1 Particules en Interaction dans le Modèle d'Anderson 1D

L'ajout d'interactions entre particules enrichit considérablement le paysage physique du modèle d'Anderson. Cette section étudie le cas de deux particules interagissant sur une chaîne unidimensionnelle désordonnée, en construisant l'Hamiltonien correspondant, l'espace de Hilbert, et les équations de Schrödinger à deux corps. L'objectif est de comprendre comment l'interaction modifie les longueurs de localisation et la structure des états propres. En explorant différents régimes d'interaction (attractive, répulsive, ou nulle), cette partie met en lumière des effets collectifs tels que la délocalisation induite par l'interaction, absents dans le modèle à une seule particule.

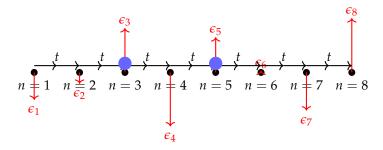


FIGURE 1 – Chaîne 1D avec désordre aléatoire ϵ_n , hopping t, et deux particules (bleues).

1.1 Hamiltonien et Opérateurs

L'Hamiltonien pour une chaîne 1D de N sites avec deux particules en interaction est :

$$H = H_0 + H_{int}$$

où : - Terme cinétique et désordre (H_0) :

$$H_0 = -t \sum_{n=1}^{N-1} \left(c_n^{\dagger} c_{n+1} + c_{n+1}^{\dagger} c_n \right) + \sum_{n=1}^{N} \epsilon_n c_n^{\dagger} c_n$$

avec t=1 (amplitude de saut), $\epsilon_n \in \left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right]$ (potentiel aléatoire, $\epsilon_n \sim \mathcal{U}\left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right]$), et $W \geq 0$ (force du désordre).

- Terme d'interaction (H_{int}):

$$H_{\rm int} = U \sum_{n=1}^{N} c_n^{\dagger} c_n c_n^{\dagger} c_n$$

où *U* est l'énergie d'interaction sur site.

Signification des opérateurs

- c_n^{\dagger} : Opérateur de création, ajoute une particule au site n.
- c_n : Opérateur d'annihilation, supprime une particule au site n.
- $c_n^{\dagger}c_n$: Opérateur nombre, qui compte le nombre de particules au site n.
- *U* : Intensité de l'interaction entre deux particules occupant le même site.
- Terme hermitien conjugué (h.c.) dans H_0 , tel que $c_{n+1}^{\dagger}c_n$, représente l'adjoint de $c_n^{\dagger}c_{n+1}$, garantissant l'hermiticité de l'hamiltonien H.

Exemple d'application : Considérons une chaîne finie unidimensionnelle de N=3 sites. L'état vide (aucune particule) est noté $|0\rangle$. Appliquons successivement des opérateurs :

- $c_2^{\dagger} |0\rangle = |2\rangle$: création d'une particule au site 2.
- $c_1 |2\rangle = 0$: annihilation impossible, car aucune particule n'est présente au site 1.
- $c_1^{\dagger}c_2^{\dagger}|0\rangle = |1,2\rangle$: deux particules sont créées respectivement aux sites 1 et 2.

1.2 Espace de Hilbert

Pour une particule, l'espace de Hilbert est \mathbb{C}^N , avec la base $\{|n\rangle \mid n=1,\ldots,N\}$, où $|n\rangle = c_n^\dagger |0\rangle$. Pour deux particules (fermions ou bosons), l'espace dépend de la statistique : - Fermions : Les particules sont antisymétriques, l'espace est $\bigwedge^2 \mathbb{C}^N$, de dimension $\binom{N}{2}$. La base est :

$$|n_1, n_2\rangle = c_{n_1}^{\dagger} c_{n_2}^{\dagger} |0\rangle, \quad 1 \le n_1 < n_2 \le N$$

- Bosons : Les particules sont symétriques, l'espace est $\mathrm{Sym}^2\mathbb{C}^N$, de dimension $\binom{N+1}{2}$. La base inclut :

$$|n_1, n_2\rangle = c_{n_1}^{\dagger} c_{n_2}^{\dagger} |0\rangle$$
, $1 \le n_1 \le n_2 \le N$

avec normalisation pour $n_1=n_2$. Pour $n_1=n_2=n$, $|n,n\rangle=(c_n^{\dagger})^2|0\rangle$. L'Hamiltonien peut être décomposé comme :

$$H = H_0 + H_{pot} + H_{int}$$

où : - Terme cinétique (H_0) : Pour $n_1 < n_2$,

$$H_0|n_1,n_2\rangle = -(|n_1+1,n_2\rangle + |n_1-1,n_2\rangle + |n_1,n_2+1\rangle + |n_1,n_2-1\rangle)$$

avec des termes nuls si $n_1 \pm 1$ ou $n_2 \pm 1$ sortent de $\{1, \dots, N\}$. - Terme de désordre (H_{pot}) :

$$H_{\mathrm{pot}} |n_{1}, n_{2}\rangle = (\epsilon_{n_{1}} + \epsilon_{n_{2}}) |n_{1}, n_{2}\rangle$$

où ϵ_{n_1} , ϵ_{n_2} sont les potentiels aléatoires aux sites n_1 , n_2 . - Terme d'interaction ($H_{\rm int}$):

$$H_{\text{int}} | n_1, n_2 \rangle = U \delta_{n_1, n_2} | n_1, n_2 \rangle$$

 $H_{\rm int}$ est nul si $n_1 \neq n_2$. Pour bosons, $H_{\rm int}$ contribue lorsque les deux particules occupent le même site ($n_1 = n_2$). Pour fermions, $|n_1, n_1\rangle = 0$ (principe d'exclusion), donc $H_{\rm int} = 0$. Dans ce cas, le problème se réduit à deux particules non interagissantes avec antisymétrisation

L'équation de Schrödinger est $H\psi = E\psi$, où $\psi = \sum_{n_1,n_2} \phi(n_1,n_2) |n_1,n_2\rangle$. Dans la base $|n_1,n_2\rangle$, pour bosons :

$$E \phi(n_1, n_2) = -\left[\phi(n_1 + 1, n_2) + \phi(n_1 - 1, n_2) + \phi(n_1, n_2 + 1) + \phi(n_1, n_2 - 1)\right] + (\epsilon_{n_1} + \epsilon_{n_2}) \phi(n_1, n_2) + U\delta_{n_1, n_2} \phi(n_1, n_2)$$

Symétrie : Pour bosons, $\phi(n_1,n_2)=\phi(n_2,n_1)$. Pour fermions, $\phi(n_1,n_2)=-\phi(n_2,n_1)$, et $\phi(n_1,n_1)=0$.

1.3 Cas U = 0

Sans interaction (U=0), l'équation devient separable. Cherchons une solution sous forme de produit :

$$\phi(n_1, n_2) = \theta_i(n_1)\theta_j(n_2)$$

Substituons dans (1.2) (avec U = 0):

$$E \theta_{i}(n_{1})\theta_{j}(n_{2}) = -\left[\theta_{i}(n_{1}+1) + \theta_{i}(n_{1}-1)\right]\theta_{j}(n_{2}) - \theta_{i}(n_{1})\left[\theta_{j}(n_{2}+1) + \theta_{j}(n_{2}-1)\right] + (\epsilon_{n_{1}} + \epsilon_{n_{2}})\theta_{i}(n_{1})\theta_{j}(n_{2})$$

Divisons par $\theta_i(n_1)\theta_i(n_2)$, et séparons les variables :

$$-\frac{\theta_i(n_1+1) + \theta_i(n_1-1)}{\theta_i(n_1)} + \epsilon_{n_1} + -\frac{\theta_j(n_2+1) + \theta_j(n_2-1)}{\theta_j(n_2)} + \epsilon_{n_2} = E$$

Chaque terme dépend d'une seule variable, donc :

$$-\theta_i(n_1+1)-\theta_i(n_1-1)+\epsilon_{n_1}\theta_i(n_1)=E_i\theta_i(n_1)$$

$$-\theta_{j}(n_{2}+1)-\theta_{j}(n_{2}-1)+\epsilon_{n_{2}}\theta_{j}(n_{2})=E_{j}\theta_{j}(n_{2})$$

L'énergie totale est :

$$E = E_i + E_j$$

Pour un fort désordre ($W \gg 1$), les solutions sont localisées :

$$\theta_i(n_1) \approx \delta_{n_1,n_i^0}, \quad \theta_j(n_2) \approx \delta_{n_2,n_i^0}$$

donnant un état localisé :

$$\phi(n_1, n_2) \approx \delta_{n_1, n_i^0} \delta_{n_2, n_i^0}$$

1.4 Cas $U \neq 0$

Pour $U \neq 0$, définissons les coordonnées de centre de masse et relative :

$$R = \frac{n_1 + n_2}{2}, \quad r = n_1 - n_2$$

Cherchons des états symétriques pour bosons :

$$\phi(n_1, n_2) = \Phi(R)\phi(r)$$

Substituons dans (1.2). Pour $r \neq 0$, le terme $U\delta_{n_1,n_2} = 0$. Considérons un désordre nul $(\epsilon_n = 0)$ pour simplifier. L'équation devient :

$$E\Phi(R)\phi(r) = -\Phi(R)\left[\phi(r+1) + \phi(r-1)\right] - \phi(r)\left[\Phi(R+1/2) + \Phi(R-1/2)\right]$$

Séparons les variables en supposant $\Phi(R)$ localisé autour de R=0. Pour la partie relative :

$$E\phi(r) = -2\left[\phi(r+1) + \phi(r-1)\right], \quad r \neq 0$$

Pour r = 0, le terme d'interaction donne :

$$E\phi(0) = -2[\phi(1) + \phi(-1)] + U\phi(0)$$

Cherchons une solution liée:

$$\phi(r) = Ae^{-\lambda|r|}, \quad \lambda > 0$$

Pour $r \neq 0$, substituons dans (1.4):

$$EAe^{-\lambda|r|} = -2A \left[e^{-\lambda(|r|+1)} + e^{-\lambda(|r|-1)} \right]$$

Pour r > 0, divisons par $Ae^{-\lambda r}$:

$$E = -2\left(e^{-\lambda} + e^{\lambda}\right) = -4\cosh\lambda$$

Pour r=0, substituons dans (1.4), en notant $\phi(1)=\phi(-1)=Ae^{-\lambda}$:

$$E\phi(0) = -2\left[Ae^{-\lambda} + Ae^{-\lambda}\right] + UA = -4Ae^{-\lambda} + UA$$

Ainsi:

$$E = -4e^{-\lambda} + U$$

Égalisons les deux expressions de E:

$$-4\cosh\lambda = -4e^{-\lambda} + U$$

Réarrangeons:

$$4\cosh\lambda - 4e^{-\lambda} = -U$$

Divisons par 4:

$$\cosh \lambda - e^{-\lambda} = -\frac{U}{4}$$

Puisque $\cosh \lambda = \frac{e^{\lambda} + e^{-\lambda}}{2}$, substituons :

$$\frac{e^{\lambda} + e^{-\lambda}}{2} - e^{-\lambda} = -\frac{U}{4}$$

Multiplions par 2:

$$e^{\lambda} + e^{-\lambda} - 2e^{-\lambda} = e^{\lambda} - e^{-\lambda} = -\frac{U}{2}$$

Ainsi:

$$\sinh \lambda = -\frac{U}{4}$$

La longueur de localisation relative est :

$$\xi_r = \frac{1}{\lambda} = \frac{1}{\sinh^{-1}\left(-\frac{U}{4}\right)}$$

Cas U>0 (répulsion) : $\sinh\lambda<0$, donc $\lambda<0$, ce qui contredit $\lambda>0$. Aucune solution liée n'existe, les particules s'éloignent.

Cas U<0 (attraction) : $\sinh\lambda>0$, donc $\lambda>0$, permettant une solution liée. Les états de Shiba (ou Shepanski) apparaissent, correspondant à des paires liées localisées. La fonction d'onde à deux particules est définie sur \mathbb{Z}^2 :

$$\phi(n_1, n_2) \approx e^{-\frac{\sqrt{(n_1 - n_1^0)^2 + (n_2 - n_2^0)^2}}{\xi_{\text{tot}}}}$$

En coordonnées r et R, pour U < 0:

$$|\phi(n_1,n_2)|^2 \approx e^{-\frac{|r|}{\xi_r}} e^{-\frac{|R|}{\xi_R}}$$

où : - $\xi_r = \frac{1}{\sinh^{-1}(-\frac{U}{4})}$. - $\xi_R \approx \frac{96}{W^2}$ (localisation du centre de masse, similaire au cas 1D, section ??). La longueur de localisation totale est :

$$\frac{1}{\xi_{\text{tot}}^2} = \frac{1}{\xi_r^2} + \frac{1}{\xi_R^2}$$

La position moyenne est :

$$\langle n_1 \rangle = \langle n_2 \rangle \approx n_1^0, \quad \langle r \rangle = 0, \quad \langle R \rangle \approx \frac{n_1^0 + n_2^0}{2}$$

— $U = 0, W \gg 1$:

Particules non interagissantes, fortement localisées.

Longueur de localisation : $\xi \sim \frac{1}{\ln\left(\frac{W}{2}\right)}$

— U < 0, $W \ll 1$:

Formation de paires liées.

- Longueur de liaison relative : $\xi_r \sim -\frac{4}{U}$
- Localisation du centre de masse : $\xi_R \sim \frac{96}{W^2}$
- U > 0, $W \gg 1$:

Répulsion empêche la formation de paires liées.

Les particules restent localisées individuellement.

1.5 Calcul de l'IPR pour deux particules

L'IPR pour deux particules est :

IPR =
$$\sum_{n_1, n_2 \in \mathbb{Z}} |\phi(n_1, n_2)|^4$$

On approxime l'état par une fonction gaussienne bidimensionnelle centrée en (n_1^0,n_2^0) :

$$|\psi(n_1, n_2)|^2 = \frac{1}{2\pi\xi_{\text{tot}}^2} \exp\left(-\frac{(n_1 - n_1^0)^2 + (n_2 - n_2^0)^2}{2\xi_{\text{tot}}^2}\right)$$

On calcule l'Inverse Participation Ratio (IPR) pour deux particules :

$$IPR^{(2)} = \iint_{-\infty}^{\infty} |\psi(n_1, n_2)|^4 dn_1 dn_2$$

En substituant l'expression gaussienne :

$$IPR^{(2)} = \iint_{-\infty}^{\infty} \left(\frac{1}{2\pi\xi_{\text{tot}}^2}\right)^2 \exp\left(-\frac{(n_1 - n_1^0)^2 + (n_2 - n_2^0)^2}{\xi_{\text{tot}}^2}\right) dn_1 dn_2$$

Ce qui devient :

$$IPR^{(2)} = \frac{1}{4\pi^2 \xi_{\text{tot}}^4} \iint_{-\infty}^{\infty} \exp\left(-\frac{(n_1 - n_1^0)^2 + (n_2 - n_2^0)^2}{\xi_{\text{tot}}^2}\right) dn_1 dn_2$$

Changement de variables :

$$u = \frac{n_1 - n_1^0}{\xi_{\text{tot}}}, \quad v = \frac{n_2 - n_2^0}{\xi_{\text{tot}}}$$

$$dn_1 dn_2 = \xi_{\text{tot}}^2 du dv$$

Les bornes restent $-\infty$ à $+\infty$. On obtient :

$$IPR^{(2)} = \frac{1}{4\pi^2 \xi_{tot}^2} \iint_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2 - v^2} du \, dv$$

Factorisation des intégrales gaussiennes :

$$IPR^{(2)} = \frac{1}{4\pi^2 \xi_{\text{tot}}^2} \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-u^2} du \right) \left(\int_{-\infty}^{\infty} e^{-v^2} dv \right) = \frac{1}{4\pi \xi_{\text{tot}}^2}$$

Pour U < 0, ξ_{tot} est dominé par ξ_r , donnant un IPR plus grand qu'en l'absence d'interaction.

1.6 Relation entre longueurs de localisation

La fonction d'onde stationnaire à deux particules dans un système unidimensionnel désordonné peut présenter une décroissance exponentielle anisotrope, modulée différemment selon la séparation relative des particules et la position de leur centre de masse. Une forme approchée réaliste pour la décroissance de $|\psi(n_1, n_2)|$ est donnée par :

$$|\psi(n_1, n_2)| \sim \exp\left(-\sqrt{\left(\frac{r}{\zeta_r}\right)^2 + \left(\frac{R}{\zeta_R}\right)^2}\right)$$

où ζ_r , ζ_R sont les longueurs de localisation associées respectivement à ces deux coordonnées.

Cette décroissance *ellipsoïdale* reflète la structure spatiale de la fonction d'onde, souvent observée dans des simulations numériques pour deux particules en interaction dans un potentiel aléatoire.

En comparant cette expression à une décroissance globale simple :

$$|\psi(n_1,n_2)| \sim \exp\left(-\frac{\rho}{\zeta_{\mathrm{tot}}}\right)$$
, où $\rho = \sqrt{r^2 + R^2}$

on peut extraire une relation géométrique entre les longueurs de localisation :

$$\frac{1}{\zeta_{\text{tot}}^2} = \frac{1}{\zeta_r^2} + \frac{1}{\zeta_R^2}$$

Cette formule permet d'interpréter la localisation globale comme résultant d'un couplage entre deux mécanismes distincts : la localisation due à la séparation relative des particules (r) et celle associée à leur mouvement collectif (R).

Nous analysons maintenant cette relation dans différents régimes d'interaction :

1. Cas U = 0 (absence d'interaction)

En l'absence d'interaction, les deux particules évoluent indépendamment dans le désordre. Leurs fonctions d'onde individuelles sont localisées avec une même longueur ζ_1 . Il s'ensuit que :

$$\zeta_r pprox \zeta_1, \qquad \zeta_R pprox \zeta_1 \quad \Rightarrow \quad rac{1}{\zeta_{ ext{tot}}^2} = rac{2}{\zeta_1^2} \quad \Rightarrow \quad \zeta_{ ext{tot}} = rac{\zeta_1}{\sqrt{2}}$$

La localisation totale est plus forte que celle d'une seule particule, car l'état est concentré dans une région conjointe de l'espace.

2. Cas $U \gg t$ (interaction très forte)

Une interaction fortement répulsive interdit aux deux particules d'occuper simultanément le même site. Cela impose une contrainte sur la séparation relative r, conduisant à :

$$\zeta_r \ll \zeta_R \quad \Rightarrow \quad \frac{1}{\zeta_{\text{tot}}^2} \approx \frac{1}{\zeta_r^2} \quad \Rightarrow \quad \zeta_{\text{tot}} \approx \zeta_r$$

Dans ce régime, la localisation est dominée par la variable relative : l'état est fortement contraint en r, tandis que le centre de masse reste relativement étalé.

3. Cas intermédiaire $U \sim t$

Pour des interactions modérées, les deux particules restent corrélées mais non contraintes de façon rigide. On a généralement :

$$\zeta_r < \zeta_R$$
 mais ζ_R reste fini

ce qui donne une localisation totale intermédiaire :

$$\zeta_{\text{tot}} < \min(\zeta_r, \zeta_R)$$

Dans ce cas, les deux composantes de la fonction d'onde participent de manière significative à la décroissance globale, et la structure de l'état est réellement ellipsoïdale.

Cette analyse montre que la mesure de ζ_{tot} seule ne suffit pas à caractériser le comportement localisé du système : il est essentiel d'examiner aussi ζ_r et ζ_R séparément pour comprendre la nature des corrélations induites par l'interaction.