

Transition métal-isolant

L. DUMOULIN

DRTBT 1991-~~02~~ 11

Transition métal-isolant

J. BUNOUILIN

DRBT 1971-1972

TRANSITION METAL-ISOLANT

L. DUMOULIN

C.S.N.S.M. (CNRS-IN2P3) - Bât. 104-108 - 91405 ORSAY

INTRODUCTION

Parmi les phénomènes physiques dépendant de la température et pouvant donc servir de thermomètre, les propriétés de transport, comme la conductivité électrique sont les plus attrayantes par la simplicité de leur mise en œuvre. La conductivité des métaux donne d'excellents thermomètres à haute température mais devient insensible à basse température sauf cas particuliers (transition supraconductrice, effet Kondo). On a alors recours à des thermomètres dérivés des semiconducteurs cristallins ou amorphes plus ou moins dopés ou à des mélanges biphasés métal-isolant, granulaires ou "aléatoires" qui ont tous en commun la particularité de présenter du "désordre", une rupture de la symétrie de translation, cette symétrie qui a servi de base à l'épanouissement de la physique du solide depuis ses débuts. La conductivité des systèmes désordonnés qui nous intéressent, relève de la problématique de la transition métal isolant (TMI) dite de Mott-Anderson. Le désordre se manifeste sous deux aspects essentiels : d'une part, il tend à localiser les électrons dans l'espace, c'est le problème de la "localisation d'Anderson" ; d'autre part, il modifie l'interaction des électrons entre eux, c'est le problème des "interactions coulombiennes". Cette dualité rend cette TMI particulièrement riche en phénomènes nouveaux mais éminemment complexe à étudier dans sa globalité au point qu'en dépit de progrès considérables accomplis ces dix dernières années, une théorie complète n'existe pas encore.

Dans une première partie, après avoir introduit les principaux concepts nécessaires à l'étude de la conductivité en général, nous définirons l'isolant d'Anderson et illustrerons certaines de ses propriétés, en particulier, dans le cas des semiconducteurs dopés qui en sont l'exemple le plus étudié et le plus utilisé. Dans une seconde partie, nous décrirons les métaux

désordonnés et l'apport conceptuel essentiel de la localisation faible. Dans la troisième partie enfin, nous décrivons la TMI et les principaux phénomènes qui l'entourent.

I - ISOLANT D'ANDERSON

A) Structure de bande des solides et conductivité électrique

Lorsqu'on rapproche des atomes isolés pour en faire un cristal, les niveaux atomiques donnent des bandes qui sont un "quasicontinuum" d'états électroniques permis séparés par des bandes d'énergie interdites. La grandeur essentielle est la densité d'états $N(E)$, nombre d'états permis par unité de volume et par unité d'énergie (dimension $L^{-3} E^{-1}$). Dans un réseau parfait, les fonctions d'onde de ces états sont des fonctions de Bloch délocalisées dans l'espace. L'occupation des états par les électrons se fait en minimisant l'énergie et en respectant le principe d'exclusion de Pauli, ce qui conduit au remplissage des états jusqu'au Niveau de Fermi E_F .

Une bande complètement remplie ne transporte pas de courant bien que les fonctions d'onde soient délocalisées. Ce résultat fondamental permet de définir les métaux et les isolants suivant qu'il y a ou non un continuum d'états permis immédiatement au-dessus de E_F .

B) Modèle des électrons libres - Liquides de Fermi

L'étude de propriétés physiques, telles que la conductivité électrique des métaux, directement à partir de la structure de bande, serait extrêmement complexe et priverait des "représentations" nécessaires à l'imagination.

Le modèle métallique le plus simple est celui des électrons libres. Les états sont les états d'énergie cinétique de N particules enfermées dans une boîte ; on néglige l'énergie potentielle due à la présence des ions qui ne font qu'assurer la neutralité électrique et on néglige l'interaction entre électrons, sauf à respecter le principe de Pauli.

Les états sont décrits par des ondes planes $e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$, où le

vecteur d'onde \vec{k} est lié à la vitesse $\vec{v} = \frac{\hbar \vec{k}}{m}$ et à l'énergie

$E(\vec{k}) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. A l'énergie de Fermi E_F correspond donc le vecteur d'onde de Fermi k_F dont l'ordre de grandeur est l'inverse d'une distance interatomique a . La vitesse de Fermi associée est de l'ordre de 10^8 cm/s et la température de Fermi supérieure à 10^4 K dans les métaux usuels.

La prise en compte réaliste du potentiel des ions conduit à la notion de structure de bande, mais dans un métal, la bande de conduction est bien décrite par l'approximation des électrons libres en ce qui concerne de nombreuses propriétés physiques. Il faut cependant introduire les concepts de masse effective m^* et de conduction par électrons ou par "trous" suivant la forme et le remplissage de la bande.

Le problème de la prise en compte des interactions entre électrons est beaucoup plus sérieux. A priori, la répulsion coulombienne, pour deux électrons i, j ajoute une énergie $\frac{e^2}{\kappa R_{ij}}$ où κ est la constante diélectrique et R_{ij} la distance entre les deux électrons.

Cette énergie, toujours a priori n'est pas petite devant les largeurs de bande et est à longue portée. La question fondamentale est la suivante : peut-on traiter un problème à N corps par une superposition d'états à un électron qui ressemblerait au modèle des électrons libres. En d'autres termes, une interaction forte entre électrons suppose une fréquence élevée des collisions entre eux donc un temps de relaxation court. Dès lors, les fonctions d'onde à un électron ne sont plus des solutions stationnaires utilisables pour les phénomènes physiques mettant en jeu des temps de relaxation plus longs. La réponse à cette question est paradoxalement : OUI, on peut et notamment pour la plupart des propriétés de de transport, raisonner avec une densité d'états à un électron, une bande et un niveau de Fermi convenablement renormalisés. C'est le résultat essentiel de la théorie des liquides de Fermi initiée par Landau. Les raisons fondamentales de cette surprenante simplification ne sont pas étrangères à notre propos comme nous le verrons. Elles sont d'une part que la mobilité et la densité des électrons sont telles que les interactions sont écrantées et d'autre part, que le respect du principe de Pauli crée une situation où le temps de

vie des états à un électron est infini à E_F pour $T = 0$.

La présence de désordre va remettre radicalement en cause la validité du modèle de liquide de Fermi. Il y a cependant place à faible désordre pour des modèles simples de la conductivité.

C) La localisation d'Anderson

Considérons un solide possédant une bande d'électrons de largeur B à moitié remplie. Si le potentiel ionique $V(\vec{r})$ est parfaitement périodique, toutes les fonctions d'onde sont étendues dans l'espace : c'est un "bon conducteur". Introduisons du désordre dans ce système en modulant aléatoirement les potentiels de site qui deviennent $V(\vec{r}) \pm 1/2 V_0(\vec{r})$, V_0 étant la largeur de la distribution aléatoire. Toutes les fonctions d'onde sont perturbées : leur phase change notablement sur une distance moyenne l , le libre parcours moyen élastique. Les fonctions d'onde électroniques de haute énergie restent étendues mais décrivent des mouvements diffusifs tandis que celles de basse énergie sont localisées dans l'espace avec une longueur moyenne de localisation $\xi > l$. L'énergie caractéristique séparant les deux situations est appelée le "bord de mobilité" E_c . La formulation et le premier traitement de ce problème ont été donnés par Anderson (Anderson, 1958). La position du niveau de Fermi E_F dans la bande n'est pas considérablement affectée par le désordre mais pour un certain désordre critique $V_0/B > 1.6$, E_F devient inférieur à E_c et les électrons ne peuvent plus diffuser à $T = 0$. C'est l'"isolant d'Anderson".

Il est important de noter qu'il s'agit là d'un concept entièrement nouveau par rapport aux isolants qui doivent ce caractère à leur structure de bande (diamant, semiconducteurs par exemple) : l'isolant d'Anderson a un caractère métallique par sa structure de bande (forte densité d'états au niveau de Fermi, bande de conduction partiellement occupée) et cependant, il ne peut conduire que par activation thermique ($\sigma(T=0) = 0$).

D) Exemple des semiconducteurs dopés - Les concepts introduits par Mott

a) Rappel sur les semiconducteurs cristallins

Un semiconducteur est un isolant de par sa structure de bandes mais avec un gap E_g "faible" entre la bande de valence (remplie à $T = 0$) et la bande de conduction (vide à $T = 0$). A température finie, le nombre n d'électrons excités au-dessus du gap est de l'ordre de $e^{-E_g/2kT}$ et on parle de semiconducteur lorsque ce nombre est appréciable à température ambiante, ce qui donne $E_g \approx 1\text{eV}$ ($\text{eV} = \text{électronVolt}$). En l'absence d'impuretés (semiconducteur intrinsèque), la conductivité est due aux électrons activés dans la bande de conduction et aux trous qu'ils ont laissés dans la bande de valence.

Mettons une impureté pentavalente dans un semiconducteur tétravalent, par exemple du P dans le Si. Le P vient substituer un Si, on a gagné un électron et le réseau, localement, présente un excès d'une charge positive. Cette charge positive crée un état lié qui se calcule comme l'atome d'hydrogène. Cependant, la forte constante diélectrique ϵ du milieu et la faible masse effective m^* des électrons de bas de bande de conduction conduisent à une énergie de liaison $\frac{m^*}{m} \frac{1}{\epsilon^2} \times 13,6 \text{ eV}$ très inférieure à E_g et à un rayon de la première orbite de Bohr $a_0^* = \frac{m}{m^*} \epsilon a_0$ bien supérieur à celui a_0 de l'hydrogène. L'impureté a donc créé un état lié dans le gap très près du bas de bande de conduction (0,044 eV pour P dans Si où $E_g = 1,17 \text{ eV}$) et de grande extension spatiale ($\approx 100 \text{ \AA}$). Il est très facile d'exciter thermiquement l'électron supplémentaire dans la bande de conduction. On a créé un niveau donneur.

Un raisonnement identique montre qu'une impureté trivalente crée un état lié dans le gap proche du haut de la bande de valence prêt à accepter un électron (Figure 1).

Nous serons amenés à présenter des semiconducteurs dopés par N_d donneurs et $N_a = K N_c$ accepteurs par unité de valence. K est le facteur de compensation et varie de 0 à 1. A température suffisamment basse, dans un tel semiconducteur, les accepteurs ont tous capturé un électron et sont chargés négativement tandis que N_a donneurs sont vides et chargés positivement et $N_d - N_a$ donneurs sont

occupés et neutres.

On a donc une très belle illustration du potentiel aléatoire d'Anderson.

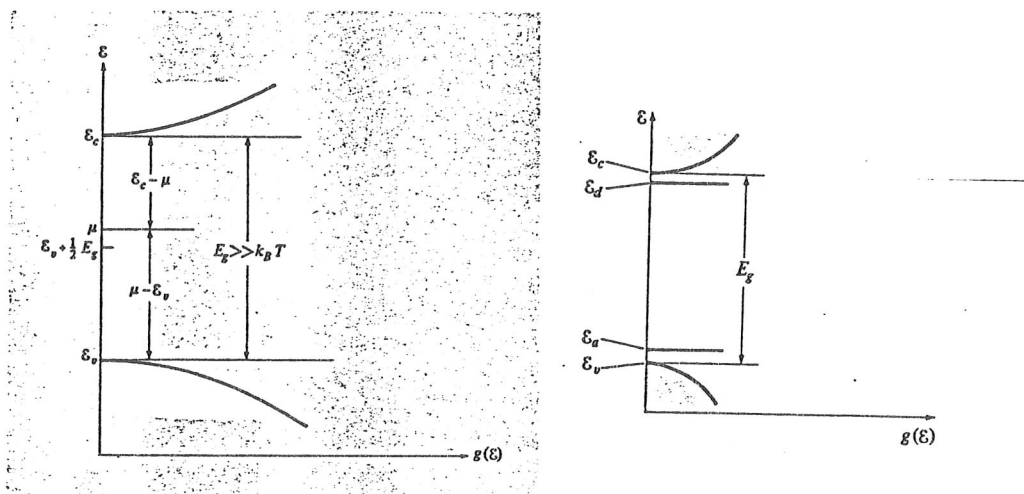


Figure 1

Semiconducteur cristallin non dopé (à gauche) et dopé (à droite).

b) Concentration critique de Mott - Transition de Mott

Considérons pour simplifier, un semiconducteur non compensé comportant $n = N_d$ impuretés. Lorsque les impuretés sont très diluées les fonctions d'onde ne se recouvrent pas, les niveaux d'impuretés sont semblables à des niveaux atomiques, l'état à 1 électron est séparé de l'état à deux électrons sur le même site par la répulsion coulombienne intraatomique (énergie de Hubbard), le système est isolant. Lorsque la distance entre impuretés diminue, les fonctions d'onde d'impuretés voisines se recouvrent et les niveaux s'élargissent en bande dont l'une est pleine et l'autre vide puisqu'il n'y a qu'un électron disponible par site. Le système reste isolant jusqu'à ce que les bandes se croisent à une concentration critique n_c donnée par Mott. Alors le système devient métallique.

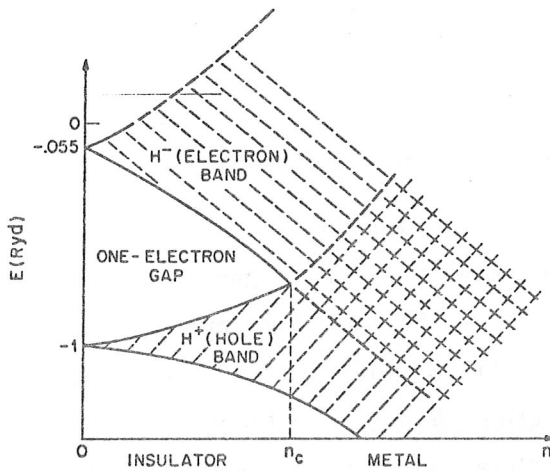
$$n_c^{1/3} a^* = 0,25$$

où a^* est le rayon de la première orbite de Bohr. On notera que $n_c^{-1/3}$ est la distance moyenne entre impuretés.

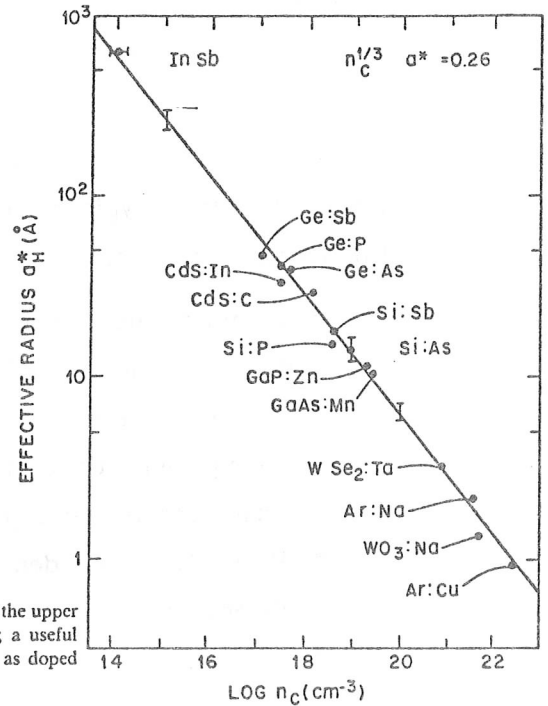
Le raisonnement précédent est illustré par la figure 2a (Milligan et al., 1985) où l'on suppose rapprocher des atomes

d'hydrogène régulièrement répartis.

Le succès de ce critère simple est illustré de façon spectaculaire par la figure 2b (8 ordres de grandeur en concentration critique !).



Schematic diagram of the electron (H^-) and hole (H^+) bands (also referred to as the upper and lower Hubbard bands) for a lattice of hydrogen atoms, as a function of density; a useful diagram for locating n_c though incomplete in its description of random systems such as doped semiconductors.



Mott criterion illustrated for a variety of systems (Edwards and Sienko 1978)

Figure 2a

Figure 2b

Le lecteur s'étonnera sans doute que la notion de désordre si patiemment introduite précédemment soit absente de ce paragraphe. Dans la description que nous venons de faire, ce n'est pas le désordre qui est responsable de l'état isolant, mais la répulsion coulombienne qui interdit de mettre deux électrons sur le même site. Il s'agit d'un isolant et d'une transition isolant-métal de Mott. (voir Mott, 1974). Les travaux de ces dix dernières années ont clairement montré qu'on ne peut pas faire l'économie des interactions coulombiennes dans la description de la transition d'Anderson qui a d'une certaine manière aussi les caractères d'une transition de Mott.

c) Le "gap de Coulomb" dans l'isolant d'Anderson

Ce paragraphe renforcera encore l'affirmation précédente tout en introduisant un important concept nouveau. Nous considérons le semiconducteur décrit à la fin du paragraphe IEa avec une concentration de donneurs de l'ordre de $n_c/10$ ($n_c = 3,87 \cdot 10^{18}$ atomes par cm^3 pour P dans Si).

On peut traiter directement le problème à N corps qui consiste à trouver simultanément les niveaux d'énergie ϵ_i et leur taux d'occupation n_i . En effet, dans un système avec interactions les niveaux d'énergie dépendent de leur peuplement.

Les différentes méthodes d'approche de ce problème sortent du cadre de cet exposé (voir Efros and Shlovskii, 1984). La figure 3 donne l'allure typique d'une bande d'impuretés dans l'isolant d'Anderson. Les remarques importantes sont :

- * Il existe un "trou" dans la densité d'états autour du niveau de Fermi (ou potentiel chimique μ), c'est le "gap de Coulomb"
- * Ce gap résulte des interactions de Coulomb et de plus l'annulation complète de la densité d'états au niveau de Fermi provient des interactions à longue distance.
- * Près de μ la densité d'état $g(\epsilon)$ varie comme $(\epsilon - \mu)^2$ à 3 dimensions.
- * La largeur de ce "trou" Δ peut s'estimer par $g(\Delta) = g_0$ où g_0 serait la densité d'états en l'absence d'interactions.

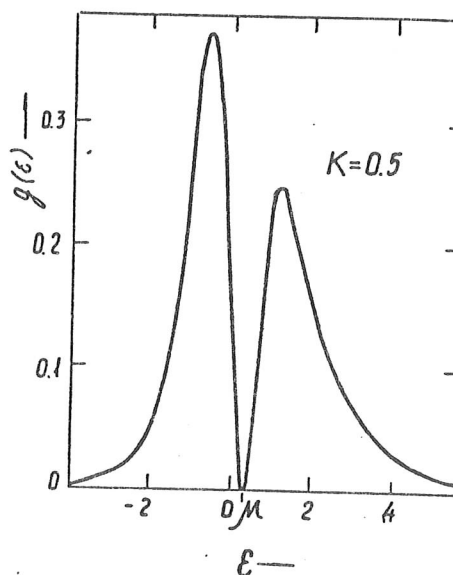


Figure 3

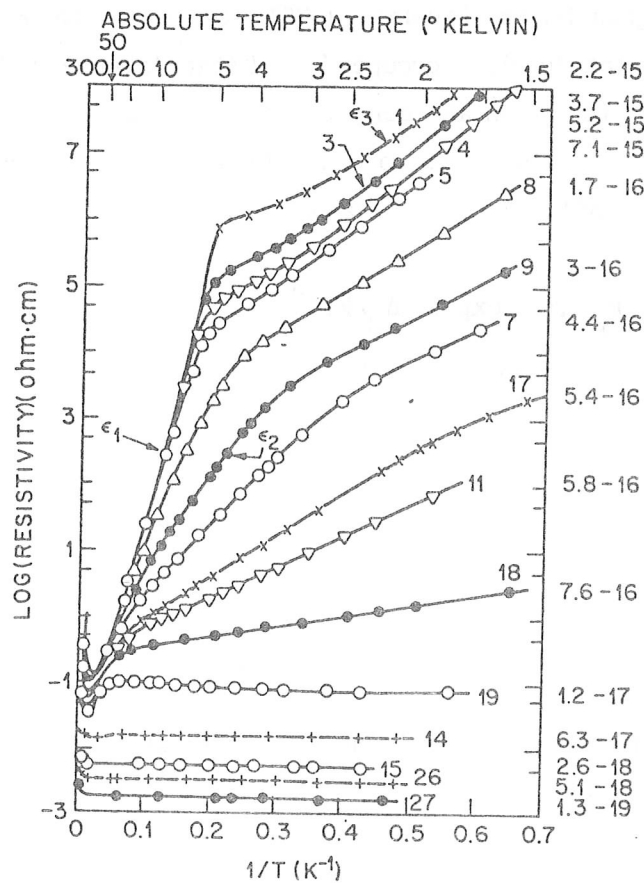
Density of states $g(\epsilon)$ as obtained by computer modelling at $K=0.5$.
After Efros et al. (1979).

d) *Les lois de conductivité dans l'isolant d'Anderson*

Le caractère localisé des états électroniques et la prise en compte des répulsions coulombiennes sont nécessaires pour comprendre les lois de la conductivité électrique dans l'isolant

d'Anderson. Tout ce qui précède montre qu'on doit se le représenter comme une bande d'états localisés dans l'espace occupés jusqu'au niveau de Fermi E_F (ou μ) où la densité d'états s'annule (fig. 3). Plus haut dans la bande, existe un bord de mobilité E_c au-dessus duquel les états électroniques sont étendus dans l'espace (paragraphe I.C).

La figure 4 (Milligan, 1985) montre la variété pour ne pas dire la complexité des différents comportements possibles de $\rho(T)$ suivant le dopage et la gamme de température. Limitons-nous pour l'instant aux échantillons isolants (1 à 18). La conductivité ne peut avoir lieu que par activation thermique d'électrons dans des états délocalisés ou par sauts thermiquement assistés entre états localisés.



Plot of $\log \rho$ versus $1/T$ for Ge:Ga. The sample with a donor concentration of $1.3 \times 10^{19} \text{cm}^{-3}$ is labeled as 1.3-19. Sample 19 is just on the metallic side of the transition ($n_c \sim 10^{17} \text{cm}^{-3}$). Samples with lower donor concentrations show evidence of activation energies as discussed in the text (Fritzsche 1955, 1978).

Figure 4

1) Activation dans un continuum d'états délocalisés

Lorsque la concentration est très faible (échant. 1 à 5 de la figure 4), on observe à haute température l'activation ε_1 dans la bande de conduction d'où $\sigma = \sigma_1 \exp(-\varepsilon_1/k_T)$.

A plus forte concentration (échant. 8 à 11 de la fig. 4), on observe l'activation ε_2 au-dessus du bord de mobilité E_c . Donc $\varepsilon_2 = E_c - E_F$ dépend de la concentration. Alors $\sigma = \sigma_2 \exp(-\varepsilon_2/k_T)$, Mott a montré que σ_2 s'identifie avec le fameux minimum de conductivité métallique σ_M sur lequel nous reviendrons.

2) Conduction par sauts

Ce problème a fait l'objet de travaux considérables. Il concerne le transport dans les semiconducteurs dopés mais aussi dans les métaux granulaires (Abelès, 1975). On veut faire passer un électron de l'état localisé occupé i à l'état localisé vide j . Si on part de l'état fondamental, cela coûtera une énergie Δ_{ij} qui sera fournie par les phonons. La probabilité d'un tel processus (Miller et Abrahams, 1960) est liée à la distribution de phonons et a la forme :

$$\nu_{ph} [1 - \exp(-\Delta_{ij}/kT)]^{-1}$$

Mais il faut simultanément que l'électron passe par effet tunnel du site i au site j , ce qui est possible par le recouvrement des fonctions d'onde avec une probabilité $\exp(-2r_{ij}^*/a^*)$ où r_{ij}^* est la distance entre les sites et a^* le rayon de Bohr de l'état lié, ou une longueur de localisation ξ en général. La probabilité du processus est donc :

$$W_{ij} = \nu_{ph} \exp(-2r_{ij}^*/a^*) [1 - \exp(-\Delta_{ij}/kT)]^{-1}$$

On peut montrer que ce problème est équivalent à un réseau de résistances aléatoires et peut se traiter en terme de percolation de liens (Ambegaokar et al., 1971). La forme fonctionnelle de $\sigma(T)$ dépend là encore du domaine de concentration. Si les niveaux d'énergie sont déterminés (c'est-à-dire non aléatoires dans l'espace ce qui est le cas des faibles concentrations), alors

$$\sigma = \sigma_3 \exp(-\varepsilon_3/kT)$$

ce qui est la situation basse température des échantillons 1 à 5 de la figure 4.

En revanche, pour des concentrations juste au-dessous de n_c , les énergies des états localisés sont très aléatoires mais on peut supposer que la densité d'états au niveau de Fermi est constante. Alors :

$$\sigma_{VRH}^1 = \sigma_{01} [\exp - (T_{01}/T)^{1/4}]$$

C'est la fameuse loi de "variable range hopping" de Mott (Mott, 1968). Physiquement, elle résulte de la compétition entre les deux probabilités qui figurent dans W_{ij} : plus l'électron peut sauter loin, plus il a de chance de trouver un site très proche en énergie. Ce processus suppose qu'il existe de nombreux sites pas très éloignés (fortes concentrations) et sera plutôt favorable à basse température lorsque les phonons se font rares.

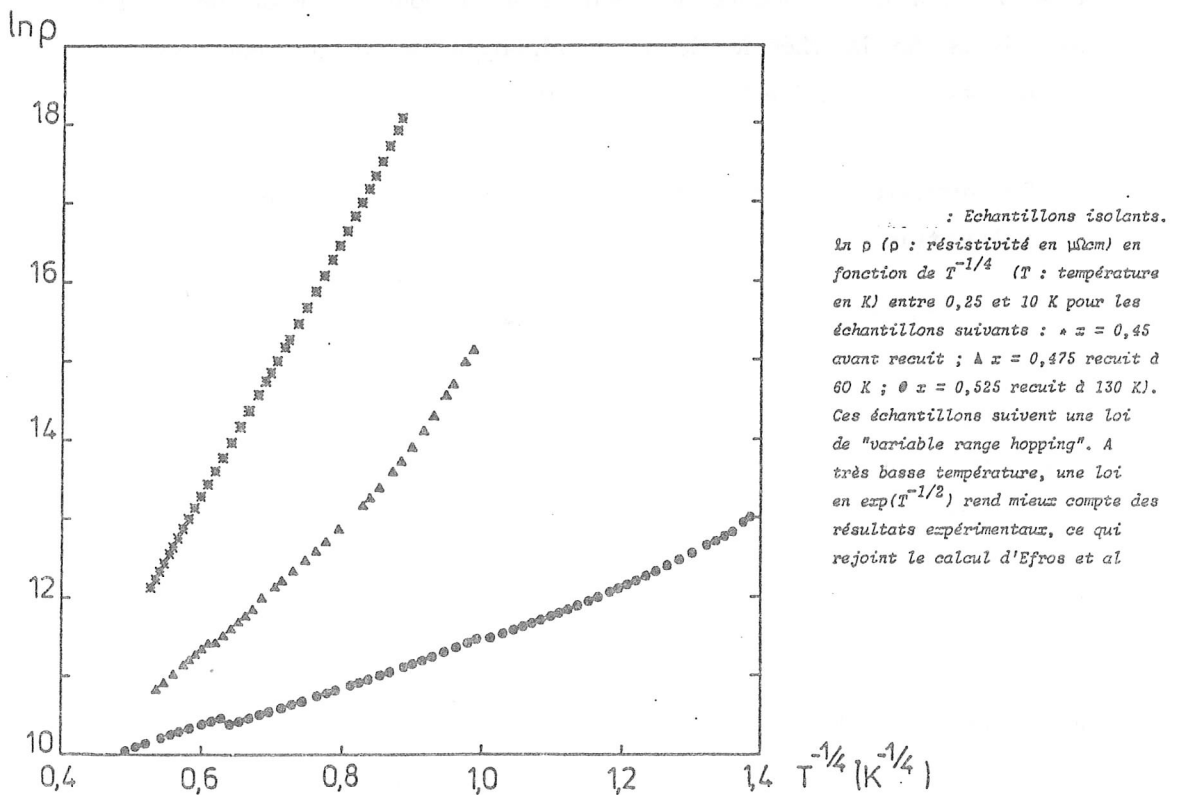


Figure 5 - $Al_x Ge_{1-x}$ (préparé par codéposition à 5 K)

L'hypothèse de la constance de la densité d'états près de E_F n'est pas vérifiée si on prend en compte le gap de coulomb $\Delta(I_c)$. Cet effet deviendra important pour $kT < \Delta$ donc à très basse tempéra-

ture. Efros et Shklovskii (1975) ont montré que la loi de "variable range hopping" devient :

$$\sigma_{VRH}^2 = \sigma_{02} [\exp - (T_{02}/T)^{1/2}]$$

On peut observer un passage de la loi $T^{-1/4}$ à la loi $T^{-1/2}$ en fonction de la gamme de température comme illustré sur la figure 5 (Lesueur, 1985)

II - METAUX DESORDONNES

De l'autre côté de la transition métal isolant, pour $n > n_c$ dans les semiconducteurs dopés par exemple, le niveau de Fermi est au-dessus du bord de mobilité et une conductivité finie σ_0 existe à $T = 0$. Bien des concepts nécessaires à la compréhension de la TMI sont issus de la théorie de la localisation faible que nous présenterons avant de décrire le côté métallique près de la transition.

A) Conductivité des métaux dans l'approximation du temps de relaxation

En l'absence d'écart à la périodicité du potentiel ionique la résistivité ρ d'un métal est nulle. En revanche, tout écart à cette périodicité crée un centre de diffusion dont l'effet peut se concevoir comme un choc qui perturbe la vitesse acquise. Si τ est le temps moyen entre deux chocs successifs (temps de relaxation), la conductivité est donnée par :

$$\sigma = \frac{1}{\rho} = \frac{ne^2\tau}{m}$$

où n est le nombre de porteurs par unité de volume, m et e leur masse et leur charge. On définit le libre parcours moyen $\ell = v_F \tau$.

Il y a deux types de chocs très différents. Les chocs inélastiques (indice i) avec échange d'énergie. Après un tel choc, l'électron a changé d'état d'énergie et donc "oublié" totalement son état antérieur. C'est le cas pour l'interaction électron-phonons réels ou pour les interactions électron-électron ou toute collision avec les excitations existant dans le métal à la température considérée T . La dépendance de τ_i avec T est une loi de puissance T^p

où ρ dépend du type d'excitation et de la dimensionnalité du système. Elle fixe la loi de dépendance de ρ_1 avec T . Le nombre d'excitations et donc ρ_1 tendent vers zéro quand T tend vers zéro.

Les chocs élastiques (indice e), en revanche, conservent l'énergie ; la fonction d'onde de l'électron est seulement déphasée et il y a une corrélation entre les phases avant et après le choc. Ces chocs de fréquence $1/\tau_e$ conduisent à une résistivité ρ_e qui est la résistivité résiduelle à $T = 0$. La loi de Matthiessen suppose l'additivité des différentes contributions à ρ .

Notons dès maintenant que la "mémoire" de phase au cours des chocs élastiques permet des interférences quantiques entre ondes multiples diffusées qui seront à la base des phénomènes de localisation d'Anderson.

B) La localisation faible - Interférences quantiques.

Expérimentalement, on constate que pour des résistivités supérieures à environ $150 \mu\Omega\text{cm}$, la loi de Matthiessen ne s'applique qualitativement plus en ce sens que le coefficient de dépendance de la résistance avec la température (TCR) change de signe pour être négatif à basse température : la résistivité passe par un minimum. Le comportement est réminiscent de celui d'un isolant. L'origine physique de ce phénomène a émergé progressivement de 1975 à 1979. Il est lié aux interférences quantiques entre les fonctions d'ondes électroniques que l'on peut qualitativement comprendre comme suit. En présence de désordre le mouvement diffusif des électrons est caractérisé par le coefficient de diffusion D . La probabilité de trouver un électron, initialement en $\vec{r} = 0$ au temps $t = 0$, en \vec{r} au temps t est (à 3D) :

$$P(r,t) = (4\pi Dt)^{-3/2} \exp(-r^2/4Dt).$$

Si l'on connaît D , on calcule la conductivité par la relation d'Einstein $\sigma = e^2 D(dn/d\mu)$ où n est le nombre d'électrons par unité de volume et μ leur potentiel chimique. Evaluons la probabilité pour un électron d'aller de A en B lorsque la distance AB est grande devant ℓ . En mécanique classique $P_{cl}(AB)$ est la somme des probabilités de tous les chemins allant de A à B. En mécanique quantique $P_Q(AB)$ est le carré de la somme des amplitudes de probabilité de

tous les chemins possibles. A cause du désordre, il n'y a pas de corrélation de phase entre les amplitudes et $P_{cl}(AB) = P_Q(AB)$. Ceci est cependant inexact pour les chemins présentant une boucle fermée en M. A un tel chemin on peut associer celui pour lequel la boucle est décrite en sens inverse. Les deux amplitudes sont alors en phase au point M et pour cette boucle $P_Q(M,M) = 2P_{cl}(MM)$. Donc, du fait des interférences quantiques, la probabilité pour un électron de repasser au même point est plus grande que la probabilité classique. Elle est exactement deux fois celle-ci si la cohérence de phase est conservée sur toutes les boucles que l'on peut construire à partir de ce point. Il est clair que ce processus -d'origine purement quantique- est un processus de confinement, de localisation. Il est clair aussi qu'il dépend de l'échelle L de la taille maximale des boucles sur lesquelles la cohérence de phase est conservée : plus cette taille est grande, plus la localisation est forte. A T = 0, L est la taille de l'échantillon, mais à T finie apparaissent des processus inélastiques à la fréquence $1/\tau_1 \propto T^p$ où l'index p dépend du processus inélastique (choc électron-électron, électron-phonon, etc...) et de la dimensionalité. On peut lui associer une longueur inélastique $L_1 = \sqrt{D\tau_1}$ qui fixe la taille maximale des boucles avec interférence quantique (IQ) et donc la taille effective sur laquelle porte la mesure. L_1 étant une fonction décroissante de T, la localisation et donc la résistivité décroît lorsque T croît. Ainsi s'explique très simplement les coefficients négatifs de dépendance de ρ avec T dans les systèmes désordonnés à basse température (Mooij 1973). On peut ainsi comprendre l'effet du champ magnétique, du spin orbite, des impuretés magnétiques, etc...

Il est important de noter que c'est le coefficient de diffusion D qui est affecté et à travers lui toutes les propriétés de transport. Fondamentalement, c'est D qui dépend de l'échelle et qui tend vers zéro à grande échelle à la TMI.

C) La localisation faible - Interactions de Coulomb

Nous avons discuté en I.B le traitement des interactions de Coulomb dans un métal, dans le cadre de la théorie des liquides de Fermi et nous avons signalé qu'en présence de désordre ce modèle ne pouvait plus s'appliquer rigoureusement. C'est Altshuler et

Aronov (1979) qui montrèrent les premiers que dans un gaz d'électrons en interaction, le désordre conduit à de fortes singularités au niveau de Fermi. L'effet de ces singularités sur les propriétés physiques est du même ordre de grandeur que celui des interférences quantiques. Dans l'étude des systèmes désordonnés, on trouve toujours ces deux aspects : interférences quantiques (IQ) (ou localisation proprement dite) et effet du désordre sur les interactions de Coulomb encore appelées interactions électron-électron (IEE). Ils sont compétitifs, complémentaires et peuvent être traités indépendamment, sauf en ce qui concerne la compréhension complète de la TMI. Dans la limite du désordre faible, les calculs en perturbation qui constituent la théorie de la localisation faible, ont permis d'expliquer un nombre considérable d'observations expérimentales. Dans cette limite, nous donnons en annexe, sur quelques exemples, les caractéristiques essentielles des deux aspects.

On ne peut pas donner de l'effet du désordre sur les IEE une image aussi parlante que celle que nous avons rapportée pour la localisation due aux IQ. Nous insistons sur le fait que ces effets sont directement dus au caractère diffusif des mouvements électroniques, indépendamment des IQ. Ce caractère diffusif augmente le temps pendant lequel les électrons demeurent dans une région donnée de l'espace, ce qui accroît leurs interactions. Dès 1974, Schmid (Schmid, 1974) avait montré que la fréquence de collision entre électrons $1/\tau_{ee}$ était considérablement augmentée en présence de désordre (2 à 3 ordres de grandeur dans les expériences usuelles de localisation). Schématiquement, la diffusion change l'équilibre entre les termes d'échange (dus au principe d'exclusion de Pauli) et les termes de Hartree (interaction coulombienne directe) dans les calculs du gaz d'électrons en interaction.

D) Interactions de Coulomb près de la TMI du côté métallique : le pseudo gap.

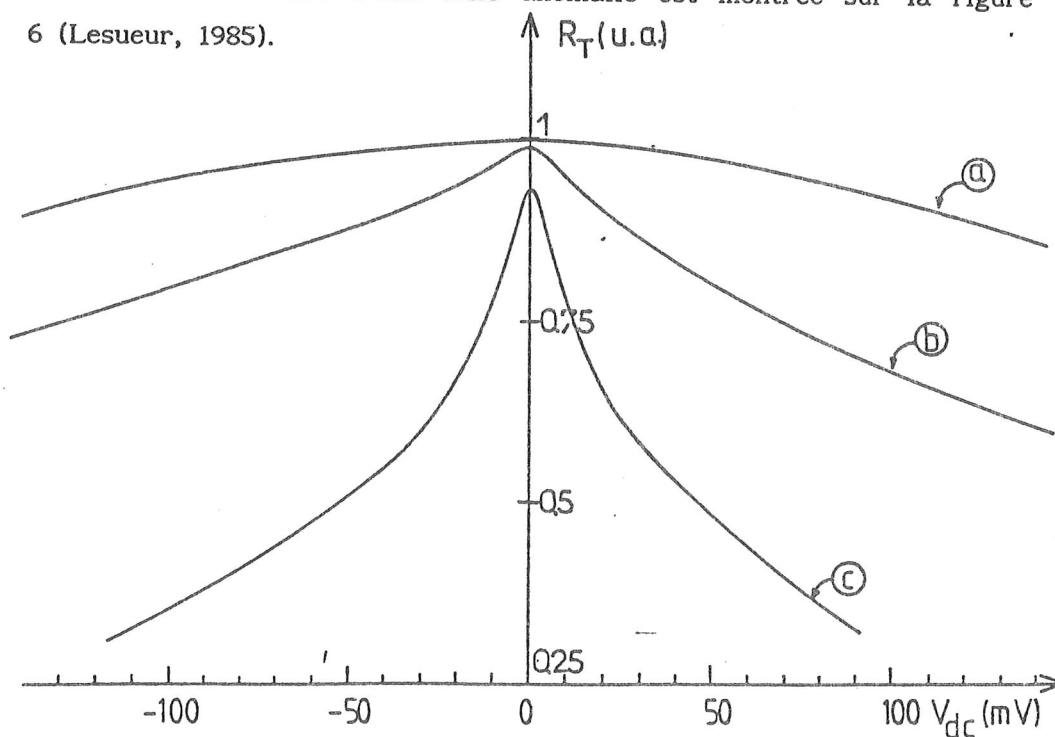
La conséquence la plus surprenante des calculs d'Altshuler et Aronov, développée notamment par Mc Millan (1981) est l'apparition avec le désordre d'une anomalie de la densité d'états à un électron de la forme :

$$N(E) = N(0) [1 + (E/\Delta)^{1/2}] \quad \text{à 3 dimensions.}$$

Cette anomalie est le prémice de ce qui deviendra le gap de Coulomb dans l'isolant, c'est pourquoi nous le représenterons par le même symbole Δ . Il convient de faire les deux remarques importantes suivantes :

1) La densité d'états dont il est question ici est la densité d'états non relaxée, celle qui répond à la question : combien y-a-t-il d'états instantanément disponibles pour ajouter ou enlever un électron au métal. Il convient de la distinguer soigneusement de la densité d'états thermodynamique $dn/d\mu$ qui intervient dans toutes les propriétés pour lesquelles le système peut faire une moyenne sur une échelle finie d'énergie (chaleur spécifique, conductivité thermique, effet Hall, longueur d'écran, etc...). On ne peut atteindre $N(E)$ que par une mesure quasi-instantanée qui est typiquement réalisée dans l'effet tunnel.

L'existence d'une telle anomalie est montrée sur la figure 6 (Lesueur, 1985).



: Résistance tunnel R_T (en unités arbitraires) en fonction de la polarisation V_{dc} entre -100 meV et $+100$ meV pour une barrière tunnel $Al/Al_2O_3/$ système étudié. Quand le système étudié est un métal normal, on observe la courbe a. Les courbes b et c correspondent à des échantillons $Al_{1-x}Ge_x$. On observe une anomalie de ces courbes autour de la polarisation nulle d'autant plus marquée que x est petit. On interprète cette anomalie grâce au modèle d'Altschuler et Aronov, comme une baisse de la densité d'états du niveau de Fermi due au renforcement des interactions de Coulomb.

2) Le mot "pseudo gap" ne doit pas renvoyer à la représentation habituelle qu'on se fait d'un gap ; il donne plutôt une échelle en énergie de l'anomalie de densité d'états. On trouve que Δ varie comme σ_0^2 . Il est donc grand pour des métaux faiblement désordonnés et $N(E)$ est peu perturbée tandis qu'il tend vers zéro à la TMI en même temps que $N(0)$ ce qui donne une anomalie violente pour $N(E)$.

E) La conductivité métallique près de la TMI

Les théories sont beaucoup moins élaborées que dans l'isolant ; elles résultent le plus souvent d'une extrapolation des propriétés démontrées en localisation faible. Il y a un accord qualitatif avec les résultats expérimentaux qui sont encore peu nombreux. Nous donnerons deux exemples :

1) semiconducteurs dopés au-dessus de n_c

$$\sigma(T) = \sigma_0 + m T^{1/2} + BT$$

Le terme BT provient de la localisation (IQ) et le terme $m T^{1/2}$ des interactions de Coulomb (IEE) ; c'est ce dernier qui domine à basse température.

Un aspect original de ce terme et que m peut être positif ou négatif suivant le dopage, ce qu'explique bien l'approche d'Alshuler et Aronov. Un exemple de ce comportement ($m < 0$) paradoxal est donné figure 7.

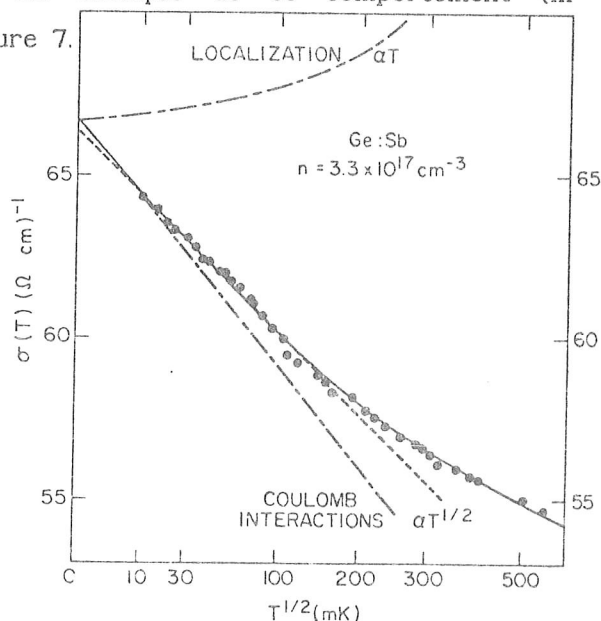


Figure 7
(Milligan et al. 1985)

$\sigma(T)$ plotted against $T^{1/2}$ for a barely metallic sample of Ge:Sb. The data have been analyzed in terms of a linear T localization term and a $T^{1/2}$ Coulomb interaction term. The two lower dashed lines assume different values of $\sigma(0)$. The solid line is a best fit to the data using both the T and $T^{1/2}$ terms
(Thomas et al. 1982b).

2) Les semiconducteurs amorphes dopés.

En accord qualitatif avec la théorie de Mc Millan (1981) on trouve :

$$\sigma = \sigma_0 + \sigma(T)$$

où $\sigma(T)$ varie comme $T^{1/2}$ et est indépendant de σ_0 et toujours positif dans ces systèmes. (Bishop et al., 1983 sur aNbSi, Lesueur et al., 1985 sur aAlGe). Ce terme est directement relié à Δ mesuré par effet tunnel $\sigma(T) = \sigma_0(kT/\Delta)^{1/2}$ avec $\Delta \sim \sigma_0^2$.

On notera avec intérêt qu'une telle loi entraîne une divergence de $\left(\frac{\partial\sigma}{\partial T}\right)_{T \rightarrow 0}$. Dans la recherche de thermomètres sensibles à très basse température, on a ici l'exemple rare d'un métal présentant une forte variation avec $T \rightarrow 0$. Les figures 8 et 9 en donnent une illustration en terme de résistivité (Lesueur, 1985 ; Bishop et al., 1985).

Nous noterons enfin que les lois que nous venons de décrire cessent d'être valables au voisinage immédiat de la transition. Mais de toutes manières, on s'attend bien à ce que des résultats extrapolés à partir de calculs en perturbation cessent d'être valables dans la région critique près d'une transition.

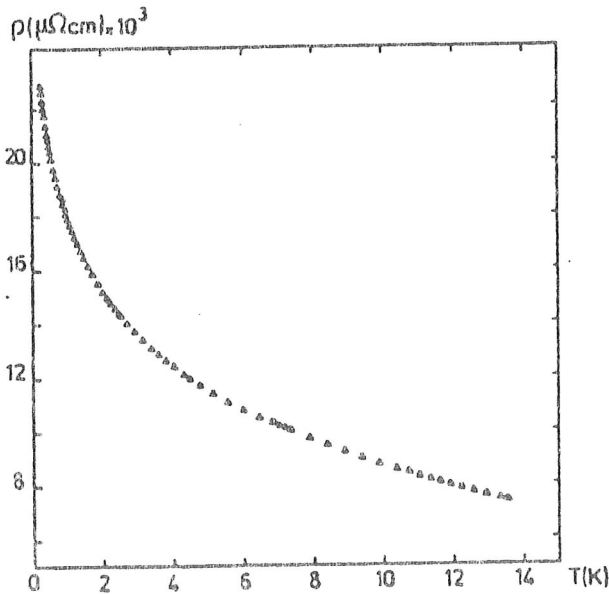
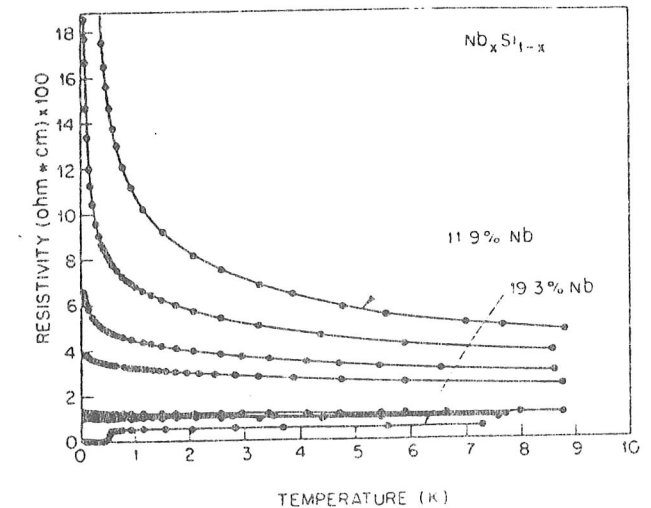


Figure 8 : $\text{Al}_{0,5}\text{Ge}_{0,5}$
(Lesueur 1985)
Echantillon métallique



Resistivity as a function of temperature for various concentrations

Figure 9 : (Bishop et al., 1985).
Echantillons métalliques sauf le plus résistif.

III - LA TRANSITION

A) Le concept de Mott de minimum de conductivité métallique

Dans l'approximation du temps de relaxation (voir II.A), on a $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m}$ avec $\tau = v_F \ell$. Dans un schéma d'électrons libres $v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$ et $k_F \sim \frac{1}{d}$ où d est la maille du réseau de donneurs d'où :

$$\sigma = \frac{e^2}{\hbar d} \cdot \frac{\ell}{d} \quad \text{où} \quad \frac{e^2}{\hbar} \approx (4000 \Omega)^{-1} \text{ a la dimension d'une conductance.}$$

Ioffe et Rigel (1960) ont fait remarquer que ℓ , le libre parcours entre deux chocs ne pouvait pas être inférieur à d , la distance entre centres diffuseurs. Mott a formalisé ce critère en montrant qu'un métal ne pouvait avoir une conductivité σ_0 à $T = 0$ inférieure à $\sigma_M \approx 0,026 \frac{e^2}{\hbar d}$.

De plus, comme nous l'avons vu (I.C.1) σ_M est le préfacteur dans le terme de conductivité provenant de l'activation de porteurs au-dessus du bord de mobilité. La figure 10, mais aussi la figure 4, rendaient le point de vue de Mott très convaincant.

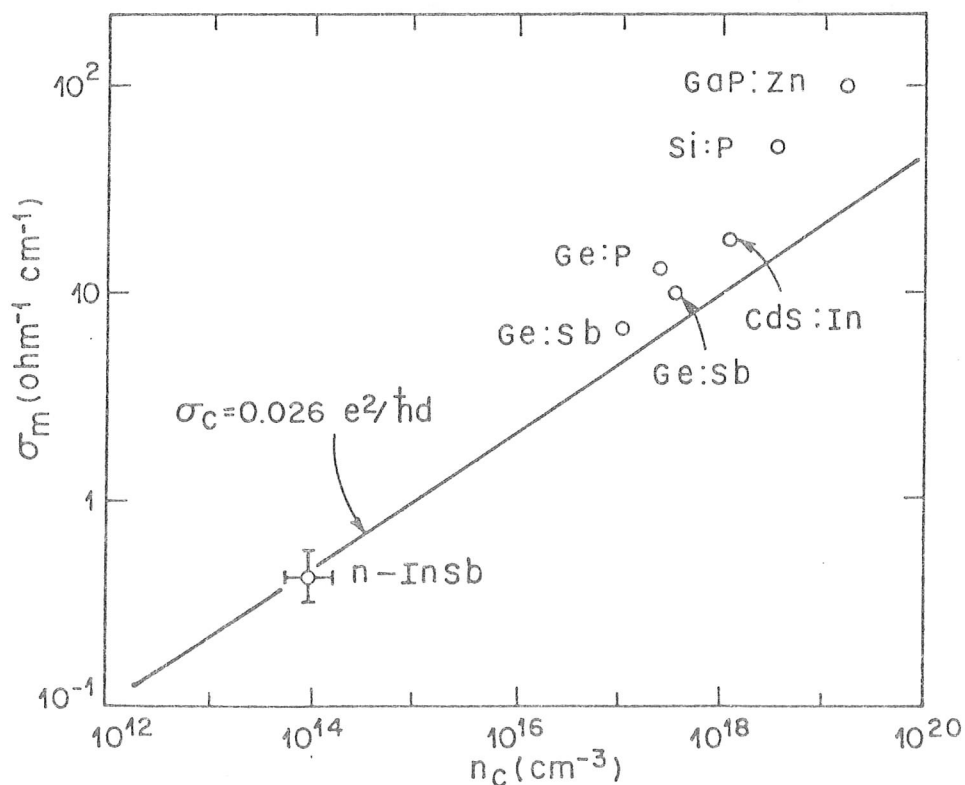


Figure 10 : (Milligan, 1985)

La théorie d'échelle de la transition (1979) que nous exposerons plus loin est incompatible avec ce concept et il a fallu des expériences extrêmement soignées à très basses températures (quelques mK) pour mettre en évidence des conductivités métalliques inférieures à σ_M (figures 11 et 12).

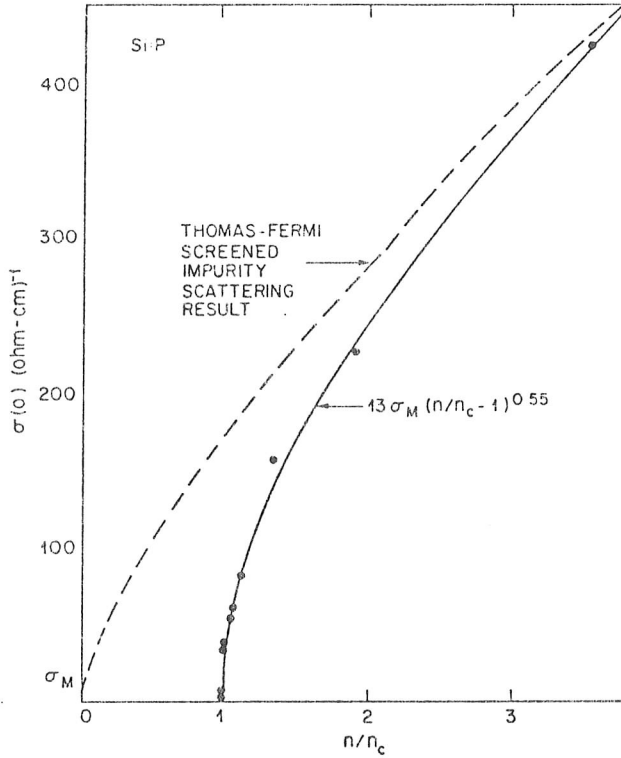


Figure 11 (Rosenbaum et al.)

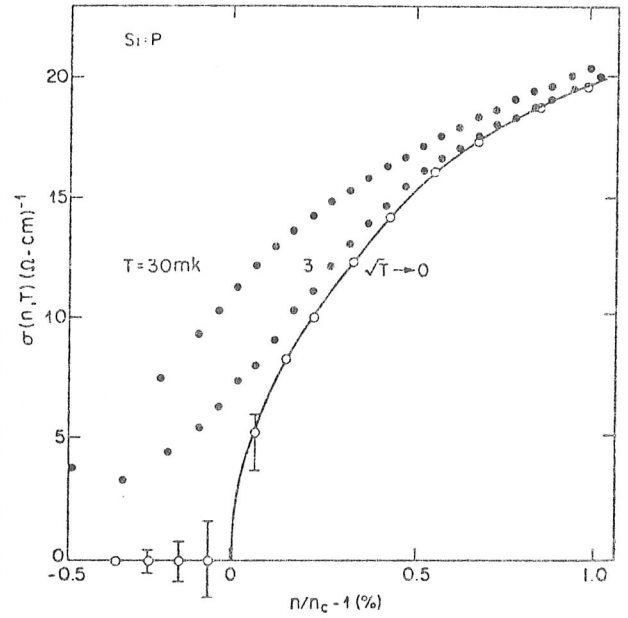


Figure 12 (Thomas et al.)

Conductivité à très basse température de SiP en fonction de la concentration normalisée à la concentration critique $n_c = 3,7 \times 10^{18} \text{ cm}^{-3}$ et $\sigma_M = 20 (\Omega\text{cm})^{-1}$. D'après Milligan et al. (1985).

B) Théorie d'échelle de la transition Métal Isolant d'Anderson

Thouless a permis de réaliser progressivement à partir de 1974 que les propriétés de transport d'un métal désordonné dépendent de l'échelle à laquelle on les mesure. Les propriétés sont donc renormalisées lorsque l'on varie la taille L du système. Thouless a de plus montré que cette renormalisation peut se faire au moyen d'un seul paramètre : la conductance $g = G / \left(\frac{e^2}{h} \right)$ de l'hypercube de taille L . Puis Wegner a montré (1976) que la TMI relève de la théorie générale des phénomènes critiques si $\sigma(T = 0)$ tend continuellement vers zéro c'est-à-dire s'il n'y a pas de minimum de conductivité métallique. En 1979, Abrahams, Anderson, Licciardello et Ramakrishnan ont combiné les idées d'échelle de Thouless avec des

résultats obtenus par perturbation dans la limite du désordre faible, pour formuler une théorie analysant les comportements de la conductivité, depuis le métal pur jusqu'à l'isolant d'Anderson en fonction de la dimensionnalité spatiale du système. Les résultats sont présentés de manière synthétique sur la figure 13.

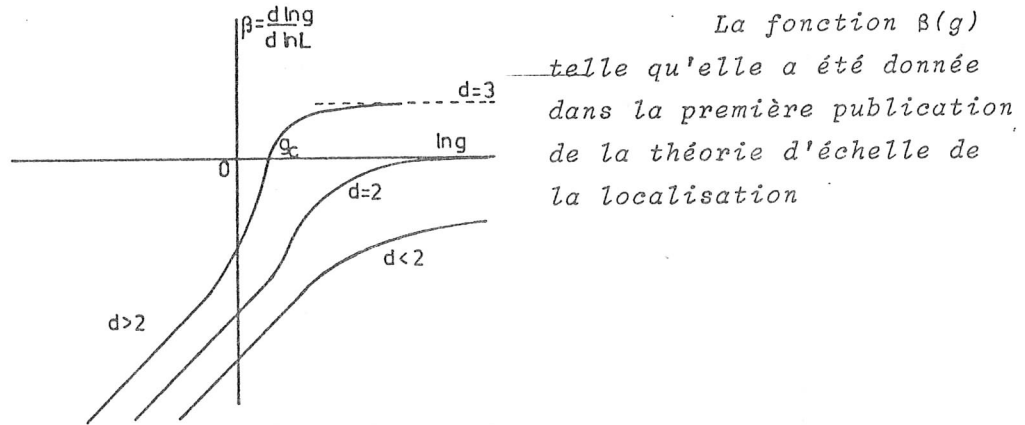


Figure 13

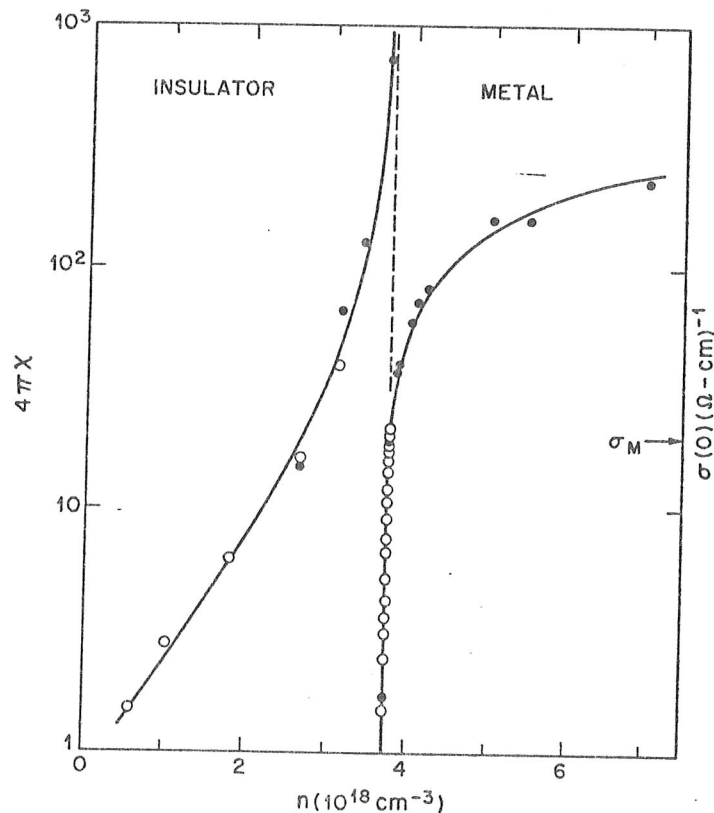
Soit g la conductance (en unité e^2/\hbar) de l'hypercube de taille L . La dépendance de g avec L est donnée par la fonction $\beta(g)$. Supposons que l'on connaisse la conductance g_0 du matériau à l'échelle L_0 (la plus petite échelle sur laquelle on peut définir g étant ℓ). Si $\beta(g_0)$ est négatif g est une fonction décroissante de L et un échantillon de taille suffisamment grande sera isolant (à $T=0$) avec une longueur de localisation $\xi_\ell(g_0, L_0)$. C'est toujours le cas à une et deux dimensions pour lesquelles il n'y a donc pas de vrai métal quel que soit le désordre (à $T = 0$ toutes les fonctions d'onde sont localisées). A 3D, il existe une conductance critique g_c . Si $g_0 < g_c$, $\beta(g)$ est négative comme précédemment. En revanche, si $g_0 > g_c$, β est positive, g croît avec L et finit par atteindre pour $L \sim \xi_c$ des valeurs où $\beta \approx 1$, ce qui entraîne $g = \sigma L$ qui est l'expression de la loi d'Ohm. ξ_c qui est l'échelle spatiale séparant un comportement normal d'un comportement critique est appelée la longueur de corrélation.

Concentrons notre attention sur le cas 3D pour lequel la théorie prédit l'existence d'une TMI. Il n'y a pas de conductivité métallique minimum σ_M : du côté métallique, près de g_c

$$\sigma(L \rightarrow \infty) = \sigma_c \left(\frac{g_0 - g_c}{g_c} \right)^\nu = \sigma_c \varepsilon^\nu \text{ où } \sigma_c \text{ est en principe de l'ordre}$$

de σ_M et $\varepsilon = (g_0 - g_c)/g_c$ mesure la "distance à la transition" en fonction des conductances mesurées à l'échelle du libre parcours moyen ℓ ; ν est un exposant critique de l'ordre de 1. Notons que c'est à l'échelle microscopique (la plus petite échelle possible étant le libre parcours moyen ℓ) que tout système a sa conductivité maximale. En approchant du point critique $g = g_c$, ξ_ℓ et ξ_c divergent. A l'échelle microscopique (si $L < \xi_\ell$ ou ξ_c) on ne peut pas faire la différence entre un métal et un isolant. Lorsque $g_0 \approx g_c$, une petite variation de la conductance locale g_0 peut changer la nature du système.

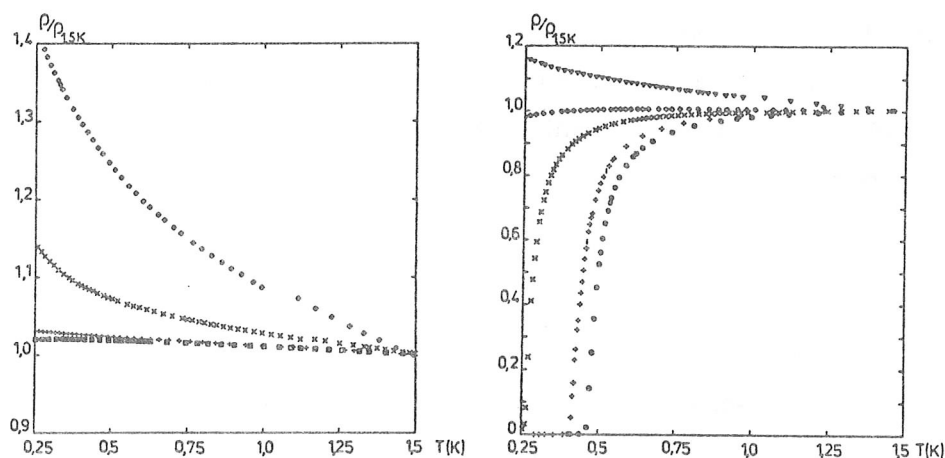
La figure 14 illustre bien la TMI sur le système SiP en fonction du dopage ou, très près de la transition, d'une contrainte uniaxiale qui change n_c . Ce système montre un exposant critique $\nu = 1/2$ qui a fait couler beaucoup d'encre.



Divergence of the donor dielectric susceptibility, $4\pi\chi$, and conductivity $\sigma(0)$ extrapolated to $T=0$ as the MI transition is approached from below and above, respectively. The system is Si:P. The open circles for $4\pi\chi$ are from IR studies while the closed circles are from direct measurements at 400 MHz. The open circles for $\sigma(0)$ were obtained for samples under stress. The solid lines for $4\pi\chi$ and $\sigma(0)$ are best fits using eq. (6.4) and eq. (6.5) respectively (Hess et al. 1982).

Figure 14 : d'après Milligan et al. (1985)

Sur la figure 15 est montré le passage progressif de la TMI par des recuits basse température ($T_A < 100$ K) d'AlGe codéposés sur substrat froid (5K). Les recuits ne produisent que de minimes relaxations locales préservant la nature amorphe du système comme on peut l'observer sur des échantillons loin de la TMI de par leur composition. Mais pour des échantillons près de la TMI ces faibles modifications de la résistivité locale produisent une TMI à l'échelle macroscopique (Lesueur, 1985). Nous trouvons $\nu = 1$ conformément à la théorie. Ces expériences montrent qu'il existe des systèmes dont on peut "ajuster" la distance à la TMI par une faible modification de l'arrangement local par recuit ou irradiation.



. Evolution de la dépendance de la résistivité avec la température, normalisée par sa valeur à 1,5 K après différents recuits de 15 mn à des températures T_A croissantes. A gauche, $Al_{0,5}Ge_{0,5}$ est avant recuit très près de la TMI et celle-ci est franchie après un recuit à 40°K. A droite, $Al_{0,525}Ge_{0,475}$ est initialement plus loin de la TMI et montre la supraconductivité. La TMI est franchie après un recuit à 100°K. Pour chaque figure, on rencontre de bas en haut les courbes après recuit à 5 K (c'est-à-dire sans recuit) 20 K, 40 K, 60 K et 100 K (courbe de droite seulement) respectivement.

Figure 15 : d'après Dumoulin et al. (1987)

CONCLUSION

Ce rapide tour d'un vaste horizon montre que les concepts introduits dans l'étude de la TMI de Mott-Anderson sont omniprésents dans la plupart des phénomènes de transport à très basse température qui peuvent servir de thermomètre. Une variété considérable de lois $\sigma(T)$ sont accessibles du côté isolant ou du côté métallique. L'originalité de cette transition réside dans le fait que le caractère métallique ou isolant dépend de l'échelle sur laquelle on l'observe. Un isolant pour la conductivité macroscopique ($\sigma_0 = 0$) assez près de la TMI conserve de forts caractères métalliques à l'échelle microscopique telles qu'une constante de Hall ou une chaleur spécifique électronique finies. Nous suggérons que cette dualité peut éventuellement être exploitée en bolométrie basse température.

Remerciements

Je remercie spécialement J. Lesueur et P. Nédellec pour de fructueuses discussions et leur collaboration à l'élaboration de ce cours, ainsi que Monique Perrin pour sa réalisation.

ANNEXE

Comparaison des effets des interférences quantiques et des interactions coulombiennes dans le cadre de la localisation faible

Interférences quantiques (IQ)	Interactions Coulombiennes (IEE)
Dépendance de la conductivité à 2 et 3 dimensions (noté 2D et 3D) $\sigma_{2D}^{IQ}(T) = \sigma_0 + \frac{p}{2} \frac{e^2}{4\pi^2} \ln \left \frac{T}{T_0} \right $ rappelons que $\tau_i \propto T^{-p}$	$\sigma_{2D}^{IEE}(T) = \sigma_0 + \frac{e^2}{4\mu\pi^2} (2 - 2F) \ln \left \frac{T}{T_0} \right $ F est un paramètre lié à l'écran- tage compris entre 0 et 1

On voit que les deux expressions sont semblables. Les deux contributions sont nécessaires à l'interprétation des expériences. Au premier ordre elles sont additives. Pour les distinguer, il faut analyser la magnétorésistance /15/

$\sigma_{3D}^{IQ}(T) = \sigma_0 + \frac{e^2}{4\pi^2} \left(\frac{1}{a} \right) T^{p/2}$ où $L_i = aT^{-p/2}$	$\sigma_{3D}^{IEE}(T) = \sigma_0 + \frac{e^2}{4\mu\pi^2} (2 - 2F) \sqrt{\frac{T}{D}}$ D coefficient de diffusion
---	--

A 3D p est toujours supérieur à 1 /17/ donc les IEE donnent toujours la contribution dominante à très basse température.

On observe un effet important des champs magnétiques faibles (quelques dizaines à quelques milliers de Gauss). Les boucles qui ensèrent un quantum de flux ne contribuent plus aux IQ : c'est un effet orbital et donc fortement anisotrope à 2D (épaisseur inférieure à L_i).

Les IQ ne donnent pas d'anomalie de densité d'états au niveau de Fermi.

Dans les métaux normaux /18/, il n'y a pas d'effet du champ magnétique tant que celui-ci n'a pas espacé les niveaux Zeeman des spins opposés d'une valeur supérieure à $k_B T$ (environ 1 Tesla vers 1 K). C'est un effet isotrope.

La densité d'états "à un électron" présente une anomalie au niveau de Fermi, E_F , en $\ln E$ à 2D et en \sqrt{E} à 3D où E est l'énergie comptée à partir de E_F . Cet effet est la signature la plus directe des effets d'IEE.

REFERENCES

- Abeles B., P. Sheng, M.D. Coutts et Y. Arie, (1975)
Adv. Phys. 24, 407

- Altshuler B.L. et A.G. Aronov, (1979)
Solid. State Commun. 36, 115

- Ambegaokar V., B.I. Helperin et J.S. Langer, (1971)
Phys. Rev. B4, 261

- Anderson P.W. (1958) Phys. Rev. 109, 1492

- Bishop D.J., E.G. Spencer et R.C. Dynes, (1985)
Solid Stat. Electronics 28, 73

- Dumoulin L., J. Lesueur et P. Nédellec, (1987)
Helvetica Physica Acta 60, 86

- Efros A.L. et B.I. Shklovskii, (1985)
dans Electron-Electron interactions in disordered systems,
édité par A.L. Efros et M. Pollak, North-Holland (Amsterdam,
Oxford, New York, Tokyo)

- Ioffe A.F. et A.R. Regel, (1960) Prog. Semicond. 4, 237

- Lesueur J., (1985) Thèse Université Paris Sud, Centre d'Orsay

- Lesueur J., L. Dumoulin et P. Nédellec, (1985)
Phys. Rev. Lett. 56, 2355

- Mc Millan W.L. (1981), Phys. Rev. B24, 2739

- Miller A. et E. Abrahams, (1960) Phys. Rev. 120, 745

- Milligan R.F., T.F. Rosenbaum, R.N. Bhatt et G.A. Thomas, (1985)
dans Electron-Electron interactions in disordered systems,
édité par A.L. Efros et M. Pollak, North Holland (Amsterdam,
Oxford, New York, Tokyo)

- Mott N.F. (1968), J. Non. Cristalline Solide 1, 1

- Mott N.F. (1972), Phil. Mag. 26, 1015

- Mott N.F. (1974), Metal-Insulator Transitions
(Taylor and Francis, London)

- Schmid A. (1974), Z. Phys. 271, 251