1 Dynamique Temporelle de la Localisation dans le Modèle d'Anderson 1D

La localisation d'Anderson, étudiée dans les sections précédentes à travers l'équation de Schrödinger stationnaire, révèle comment le désordre affecte les états propres et leur extension spatiale. Cependant, pour comprendre pleinement le phénomène de localisation, il est essentiel d'explorer la dynamique temporelle : comment un état quantique initialement préparé, tel qu'un paquet d'onde localisé, évolue dans un réseau désordonné. Cette section analyse l'évolution temporelle de la fonction d'onde $|\psi_n(t)|^2$ dans le modèle d'Anderson unidimensionnel (1D), en comparant trois régimes distincts.

1.1 Formulation de l'Équation de Schrödinger Dépendante du Temps

Dans le modèle d'Anderson 1D, l'Hamiltonien est donné par (voir section 2.1) :

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

L'équation de Schrödinger dépendante du temps s'écrit :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t}|\psi(t)\rangle = H|\psi(t)\rangle$$

où $|\psi(t)\rangle = \sum_n \psi_n(t)|n\rangle$ est l'état quantique, et $\psi_n(t) = \langle n|\psi(t)\rangle$ est l'amplitude sur le site n à l'instant t. En projetant sur $\langle n|$, on obtient :

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n(t)}{\partial t} = \epsilon_n \psi_n(t) - t\left(\psi_{n+1}(t) + \psi_{n-1}(t)\right)$$

Note pédagogique : Cette équation décrit l'évolution temporelle de l'amplitude $\psi_n(t)$ sous l'effet combiné du potentiel désordonné ϵ_n et du couplage cinétique entre sites voisins. Contrairement à l'équation stationnaire, qui donne des états propres fixes, l'équation dépendante du temps permet de suivre la propagation (ou l'absence de propagation) d'un paquet d'onde initialement localisé.
Pour analyser la dynamique, nous initialisons le système avec un paquet d'onde localisé, par exemple :

$$\psi_n(0) = \delta_{n,n_0}$$

où l'électron est initialement localisé sur le site n_0. L'objectif est de calculer $|\psi_n(t)|^2$, la probabilité de présence sur le site n à l'instant t, et d'observer si le paquet s'étend (propagation balistique ou diffusive) ou reste confiné (localisation).

1.2 Régime sans Désordre $W = 0$

Dans l'absence de désordre ($W = 0$), tous les $\epsilon_n = 0$, et l'Hamiltonien représente un réseau périodique parfait. L'équation de Schrödinger devient :

$$i\hbar \frac{\partial \psi_n(t)}{\partial t} = -t\left(\psi_{n+1}(t) + \psi_{n-1}(t)\right)$$

Les états propres de H sont des ondes de Bloch, $\psi_n = e^{ikn}/\sqrt{N}$, avec des énergies $E_k = -2t\cos k$ (voir section 3.1). Pour résoudre l'équation, nous utilisons la transformée de Fourier :

$$\psi_n(t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\pi}^{\pi} \tilde{\psi}(k,t) e^{ikn} dk$$

où $\tilde{\psi}(k,t)$ est la fonction d'onde en espace réciproque. En substituant dans l'équation, on obtient :

$$i\hbar\frac{\partial\tilde{\psi}(k,t)}{\partial t} = -2t\cos k\,\tilde{\psi}(k,t)$$

La solution est :

$$\tilde{\psi}(k,t) = \tilde{\psi}(k,0)e^{-i(-2t\cos k)t/\hbar}$$

Pour un paquet initialement localisé, $\psi_n(0) = \delta_{n,n_0}$, la transformée initiale est $\tilde{\psi}(k,0) = e^{-ikn_0}/\sqrt{2\pi}$. Ainsi :

$$\psi_n(t) = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} e^{-ikn_0}e^{ikn}e^{i2t\cos kt/\hbar}dk$$

Cette intégrale peut être exprimée en termes de fonctions de Bessel de première espèce :

$$\psi_n(t) = e^{i\pi(n-n_0)/2}J_{n-n_0}\left(\frac{2t}{\hbar}t\right)$$

où $J_m(z)$ est la fonction de Bessel d'ordre m. La probabilité de présence est :

$$|\psi_n(t)|^2 = \left|J_{n-n_0}\left(\frac{2t}{\hbar}t\right)\right|^2$$

Note pédagogique : La fonction de Bessel $J_m(z)$ décroît rapidement pour $|m| > z$. Ainsi, le paquet d'onde s'étend balistiquement avec une vitesse proportionnelle à t, atteignant des sites à une distance $|n-n_0| \approx 2tt/\hbar$ du site initial n_0. Cette propagation est caractéristique d'un régime sans désordre, où les électrons se déplacent librement, comme dans un conducteur parfait.

FIGURE 1 – Propagation balistique d'un paquet d'onde dans un réseau périodique ($W = 0$). La probabilité $|\psi_n(t)|^2$ s'étend symétriquement autour du site initial n_0, suivant la fonction de Bessel.

1.3 Régime de Faible Désordre $W \ll t$

Dans le régime de faible désordre ($W \ll t$), les potentiels aléatoires $\epsilon_n \sim \mathcal{U}\left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right]$ perturbent légèrement la propagation. L'équation de Schrödinger reste :

$$i\hbar\frac{\partial\psi_n(t)}{\partial t} = \epsilon_n\psi_n(t) - t\left(\psi_{n+1}(t) + \psi_{n-1}(t)\right)$$

Pour simuler l'évolution, nous utilisons une méthode numérique, comme la méthode de Crank-Nicolson, qui est implicite et conserve la norme de la fonction d'onde. Considérons un réseau de $N = 1000$ sites avec des conditions aux limites périodiques. Nous initialisons $\psi_n(0) = \delta_{n,N/2}$ et calculons $\psi_n(t)$ pour différents W/t.
La dynamique dans ce régime est diffusive plutôt que balistique. La largeur du paquet d'onde, mesurée par l'écart-type spatial :

$$\sigma(t) = \sqrt{\sum_n (n-\langle n\rangle)^2|\psi_n(t)|^2}, \quad \langle n\rangle = \sum_n n|\psi_n(t)|^2$$

croît comme $\sigma(t) \sim \sqrt{Dt}$, où D est le coefficient de diffusion. En utilisant la théorie des perturbations (voir section 3.2), le désordre réduit D par rapport au cas $W = 0$. Numériquement, pour $W/t = 0.1$, on observe une propagation diffusive, mais avec une amplitude décroissante due à des interférences destructives partielles, comme illustré dans la figure 2.

FIGURE 2 – Propagation diffusive dans un régime de faible désordre ($W \ll t$). La probabilité $|\psi_n(t)|^2$ s'étend plus lentement qu'en régime balistique, avec une amplitude réduite.

1.4 Régime de Fort Désordre $W \gg t$

Dans le régime de fort désordre ($W \gg t$), les potentiels aléatoires dominent, et les états propres sont fortement localisés (voir section 3.3). L'équation de Schrödinger est la même, mais $\epsilon_n \gg t$ supprime presque entièrement le couplage entre sites voisins. En reprenant la méthode numérique, nous constatons que le paquet d'onde reste largement confiné près du site initial n_0. La probabilité $|\psi_n(t)|^2$ présente une décroissance exponentielle rapide :

$$|\psi_n(t)|^2 \sim e^{-2\lambda|n-n_0|}$$

où $\lambda \approx \ln\left(\frac{W}{2t}\right) - 1 + \frac{2E^2}{W^2}$ est l'exposant de Lyapunov (voir section 3.3). La largeur $\sigma(t)$ reste finie et converge vers la longueur de localisation $\xi = 1/\lambda$, indiquant une absence de propagation significative.

Note pédagogique : Ce phénomène est la signature de la localisation d'Anderson. Contrairement aux régimes précédents, le désordre fort inhibe la diffusion quantique, confinant l'électron à une région spatiale limitée, comme dans un isolant parfait.

FIGURE 3 – Localisation dans un régime de fort désordre ($W \gg t$). La probabilité $|\psi_n(t)|^2$ reste concentrée autour du site initial, avec une décroissance exponentielle.

1.5 Simulation Numérique

Pour simuler l'évolution de $|\psi_n(t)|^2$, nous utilisons l'approximation de Crank-Nicolson. Discrétisons le temps en pas Δt et écrivons l'équation sous forme matricielle :

$$i\hbar\frac{\psi(t+\Delta t)-\psi(t)}{\Delta t} = \frac{H\psi(t+\Delta t)+H\psi(t)}{2}$$

Réarrangeons :

$$\left(I + \frac{i\Delta t}{2\hbar}H\right)\psi(t+\Delta t) = \left(I - \frac{i\Delta t}{2\hbar}H\right)\psi(t)$$

Cette équation est résolue itérativement pour $\psi(t+\Delta t)$. Pour $N = 1000$, $t = 1$, $\hbar = 1$, et $\Delta t = 0.01$, nous calculons $|\psi_n(t)|^2$ pour $W/t = 0, 0.1, 10$. Les résultats confirment :

— **Sans désordre (**$W = 0$**)** : Propagation balistique, $\sigma(t) \sim t$.

— **Faible désordre (**$W = 0.1t$**)** : Propagation diffusive, $\sigma(t) \sim \sqrt{t}$.

— **Fort désordre (**$W = 10t$**)** : Localisation, $\sigma(t) \approx \xi$.

1.6 Synthèse et Implications

Le tableau 1 résume les comportements dynamiques observés dans les trois régimes.

Note pédagogique : Ces résultats mettent en évidence l'impact du désordre sur la dynamique quantique. Dans le régime sans désordre, la propagation est balistique, typique des conducteurs parfaits. Le faible désordre introduit une diffusion réduite, tandis que le fort désordre conduit à une localisation complète, empêchant tout transport électronique. Ces comportements sont cruciaux pour comprendre les propriétés des matériaux désordonnés, comme les semi-conducteurs dopés ou les verres.

TABLE 1 – Résumé des comportements dynamiques dans le modèle d'Anderson 1D.

Régime	Propagation	Largeur $\sigma(t)$	Comportement
Sans désordre ($W = 0$)	Balistique	$\sim t$	Onde de Bloch étendue
Faible désordre ($W \ll t$)	Diffusive	$\sim \sqrt{Dt}$	Localisation partielle
Fort désordre ($W \gg t$)	Localisée	$\sim \xi$	Localisation forte