

1 Le Modèle d'Anderson Unidimensionnel

Le modèle d'Anderson, introduit par P.W. Anderson en 1958, est un outil fondamental en physique de la matière condensée pour étudier l'impact du désordre sur le transport électronique dans un réseau. En une dimension (1D), ce modèle prédit que tout désordre, même infinitésimal, conduit à la localisation de tous les états électroniques, supprimant la diffusion quantique. Cette propriété distingue les systèmes 1D des systèmes en dimensions supérieures, où une transition métal-isolant peut exister. Ce chapitre définit le modèle d'Anderson unidimensionnel, dérive l'équation de Schrödinger correspondante, et introduit l'exposant de Lyapunov, un outil clé pour quantifier la localisation des états propres.

1.1 Définition du Modèle

Le modèle d'Anderson unidimensionnel décrit un électron non interagissant se déplaçant dans un réseau unidimensionnel avec un potentiel désordonné. L'Hamiltonien s'écrit dans la base des états localisés $\{|n\rangle\}$, où $|n\rangle$ représente l'état d'un électron sur le site n du réseau :

$$H = \sum_n \epsilon_n |n\rangle \langle n| - t \sum_n (|n\rangle \langle n+1| + |n+1\rangle \langle n|)$$

où :

- $|n\rangle$ est l'état localisé sur le site n , formant une base orthonormée ($\langle n|m\rangle = \delta_{nm}$).
- ϵ_n est le potentiel aléatoire sur le site n , tiré d'une distribution uniforme $\mathcal{U}[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$, où W mesure l'intensité du désordre.
- $t > 0$ est l'amplitude de saut (ou couplage) entre sites voisins, représentant l'énergie cinétique de l'électron.

Note pédagogique: L'Hamiltonien décrit un équilibre entre deux contributions : le terme $\epsilon_n |n\rangle \langle n|$ représente l'énergie potentielle aléatoire sur chaque site, tandis que le second terme modélise le déplacement de l'électron entre sites voisins. Sans désordre ($W = 0$), le système est un cristal parfait, permettant un transport électronique libre. Avec désordre ($W > 0$), les potentiels aléatoires perturbent ce mouvement, pouvant conduire à la localisation.

Pour un réseau fini de N sites avec conditions aux limites périodiques, l'Hamiltonien prend la forme d'une matrice tridiagonale symétrique :

$$H = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & -t & 0 & \cdots & -t \\ -t & \epsilon_2 & -t & \cdots & 0 \\ 0 & -t & \epsilon_3 & \ddots & \vdots \\ \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & -t \\ -t & 0 & \cdots & -t & \epsilon_N \end{pmatrix}.$$

Notez que le signe négatif devant t est une convention courante pour assurer des valeurs propres positives dans le spectre d'énergie.

Exemple: Considérons un réseau de $N = 4$ sites avec $\epsilon_1 = 0.1$, $\epsilon_2 = -0.3$, $\epsilon_3 = 0.5$, $\epsilon_4 = -0.2$, et $t = 1$. La matrice Hamiltonienne est :

$$H = \begin{pmatrix} 0.1 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & -0.3 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & 0.5 & -1 \\ 0 & 0 & -1 & -0.2 \end{pmatrix}.$$

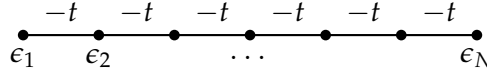


FIGURE 1 – Représentation schématique d'un réseau unidimensionnel avec potentiel désordonné. Chaque site n a un potentiel aléatoire ϵ_n , et les sites voisins sont couplés par l'amplitude de saut $-t$.

En diagonalisant cette matrice (par exemple, numériquement), on obtient les valeurs propres $E \approx -1.87, -0.57, 0.55, 1.79$, qui correspondent aux énergies des états propres. Avec un désordre plus fort (W plus grand), les états tendent à se localiser autour de sites spécifiques.

Propriétés clés :

- **Sans désordre** ($W = 0$) : Tous les $\epsilon_n = 0$, le système est périodique, et les états propres sont des ondes de Bloch délocalisées, permettant un transport électronique sans résistance.
- **Avec désordre** ($W > 0$) : Les potentiels aléatoires ϵ_n induisent des interférences destructives, pouvant localiser les états et réduire leur extension spatiale.

1.2 Équation de Schrödinger

L'objectif est de résoudre l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$H |\psi\rangle = E |\psi\rangle,$$

où $|\psi\rangle = \sum_n \psi_n |n\rangle$ est la fonction d'onde, $\psi_n = \langle n|\psi\rangle$ est l'amplitude sur le site n , et E est l'énergie propre. En projetant sur $\langle n|$, on obtient :

$$\epsilon_n \psi_n - t(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) = E \psi_n.$$

Réarrangeons cette équation :

$$(E - \epsilon_n) \psi_n = -t(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}).$$

Divisons par $-t$ pour obtenir une équation de récurrence :

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} = -\frac{E - \epsilon_n}{t} \psi_n.$$

Note pédagogique: Cette équation de récurrence relie l'amplitude ψ_n sur le site n à celles des sites voisins ψ_{n+1} et ψ_{n-1} . Le terme ϵ_n introduit une variabilité aléatoire, perturbant la régularité des solutions par rapport à un réseau périodique. Cette équation est une différence finie, analogue à une équation différentielle pour un système continu, mais adaptée à un réseau discret.

Dérivation étape par étape :

1. Partons de l'équation de Schrödinger projetée :

$$\epsilon_n \psi_n - t(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) = E \psi_n.$$

2. Isolons les termes :

$$(E - \epsilon_n) \psi_n = -t(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}).$$

3. Divisons par $-t$ (en notant que $t > 0$) :

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} = -\frac{E - \epsilon_n}{t} \psi_n.$$

4. Cette équation de récurrence du second ordre nécessite deux conditions initiales, par exemple ψ_0 et ψ_1 , pour être résolue numériquement ou analytiquement.

1.3 Exposant de Lyapunov

L'exposant de Lyapunov λ quantifie le taux de croissance ou de décroissance exponentielle de la fonction d'onde dans un système désordonné. Il est défini comme :

$$\lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln |\psi_n|.$$

Pour analyser λ , exprimons ψ_n en termes d'un produit. Définissons z_n tel que :

$$\psi_n = \psi_{n-1} z_n \quad \Rightarrow \quad \psi_n = \psi_0 \prod_{k=1}^n z_k.$$

L'amplitude est alors :

$$|\psi_n| = |\psi_0| \exp \left(\sum_{k=1}^n \ln |z_k| \right).$$

Substituons dans la définition de λ :

$$\lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \ln \left(|\psi_0| \exp \left(\sum_{k=1}^n \ln |z_k| \right) \right) = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \left(\ln |\psi_0| + \sum_{k=1}^n \ln |z_k| \right).$$

Puisque $\ln |\psi_0|$ est constant, son contribution devient négligeable pour $n \rightarrow \infty$, donc :

$$\lambda = \lim_{n \rightarrow \infty} \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n \ln |z_k|.$$

Si les z_k sont stationnaires et ergodiques (ce qui est le cas pour ϵ_n tiré d'une distribution aléatoire), le théorème ergodique de Birkhoff implique :

$$\lambda = \mathbb{E}[\ln |z_k|].$$

La longueur de localisation, qui mesure l'échelle spatiale sur laquelle la fonction d'onde décroît, est définie comme :

$$\xi = \frac{1}{\lambda}.$$

Note pédagogique: L'exposant de Lyapunov λ indique si les états sont localisés ($\lambda > 0$, ξ fini) ou délocalisés ($\lambda = 0$, $\xi \rightarrow \infty$). Une fonction d'onde localisée a une amplitude qui décroît exponentiellement, $|\psi_n| \sim e^{-\lambda n}$, empêchant le transport électronique sur de longues distances.

1.4 Reconstruction de la Fonction d'Onde

Pour relier ψ_n à z_n , partons de l'équation de récurrence :

$$\psi_{n+1} = -\frac{E - \epsilon_n}{t} \psi_n - \psi_{n-1}.$$

Définissons $z_n = \frac{\psi_n}{\psi_{n-1}}$, de sorte que :

$$\psi_n = \psi_{n-1} z_n = \psi_{n-2} z_{n-1} z_n = \cdots = \psi_0 \prod_{k=1}^n z_k.$$

L'amplitude est alors :

$$|\psi_n| = |\psi_0| \exp \left(\sum_{k=1}^n \ln |z_k| \right).$$

Substituons dans l'équation de récurrence pour trouver z_n . Réécrivons :

$$\psi_{n+1} = \psi_n z_{n+1}, \quad \psi_{n-1} = \frac{\psi_n}{z_n}.$$

Alors :

$$\psi_n z_{n+1} + \frac{\psi_n}{z_n} = -\frac{E - \epsilon_n}{t} \psi_n.$$

Divisons par ψ_n (en supposant $\psi_n \neq 0$) :

$$z_{n+1} + \frac{1}{z_n} = -\frac{E - \epsilon_n}{t}.$$

Cette équation définit la dynamique de z_n , qui dépend du désordre ϵ_n . L'exposant de Lyapunov est alors calculé en prenant la moyenne statistique de $\ln |z_n|$.

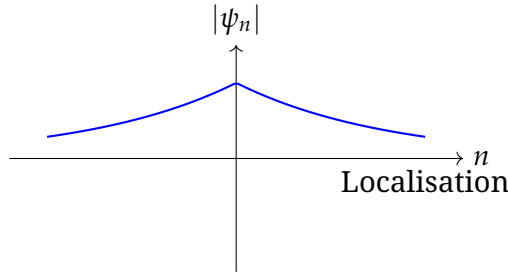


FIGURE 2 – Profil typique d'une fonction d'onde localisée ($\lambda > 0$). L'amplitude décroît exponentiellement, $|\psi_n| \sim e^{-\lambda|n|}$, autour d'un site central.

2 Régimes de Localisation dans le Modèle d'Anderson 1D

Le comportement quantique des électrons dans un système désordonné varie profondément selon l'intensité du désordre. Cette section analyse les différents régimes de localisation dans le modèle d'Anderson unidimensionnel : du cas parfaitement périodique, où les états sont délocalisés, jusqu'au régime fortement désordonné, où la localisation est maximale. Chaque régime est étudié à travers l'évolution de la fonction d'onde, les variations de la longueur de localisation, et l'analyse asymptotique des solutions. Cette exploration met en lumière l'absence de transition de phase en 1D, caractéristique unique du modèle.

2.1 Régime sans Désordre ($W = 0$)

Dans l'absence de désordre ($W = 0$), tous les potentiels sur site sont nuls ($\epsilon_n = 0$), et le système est un réseau périodique parfait. L'équation de Schrödinger discrète s'écrit :

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} = \frac{E}{t} \psi_n$$

où ψ_n est l'amplitude de la fonction d'onde au site n , E est l'énergie, et t est l'amplitude de saut.

Nous cherchons une solution sous forme d'onde plane, $\psi_n = e^{ikn}$. En substituant dans l'équation (2.1) :

$$e^{ik(n+1)} + e^{ik(n-1)} = e^{ikn}(e^{ik} + e^{-ik}) = e^{ikn} \cdot 2 \cos k = \frac{E}{t} e^{ikn}$$

En simplifiant, nous obtenons la relation de dispersion :

$$2 \cos k = \frac{E}{t} \Rightarrow E = 2t \cos k$$

Le spectre d'énergie est continu, s'étendant sur $[-2t, 2t]$, correspondant à des états délocalisés appelés **ondes de Bloch**. Ces états s'étendent sur tout le réseau, permettant un transport électronique sans résistance.

L'exposant de Lyapunov est :

$$\lambda = \mathbb{E} \left[\ln \left| \frac{\psi_{n+1}}{\psi_n} \right| \right] = \ln |e^{ik}| = \ln 1 = 0$$

Ainsi, la longueur de localisation est :

$$\xi = \frac{1}{\lambda} \rightarrow \infty$$

indiquant des états complètement délocalisés. Physiquement, l'absence de diffusion permet aux électrons de se propager librement, comme dans un conducteur parfait.

2.2 Régime de Faible Désordre ($W \ll t$)

Pour un désordre faible ($W \ll t$), les potentiels $\epsilon_n \sim \mathcal{U} \left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2} \right]$ introduisent une perturbation légère. La variance du désordre est :

$$\sigma^2 = \mathbb{E}[\epsilon_n^2] = \frac{1}{W} \int_{-\frac{W}{2}}^{\frac{W}{2}} x^2 dx = \frac{W^2}{12}$$

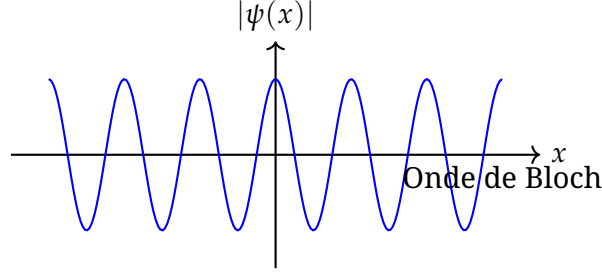


FIGURE 3 – Fonction d’onde étendue (onde de Bloch) pour $W = 0$. L’amplitude constante indique un état délocalisé.

L’équation de Schrödinger devient :

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + \frac{\epsilon_n}{t} \psi_n = \frac{E}{t} \psi_n$$

Nous supposons une fonction d’onde proche de l’onde plane, $\psi_n = A_n e^{ikn}$, où A_n varie lentement. Substituons dans l’équation (2.2) :

$$A_{n+1} e^{ik(n+1)} + A_{n-1} e^{ik(n-1)} + \frac{\epsilon_n}{t} A_n e^{ikn} = \frac{E}{t} A_n e^{ikn}$$

Divisons par e^{ikn} :

$$A_{n+1} e^{ik} + A_{n-1} e^{-ik} = \left(\frac{E}{t} - \frac{\epsilon_n}{t} \right) A_n$$

Puisque $E = 2t \cos k$, soit $\frac{E}{t} = e^{ik} + e^{-ik}$, nous obtenons :

$$A_{n+1} e^{ik} + A_{n-1} e^{-ik} = \left(e^{ik} + e^{-ik} - \frac{\epsilon_n}{t} \right) A_n$$

Pour un désordre faible, nous utilisons l’approche de la matrice de transfert pour calculer l’exposant de Lyapunov. Réécrivons l’équation (2.2) sous forme matricielle :

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \frac{E-\epsilon_n}{t} & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix}$$

En appliquant la théorie des perturbations, l’exposant de Lyapunov est :

$$\lambda \approx \frac{\mathbb{E}[\epsilon_n^2]}{8t^2 \sin^2 k} = \frac{W^2/12}{8t^2 \sin^2 k} = \frac{W^2}{96t^2 \sin^2 k}$$

Puisque $\sin^2 k = 1 - \cos^2 k = 1 - \left(\frac{E}{2t}\right)^2$, nous obtenons :

$$\lambda \approx \frac{W^2}{96t^2 \left[1 - \left(\frac{E}{2t}\right)^2\right]}, \quad \xi \approx \frac{96t^2 \left[1 - \left(\frac{E}{2t}\right)^2\right]}{W^2}$$

Ce résultat, en accord avec, montre que tout désordre, même faible, localise les états en 1D. La longueur de localisation ξ est grande, indiquant une localisation partielle, mais diverge près des bords de bande ($|E| \rightarrow 2t$).

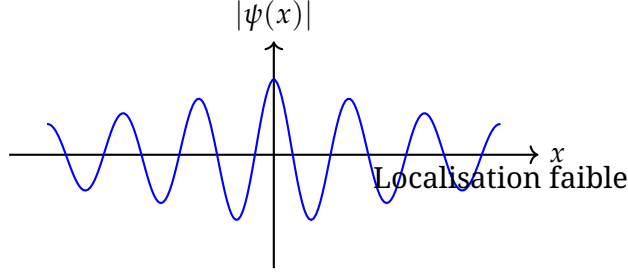


FIGURE 4 – Fonction d’onde pour un désordre faible ($W \ll t$). L’enveloppe exponentielle indique une décroissance lente, signe d’une localisation partielle.

2.3 Régime de Fort Désordre ($W \gg t$)

Dans le régime de fort désordre ($W \gg t$), les potentiels aléatoires ϵ_n , distribués uniformément sur $[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$, dominent le terme de couplage inter-site t . L’équation de Schrödinger discrète est approximée par :

$$\epsilon_n \psi_n \approx E \psi_n \quad (1)$$

Si $E \approx \epsilon_n$, l’état ψ_n est significatif au site n ; sinon, $\psi_n \approx 0$, indiquant une localisation forte autour d’un seul site (localisation d’Anderson). Pour quantifier cette localisation, nous utilisons la fonction de Green locale :

$$G_{nn}(E) = \frac{1}{E - \epsilon_n - \Sigma(E)} \quad (2)$$

où $\Sigma(E)$ représente les corrections dues aux sites voisins. Dans le régime $W \gg t$, $\Sigma(E) \approx 0$, car les interactions inter-sites sont négligeables. L’exposant de Lyapunov, qui mesure le taux de décroissance exponentielle des états localisés, est donné par :

$$\lambda \approx \mathbb{E} \left[\ln \left| \frac{E - \epsilon_n}{t} \right| \right] = \mathbb{E} [\ln |E - \epsilon_n|] - \ln t \quad (3)$$

Calculons l’espérance $\mathbb{E} [\ln |E - \epsilon_n|]$ pour $\epsilon_n \sim \mathcal{U} [-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$:

$$\mathbb{E} [\ln |E - \epsilon_n|] = \frac{1}{W} \int_{-\frac{W}{2}}^{\frac{W}{2}} \ln |E - x| dx \quad (4)$$

Pour simplifier, supposons $|E| \ll W/2$, ce qui est typique au centre de la bande d’énergie. Effectuons le changement de variable $y = x - E$, donc $dx = dy$, avec les bornes $x = -\frac{W}{2} \rightarrow y = -\frac{W}{2} - E$ et $x = \frac{W}{2} \rightarrow y = \frac{W}{2} - E$. L’intégrale devient :

$$\frac{1}{W} \int_{-\frac{W}{2}-E}^{\frac{W}{2}-E} \ln |y| dy \quad (5)$$

Puisque $|E| \ll W/2$, les bornes sont approximativement $[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$. Pour simplifier et éviter les complications liées à la valeur absolue, exploitons la symétrie de la distribution uniforme. Considérons l’intégrale exacte :

$$\int_{-\frac{W}{2}}^{\frac{W}{2}} \ln |E - x| dx = \int_{-\frac{W}{2}}^E \ln(E - x) dx + \int_E^{\frac{W}{2}} \ln(x - E) dx \quad (6)$$

Effectuons le changement de variable $u = E - x$ pour la première intégrale, donc $du = -dx$, avec les bornes $x = -\frac{W}{2} \rightarrow u = E + \frac{W}{2}$, $x = E \rightarrow u = 0$:

$$\int_{-\frac{W}{2}}^E \ln(E-x) dx = \int_{E+\frac{W}{2}}^0 \ln u \cdot (-du) = \int_0^{E+\frac{W}{2}} \ln u du \quad (7)$$

Pour la seconde intégrale, posons $v = x - E$, donc $dv = dx$, avec les bornes $x = E \rightarrow v = 0$, $x = \frac{W}{2} \rightarrow v = \frac{W}{2} - E$:

$$\int_E^{\frac{W}{2}} \ln(x-E) dx = \int_0^{\frac{W}{2}-E} \ln v dv \quad (8)$$

Calculez chaque intégrale. Pour une intégrale de la forme $\int \ln u du$, la primitive est $u \ln u - u$. Ainsi :

$$\int_0^{E+\frac{W}{2}} \ln u du = [u \ln u - u]_0^{E+\frac{W}{2}} = \left(E + \frac{W}{2}\right) \ln \left(E + \frac{W}{2}\right) - \left(E + \frac{W}{2}\right) - \lim_{u \rightarrow 0^+} (u \ln u - u) \quad (9)$$

Puisque $\lim_{u \rightarrow 0^+} u \ln u = 0$ et $\lim_{u \rightarrow 0^+} (-u) = 0$, le terme à la borne inférieure est nul. De même :

$$\int_0^{\frac{W}{2}-E} \ln v dv = \left(\frac{W}{2} - E\right) \ln \left(\frac{W}{2} - E\right) - \left(\frac{W}{2} - E\right) \quad (10)$$

Sommez les contributions et divisez par W . Pour $|E| \ll W/2$, approximations $\ln \left(\frac{W}{2} \pm E\right)$:

$$\ln \left(\frac{W}{2} \pm E\right) \approx \ln \frac{W}{2} \pm \frac{2E}{W} \quad (11)$$

Ainsi, l'intégrale totale donne :

$$\mathbb{E} [\ln |E - \epsilon_n|] \approx \frac{1}{W} \left[\left(\frac{W}{2} + E\right) \left(\ln \frac{W}{2} + \frac{2E}{W}\right) + \left(\frac{W}{2} - E\right) \left(\ln \frac{W}{2} - \frac{2E}{W}\right) - W \right] \quad (12)$$

Après simplification, les termes en E s'annulent, et on obtient :

$$\mathbb{E} [\ln |E - \epsilon_n|] \approx \ln \frac{W}{2} - 1 \quad (13)$$

L'exposant de Lyapunov devient :

$$\lambda \approx \ln \frac{W}{2} - 1 - \ln t = \ln \frac{W}{2t} - 1 \quad (14)$$

Ce résultat indique que, dans le régime de fort désordre, l'exposant de Lyapunov est dominé par le rapport W/t , confirmant une localisation forte des états propres. Plus W est grand par rapport à t , plus les états sont fortement localisés, avec une longueur de localisation inversement proportionnelle à λ . L'exposant de Lyapunov devient :

$$\lambda \approx \ln \frac{W}{2} + \frac{2E^2}{W^2} - 1 - \ln t = \ln \left(\frac{W}{2t}\right) - 1 + \frac{2E^2}{W^2}$$

La longueur de localisation est :

$$\xi \approx \frac{1}{\ln \left(\frac{W}{2t}\right) - 1 + \frac{2E^2}{W^2}}$$

Pour $W/t \gg 1$ et $E \ll W$, le terme $\frac{2E^2}{W^2}$ est négligeable, et $\xi \approx \frac{1}{\ln(W/2t)}$, mais cette expression est plus précise car elle inclut la dépendance en E .

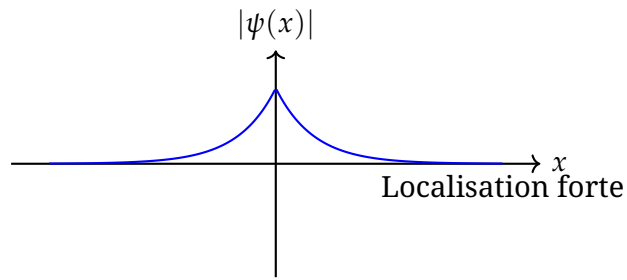


FIGURE 5 – Fonction d’onde pour un désordre fort ($W \gg t$). La décroissance exponentielle rapide indique une localisation sur un seul site.

Note pédagogique: Un exposant $\lambda > 0$ indique une décroissance exponentielle de $|\psi_n|$, donc une localisation. Si $\lambda = 0$, les états sont étendus, et $\xi \rightarrow \infty$.

3 Inverse Participation Ratio (IPR) dans le Modèle d'Anderson 1D

L'Inverse Participation Ratio (IPR) est une mesure quantitative de la localisation spatiale d'un état quantique normalisé, c'est-à-dire satisfaisant $\sum_n |\psi_n|^2 = 1$. Défini comme :

$$\text{IPR} = \sum_n |\psi_n|^4$$

Si la longueur de localisation donne une mesure spatiale de la décroissance d'un état quantique, l'Inverse Participation Ratio (IPR) en offre une évaluation plus directe de sa concentration. Cette section approfondit la signification physique et mathématique de l'IPR dans le contexte du modèle d'Anderson. À travers les trois régimes de désordre, nous montrons comment l'IPR varie entre des valeurs proches de zéro (états étendus) et proches de un (états fortement localisés).

3.1 Régime sans Désordre ($W = 0$)

Dans le régime sans désordre ($W = 0$), la fonction d'onde est une onde de Bloch délocalisée, comme dérivé dans la section 2.1. Pour un système de N sites avec des conditions aux limites périodiques, la fonction d'onde normalisée est :

$$\psi_n = \frac{e^{ikn}}{\sqrt{N}}, \quad |\psi_n|^2 = \frac{1}{N}$$

L'IPR est alors :

$$\text{IPR} = \sum_{n=1}^N |\psi_n|^4 = \sum_{n=1}^N \left(\frac{1}{N} \right)^2 = N \cdot \frac{1}{N^2} = \frac{1}{N}$$

Pour un système infini ($N \rightarrow \infty$) :

$$\text{IPR} \rightarrow 0$$

ce qui indique un état complètement délocalisé. Physiquement, cela reflète le fait que l'électron est uniformément réparti sur tout le réseau, permettant un transport balistique sans résistance, comme dans un conducteur parfait.

3.2 Régime de Faible Désordre $W \ll t$

Dans le régime de faible désordre ($W \ll t$), les états sont partiellement localisés, avec une longueur de localisation $\xi \approx \frac{96t^2 \left[1 - \left(\frac{E}{2t} \right)^2 \right]}{W^2}$, comme calculé dans la section 2.2. La fonction d'onde peut être approximée par une onde plane modulée par une enveloppe exponentielle :

$$\psi_n = C e^{ikn} e^{-|n-n_0|/\xi}$$

où n_0 est le site central de localisation, et C est la constante de normalisation. Normalisons la fonction d'onde :

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} |\psi_n|^2 = C^2 \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-2|n-n_0|/\xi} = 1$$

Évaluons la somme en approximation continue pour un système infini :

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-2|n-n_0|/\xi} \approx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2|n|/\xi} dn$$

Effectuons le changement de variable $u = \frac{n}{\xi}$, donc $dn = \xi du$:

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-2|n|/\xi} dn = \xi \int_{-\infty}^{\infty} e^{-2|u|} du = \xi \cdot 2 \int_0^{\infty} e^{-2u} du = \xi \cdot 2 \cdot \frac{1}{2} = \xi$$

Ainsi :

$$C^2 \xi \approx 1 \quad \Rightarrow \quad C^2 \approx \frac{1}{\xi}$$

Calculons l'IPR :

$$\text{IPR} = \sum_{n=-\infty}^{\infty} |\psi_n|^4 = C^4 \sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-4|n-n_0|/\xi}$$

Évaluons la somme :

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-4|n-n_0|/\xi} \approx \int_{-\infty}^{\infty} e^{-4|n|/\xi} dn = \xi \int_{-\infty}^{\infty} e^{-4|u|} du = \xi \cdot 2 \int_0^{\infty} e^{-4u} du = \xi \cdot \frac{2}{4} = \frac{\xi}{2}$$

Donc :

$$\text{IPR} = C^4 \cdot \frac{\xi}{2} \approx \left(\frac{1}{\xi}\right)^2 \cdot \frac{\xi}{2} = \frac{1}{\xi^2} \cdot \frac{\xi}{2} = \frac{1}{2\xi}$$

Pour une précision accrue, utilisons l'approximation discrète :

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-2|n-n_0|/\xi} = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-2n/\xi} = 1 + 2 \cdot \frac{e^{-2/\xi}}{1 - e^{-2/\xi}} = \frac{1 + e^{-2/\xi}}{1 - e^{-2/\xi}} = \coth\left(\frac{1}{\xi}\right)$$

Ainsi :

$$C^2 \approx \frac{1}{\coth\left(\frac{1}{\xi}\right)} \approx \tanh\left(\frac{1}{\xi}\right)$$

Pour l'IPR :

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} e^{-4|n-n_0|/\xi} = \coth\left(\frac{2}{\xi}\right)$$

donc :

$$\text{IPR} \approx \tanh^2\left(\frac{1}{\xi}\right) \coth\left(\frac{2}{\xi}\right)$$

Pour $\xi \gg 1$, $\tanh\left(\frac{1}{\xi}\right) \approx \frac{1}{\xi}$, et $\coth\left(\frac{2}{\xi}\right) \approx \frac{\xi}{2}$, donc :

$$\text{IPR} \approx \left(\frac{1}{\xi}\right)^2 \cdot \frac{\xi}{2} = \frac{1}{2\xi}$$

Cette expression montre que l'IPR est inversement proportionnel à la longueur de localisation, reflétant une localisation partielle où l'état s'étend sur environ ξ sites.

3.3 Régime de Fort Désordre $W \gg t$

Dans le régime de fort désordre ($W \gg t$), les états sont fortement localisés autour d'un seul site, comme discuté dans la section 2.3. Si l'état est centré sur le site n_0 , alors $|\psi_{n_0}|^2 \approx 1$, et $|\psi_n|^2 \approx 0$ pour $n \neq n_0$. L'IPR est :

$$\text{IPR} = \sum_n |\psi_n|^4 \approx |\psi_{n_0}|^4 = 1$$

Physiquement, cela indique que l'électron est confiné à un seul site, supprimant tout transport électronique, comme dans un isolant parfait. La longueur de localisation, dérivée dans la section 2.3, est :

$$\xi \approx \frac{1}{\ln\left(\frac{W}{2t}\right) - 1 + \frac{2E^2}{W^2}}$$

ce qui est très petit pour $W \gg t$, cohérent avec un IPR proche de 1.

3.4 Synthèse des Résultats

Le tableau 1 résume les résultats pour les trois régimes, en lien avec les longueurs de localisation calculées précédemment.

Régime	Longueur de localisation ξ	IPR	Type d'état
Sans désordre ($W = 0$)	∞	$\frac{1}{N} \rightarrow 0$	Étendu
Faible désordre ($W \ll t$)	$\frac{96t^2 \left[1 - \left(\frac{E}{2t}\right)^2\right]}{W^2}$	$\approx \frac{1}{2\xi}$	Localisation faible
Fort désordre ($W \gg t$)	$\frac{1}{\ln\left(\frac{W}{2t}\right) - 1 + \frac{2E^2}{W^2}}$	≈ 1	Localisation forte

TABLE 1 – Résumé des longueurs de localisation et des valeurs de l'IPR pour les différents régimes du modèle d'Anderson 1D.

4 Matrices de Transfert dans le Modèle d'Anderson 1D

La méthode des matrices de transfert constitue une approche particulièrement efficace pour étudier la propagation des états dans un réseau désordonné. En reformulant l'équation de Schrödinger en une relation matricielle récurrente, elle permet de suivre l'évolution de la fonction d'onde à travers le réseau, site après site. Cette section présente la construction explicite des matrices de transfert, leur produit itératif, et leur rôle dans le calcul des exposants de Lyapunov. Elle met aussi en évidence la robustesse de cette méthode, notamment dans les simulations numériques de grande taille.

4.1 Formulation de la Matrice de Transfert

Dans le modèle d'Anderson 1D, l'équation de Schrödinger discrète pour un électron non-interagissant dans un réseau avec potentiel aléatoire est (voir section 2) :

$$\psi_{n+1} + \psi_{n-1} + \epsilon_n \psi_n = E \psi_n$$

où ψ_n est l'amplitude de la fonction d'onde au site n , E est l'énergie, $\epsilon_n \sim \mathcal{U}[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$ est le potentiel aléatoire, et l'amplitude de saut est fixée à $t = 1$. Réécrivons cette équation sous forme matricielle en définissant l'état au site n par le vecteur $\begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix}$. De l'équation (4.1), nous isolons ψ_{n+1} :

$$\psi_{n+1} = (E - \epsilon_n) \psi_n - \psi_{n-1}$$

Ainsi, l'évolution d'un site à l'autre est donnée par :

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} E - \epsilon_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} = T_n \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix}$$

où T_n est la matrice de transfert au site n :

$$T_n = \begin{pmatrix} E - \epsilon_n & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Notons que $\det T_n = -1$, ce qui garantit que la matrice est inversible, mais elle n'est pas unitaire, car le système est non hermitien dans cette formulation.

Le produit des matrices de transfert relie l'état initial aux sites $n = 0, 1$ à l'état aux sites $n = N, N + 1$:

$$\begin{pmatrix} \psi_{N+1} \\ \psi_N \end{pmatrix} = M_N \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix} \quad M_N = \prod_{n=1}^N T_n = T_N T_{N-1} \cdots T_1$$

La matrice M_N encode l'évolution de la fonction d'onde à travers les N sites du réseau désordonné.

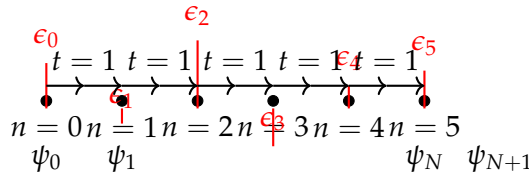


FIGURE 6 – Représentation schématique du réseau 1D avec potentiels aléatoires ϵ_n et sauts de amplitude $t = 1$. La matrice de transfert T_n propage la fonction d'onde de (ψ_n, ψ_{n-1}) à (ψ_{n+1}, ψ_n) .

4.2 Exposants de Lyapunov

L'exposant de Lyapunov λ mesure le taux de croissance ou de décroissance exponentielle de la fonction d'onde, défini comme :

$$\lambda = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \mathbb{E} \left[\ln \left\| M_N \begin{pmatrix} \psi_1 \\ \psi_0 \end{pmatrix} \right\| \right]$$

En pratique, on utilise la norme de la matrice M_N , liée aux valeurs propres de $(M_N^\dagger M_N)^{1/(2N)}$. Puisque M_N est un produit de matrices T_n non commutatives avec des éléments aléatoires ϵ_n , le calcul repose sur le théorème d'Oseledets, qui garantit que les logarithmes des valeurs propres de $(M_N^\dagger M_N)^{1/(2N)}$ convergent vers les exposants de Lyapunov dans la limite $N \rightarrow \infty$.

Pour un système 1D, il existe deux exposants de Lyapunov, λ_+ et λ_- , correspondant aux directions de croissance et de décroissance. Dans le contexte de la localisation, nous nous intéressons à $\lambda_+ > 0$, car il décrit la décroissance exponentielle de la fonction d'onde ($|\psi_n| \sim e^{-\lambda_+ |n|}$), et la longueur de localisation est $\xi = \frac{1}{\lambda_+}$. Notons que $\lambda_- = -\lambda_+$, car $\det M_N = (-1)^N$.

4.2.1 Exemple : Régime sans Désordre $W = 0$

Dans l'absence de désordre, $\epsilon_n = 0$, et la matrice de transfert est constante :

$$T_n = \begin{pmatrix} E & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

Les valeurs propres de T_n sont obtenues en résolvant $\det(T_n - \mu I) = 0$:

$$\det \begin{pmatrix} E - \mu & -1 \\ 1 & -\mu \end{pmatrix} = \mu^2 - E\mu - 1 = 0$$

Les racines sont :

$$\mu_{\pm} = \frac{E \pm \sqrt{E^2 + 4}}{2}$$

Pour $|E| < 2$, $E^2 + 4 < 4$, et les valeurs propres sont complexes avec $|\mu_{\pm}| = 1$, correspondant à des ondes de Bloch délocalisées (voir section 2.1). Ainsi :

$$\lambda_+ = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln |\mu_+|^N = \ln 1 = 0, \quad \xi = \infty$$

Cela confirme que les états sont délocalisés, en accord avec la section 2.1.

5 Statistique des Niveaux dans le Modèle d'Anderson 1D

L'organisation des niveaux d'énergie dans un système quantique désordonné porte des informations cruciales sur la nature de ses états propres. En étudiant la distribution des espacements entre niveaux voisins, cette section explore les signatures spectrales associées aux régimes localisé et délocalisé. En l'absence de désordre, le spectre est parfaitement régulier, tandis qu'un désordre fort conduit à une distribution aléatoire de type Poisson. Entre ces extrêmes, la statistique de type Wigner-Dyson traduit l'émergence de corrélations entre niveaux. Ces analyses spectrales complètent l'étude de la localisation par des critères globaux.

5.1 Régime sans Désordre $W = 0$

Dans l'absence de désordre ($W = 0$), tous les potentiels sur site sont nuls ($\epsilon_n = 0$), et la matrice tridiagonale est déterministe, avec des éléments $A_{i,i+1} = A_{i+1,i} = 1$ et $A_{i,j} = 0$ sinon. Les niveaux d'énergie dépendent des conditions aux limites : périodiques (chaîne fermée) ou ouvertes (chaîne libre).

5.1.1 Conditions Périodiques

Pour une chaîne de N sites avec des conditions périodiques, les états propres sont des ondes de Bloch :

$$|\psi_k\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{j=1}^N e^{ikj} |j\rangle, \quad k = \frac{2\pi n}{N}, \quad n = 0, 1, \dots, N-1$$

Les énergies associées sont :

$$E_k = 2 \cos k = 2 \cos \left(\frac{2\pi n}{N} \right)$$

Pour un grand N , les niveaux sont régulièrement espacés dans l'espace des k . L'espacement entre niveaux voisins est déterminé par la dérivée de l'énergie :

$$\Delta k = \frac{2\pi}{N}, \quad \frac{dE}{dk} = -2 \sin k, \quad S_n \approx \left| \frac{dE}{dk} \right| \Delta k = 2 \sin \left(\frac{2\pi n}{N} \right) \cdot \frac{2\pi}{N}$$

La densité d'états est :

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi \sqrt{4 - E^2}}, \quad E \in [-2, 2]$$

L'espacement moyen local est $\Delta = \frac{1}{\rho(E)}$. La distribution des espacements normalisés $s = \frac{s}{\Delta}$ est une distribution de Dirac :

$$P(s) \approx \delta(s - 1), \quad \text{pour } N \rightarrow \infty$$

Physiquement, l'absence de désordre entraîne un spectre régulier, sans fluctuations aléatoires, caractéristique des systèmes intégrables.

5.1.2 Conditions Ouvertes

Pour une chaîne ouverte, les états propres sont :

$$\psi_i^{(n)} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin \left(\frac{\pi n i}{N+1} \right), \quad n = 1, \dots, N$$

Les énergies sont :

$$E_n = 2 \cos \left(\frac{\pi n}{N+1} \right)$$

L'espacement entre niveaux voisins est :

$$S_n \approx 2 \sin \left(\frac{\pi n}{N+1} \right) \cdot \frac{\pi}{N+1}$$

Comme pour le cas périodique, la distribution des espacements normalisés tend vers une distribution de Dirac, reflétant l'ordre parfait du spectre.

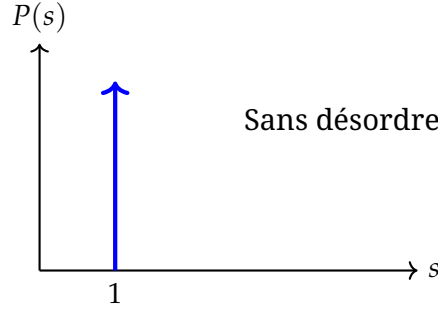


FIGURE 7 – Distribution des espacements normalisés sans désordre ($W = 0$). La distribution de Dirac $P(s) = \delta(s - 1)$ reflète un spectre régulier.

5.2 Régime de Faible Désordre $W \ll 1$

Dans le régime de faible désordre ($W \ll 1$), les potentiels aléatoires $\epsilon_n \sim \mathcal{U} \left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2} \right]$ perturbent légèrement le spectre. Considérons le cas avec conditions ouvertes pour simplifier. La matrice est $H = H_0 + V$, où : - H_0 est la matrice tridiagonale sans désordre ($H_{0,i,i+1} = H_{0,i+1,i} = 1$). - V est diagonal, avec $V_{ii} = \epsilon_i$.

Les états propres de H_0 sont $\psi_i^{(n)} = \sqrt{\frac{2}{N+1}} \sin \left(\frac{\pi n i}{N+1} \right)$, avec énergies $E_n^{(0)} = 2 \cos \left(\frac{\pi n}{N+1} \right)$. La correction d'énergie au premier ordre est :

$$\Delta E_n^{(1)} = \langle \psi_n^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle = \sum_{i=1}^N \epsilon_i \left| \psi_n^{(0)}(i) \right|^2 = \frac{2}{N+1} \sum_{i=1}^N \epsilon_i \sin^2 \left(\frac{\pi n i}{N+1} \right)$$

La variance de $\Delta E_n^{(1)}$ est :

$$\text{Var}(\Delta E_n^{(1)}) = \left(\frac{2}{N+1} \right)^2 \sum_{i=1}^N \sin^4 \left(\frac{\pi n i}{N+1} \right) \cdot \frac{W^2}{12}$$

Puisque $\sin^4 \theta \approx \frac{3}{8}$ en moyenne, $\text{Var}(\Delta E_n^{(1)}) \sim \frac{W^2}{N}$. Les éléments de couplage entre états voisins sont :

$$V_{mn} = \langle \psi_m^{(0)} | V | \psi_n^{(0)} \rangle = \sum_{i=1}^N \epsilon_i \psi_m^{(0)}(i) \psi_n^{(0)}(i)$$

Pour $m \approx n$, V_{mn} induit une répulsion des niveaux, empêchant leur croisement. L'espacement entre niveaux est :

$$S_n = E_{n+1} - E_n \approx (E_{n+1}^{(0)} - E_n^{(0)}) + (\Delta E_{n+1}^{(1)} - \Delta E_n^{(1)}) + \text{termes d'ordre supérieur}$$

Pour analyser la statistique, nous normalisons le spectre par le déphasage spectral :

$$E_n^{\text{norm}} = N \int_{-2}^{E_n} \rho(E) dE, \quad \rho(E) = \frac{1}{\pi\sqrt{4-E^2}}$$

L'intégrale donne :

$$\int_{-2}^E \frac{dE'}{\pi\sqrt{4-E'^2}} = \frac{1}{\pi} \left[\pi - \arccos\left(\frac{E}{2}\right) \right] = 1 - \frac{1}{\pi} \arccos\left(\frac{E}{2}\right)$$

Ainsi, $E_n^{\text{norm}} = N \left[1 - \frac{1}{\pi} \arccos\left(\frac{E_n}{2}\right) \right]$, et les espacements normalisés sont :

$$s_n = E_{n+1}^{\text{norm}} - E_n^{\text{norm}}, \quad \langle s_n \rangle = 1$$

Dans ce régime, la statistique des espacements suit la distribution de Wigner-Dyson pour l'ensemble orthogonal gaussien (GOE) :

$$P_{\text{GOE}}(s) = \frac{\pi s}{2} e^{-\frac{\pi s^2}{4}}$$

Cette distribution présente une répulsion linéaire ($P(s) \sim s$ pour $s \rightarrow 0$) et un maximum autour de $s \approx 1$, reflétant les corrélations quantiques entre niveaux dues à la délocalisation partielle.

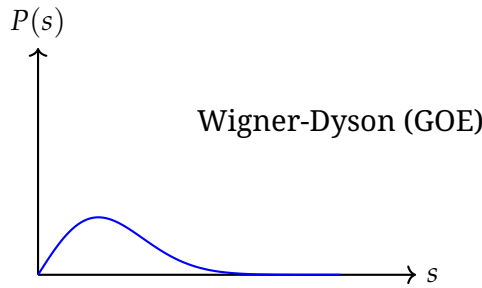


FIGURE 8 – Distribution des espacements normalisés pour un faible désordre ($W \ll 1$). La distribution $P_{\text{GOE}}(s)$ montre une répulsion linéaire pour $s \rightarrow 0$.

5.3 Régime de Fort Désordre $W \gg 1$

Dans le régime de fort désordre ($W \gg 1$), les éléments diagonaux ϵ_n dominent, et la matrice est approximativement diagonale, avec $H_{ii} = \epsilon_i$. Le terme de saut $T_{i,i+1} = T_{i+1,i} = 1$ est une perturbation faible. Les énergies non perturbées sont $E_i^{(0)} = \epsilon_i$, avec une distribution uniforme sur $[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}]$. La correction d'énergie au second ordre est :

$$\Delta E_i^{(2)} = \sum_{j \neq i} \frac{|T_{ij}|^2}{E_i^{(0)} - E_j^{(0)}} = \frac{|T_{i,i+1}|^2}{\epsilon_i - \epsilon_{i+1}} + \frac{|T_{i,i-1}|^2}{\epsilon_i - \epsilon_{i-1}}$$

Puisque $|T_{ij}| = 1$ pour les voisins et $|\epsilon_i - \epsilon_j| \sim W$, $\Delta E_i^{(2)} \sim \frac{1}{W} \ll W$. Les niveaux d'énergie sont donc approximativement ϵ_i , et leur distribution est celle d'une variable aléatoire uniforme, avec une densité $\rho(E) = \frac{1}{W}$. Les espacements suivent une loi de Poisson :

$$P(s) = e^{-s}$$

où s est l'espacement normalisé par l'espacement moyen $\Delta = \frac{W}{N}$. Cette distribution reflète l'absence de corrélations entre niveaux, car les états sont fortement localisés (voir section 2.3), sans interaction significative.

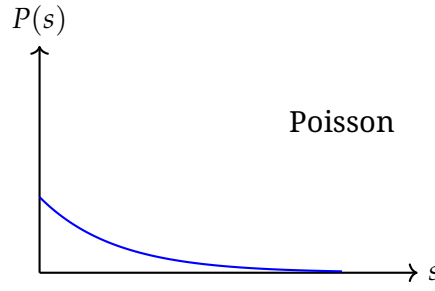


FIGURE 9 – Distribution des espacements normalisés pour un fort désordre ($W \gg 1$). La loi de Poisson $P(s) = e^{-s}$ indique une absence de corrélation.

5.4 Résumé des Régimes Statistiques

La statistique des niveaux permet de caractériser la nature des états propres au sein d'un système désordonné, et en particulier de suivre la transition entre régimes délocalisés et localisés :

- **Sans désordre** ($W = 0$) : la distribution des espacements normalisés est donnée par

$$P(s) = \delta(s - 1)$$

ce qui reflète un spectre parfaitement régulier, typique d'un système intégrable.

- **Désordre faible** ($W \ll 1$) : les états restent délocalisés et les niveaux montrent une forte corrélation, caractérisée par la statistique de type GOE :

$$P_{\text{GOE}}(s) = \frac{\pi s}{2} e^{-\frac{\pi s^2}{4}}$$

indiquant une répulsion des niveaux, signature d'un chaos quantique.

- **Désordre fort** ($W \gg 1$) : les niveaux deviennent statistiquement indépendants, et la distribution converge vers une loi de Poisson :

$$P(s) = e^{-s}$$

cohérente avec une forte localisation spatiale des états propres.

Ces résultats, illustrés dans les figures 7, 8 et 9, mettent en évidence l'évolution des corrélations spectrales en fonction de l'intensité du désordre. Ils complètent l'analyse fondée sur l'IPR (section 3), qui quantifie la transition métal-isolant à l'échelle des états individuels.