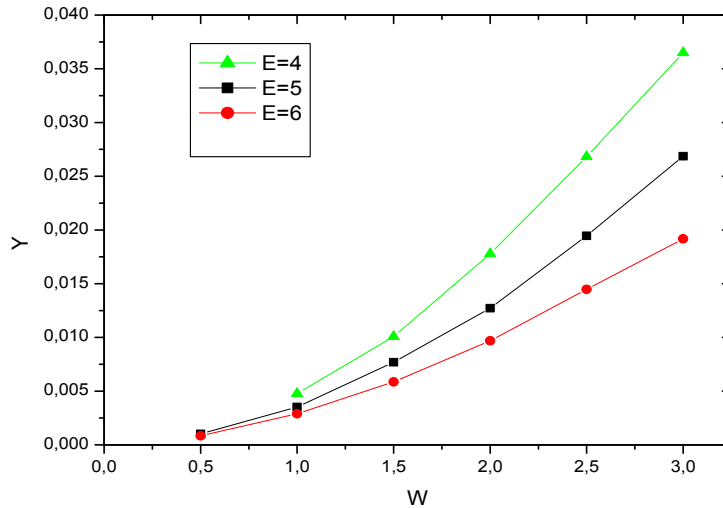
**Figure III.5 :** Exposant de Lyapunov  $\gamma$  en fonction du degré du désordre  $w$  pour  $E=4$ .



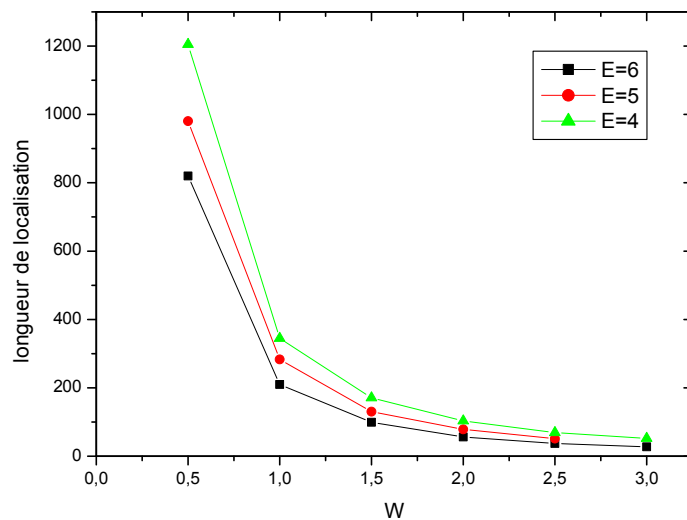
**Figure III.6 :** longueur de localisation  $\xi$  en fonction du degré du désordre  $w$  pour  $E=4$ .

### III. 1. b. Effet de l'énergie sur la longueur de localisation et l'exposant de Lyapunov

On peut déduire l'exposant de Lyapunov ( $\gamma$ ) qui représente la pente et la longueur de localisation ( $\xi$ ) pour différents valeurs des énergies ( $E=4, E=5$  et  $E=6$ ) dans le cas de potentiels en barrières.



**Figure III.7 :** Exposant de Lyapunov  $\gamma$  en fonction du degré du désordre  $w$  pour différentes valeurs du  $E$  dans le cas de potentiels en barrières.



**Figure III.8 :** longueur de localisation  $\xi$  en fonction du degré du désordre  $w$  pour différentes valeurs de  $E$  et le cas de potentiels en barrières.

La figure (III.7) montre aussi que l'exposant de Lyapunov est plus petit dans le cas ( $E=6$ ), alors que le cas d'énergie ( $E=4$ ) est plus grand, pour le cas d'énergie ( $E=5$ ) intermédiaire. La figure (III.8) montre aussi que la longueur de localisation est plus grand dans le d'énergie ( $E=4$ ), par rapport le cas d'énergie  $E=5$  et  $E=6$ .

### III. 2. Statistique de la conductance

#### III. 2. a. L'effet du désordre sur la conductance :

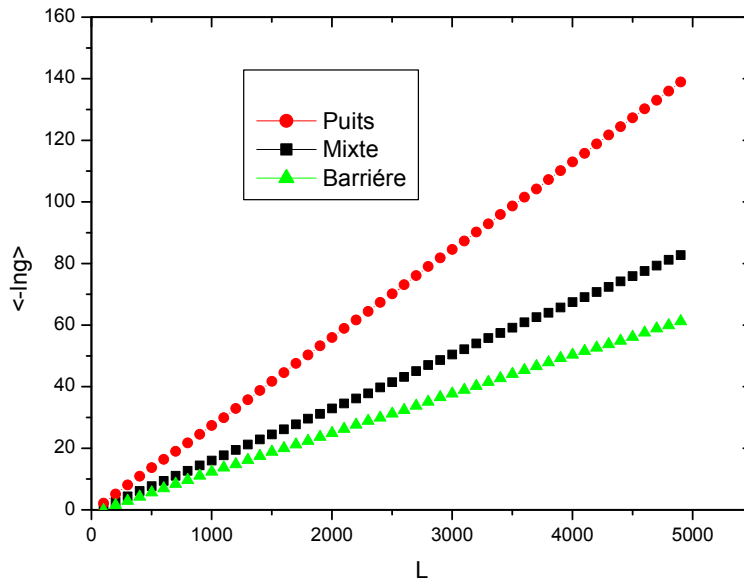
Notre étude concerne seulement le régime isolant, puisque nous avons un système purement désordonné à 1D. Nous avons montré que tous les états électroniques sont localisés quelque soit le degré du désordre. Dans ce régime, il a été montré que la conductance présente de très grandes fluctuations.

Dans ce travail l'énergie est fixée à  $E=5$ , la taille de système  $L=5000$  et le degré du désordre  $w=3$ .

Nous avons d'abord étudié le comportement de la conductance moyenne  $\langle -\ln g \rangle$  en fonction de la taille de système  $L$  pour différents types de potentiel (figure III.9). Ce résultat confirme le comportement général dans ce régime (isolant). La conductance montre une décroissance exponentielle avec la taille du système pour.

$$g = \exp\left(\frac{-L}{\xi}\right) \quad (\text{III. 10})$$

La conductance dans le cas potentiel en puits plus petite par rapport le cas en barrière, et en mixte intermédiaire, indiquant une très forte localisation des états électroniques dans le cas potentiel en puits.



**Figure III.9 :** la conductance moyenne  $\langle -\ln g \rangle$  en fonction de la taille de système  $L$  pour  $E=5$  ,  $w=3$  et différents types de potentiel.

### III.2.b. L'effet du désordre sur les fluctuations de conductance :

Les fluctuations de conductance sont données par la variance:

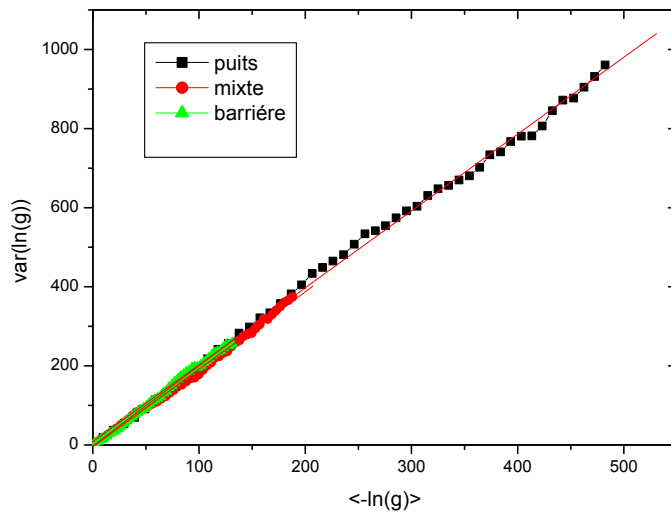
$$\text{var}(\ln g) = \langle -\ln g^2 \rangle - \langle -\ln g \rangle^2 \quad (\text{III. 11})$$

L'énergie est fixée à  $E=5$ , la taille de système  $L=5000$  et le degré du désordre  $w=3$ .

La figure (III.10) confirme le comportement général dans régime isolant, les fluctuations de conductance varient linéairement avec la conductance moyenne :

$$\text{var}(\ln g) = A \langle -\ln g \rangle + B \quad (\text{III. 12})$$

Ce comportement n'est pas affecté par le type de potentiel ou la degré du désordre. On observe de très grandes fluctuations de conductance dans le cas potentiel en puits indiquant une très forte localisation des états électroniques.



**Figure III.10 :** la variance de la conductance  $var(\ln g)$  en fonction la conductance moyenne  $\langle -\ln g \rangle$  pour  $w=3$ ,  $E=5$  et différents types de potentiel.

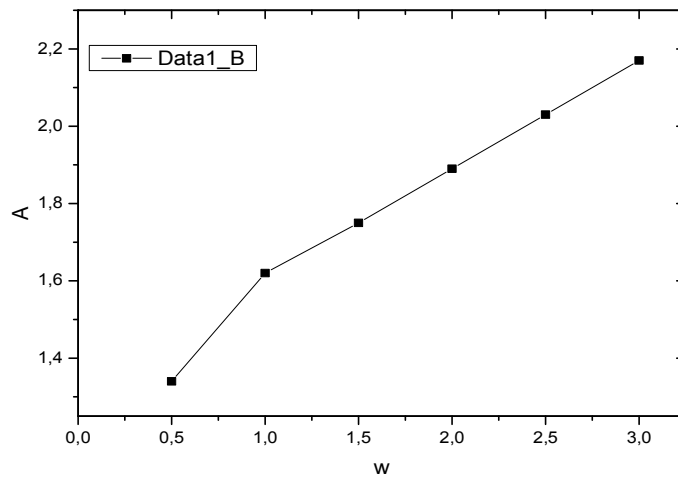
A partir de la figures de la variance de  $(\ln g)$ , on peut déduire le coefficient (A) représentant la pente pour différentes valeurs du désordre  $w$  dans le cas de potentiel en barrière.

Les resultats sont montrés sur le tableaux (III.4).

W	0.5	1	1.5	2	2.5	3
A	0.84	1.62	1.75	1.89	2.03	2.17

**Tableau III.4 :** le coefficient (A) en fonction de différentes valeurs du désordre  $w$  pour le cas de potentiel en barrière et  $E=5$ .

On remarque dans cette figure (III.11) le coefficient (A) augmente en fonction de différents valeurs du désordre.



**Figure III.11 :** le coefficient (A) en fonction différentes valeurs du degré du désordre w pour E=5 et le cas de potentiel en barrière.

### III.2.c. Distribution de probabilité de conductance :

Il a été montré que dans le regime métallique la distribution de la conductance  $P(g)$  est gaussienne. Par contre, dans le regime isolant la distribution de  $P(-\ln(g))$  est gaussienne. On dit que la distribution est log-normale :

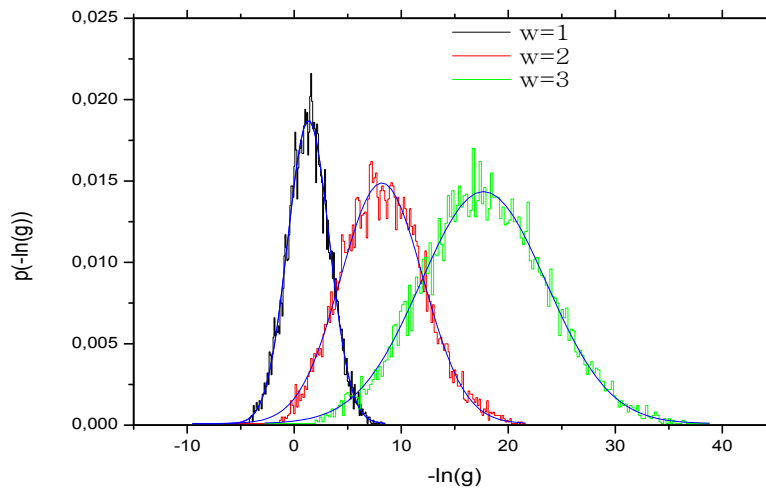
$$P(\ln g) = A \exp\left[-\frac{(\ln(g) - \langle -\ln(g) \rangle)^2}{2\sigma}\right] \quad (\text{III. 13})$$

Avec:

$\sigma$ : la variance de  $(-\ln(g))$  (largeur à mi hauteur de la distribution)

#### III.2.c.1 L'effet du désordre

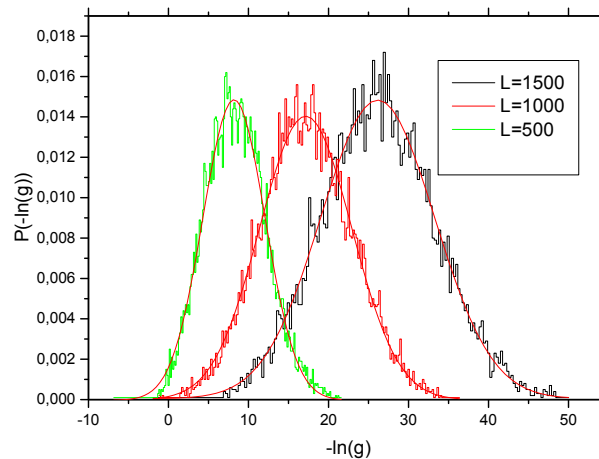
Nous avons calculé la distribution de  $P(-\ln(g))$  pour différentes valeurs du désordre w, L=500 et E=4 dans le cas de potentiel en barrière.



**Figure III.12** : la distribution de  $P(-\ln(g))$  en fonction de  $-\ln(g)$ , pour des différentes valeurs du désordre  $w$ ,  $L=500$  et  $E=4$  dans le cas de potentiel en barrière.

Dans cette figure (III.12), on montre que la distribution de  $P(-\ln(g))$  est gaussienne confirmant le comportement général dans ce régime. Cette figure confirme aussi que la variance  $\sigma$  augmente et la conductance moyenne diminue avec l'augmentation des valeurs du désordre  $w$ .

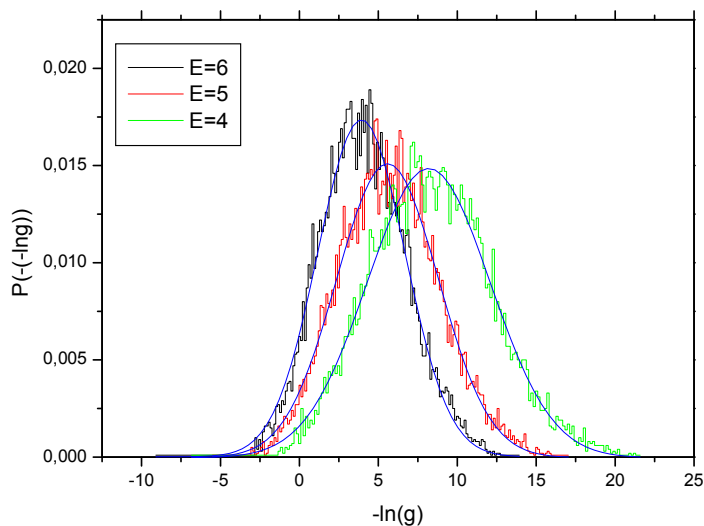
### III.2.c.2. L'effet de la taille



**Figure III.13** : la distribution de  $P(-\ln(g))$  en fonction de différentes valeurs de taille pour  $w=2$ ,  $E=4$  et le cas de potentiel en barrière.

On observe que la variance  $\sigma$  augmente et la conductance moyenne  $\langle -\ln g \rangle$  diminue pour l'augmentation de valeur L de système.

### III.2.c.3 L'effet de l'énergie



**Figure III.14** : la distribution de  $P(-\ln(g))$  en fonction de différentes valeurs des énergies pour  $w=2$  et le cas de potentiel en barrière.

Cette figure(III.15) confirme aussi que la variance  $\sigma$  diminue et la conductance moyenne  $\langle -\ln g \rangle$  augmentent avec l'augmentation des valeurs des énergies.

## IV. Résumé

Ce mémoire présente une étude des propriétés de transmission d'un électron se propageant dans un système désordonné à une dimension pour trois types de potentiels (barrière, puits et mixte). Nous avons étudié aussi les propriétés statistiques de la conductance. Nous avons analysé l'effet du désordre sur les propriétés de transport de système unidimensionnel.

D'un état électronique, nous avons confirmé numériquement pour le comportement du coefficient de transmission pour différents types de potentiel qui montre une décroissance exponentielle avec la taille du système  $T \sim \exp(-2\gamma L) \sim \exp\left(\frac{-L}{\xi}\right)$ . Ceci indique que tous les états électronique sont localisés quelque soit le degré du désordre. Nous avons montré que la localisation est plus faible dans le cas dans le cas de potentiel en barrière l'exposant de lyapunov est plus petit en comparaison avec les autres types de potentiel (puits et mixte).

Dans ce régime isolant, la conductance montré une décroissance exponentielle pour différents types de potentiel avec la taille du système  $g \sim \exp\left(\frac{-L}{\xi}\right)$ .

On observe de très grandes fluctuations de conductance dans le cas potentiel en puits indiquant une très forte localisation des états électroniques. Nous avons montre que la distribution de  $P(-\ln(g))$  est gaussienne confirmant le comportement général dans ce régime.

## Conclusion

Dans ce travail nous avons étudié la nature des états électronique dans un système unidimensionnel désordonné. Nous avons utilisé la méthode de la matrice de transfert pour calculer le coefficient de transmission.

Nous avons présentée une étude des propriétés de transmission des électrons indépendantes propageant dans un système désordonné à une dimension des trois potentiels (barrière, puits et mixte). Nous avons aussi étudié ses propriétés statistiques de la conductance. Nous avons analysé l'effet du désordre sur les propriétés de transport de système unidimensionnel.

En introduisant le désordre nous avons montré que les états électronique deviennent localisés quelque soit le degré du désordre.

Plusieurs résultats ont été trouvés et analysés.

D'un état électronique, nous avons confirmé numériquement pour le comportement du coefficient de transmission pour différents types de potentiel qui montre une décroissance exponentielle avec la taille du système  $T \sim \exp(-2\gamma L) \sim \exp\left(\frac{-L}{\xi}\right)$ . Ceci indique que tous les états électroniques sont localisés quelque soit le degré du désordre. Nous avons montré que la localisation est plus faible dans le cas de potentiel en barrière l'exposant de Lyapunov est plus petit en comparaison avec les autres types de potentiel (puits et mixte).

Dans ce régime isolant, la conductance montrée une décroissance exponentielle pour différents types de potentiel avec la taille du système  $g \sim \exp\left(\frac{-L}{\xi}\right)$ .

On observe de très grandes fluctuations de conductance dans le cas de potentiel en puits indiquant une très forte localisation des états électroniques.

Nous avons montré que la distribution de  $P(-\ln(g))$  est gaussienne confirmant le comportement général dans ce régime.

### Bibliographie

- [1] F. Bloch, Z. phys. 52, 555 (1928)
- [2] P. W. Anderson, Phys. Rev 109, 1493 (1958).
- [3] E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciadello, and T.V. Ramakrishna, Scaling Theory of localisation: Absence of quantum diffusion in two dimensions, Phys. Rev. Lett.42, 673 (1979).
- [4] S. Blacher, F. Brouers, et R. Van Dyck, Physica A 197, 5 (1993), G. C. Cody, Physical phenomena in granular materials, MRS Symposia Proceedings N°1995 (Materials Research Society, Pittsburg, 1990).
- [5] V.N. Prigodin, Metallic state in conducting polymers, Lecture notes, Spring college in condensed matter on disorder and chaos in quantum systems, (Trieste, Italie) 1996.
- [6] B.J. Van Wees, H. Van Houten, C. W. J. Beenakker, J. G. Williamson, L. P. Kouwenhoven, D. Vander Marcel et C.T. Foxon, Phys. Rev. Lett. **60**, 848(1988).
- [7] G. H. Wannier, Phys. Rev. 117, 432 (1960).
- [8] N.F.Mott, Phil.Mag.B44, 265(1981).
- [9] Z. Okbani, Etude d'un système désordonné corrélé à une dimension, Thèse de Doctorat, U.S.T.O.M.B(2007).
- [10] R.J.Bell et P.Dean, Discuss, Farady Soc.50, 55 (1970).
- [11] N.F. Mott et W.D. Twose, Adv. Phys.10,107 (1961).
- [12] Comme. Ref : G. Bastard, E. Emendez, L.L.Chang et L. Esaki , Phys.Rev.B28,3241 (1983);
- [13] G. Gonzalaz, I. Delgadillo et A. Calderon, Sol. Stat Commun.98, 357(1996);
- [14] S.M.A. Nimour, N. Zekri et R. Ouasti, Phys. Lett. A. 226, 393 (1997).
- [15] A. Abrahams, P.W. Anderson, D.C.Licciardello and T.V. Remarkrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 973 (1979).
- [16] K. Senouci, Mémoire de Magister, USTO (1995).
- [17] J.W. Touless, Phys. Rep. **13C**, 93 (1974).
- [18] N. Giordano, Phys. Rev. **B22**, 5635 (1980).
- [19] C. M. Soukoulis, J.V.Jose, E.N. Economou et P. Sheng, Phys. Rev. Lett. **50**,764 (1983).
- [20] D. Castello, A. Caro et A. Lopez, Phys. Rev.B36, 3002 (1987).

## Bibliographie

- [21] E.Y. Levy and B. Souillard, *Europhysics Lett.* **4**,233 (1987).
- [22] D. Chen, M.I. Molina et G.P. Tsironis, *J. Phys. Condens. Matt.* **5**,8689 (1993).
- [23] 'Bose-Einstein Condensation', eds. A. Griffin, D. W. Snoke and S. Stringari, Cambridge, University press (1995).
- [24] F. Abdullaev, A.R. Bishop et S. Pneumatikos, Eds "Disorder with Nonlinearity", (Springer-Verlag-Berlin 1998).
- [25] P. Devillard et B. Souillard, *J. Stat. Phys.* **43**, 423 (1986).
- [26]. P. Markoš, C. M. Soukoulis, *wave Propagation: from Electrons to Photonic Crystals and Left-Handed Materials*. Princeton University Press, New Jersey (2008).
- [27]. Cohen-Tannoudji, C. B. Diu, and F. Lalce, *Quantum Mechanics*. John Wiley & Sons, New York (1977).
- [28]. Mello, P. A., and N. Kumar, *Quantum Transport in Mesoscopic Systems: Complexity and Statistical Fluctuations*. Oxford University Press, Oxford (2004).
- [29] Yeh, P., *Optical Waves in Layered Media*, 2nd ed. Wiley Series in Pure and Applied Optics. John Wiley & Sons, New York (2005).
- [30] Economou, E. N., *Green's F unction in Quantum Physics*, 2nd ed. Springer, Berlin (1979).
- [31]. Peter Markos, costas M. Soukoulis. *Wave propagation (from electrons to photonic crystals and left-handed materials)*
- [32]. 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).
- [33]. Landau, L. D. and E. M. Lifshitz, *Quantum Mechanics*. Pergamon, Oxford (1984).
- [34] Flügge, S, *Practical Quantum Mechanics*. Springer, Berlin (1994, reprinted 1999).
- [35] R. Landauer, *Philos. Mag.* **21**, (1970).
- [36] N. F.Mott, *J. NonCrystal. Solids* **1**, 1(1968).
- [37] F. La dieu and J. P. Bouchaud, *J. Phys. I France* **3**,n<sup>0</sup>3,2321(1993);F. Ladieu, *Thèse de doctorat Paris6*(1994)
- [38] P. Markos, *J. Phys. I France* **4**,551 (1994).
- [39] J. Heinrichs, A. M. Jayannavar and N. Kumar, *Solid State Comm.* **67**,1103 (1988).

## Bibliographie

- [40] B. Shapiro, Philos. Mag. B 56,1031(1987).
- [41] P. Markos and B. Kramer, Philos. Mag. B 68,357 (1993)
- [42] A. Sanchez, E. Marcia et F. Dominguez-Adame, Phys. Rev. B 49, 147 (1994)
- [43] M. Hilke, J.C.Flores, F. Dominuez-Adame, Phys. Rev .B 58, 13 (1998)
- [44] H. Xiuqing et W. Xintian, Phys. Rev. B 55, 11 018 (1997)
- [45] C.M. Soukoulis, J.V. José, E.N. Economou, P. Sheng, Phys. Rev. Lett. 50(1983) 764.