Quantification de la conductance dans les nanofils

D’après document du Prof. Dr. Axel Lorke

Université de Physique Duisburg-Essen 2025

1. Introduction

Dans la description classique, les électrons sont considérés comme des particules dotées d’une énergie E et d’une quantité de mouvement $\vec{p} = m\vec{v}$. Toutefois à l’état particulaire, en mécanique quantique, ils doivent être décrits comme des ondes avec une fréquence f et une longueur d’onde λ selon la relation de De Broglie :

$$p = \frac{h}{\lambda} \qquad (1)$$

Le transport électronique dans un fil quantique suit ces principes fondamentaux et conduit à la quantification de la conductance.

2. Modélisation du Fil Quantique

Les fils métalliques très fins tels que les électrons ne peuvent pas se déplacer dans le sens transversal du fil, sont appelés "nanofils", "fils unidimensionnels", "fils de fer" ou "fils quantiques". Ils ont des propriétés fascinantes que l'on ne peut pas expliquer avec la physique classique.

En physique classique et en électronique, il existe une propriété matérielle, la conductivité σ qui, avec la géométrie, détermine la résistance R d'un fil : conductivité doublée ⟶ résistance divisée par deux ; longueur doublée ⟶ résistance doublée ; section doublée ⟶ résistance divisée par deux.

Ce n'est pas le cas des fils quantiques. Ici, la résistance R et la conductance $G = 1/R$ sont totalement indépendantes de la géométrie et même du matériau !

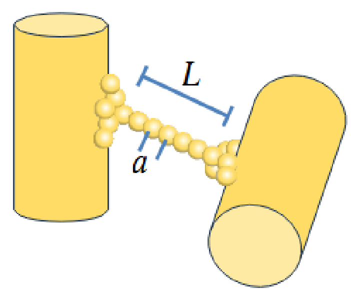
Sauts de conductance quantique sur l'oscilloscope

La conductance quantifiée n'est déterminée que par deux constantes fondamentales : la charge élémentaire e et le quantum d'action de Planck h. La quantification de la conductance a donc été observée dans des systèmes très différents : dans les contacts métalliques, les nanotransistors, les nanotubes de carbone …

L'observation de la quantification de la conductance a fondamentalement modifié notre compréhension théorique du transport d'électrons. Cela a d'abord été observé dans des structures semi-conductrices spéciales soumises à des champs magnétiques élevés et températures proches du zéro absolu (prix Nobel de Physique 1985 de Klaus von Klitzing) .

Mais si l'on sait où chercher et si l'on regarde suffisamment attentivement, on peut aussi observer la conductance quantifiée dans un très simple "faux contact" entre deux fils d'or !

Le contact entre deux fils d'or avant rupture peut être modélisé par un fil métallique extrêmement fin composé d'une chaîne d'atomes d'or de longueur L, libérant chacun un électron libre.

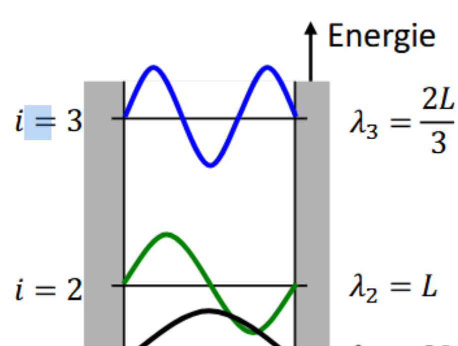


Ces électrons dans ce fil sont confinés dans un puits de potentiel et leurs ondes doivent satisfaire à la condition de résonance comme celles d'une corde vibrante attachée à ses deux extrémités :

$$L = i\frac{\lambda_i}{2}, i \in N^* \ (1)$$

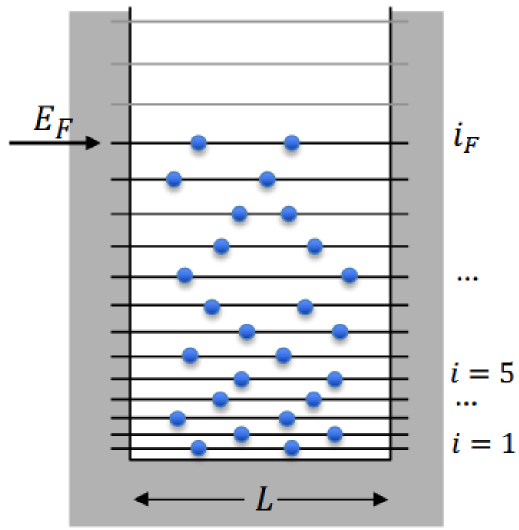
(1)

Les longueurs d'onde permises sont ainsi :



$$\lambda_1 = \frac{2L}{1}$$
$$\lambda_2 = L,$$
$$\lambda_3 = \frac{2L}{3}, \ldots$$

3. Calcul des énergies cinétiques des électrons (ondes en mécanique quantique)



$$E = \frac{1}{2}mv^2 = \frac{p^2}{2m}$$

$p = mv$: quantité de mouvement

$p = \dfrac{h}{\lambda}$: relation de De Broglie

λ : longueur d'onde de l'onde d'un électron

$$\Rightarrow E_i = \frac{h^2}{2m\lambda_i^{\,2}} = i^2 \frac{h^2}{8mL^2} \quad (2)$$

Comme dans l'atome, les électrons occupent les états d'énergie croissants. L'énergie maximale des électrons dans la boîte est appelée « énergie de Fermi », E_F. Sur chaque niveau d'énergie il y a deux électrons. Ceux-ci se différencient par ce que l'on appelle le « spin », une grandeur de la mécanique quantique qui sur un axe prend deux valeurs différentes : $+\frac{1}{2}$ et $-\frac{1}{2}$.

A l'intérieur des fils il y a au total N électrons. En raison des 2 valeurs de spin possibles, ceux-ci se répartissent sur $N/2$ niveaux d'énergie, de sorte que le numéro du niveau occupé le plus élevé est $i_F = N/2$.

De plus pour que le courant traverse le fil quantique, il est nécessaire d'avoir une propagation d'ondes. Dans le calcul du puits quantique infini, **analogue à celui d'une corde vibrante attachée à ses extrémités**, il s'agit d'ondes stationnaires. Mais celles-ci peuvent aussi être interprétées comme une superposition d'ondes progressives vers la droite et vers la gauche. Par conséquent, les N électrons se répartissent pour moitié en ondes se déplaçant vers la droite et vers la gauche :

$$N_{\rightarrow} = N_{\leftarrow} = N/2 = i_F \,. \quad (3)$$

Les vitesses v_i des électrons s'obtiennent par la relation de Broglie par :

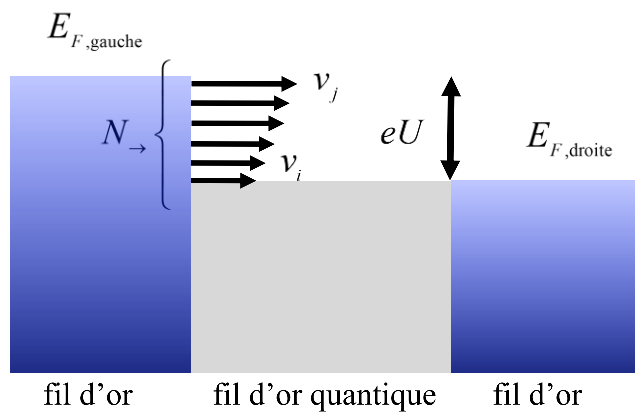
$$v_i = \frac{p_i}{m} = \frac{h}{m\lambda_i} = i\frac{h}{2mL}. \quad (4)$$

Avec la densité linéique des électrons, $n = N/L$, il en résulte pour le courant : $I(\text{charge par unité de temps}) = \frac{Q}{t} = \frac{Ne}{t} = \frac{nLe}{t} = ne\bar{v}$. (5)
Comme la vitesse dépend de l'indice i, d'après (4), il faut utiliser dans (5) la vitesse moyenne $\bar{v}$.

4. Quantification de la conductance, *G* = 1/*R*, dans le fil quantique

On applique maintenant, comme le montre la figure, une tension U entre les deux fils d'or, de sorte qu'un courant puisse circuler de gauche à droite à travers les états les plus élevés $i \ldots j$.

La tension U correspond à une différence des énergies de Fermi de (avec $N_{\rightarrow} = j - i$) :



$$eU = E_{F,\text{gauche}} - E_{F,\text{droite}} = j^2\frac{h^2}{8mL^2} - i^2\frac{h^2}{8mL^2} = \frac{h^2}{8mL^2}(j-i)(j+i) =$$

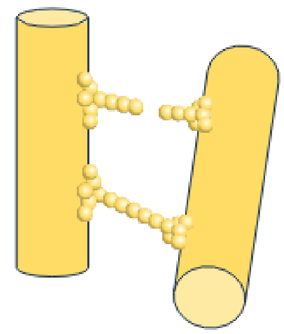
$$N_{\rightarrow}\frac{h^2}{8mL^2}(j+i) = \frac{h}{4}\frac{N_{\rightarrow}}{L}\frac{h}{2mL}(j+i) = \frac{h}{4}\frac{N_{\rightarrow}}{L}(v_i + v_j) = \frac{h}{2}\frac{N_{\rightarrow}}{L}\bar{v} = \frac{h}{2}n_{\rightarrow}\bar{v}.$$

$$\Rightarrow n_{\rightarrow}\bar{v} = \frac{2e}{h}U \quad (6)$$

D'où la conductance quantifiée G_q dans le fil unidimensionnel :

$$\boxed{G_q = \frac{I_{\rightarrow}}{U} = \frac{n_{\rightarrow}e\bar{v}}{U} = \frac{2e^2}{h} = \frac{1}{12{,}90640\ldots}\ (\mathrm{k\Omega})^{-1}}$$

Comme le contact en or peut se rompre à différents endroits et qu'il peut donc y avoir plusieurs fils quantiques parallèles, la conductance chute par paliers de même niveau, comme on peut le voir sur la première page.



5. Conclusion

L’étude de fils d’or ultrafins montre que la conductance est quantifiée et ne dépend étonnamment que de deux constantes fondamentales, *e* et *h*. Elle est indépendante de la géométrie et de la nature du matériau. Ce phénomène est une conséquence du confinement quantique des électrons et est une propriété universelle des systèmes nanométriques.