

UNIVERSITÉ PAUL SABATIER



THÈSE DE DOCTORAT

présentée pour obtenir le grade de Docteur en Physique

Spécialité : Physique Théorique

par

José Lages

Phase de bi-particules localisées par interaction attractive dans un milieu aléatoire

Thèse soutenue le Vendredi 19 octobre 2001
à l'I.R.S.A.M.C., Université Paul Sabatier, Toulouse,
devant le jury composé de :

Mr. Carlo W. J. BEENAKKER	Rapporteur
Mr. Benoît DOUCOT	Examineur
Mr. Klaus M. FRAHM	Directeur de Thèse
Mr. Gilles MONTAMBAUX	Examineur
Mr. Jean-Louis PICHARD	Rapporteur
Mr. Didier POILBLANC	Examineur
Mr. Dima L. SHEPELYANSKY	Examineur
Mr. Erik S. SØRENSEN	Président du Jury

Phase de bi-particules localisées par interaction attractive dans un milieu aléatoire

JOSÉ LAGES

19 octobre 2001

Remerciements

Ce travail de thèse a été réalisé au sein du groupe de Physique Théorique du Laboratoire de Physique Quantique de l'Université Paul Sabatier.

Je remercie Klaus Frahm d'avoir accepté que je sois son premier étudiant de thèse. Grâce à lui j'ai pu m'initier aux techniques supersymétriques en matière condensée.

Je remercie Dima Shepelyansky avec qui j'ai eu la chance de collaborer étroitement durant ces trois années de thèse. Nos discussions m'ont très souvent éclairé et m'ont permis d'avancer constamment dans mon travail de recherche.

Merci à Giuliano Benenti avec qui j'ai eu grand plaisir à travailler durant son séjour à Toulouse. Merci également à Bhargavi Srinivasan qui m'a initié aux calculs Monte Carlo quantiques.

Je remercie sincèrement Carlo Beenakker et Jean-Louis Pichard de m'avoir fait l'honneur d'être les rapporteurs de mon manuscrit de thèse. Je suis également infiniment reconnaissant à Benoît Douçot, Gilles Montambaux et Didier Poilblanc d'avoir chacun accepté de participer à mon jury de thèse ainsi qu'à Erik Sørensen qui a eu la solennelle tâche de le présider. L'ensemble de leurs critiques et remarques sur mon travail de thèse constitue pour moi un encouragement très important pour la suite de mes recherches. Qu'ils trouvent tous ici l'expression de ma sincère gratitude.

Merci à Bertrand Georgeot pour les conseils avisés qu'il m'a donné au cours de cette dernière année de thèse et pour avoir relu avec attention le premier chapitre de mon manuscrit.

Merci à Alain Bérard et Hervé Mohrbach avec qui j'ai pu m'évader de temps en temps sur d'autres sujets de recherche que ceux présentés ici.

Je remercie également chaleureusement toutes les personnes qui, au hasard des différentes rencontres et conférences, m'ont permis d'échanger des points de vues sur différents domaines qu'ils aient été de nature scientifique ou non. Ainsi j'ai le plaisir de remercier plus particulièrement Miguel Araújo, Dionys Baeriswyl, José Carmelo, Philippe Jacquod, Rodolfo Jalabert, Pedro Sacramento, Vítor Vieira, Xavier Waintal et Dietmar Weinmann.

Je remercie les membres du groupe de Physique Théorique de m'avoir accueilli ainsi que les membres et personnels de l'Institut de Recherche sur les Systèmes Atomiques ou Moléculaires Complexes. Merci à Ming Ma qui a corrigé les fautes d'orthographe de mon manuscrit ainsi qu'à Éric Giglio pour m'avoir supporté comme collègue de bureau. Merci aussi à Raphaël Cherrier, Olivier Chiappa, Nicolas Laflorencie, Benjamin Levi, Fabien Megi, Simone Montangero, Andreas Pohl, Andrei Pomeransky, Dominique Spehner et Marcello Terraneo pour les bons moments passés ensemble.

Merci à toute ma famille et surtout à vous, João et Deolinda, pour m'avoir tout donné.

Table des matières

Remerciements	iii
Préambule	xiii
1 Introduction	17
1.1 Problème de Cooper	17
1.1.1 Origine de l'interaction attractive	18
1.1.2 Instabilité de la mer de Fermi	19
1.1.2.a Énergie de liaison des particules	20
1.1.2.b Longueur de corrélation	22
1.1.2.c Température critique	23
1.1.2.d Discussion sur l'ansatz de Cooper	24
1.2 Transition Métal-Isolant d'Anderson	24
1.2.1 Description du modèle	24
1.2.2 Théorie d'échelle de la localisation	26
1.2.2.a Forte conductance $g \gg 1$	27
1.2.2.b Faible conductance $g \ll 1$	27
1.2.3 Propriétés statistiques de la transition d'Anderson	29
1.2.3.a Domaines d'application des matrices aléatoires	29
1.2.3.b Distribution des écarts de niveaux	31
1.3 Deux particules en interaction dans un milieu aléatoire : Modèle TIP . .	33
1.3.1 Description du modèle TIP	34
1.3.2 Estimation des éléments de la matrice d'interaction	35
1.3.3 Longueur de cohérence l_c des deux particules	36
1.3.4 Image des boîtes de Thouless et extension de la théorie d'échelle de la conductance pour deux particules	38
1.3.5 Matrice de bande aléatoire avec diagonale surimposée	40
1.3.6 Mer de Fermi et barrière de mobilité	42
1.3.7 Note sur les travaux présentés	43
1.4 Théorie de la supraconductivité	44
1.4.1 Théorie BCS	44
1.4.1.a Gap supraconducteur	45
1.4.1.b Température critique	46
1.4.1.c Énergie d'excitation d'une quasiparticule	47
1.4.2 Traitement "champ moyen" et désordre : Méthode de Bogolubov- de Gennes	48
1.4.2.a Approximation de "champ moyen"	49
1.4.2.b Diagonalisation de l'Hamiltonien effectif et auto-cohérence	50

1.5	Transition Supraconducteur-Isolant	51
1.5.1	Nature du désordre	51
1.5.2	Fluctuations du paramètre d'ordre	51
1.5.2.a	Fluctuations de la phase : Modèle de bosons en milieux désordonnés	52
1.5.2.b	Fluctuations de l'amplitude	54
1.5.2.c	Travaux présentés	55
1.5.3	Lien entre la transition Supraconducteur-Isolant et la transition Métal-Isolant d'Anderson	56
2	Problème de Cooper généralisé	59
2.1	Description du modèle	60
2.2	Étude de l'état fondamental	62
2.2.1	Distributions de probabilité	62
2.2.2	Diagramme de phase de la délocalisation / localisation	65
2.2.3	Énergie de liaison	68
2.2.4	Comparaison avec l'ansatz de Cooper	70
2.3	Étude des états excités	72
2.3.1	Distribution des écarts de niveaux d'énergie	72
2.3.2	Propriétés des fonctions d'onde des états excités	75
2.4	Conclusion	76
3	Effet de l'interaction attractive sur les systèmes désordonnés bidimensionnels	77
3.1	Problème de Cooper généralisé bidimensionnel	78
3.1.1	Analyse des distributions de probabilité	78
3.1.2	Phase BLS	80
3.1.3	Énergie de liaison	85
3.2	Effet d'un champ magnétique	86
3.2.1	Introduction du champ magnétique	86
3.2.2	Altération de la phase BLS par le champ magnétique	88
3.3	Conclusion	91
4	Interaction attractive à longue portée	93
4.1	Description du modèle	95
4.2	Couplage fort $ U \gg V$: Analogie avec le modèle d'Anderson tridimensionnel	96
4.2.1	Topologie induite par la géométrie de l'interaction	96
4.2.2	Longueur de localisation de l'anneau	96
4.3	Couplage modéré $U \sim V$: Délocalisation à proximité du niveau de Fermi	98
4.3.1	Image de la délocalisation de l'anneau	99
4.3.2	Étude des états liés	102
4.4	Conclusion	104

5	Extension du problème de Cooper généralisé au cas de plusieurs corps	107
	$(N > 2)$	
5.1	Description du modèle à N -corps	108
5.2	Étude du gap d'appariement	111
5.3	Localisation des paires	114
5.3.1	Occupation spatiale du réseau	114
5.3.2	Suppression du paramètre d'ordre supraconducteur	115
5.3.3	Phase BLS	118
5.4	Conclusion	120
	Conclusion générale	123
	Publications	127
	• Cooper problem in the vicinity of the Anderson transition	129
	• Excited States of the Cooper Problem in a Three-Dimensional Disordered System	135
	• Phase of biparticle localized states for the Cooper problem in two-dimensional disordered systems	141
	• Disordered Hubbard model with attraction : The coupling energy of Cooper pairs in small clusters	151
	• Delocalization of two-particle ring near the Fermi level of 2d Anderson model	159
	Bibliographie	167

Table des figures

Figures du Chapitre 1

1.1	Les deux possibilités d'interaction entre les électrons via l'échange d'un phonon	19
1.2	Spectre des énergies du problème de Cooper	21
1.3	États couplés par l'interaction attractive dans le problème de Cooper . .	23
1.4	Chemin A_k et son symétrique $A_{\bar{k}}$ par renversement du temps	25
1.5	Densité d'états pour le modèle d'Anderson à trois dimensions	26
1.6	Fonction d'échelle $\beta(g) = d \ln(g)/d \ln(L)$	28
1.7	Distributions de Poisson et de Wigner	31
1.8	Paramètre η en fonction du désordre W pour différentes tailles L du système. Données tirées de [90]	32
1.9	Recouvrement des amplitudes de probabilités monoparticulaires	36
1.10	Représentation de l'espace de Hilbert des deux particules	37
1.11	Distribution de Breit-Wigner de la densité locale d'états et représentation d'une fonction propre d'une matrice aléatoire de bande avec diagonale surimposée. Figures adaptées de [52]	41
1.12	Représentation du gap supraconducteur BCS $\Delta(T)$ en fonction de la température T	47
1.13	Énergie d'excitation $E_{\mathbf{k}}$ d'une quasiparticule en fonction de $\mathbf{k}$	48
1.14	Schéma du diagramme de phase montrant la température T en fonction du désordre W pour la transition supraconducteur-isolant dans les films bidimensionnels supraconducteurs désordonnés	53
1.15	Gap E_{gap} du spectre d'excitation des quasiparticules, amplitude d'appariement $\Delta(\mathbf{r})$, et paramètre d'ordre Δ_{op} en fonction du désordre V . Figures tirées de [43]	55
1.16	Diagramme de phase montrant, en l'absence de supraconductivité, le comportement des résistivités ρ_{ab} et ρ_c de l'état normal du composé $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ en fonction de la température et du dopage en Sr. Figure tirée de [10]	56

Figures du Chapitre 2

2.1	États biparticulaires couplés par l'interaction	62
2.2	Distributions de probabilité pour l'état fondamental du modèle TIP attractif	64

2.3	Inverse ξ du taux de participation en fonction de l'intensité du désordre W/W_c pour une interaction $U = -4V$ et pour différentes tailles L du réseau	66
2.4	Inverse ξ du taux de participation en fonction de l'intensité du désordre W/W_c pour pour différentes intensités de l'interaction	67
2.5	Diagramme de phase pour la transition entre la phase localisée BLS (isolante) et la phase délocalisée (supraconductrice S) de l'état fondamental du problème de Cooper généralisé	68
2.6	Énergie de liaison Δ en fonction du désordre W pour différentes intensités de l'interaction U	69
2.7	Distributions de probabilité $f(\mathbf{n}_1)$ et $f_d(\mathbf{r})$ calculées pour la même réalisation du désordre sans approximation et avec l'approximation de l'ansatz de Cooper	71
2.8	Paramètre η en fonction de l'énergie d'excitation ΔE pour $W = 18V > W_c$ et $U = -4V$ pour différentes tailles linéaires L du réseau	72
2.9	Paramètre η en fonction de l'énergie d'excitation ΔE pour $W = 12V < W_c$ et $U = -4V$ pour différentes tailles linéaires L du réseau	73
2.10	Densité de probabilité de présence $f^\lambda(\mathbf{n}_1) = \sum_{\mathbf{n}_2} \chi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2}^\lambda ^2$ d'une particule dans l'état excité $ \chi^\lambda\rangle$ du modèle TIP	74
2.11	Inverse ξ_2 du taux de participation en fonction de l'énergie d'excitation ΔE	76

Figures du Chapitre 3

3.1	Distributions de probabilité pour les particules dans l'état fondamental du problème désordonné de Cooper bidimensionnel	79
3.2	Inverse ξ du taux de participation de l'état fondamental du problème de Cooper généralisé bidimensionnel en fonction du désordre W	81
3.3	Inverse ξ du taux de participation en fonction de la taille linéaire L . Données tirées de [95]	82
3.4	Distributions de charge $\delta\rho_i$ pour deux particules à proximité du niveau de Fermi sur un réseau 12×12 avec $N = 72$ fermions, $W = 5V$, $U = 0V$ (diagonalisation exacte) et $U = -6V$ (methode BdG). Données tirées de [95]	83
3.5	Distributions de charge $\delta\rho_i$ pour deux particules à proximité du niveau de Fermi obtenue à l'aide de la méthode Monte Carlo quantique pour un réseau 12×12 avec $N = 72$ fermions, une intensité de l'interaction $U = -6V$ et pour la même réalisation du désordre que celle utilisée pour la FIG. 3.4. Données tirées de [95]	84
3.6	Dépendance de l'énergie de liaison Δ vis-à-vis du désordre W pour $U = -2V$	85
3.7	Représentation des chemins $\Gamma_x = (\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n} + \mathbf{e}_x)$ et $\Gamma_y = (\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n} + \mathbf{e}_y)$ sur le réseau bidimensionnel	87
3.8	Topologie effective du réseau bidimensionnel avec conditions périodiques aux bords	87

Table des figures

3.9	Distributions de probabilité $f(\mathbf{n})$ et $f_d(\mathbf{r})$ correspondant à l'état fondamental des deux particules en interaction sur un réseau de taille linéaire $L = 40$ avec un désordre de $W = 3V$ et une interaction $U = -2V$	89
3.10	Dépendance de l'inverse ξ du taux de participation de l'état fondamental vis-à-vis du désordre W et du flux magnétique γ	90
3.11	Dépendance de l'inverse ξ du taux de participation de l'état fondamental vis-à-vis du flux magnétique γ pour deux tailles de réseau $L = 20$ et $L = 40$	91
3.12	Énergie de liaison Δ en fonction du flux magnétique γ	92

Figures du Chapitre 4

4.1	Schéma représentant les deux particules couplées par l'interaction attractive à longue portée	94
4.2	Bande d'états créés par l'interaction $ U \gg V$	96
4.3	Schéma du mouvement lié des deux particules (anneau) sur le réseau quasi-bidimensionnel effectif de dimension $L_x = L_y = L$ et $L_z = M_R$	97
4.4	Distributions des probabilités $f^\lambda(\mathbf{n}_1)$ et $f_d^\lambda(\mathbf{r})$ pour les états $ \chi^\lambda\rangle$ du modèle (4.7) pour un réseau de taille linéaire $L = 40$, un rayon d'interaction $R = 12$ et une largeur $\Delta R = 1$	100
4.5	Distributions des probabilités $f^\lambda(\mathbf{n}_1)$ et $f_d^\lambda(\mathbf{r})$ de la FIG. 4.4 représentées sous forme de densités de probabilité sur le réseau	101
4.6	Dépendance de l'inverse ξ du taux de participation vis-à-vis de l'énergie de liaison ΔE	102
4.7	Distribution $P(s)$ des écart des niveaux d'énergie adjacents pour les états couplés par l'interaction	103
4.8	Dépendance du bord de délocalisation ΔE_c et de l'énergie de liaison de l'état fondamental $-\Delta$ vis-à-vis de l'intensité du désordre W	105

Figures du Chapitre 5

5.1	Exemple d'états à N particules sans interaction	110
5.2	Dépendance de l'énergie d'appariement E_p vis-à-vis du nombre N de particules présentes dans le système	111
5.3	Gap d'appariement $\Delta(N) = E_p(N) - E_p(N - 1)$ en fonction du désordre W	112
5.4	Gap d'appariement Δ en fonction du désordre W	113
5.5	Fraction ξ des sites occupés par les particules dans l'état fondamental en fonction du désordre W , pour $M/L^2 \approx 0.2$, $U = -4V$ et $U = 0$	115
5.6	Dépendance du paramètre d'ordre Δ_{op} vis-à-vis du nombre N de particules pour différentes intensités W du désordre	116
5.7	Pente α du paramètre d'ordre Δ_{op} en fonction du désordre W	117
5.8	Distributions de charge $\rho_{i\sigma} = \langle \Psi_{N=4}^0 c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \Psi_{N=4}^0 \rangle$ dans l'état fondamental $ \Psi_{N=4}^0\rangle$ de $N = 2 \uparrow + 2 \downarrow = 4$ particules	119
5.9	Distributions de charge pour $U = -4V$, $W = 4V$, $L = 30$ dans l'état fondamental de $N = 4$ particules dans le modèle à N corps étudié	120

Préambule

es travaux présentés dans cette thèse s'inscrivent dans le cadre très vaste de l'étude des effets conjugués de l'interaction et du désordre sur la localisation de particules quantiques.

Le désordre dont il est question ici est introduit par des impuretés dans un réseau cristallin. Les particules évoluent alors dans un potentiel aléatoire. En 1958, ANDERSON prédit que dans un tel système sans interaction les interférences des réflexions multiples des particules sur les impuretés mènent à la localisation des fonctions d'onde monoparticulaires. Le système est alors qualifié d'isolant d'Anderson. A trois dimensions, il existe cependant une transition de cet état d'isolant vers un état métallique lorsque les fluctuations du potentiel aléatoire deviennent suffisamment faibles. Dans un cadre plus général, ABRAHAMS, ANDERSON, LICCIARDELLO et RAMAKRISHNAN montrèrent en 1979 grâce à une théorie d'échelle de la localisation, qu'à température nulle et en l'absence d'interaction, l'état fondamental d'un système désordonné est un isolant à une et à deux dimensions, et peut être métallique à trois dimensions si le niveau de Fermi se situe dans une région du spectre où les états monoparticulaires sont étendus.

Le principal type d'interaction, dont il est question dans cette thèse, couple les particules via un potentiel attractif local. Ce type d'interaction locale correspond, sans désordre, à l'interaction responsable de l'appariement des particules en paires de Cooper dans la théorie de la supraconductivité de BARDEEN, COOPER et SCHRIEFFER (BCS).

Ainsi, cette thèse est plus précisément dédiée à l'étude des effets conjugués du désordre et de l'interaction, locale et attractive, sur la localisation de particules. Aussi nous pensons que les travaux présentés dans le cadre de cette thèse apportent des éléments nouveaux à la compréhension de la supraconductivité en milieu désordonné.

Le premier chapitre comporte une introduction présentant différentes notions et théories physiques nécessaires à la compréhension des travaux exposés aux chapitres 2,3,4 et 5. Ainsi dans ce chapitre, nous commencerons par présenter, section 1.1, le problème de Cooper, qui est un modèle où l'interaction attractive entre particules mène à la formation d'une paire provoquant l'instabilité de la mer de Fermi. Dans le cadre plus général de la théorie BCS, cet appariement des particules sous forme de paires de Cooper est responsable de la supraconductivité de type *onde s*.

Nous introduirons ensuite, section 1.2, la notion de désordre au travers du modèle d'Anderson. Nous nous intéresserons plus particulièrement à la transition métal-isolant du modèle tridimensionnel d'Anderson et nous donnerons des éléments de la théorie d'échelle de la localisation.

A la section 1.3, nous présenterons une revue du modèle de deux particules en interaction dans un milieu aléatoire (modèle noté TIP pour *Two Interacting Particles*). En 1994, SHEPELYANSKY montra dans le cadre de ce modèle que l'interaction, attractive ou

répulsive, entre particules peut mener à la formation de paires pouvant se propager de manière cohérente sur une distance beaucoup plus grande que la longueur de localisation d'une seule particule sans interaction.

A la section 1.4, nous rappellerons les notions et résultats clefs de la théorie BCS de la supraconductivité. Nous décrirons également la méthode de BOGOLUBOV-DE GENNES (BdG), qui est une adaptation de la théorie de champ moyen de BCS permettant d'introduire le désordre sous forme d'un potentiel aléatoire local. Nous poursuivrons ensuite ce chapitre introductif par une brève revue, section 1.5, de la transition supraconducteur-isolant. Nous indiquerons quelle est la nature physique du désordre pouvant occasionner une telle transition dans les différents matériaux supraconducteurs. Puis nous verrons deux scénarii possibles permettant lors de l'ajout de désordre de supprimer la supraconductivité.

Le premier de ces scénarii est dû aux fluctuations de la phase du paramètre d'ordre de la supraconductivité. Les paires de Cooper perdent alors spatialement leur cohérence de phase. Si l'amplitude du paramètre d'ordre n'est pas affectée par l'augmentation du désordre, le système entreprend alors une transition d'un état supraconducteur, constitué de paires de Cooper étendues à travers tout le système, vers un état isolant, constitué de paires de Cooper localisées. En 1990, FISHER, pour traiter ces fluctuations de la phase, considéra que, des deux cotés de la transition, les paires de Cooper peuvent être assimilée à des entités bosoniques de charge $2e$ interagissant entre elles via la répulsion Coulombienne.

L'autre scénario de suppression de la supraconductivité est dû quant à lui aux fluctuations de l'amplitude du paramètre d'ordre. La phase isolante est alors composée d'îlots supraconducteurs entourés par une mer isolante où le paramètre d'ordre est nul. La méthode de champ moyen de BdG autorise une dépendance spatiale de l'amplitude du paramètre d'ordre ce qui permet alors d'étudier ce deuxième scénario.

Les travaux présentés dans le cadre de cette thèse, n'emploient quant à eux ni l'assimilation des paires de Cooper en entités bosoniques ni l'approximation de champ moyen utilisée dans le problème de Cooper, la théorie BCS et la méthode de BdG. Nous étudierons la délocalisation/localisation de réels fermions induite par les effets combinés du désordre et de l'interaction attractive et cela sans faire aucune hypothèse concernant l'appariement des particules.

Nous terminerons ce chapitre introductif par la revue de travaux expérimentaux montrant un lien étroit entre la transition supraconducteur-isolant et la transition métal-isolant dans l'état normal d'un supraconducteur lors de l'application d'un champ magnétique. En effet, l'application d'un champ magnétique sur un supraconducteur désordonné détruit la supraconductivité révélant ainsi la nature intrinsèque de l'état normal. L'état normal opère alors, avec l'augmentation du désordre, une transition d'un état métallique vers un état isolant. Certains matériaux supraconducteurs désordonnés apparaissent ainsi être modélisable par un modèle possédant une transition métal-isolant, auquel on surimposerait une interaction responsable de la supraconductivité. Ceci légitime l'approche utilisée dans le **chapitre 2**, où nous étudierons un modèle dans lequel nous établissons une interaction attractive de Hubbard entre particules évoluant dans un réseau tridimensionnel régi par le modèle d'Anderson. Ce modèle est analogue au cas attractif du modèle TIP décrit à la section 1.3 auquel on imposerait une mer de Fermi. Plus important, ce modèle constitue une généralisation du problème de Cooper dans

le cas d'un milieu désordonné. Nous montrerons qu'il est nécessaire d'aller plus loin que l'*ansatz de Cooper* pour décrire correctement la physique engendrée par les effets conjoints de l'attraction entre particules et du désordre. Nous montrerons également que l'interaction attractive permet de localiser les particules par paires pour des intensités du désordre pour lesquelles les particules sans interactions sont habituellement délocalisées : C'est une phase d'états biparticulaires localisés (phase BLS). Cette phase BLS est détruite cependant pour des intensités du désordre suffisamment faibles, le système est alors composé de paires de Cooper délocalisées. Dans ce chapitre nous établissons un diagramme de phase de la transition supraconducteur-isolant.

Au **chapitre 3**, nous étudierons le problème de Cooper généralisé vu au chapitre 2 pour le cas particulier de la dimension deux. Comme pour le cas tridimensionnel, la phase BLS existe en dimension deux. Cette phase apparaît également pour un régime de désordre où les particules sans interaction se trouvent être délocalisées dans les systèmes de tailles finies que nous avons considérés. Lors de l'application d'un champ magnétique normal au réseau bidimensionnel, la phase BLS est détruite au-delà d'un certain flux magnétique critique, ceci est dû à l'altération de la structure des paires localisées.

Le **chapitre 5** présente quant à lui l'extension du problème bidimensionnel de Cooper généralisé au cas d'un nombre $N > 2$ de particules au-dessus de la mer de Fermi. Nous montrons dans le cadre de cette extension que le système entreprends avec l'augmentation de l'intensité du désordre une transition d'un état supraconducteur vers un état isolant. Cette transition est déterminée au travers de l'étude du *gap d'appariement* des particules, de l'étude de la densité de charge sur le réseau et du paramètre d'ordre de la supraconductivité. Nous montrons également que la phase BLS, trouvée dans l'étude du problème de Cooper, subsiste également dans ce modèle où les interactions résiduelles entre les paires de particules sont prises en compte.

Le **chapitre 4** n'est pas directement consacré à la transition supraconducteur-isolant. Il présente l'étude de deux particules sur un réseau bidimensionnel désordonné et couplées entre elles par une interaction attractive à longue portée. Nous montrerons que ce type de modèle possède la même topologie que le modèle d'Anderson tridimensionnel pour une seule particule et que par conséquent il permet la délocalisation des particules près du niveau de Fermi pour une intensité du désordre en-deça d'une intensité critique. Les particules forment des paires dont la structure est un anneau. Cet anneau peut alors diffuser à travers tout le réseau bidimensionnel.

Chapitre 1

Introduction

1.1	Problème de Cooper	17
1.2	Transition Métal-Isolant d'Anderson	24
1.3	Deux particules en interaction dans un milieu aléatoire : Modèle TIP	33
1.4	Théorie de la supraconductivité	44
1.5	Transition Supraconducteur-Isolant	51

1.1 Problème de Cooper

 n 1956, COOPER [16] montra qu'une interaction attractive entre deux particules au-dessus d'une mer de Fermi provoque l'instabilité de celle-ci. En effet, le système composé des particules "gelées" remplissant la mer de Fermi et des deux particules libres couplées par l'interaction, *préfère*, dans l'état fondamental, créer un état lié dont l'énergie E_0 est plus basse que l'énergie $2\epsilon_F$ de deux particules libres à la surface de Fermi. La différence d'énergie $\Delta = 2\epsilon_F - E_0$ est l'énergie de liaison des deux particules qui forment alors ce que l'on appelle une *paire de Cooper*. Les deux particules de cette paire sont appariées de façon à ce que leurs spins σ respectifs soient opposés et que leurs impulsions $\mathbf{k}$ respectives soient opposées. C'est l'idée de cet appariement proposé par COOPER [16] qui mena BARDEEN, COOPER et SCHRIEFFER (BCS) à l'élaboration en 1957 de la théorie de la supraconductivité [7], théorie qui fût récompensée ensuite en 1972 par le prix Nobel. En effet, l'état fondamental proposé dans la théorie BCS est une combinaison linéaire d'excitations de paires de Cooper

$$|\Psi_{BCS}\rangle \propto \prod_{\mathbf{k}} \left(1 + \alpha_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger\right) |0\rangle \quad (1.1)$$

où $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ est l'opérateur de création d'une quasiparticule d'impulsion $\mathbf{k}$ et de spin σ agissant sur le vide $|0\rangle$.

Le vif succès obtenu par la théorie BCS vient d'une part du fait qu'elle prédit de manière précise les caractéristiques d'une large classe de matériaux supraconducteurs et d'autre part qu'elle n'utilise que des notions physiques simples et clairement définies qui sont d'ailleurs déjà contenues dans le problème original de Cooper. En effet, même si

ce dernier ne traite que de deux particules au-dessus d'une mer de Fermi, sa résolution permet d'obtenir une énergie de liaison et une longueur de cohérence des paires de Cooper en très bon accord qualitatif avec la théorie BCS. En fait, il est raisonnable de dire que les ingrédients principaux de la physique de la supraconductivité **sans désordre** sont en partie déjà contenus dans le problème originellement posé par COOPER [16]. Nous allons par conséquent dans ce qui va suivre l'exposer clairement de façon à ce qu'il nous serve de référence lorsque nous introduirons le désordre.

1.1.1 Origine de l'interaction attractive

L'interaction Coulombienne directe entre électrons ne favorise aucunement leur appariement. Il faut par conséquent que ces derniers soient couplés à d'autres formes d'excitations du système. La découverte de l'effet isotopique [70, 82] a montré que la température critique T_c des supraconducteurs est liée à la masse M des ions composant le cristal par la relation

$$T_c M^{-\beta} = cte \quad \text{avec} \quad \beta \simeq 0.5. \quad (1.2)$$

Cet effet nous permet de dire que les modes de vibration du cristal jouent un rôle déterminant dans le phénomène de supraconduction et que par conséquent les excitations auxquelles sont couplés les électrons sont les phonons. A température nulle, il n'existe pas de phonons libres dans le cristal; les électrons sont alors couplés entre eux par échange de phonons virtuels.

Considérons un état initial $|\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{0}\rangle$ de deux électrons de spins opposés et d'impulsions respectives $\mathbf{k}$ et $-\mathbf{k}$. L'indice $\mathbf{0}$ indique qu'il n'y a pas de phonon dans l'état initial. Ces deux électrons peuvent de manière indirecte, via l'échange d'un phonon virtuel, faire une transition vers un état final $|\mathbf{k}', -\mathbf{k}', \mathbf{0}\rangle$ où les deux électrons auront des impulsions respectives $\mathbf{k}'$ et $-\mathbf{k}'$. Les deux scénarii possibles impliquant un seul phonon sont alors (FIG. 1.1) :

- (a) un électron $\mathbf{k}$ émet un phonon d'impulsion $-\mathbf{q} = \mathbf{k} - \mathbf{k}'$. L'état intermédiaire du système est alors $|\mathbf{k}', -\mathbf{k}, -\mathbf{q}\rangle$. Le phonon est ensuite absorbé par le second électron, celui d'impulsion $-\mathbf{k}$
- (b) l'électron d'impulsion $-\mathbf{k}$ émet un phonon d'impulsion $\mathbf{q} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$. L'état intermédiaire est alors $|\mathbf{k}, \mathbf{k}', -\mathbf{q}\rangle$. Le phonon est ensuite réabsorbé par l'électron d'impulsion $\mathbf{k}$.

Ces deux processus amènent le système à des états intermédiaires $|\mathbf{k}', -\mathbf{k}, -\mathbf{q}\rangle$ et $|\mathbf{k}, \mathbf{k}', -\mathbf{q}\rangle$ dont l'énergie est équivalente. L'élément de matrice de transition indirecte induite par l'échange d'un phonon est alors [17]

$$\langle \mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{0} | \mathcal{H}_{indirecte} | \mathbf{k}', -\mathbf{k}', \mathbf{0} \rangle = \frac{|W_{\mathbf{q}}|^2}{\hbar} \left(\frac{1}{\omega - \omega_q} - \frac{1}{\omega + \omega_q} \right), \quad (1.3)$$

où $W_{\mathbf{q}}$ est le couplage électron-phonon pour l'émission ou l'absorption d'un phonon d'impulsion $\mathbf{q}$ par un électron, ω est la fréquence de transition entre deux états monoparticulaires $|\mathbf{k}'\rangle$ et $|\mathbf{k}\rangle$, telle que $\hbar\omega = (\hbar^2/2m)(k'^2 - k^2)$, et $\hbar\omega_q$ est l'énergie du phonon d'impulsion $\mathbf{q}$. L'élément de matrice de transition comporte finalement deux termes,

$$\langle \mathbf{k}, -\mathbf{k} | \mathcal{H}_{interaction} | \mathbf{k}', -\mathbf{k}' \rangle = U_{\mathbf{q}} + \frac{2|W_{\mathbf{q}}|^2}{\hbar} \frac{\omega_q}{\omega^2 - \omega_q^2}, \quad (1.4)$$

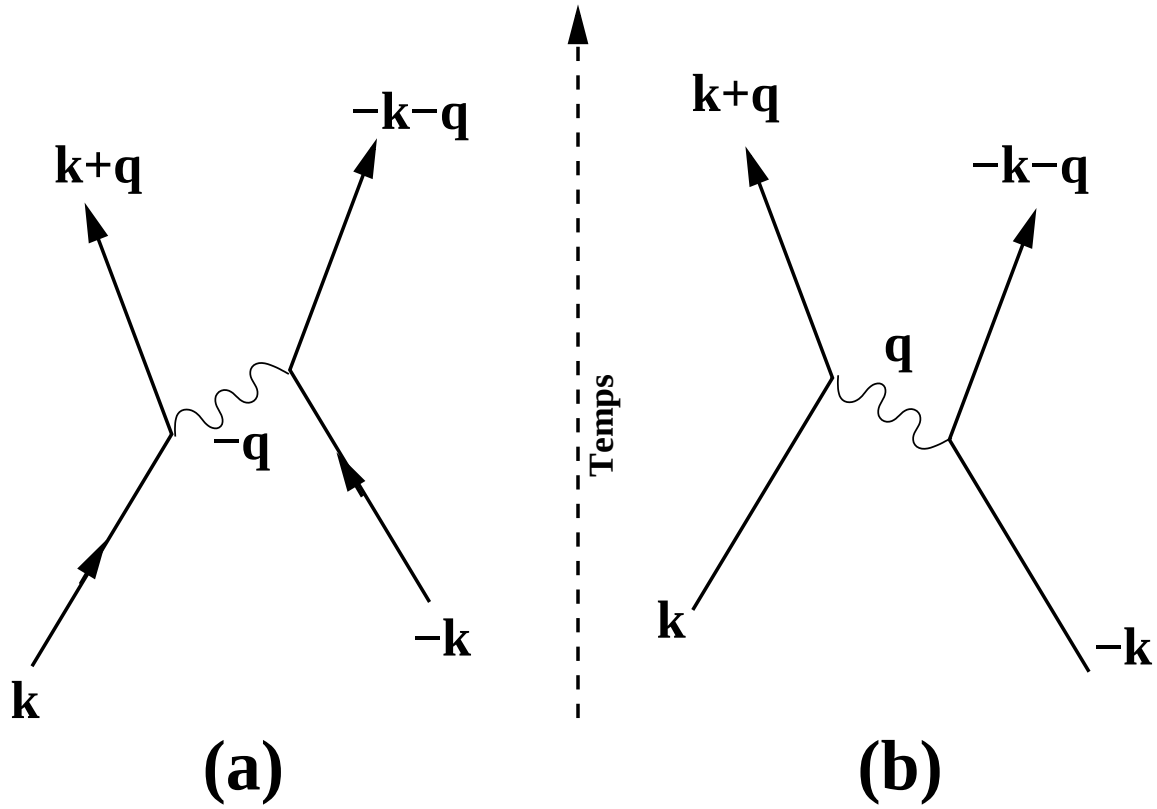


FIG. 1.1 – Les deux possibilités d'interaction entre les électrons via l'échange d'un phonon (voir texte).

le premier terme $U_{\mathbf{q}}$ est l'interaction directe Coulombienne (répulsive) et le second est l'interaction assistée par phonon virtuel (1.3). Si $U_{\mathbf{q}} > 0$ n'est pas trop grand par rapport à $\omega_{\mathbf{q}}$, l'interaction totale peut être négative pour $\omega < \omega_{\mathbf{q}}$. C'est-à-dire qu'il existe pour l'énergie de transition ω , une fenêtre énergétique d'une largeur de l'ordre de $\omega_{\mathbf{q}}$ dans laquelle l'interaction entre les deux électrons est attractive. $\omega_{\mathbf{q}}$ est alors relié à ce que l'on appelle la fréquence du phonon ou fréquence de Debye ω_D . Nous prendrons par la suite le modèle simplifié qui consiste à prendre une interaction attractive constante entre les électrons dans une fenêtre énergétique de dimension $\hbar\omega_D$

$$\langle \mathbf{k}, -\mathbf{k} | \mathcal{H}_{interaction} | \mathbf{k}', -\mathbf{k}' \rangle = \begin{cases} U < 0 & \text{si } \begin{cases} \epsilon_F < \frac{\hbar^2 k^2}{2m} < \epsilon_F + \hbar\omega_D \\ \epsilon_F < \frac{\hbar^2 k'^2}{2m} < \epsilon_F + \hbar\omega_D \end{cases} \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (1.5)$$

C'est cette interaction qui fut utilisée avec succès pour le problème de Cooper et pour la théorie BCS.

1.1.2 Instabilité de la mer de Fermi

La structure cristalline du système à considérer ne jouant pas un rôle fondamental en regard des propriétés supraconductrices, nous pouvons assimiler ce dernier à une

boîte tridimensionnelle de volume V . A l'intérieur de cette boîte se trouvent, d'une part des particules remplissant les niveaux quantiques de plus basses énergies, formant ainsi une mer de Fermi, et d'autre part deux particules au-dessus de la mer de Fermi entre lesquelles on établira une interaction attractive. Ces deux particules ont des moments respectifs $\mathbf{k}_1$ et $\mathbf{k}_2$. Il est préférable de choisir d'autres variables quantiques indépendantes pour caractériser le système comme l'impulsion totale $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2$ du centre de masse des deux particules et l'impulsion relative $\mathbf{k} = (\mathbf{k}_2 - \mathbf{k}_1)/2$ des deux particules. Nous prenons naturellement la base des ondes planes pour développer la fonction d'onde décrivant les deux particules dans la boîte et en ne considérant que des processus élastiques pour des particules de moment total $\mathbf{K}$, leur fonction d'onde s'écrit

$$|\Psi_{\mathbf{K}}\rangle = |\mathbf{K}\rangle \otimes \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^{\mathbf{K}} |\mathbf{k}\rangle \quad (1.6)$$

où $|\mathbf{K}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{R}} |\mathbf{R}\rangle$, $|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} |\mathbf{r}\rangle$, $\mathbf{R} = (\mathbf{r}_2 + \mathbf{r}_1)/2$ est la position du centre de masse, $\mathbf{r} = \mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1$ est la position relative des deux particules et $a_{\mathbf{k}}^{\mathbf{K}} \in \mathbb{C}$. Pour modéliser la mer de Fermi gelée, la somme dans l'équation (1.6) est restreinte aux vecteurs $\mathbf{k}$ tels que $k_1, k_2 > k_F$ où $\hbar k_F = \sqrt{2m\epsilon_F}$. Pour un moment total conservé $\mathbf{K}$ l'Hamiltonien de ces deux particules s'écrit

$$H_{\mathbf{K}} = \sum_{\mathbf{k}} (\mathcal{E}_{\mathbf{K}} + \epsilon_{\mathbf{k}}) |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| H_{int} |\mathbf{k}'\rangle \langle \mathbf{k}'| \quad (1.7)$$

où $\mathcal{E}_{\mathbf{K}} = (\hbar^2/4m)K^2$ et $\epsilon_{\mathbf{k}} = (\hbar^2/m)k^2$. Comme nous l'avons vu dans la section 1.1.1 l'interaction attractive peut exister à l'intérieur d'un certain intervalle énergétique

$$\langle \mathbf{k}| H_{int} |\mathbf{k}'\rangle = \begin{cases} U < 0 & \text{si } k_0 \leq k, k' \leq k_m \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases} \quad (1.8)$$

La fréquence de Debye $(\hbar^2/m)(k_m^2 - k_0^2) = \epsilon_{k_m} - \epsilon_{k_0} = 2\hbar\omega_D$ représente alors la largeur de la fenêtre énergétique à l'intérieur de laquelle le potentiel d'interaction est attractif. k_0 est la plus petite impulsion telle que $\mathbf{K}$ soit conservée et que $k_1, k_2 \geq k_F$. L'Hamiltonien (1.7) devient ainsi

$$H_{\mathbf{K}} = \sum_{\mathbf{k}} (\mathcal{E}_{\mathbf{K}} + \epsilon_{\mathbf{k}}) |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}| + U \sum_{\substack{\mathbf{k}, \mathbf{k}' \\ k_0 \leq k, k' \leq k_m}} |\mathbf{k}\rangle \langle \mathbf{k}'|. \quad (1.9)$$

1.1.2.a Énergie de liaison Δ

L'équation de Schrödinger associée au Hamiltonien (1.9) est alors

$$(\mathcal{E}_{\mathbf{K}} + \epsilon_{\mathbf{k}}) a_{\mathbf{k}}^{\mathbf{K}} + U \sum_{\substack{\mathbf{k}' \\ k_0 \leq k' \leq k_m}} a_{\mathbf{k}'}^{\mathbf{K}} = E a_{\mathbf{k}}^{\mathbf{K}}. \quad (1.10)$$

Ce qui nous donne l'équation à résoudre pour trouver les énergies propres E du système

$$\frac{1}{U} = \sum_{\substack{\mathbf{k} \\ k_0 \leq k \leq k_m}} \frac{1}{E - \mathcal{E}_{\mathbf{K}} - \epsilon_{\mathbf{k}}}. \quad (1.11)$$

En traçant chaque membre de l'équation (1.11), on peut aisément visualiser les énergies solutions du problème de Cooper (FIG. 1.2).

Comme les énergies $\epsilon_{\mathbf{k}}$ forment un quasi-continuum, les pôles de l'équation (1.11) sont infiniment proches et par conséquent le spectre du problème de Cooper est lui aussi un quasi-continuum à partir de $E = \epsilon_{k_0} + \mathcal{E}_{\mathbf{K}}$ (voir FIG. 1.2). Cependant l'état fondamental du système se sépare du quasi-continuum avec l'énergie

$$E_0(\mathbf{K}) = \epsilon_{k_0} + \mathcal{E}_{\mathbf{K}} - \Delta_{\mathbf{K}} \quad (1.12)$$

créant ainsi une instabilité du niveau de Fermi. Il est important de noter que cette instabilité existe quelque soit l'intensité $|U|$ de l'interaction, aussi petite soit elle tant que $U < 0$ (voir FIG. 1.2). $\Delta_{\mathbf{K}}$ est alors l'énergie de liaison des deux particules, d'impulsion totale $\mathbf{K}$, couplées au-dessus de la mer de Fermi par l'interaction attractive (1.8).

Etant donné le caractère continu des énergies $\epsilon_{\mathbf{k}}$ la somme discrète dans (1.11) peut être remplacée par une somme continue sur les énergies

$$\frac{1}{U} = \int_{\epsilon_0}^{\epsilon_m} d\epsilon \frac{N(\mathbf{K}, \epsilon)}{E - \mathcal{E}_{\mathbf{K}} - \epsilon} \quad (1.13)$$

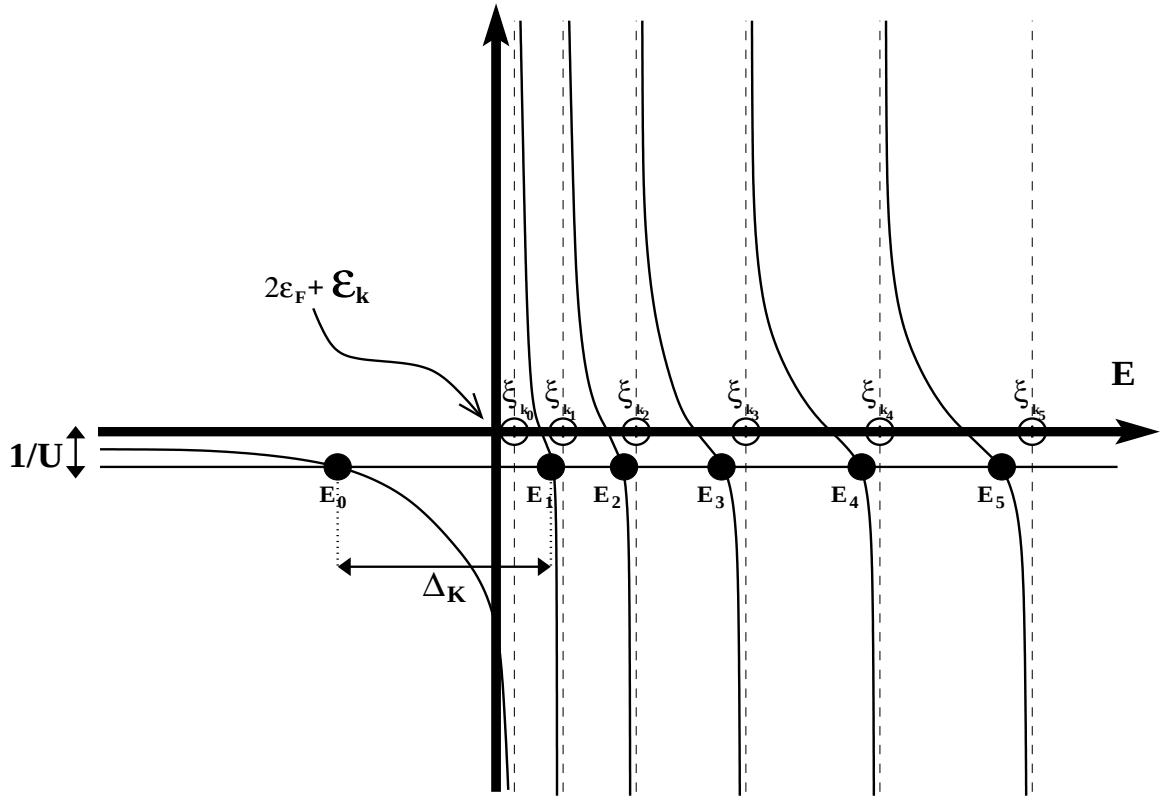


FIG. 1.2 – Spectre des énergies E_i du problème de Cooper pour une impulsion totale $\mathbf{K} \neq 0$. L'énergie ξ_{k_i} est la $i^{\text{ème}}$ énergie au-dessus du niveau de Fermi pour deux particules libres sans interaction ; $\xi_{k_i} = \epsilon_{k_i} + \mathcal{E}_{\mathbf{K}}$.

où $N(\mathbf{K}, \epsilon)$ est la densité d'états couplés d'impulsion totale $\mathbf{K}$ et d'énergie totale $\mathcal{E}_{\mathbf{K}} + \epsilon$. Supposons que les deux particules soient couplées dans une fenêtre énergétique petite en comparaison avec l'énergie de Fermi, $\epsilon_{k_m} - \epsilon_{k_0} = 2\hbar\omega_D \ll \epsilon_F$. Nous pouvons alors considérer que dans cette fenêtre énergétique la densité d'états couplés est constante pour une impulsion totale $\mathbf{K}$ donnée, $N(\mathbf{K}, \epsilon) \simeq N(\mathbf{K})$. Ainsi, cherchant l'énergie de liaison $\Delta_{\mathbf{K}}$ en utilisant (1.12) et (1.13), on obtient

$$\Delta_{\mathbf{K}} = \frac{2\hbar\omega_D}{\exp\left(\frac{1}{N(\mathbf{K})|U|}\right) - 1}. \quad (1.14)$$

Il apparaît clairement que l'énergie de liaison $\Delta_{\mathbf{K}}$ disparaît rapidement à mesure que $N(\mathbf{K})$ tend vers 0. L'énergie de liaison $\Delta_{\mathbf{K}}$ sera maximale pour une impulsion totale $\mathbf{K}$ qui donnera $N(\mathbf{K})$ maximale. En observant la FIG. 1.3 on s'aperçoit que la densité d'états couplés $N(\mathbf{K})$ est maximale lorsque l'impulsion totale des deux particules est nulle, $\mathbf{K} = \mathbf{0}$, autrement dit, lorsqu'on couple deux particules avec impulsions opposées $\mathbf{k}_1 = \mathbf{k} = -\mathbf{k}_2$ telles que

$$k_F \leq k_1 = k_2 \leq k_m. \quad (1.15)$$

Cette inégalité (1.15) est ce qu'on appellera par la suite l'**ansatz de Cooper**. En reprenant (1.14) pour $\mathbf{K} = \mathbf{0}$ et dans la limite des faibles interactions, $|U|N(\mathbf{K} = \mathbf{0}) \ll 1$, on obtient alors pour l'énergie de liaison

$$\Delta \simeq 2\hbar\omega_D \exp\left(-\frac{2}{N_F|U|}\right) \quad (1.16)$$

où $N_F = 2N(\mathbf{K} = \mathbf{0})$ est la densité d'états de Bloch à la surface de la mer de Fermi. Les deux particules forment donc dans l'état fondamental du problème de Cooper une paire dont l'énergie de liaison Δ est proportionnelle à la fréquence de Debye.

1.1.2.b Longueur de corrélation

La longueur de corrélation des deux particules l_c est donnée par

$$l_c^2 = \langle r^2 \rangle = \frac{\langle \Psi_0 | \hat{r}^2 | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} = \frac{\langle \Psi_0 | -\hat{\nabla}_{\mathbf{k}}^2 | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} = \frac{\sum_{\mathbf{k}} |\nabla_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^0|^2}{\sum_{\mathbf{k}} |a_{\mathbf{k}}^0|^2}. \quad (1.17)$$

En passant à l'intégration sur les énergies,

$$l_c^2 \simeq \frac{N_F \left(\frac{\partial \epsilon}{\partial k} \right)_{\epsilon=2\epsilon_F}^2 \int_{2\epsilon_F}^{\infty} d\epsilon \left| \frac{\partial a}{\partial \epsilon} \right|^2}{N_F \int_{2\epsilon_F}^{\infty} d\epsilon |a|^2} \quad (1.18)$$

avec $a = C/(2\epsilon_F - \Delta - \epsilon)$ et $\left(\frac{\partial \epsilon}{\partial k} \right)_{\epsilon=2\epsilon_F} = 2\hbar v_F$ on obtient la longueur de corrélation

$$l_c = \frac{2}{\sqrt{3}} \frac{\hbar v_F}{\Delta} \quad (1.19)$$

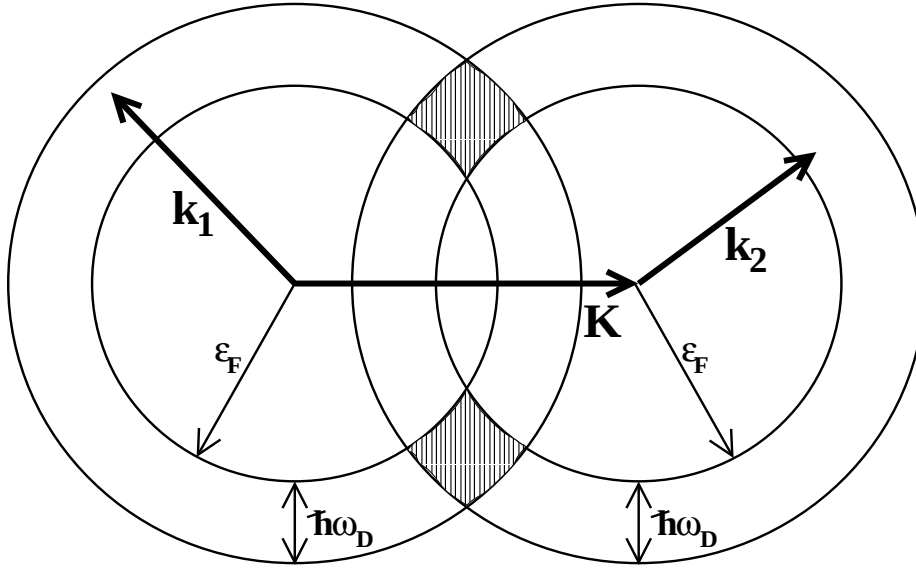


FIG. 1.3 – États couplés par l'interaction attractive dans le problème de Cooper. Le nombre d'états couplés dans l'intervalle énergétique $\hbar\omega_D$ tels que $\mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{K}$ est représenté par les zones hachurées. Ainsi, la densité d'états couplés est maximale lorsque les deux couronnes sont superposées, c'est-à-dire pour une impulsion totale $\mathbf{K} = \mathbf{0}$.

qui est inversement proportionnelle à l'énergie de liaison Δ . Ainsi plus l'énergie de liaison entre les deux particules est élevée plus les particules sont proches l'une de l'autre. L'inverse de l'énergie de liaison Δ^{-1} mesure par conséquent la *taille typique* de la paire de Cooper.

1.1.2.c Température critique

La température peut influencer sur l'appariement des particules. En effet, Δ est l'énergie de liaison dans l'état fondamental à température nulle, $T = 0K$. En augmentant la température les phonons vont transmettre de l'énergie cinétique aux particules de la paire qui formeront alors une paire d'impulsion totale $\mathbf{K} \neq \mathbf{0}$. En développant (1.14) pour les $\mathbf{K}$ faible on obtient [84]

$$\Delta_{\mathbf{K}} = \Delta - \frac{v_F \hbar \mathbf{K}}{2} + \mathcal{O}(\mathbf{K}^2). \quad (1.20)$$

Ainsi, à mesure que la température augmente l'impulsion totale $\mathbf{K}$ augmente menant à la disparition de $\Delta_{\mathbf{K}}$. On peut alors définir une température critique T_c de l'ordre de $\Delta \propto k_B T_c$ au-dessus de laquelle les paires de Cooper sont totalement détruites via la suppression de l'énergie de liaison $\Delta_{\mathbf{K}}$. La relation (1.20) nous donne alors l'impulsion critique

$$q = \frac{K_c}{2} \sim \frac{\Delta}{\hbar v_F} \sim \frac{k_B T_c}{\hbar v_F} \sim \frac{1}{l_c} \quad (1.21)$$

transmise par les phonons à chacune des deux particules permettant de “briser” la paire de Cooper^a.

1.1.2.d Discussion sur l'ansatz de Cooper

Nous venons de voir que l'interaction attractive entre deux électrons au-dessus d'une mer de Fermi mène dans l'état fondamental à la formation d'une paire de Cooper. Cette paire est une superposition d'états biparticulaires noninteractifs $|\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2\rangle$. L'énergie de liaison $\Delta_{\mathbf{K}}$ entre les deux électrons est alors maximale lorsqu'on considère le secteur d'impulsion totale $\mathbf{K} = \mathbf{k}_1 + \mathbf{k}_2 = \mathbf{0}$. Ceci mena COOPER [16] à suggérer que les états contribuant majoritairement à la supraconductivité sont les états dits *symétriques par renversement du temps*, c'est-à-dire les états biparticulaires $|\mathbf{k}, -\mathbf{k}\rangle$. Suivant cette idée, BARDEEN, COOPER et SCHRIEFFER [7] élaborèrent leur théorie en considérant uniquement une interaction attractive de symétrie *onde s*, c'est-à-dire ne couplant que les quasiparticules ayant des spins et impulsions opposés^b. Ce type d'interaction est équivalent à considérer des paires de quasiparticules $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$ voyant chacune un potentiel moyen créé par les autres paires de quasiparticules $(\mathbf{k}' \uparrow, -\mathbf{k}' \downarrow)$ présentes dans le système. De part ce fait, la théorie BCS est une théorie dite de *champ moyen*, décrivant certes une large classe de matériaux supraconducteurs de basse température, mais ne pouvant décrire de manière correcte les systèmes supraconducteurs désordonnés. En effet, nous montrerons aux chapitres 2 et 3, où nous introduisons le désordre dans le problème de Cooper, qu'il est nécessaire d'aller au-delà de l'ansatz de Cooper (au-delà du champ moyen) pour pouvoir capturer les effets physiques essentiels produits conjointement par le désordre et l'interaction attractive.

1.2 Transition Métal-Isolant d'Anderson

1.2.1 Description du modèle

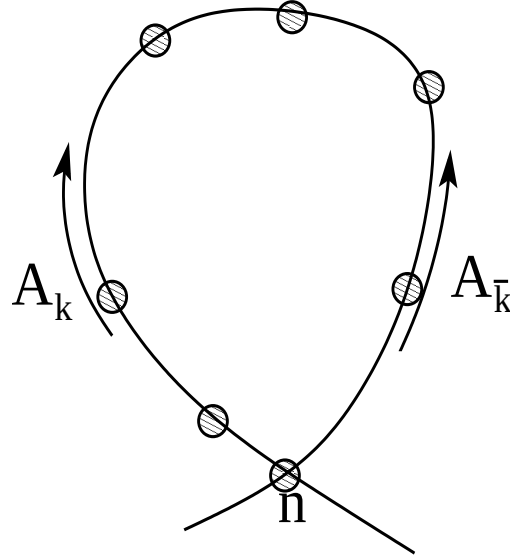
Le modèle d'ANDERSON (1958) [3] est un paradigme pour décrire les systèmes électroniques désordonnés sans interaction. Son Hamiltonien est une variante du modèle de liaisons fortes (modèle tight-binding) avec énergies aléatoires sur site. Ces énergies aléatoires modélisent les fluctuations énergétiques introduites par les impuretés du système. L'Hamiltonien d'Anderson s'écrit de la manière suivante

$$H_A = \sum_{\mathbf{n}} \epsilon_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}| + V \sum_{\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{m}|. \quad (1.22)$$

Les vecteurs $\mathbf{n}$ et $\mathbf{m}$ indexent les différents sites du réseau de volume L^d avec des conditions aux bords périodiques. Les énergies aléatoires sur site $\epsilon_{\mathbf{n}}$ sont uniformément distribuées dans l'intervalle énergétique $[-W/2, W/2]$. W est alors l'intensité des fluctuations énergétiques dues au désordre. V est l'amplitude de probabilité pour une particule de sauter sur un des sites les plus proches et la notation $\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle$ signifie que les sites $\mathbf{n}$ et $\mathbf{m}$ sont “plus proches voisins”.

^aEn effet, puisque $\mathbf{k}_1 = \mathbf{K}/2 - \mathbf{k}$ et $\mathbf{k}_2 = \mathbf{K}/2 + \mathbf{k}$, l'impulsion $q = \mathbf{K}/2$ mesure alors l'écart d'impulsion pour les deux particules par rapport à l'appariement à $T = 0K$, $\mathbf{k}_1 = -\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}_2 = \mathbf{k}$.

^bUn exposé de la théorie BCS de la supraconductivité se trouve à la section 1.4.1.


 FIG. 1.4 – Chemin A_k et son symétrique $A_{\bar{k}}$ par renversement du temps.

Ce modèle conduit pour des systèmes à une ou deux dimensions à des états monoparticulaires exponentiellement localisés quelque soit le désordre introduit. Le phénomène tient au caractère ondulatoire de l'électron ; ce sont les interférences entre les différentes réflexions sur les impuretés qui mènent à la localisation. Par exemple dans le cas de la localisation faible, la probabilité de retour $P(\mathbf{n}, \mathbf{n})$ d'un électron à un point $\mathbf{n}$ du réseau est le module au carré de la somme des amplitudes de probabilité $A_k = |A_k| \exp(iS_k)$ liées aux différents chemins k permettant de revenir au site $\mathbf{n}$. S_k est l'action classique associée au chemin k . La probabilité de retour s'écrit donc

$$P(\mathbf{n}, \mathbf{n}) = \left| \sum_k A_k \right|^2 = \sum_k |A_k|^2 + \sum_{k \neq k'} A_k A_{k'}^*. \quad (1.23)$$

Dans le cas d'une particule classique, donc totalement incohérente, il n'y a pas d'interférences possibles et donc le second terme de l'équation (1.23) disparaît $P(\mathbf{n}, \mathbf{n}) = P_{\text{classique}}(\mathbf{n}, \mathbf{n}) = \sum_k |A_k|^2$. En raison du caractère ondulatoire de l'électron, les termes d'interférences $A_k A_{k'}^*$ doivent être pris en compte. Après avoir effectué la moyenne sur le désordre presque tous les termes d'interférences dans $P(\mathbf{n}, \mathbf{n})$ (1.23) s'annulent en raison des phases aléatoires S_k des différents chemins A_k . Seules les interférences entre les chemins A_k et leur symétrique respectif par rapport au renversement du temps $A_{\bar{k}}$ persistent car en l'absence de champ magnétique ces deux types de chemin ont une action S_k identique (FIG. 1.4). On obtient alors pour la probabilité de retour

$$\langle P(\mathbf{n}, \mathbf{n}) \rangle = 2 \sum_k \langle |A_k|^2 \rangle = 2 \langle P_{\text{classique}}(\mathbf{n}, \mathbf{n}) \rangle. \quad (1.24)$$

Par conséquent les interférences dues au caractère ondulatoire des particules doublent la probabilité de retour sur un site $\mathbf{n}$ donné et donc favorisent la localisation des particules.

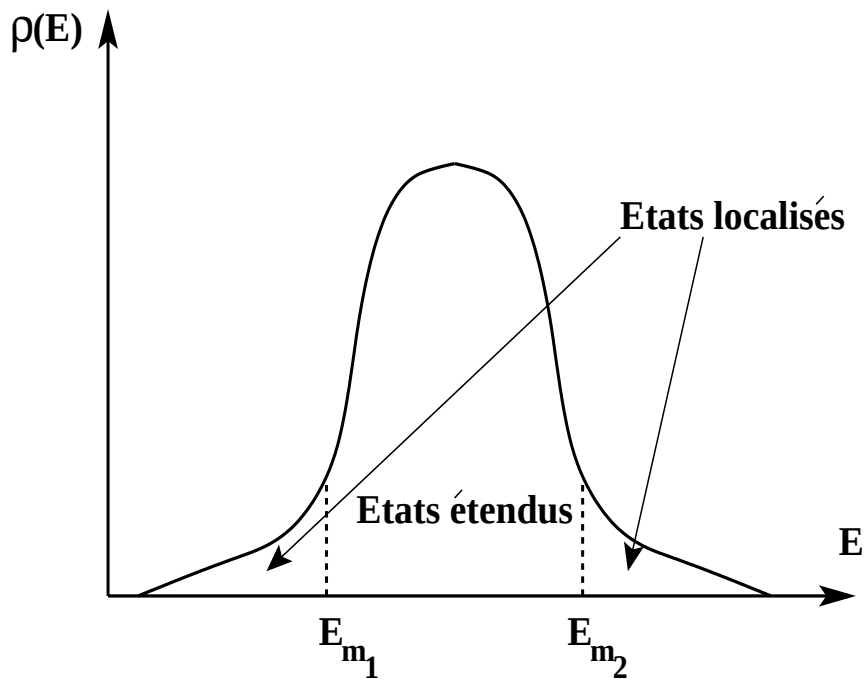


FIG. 1.5 – Densité d'états pour le modèle d'Anderson à trois dimensions. E_{m1} et E_{m2} sont les barrières de mobilité.

En trois dimensions par contre il existe un seuil critique du désordre W_c en-dessous duquel il apparaît une bande au milieu du spectre composée d'états délocalisés. Les autres états, les états aux bords du spectre, sont quant à eux localisés (FIG. 1.5). L'isolant d'Anderson apparaît donc non pas parce que la densité d'états au niveau de Fermi est nulle mais lorsque le niveau de Fermi du système se trouve dans une région du spectre où les états sont localisés.

Plus tard en 1979, ABRAHAMS, ANDERSON, LICCIARDELLO et RAMAKRISHNAN [1] introduisirent une théorie d'échelle de la conductance de systèmes métalliques désordonnés sans interaction, démontrant le caractère universel de l'absence d'états étendus à une et deux dimensions et de la possibilité d'avoir un caractère métallique pour des systèmes à trois dimensions. La section suivante présente les principaux résultats de cette théorie d'échelle.

1.2.2 Théorie d'échelle de la localisation

La théorie d'échelle permet d'étudier la localisation en considérant la conductance de systèmes de taille finie L bien plus grande que le libre parcours moyen ℓ d'une particule, c'est-à-dire, $L \gg \ell$ (régime diffusif). Deux comportements asymptotiques de la conductance apparaissent naturellement :

- pour les systèmes avec peu d'impuretés, les fonctions d'ondes des électrons sont encore assimilables à des ondes planes, la conductance adimensionnée pour un

hypercube de dimension d est alors donnée par la loi d'Ohm

$$g(L) = \sigma L^{d-2} \quad (1.25)$$

- pour les systèmes localisés, les états proches en énergie sont éloignés dans l'espace de telle façon que le recouvrement entre les différents états localisés est exponentiellement faible. La longueur typique à considérer est la longueur de localisation $l_{loc} \ll L$. Dans ce régime on s'attend à ce que la conductance diminue exponentiellement avec la taille du système

$$g(L) \propto \exp(-L/l_{loc}). \quad (1.26)$$

La théorie d'échelle repose sur l'hypothèse que la conductance $g(\alpha L)$ pour un système de volume $(\alpha L)^d$ ne dépend que du coefficient de dilatation α et de la conductance $g(L)$ pour un système de volume L^d . En d'autre terme, la fonction d'échelle $\beta(g) = d \ln(g)/d \ln(L)$ introduite par ABRAHAMS, ANDERSON, LICCIARDELLO et RAMAKRISHNAN [1] doit être indépendante de L . La conductance est ici une mesure du changement de désordre effectif lorsque l'échelle du système est modifiée. En prenant la conductance $g_0 = g(\ell)$ pour une taille de l'ordre du libre parcours moyen ℓ et en suivant les flots de variations de la fonction d'échelle $\beta(g)$, le système peut évoluer vers un des deux régimes asymptotiques suivants :

1.2.2.a Forte conductance $g \gg 1$

La loi d'Ohm (1.25) s'applique alors et par conséquent

$$\beta(g) = d - 2. \quad (1.27)$$

En dimension deux, $\beta(g)$ tends vers 0 ce qui traduit le fait bien connu que dans un plan la conductance est indépendante de la taille du système. Un calcul perturbatif en puissance de g^{-1} [1, 64] donne la déviation de $\beta(g)$ par rapport à sa valeur asymptotique (1.27)

$$\beta(g) = d - 2 - \frac{a}{g} + \mathcal{O}(g^{-2}) \quad (1.28)$$

où $a \sim 1$.

1.2.2.b Faible conductance $g \ll 1$

Les états sont localisés et par conséquent en utilisant (1.26), $\beta(g)$ devient

$$\beta(g) \propto \ln g. \quad (1.29)$$

$\beta(g)$ donne le sens de variation de la conductance $g(L)$ lorsque L varie. La FIG. 1.6 donne alors l'évolution de la conductance du système à mesure que l'on s'approche de la limite thermodynamique ($L \rightarrow \infty$).

Ainsi, **en dimension un**, la conductance disparaît à mesure que $L \rightarrow \infty$. Les électrons sont exponentiellement localisés sur une longueur de localisation l_{loc}^{1D} de l'ordre

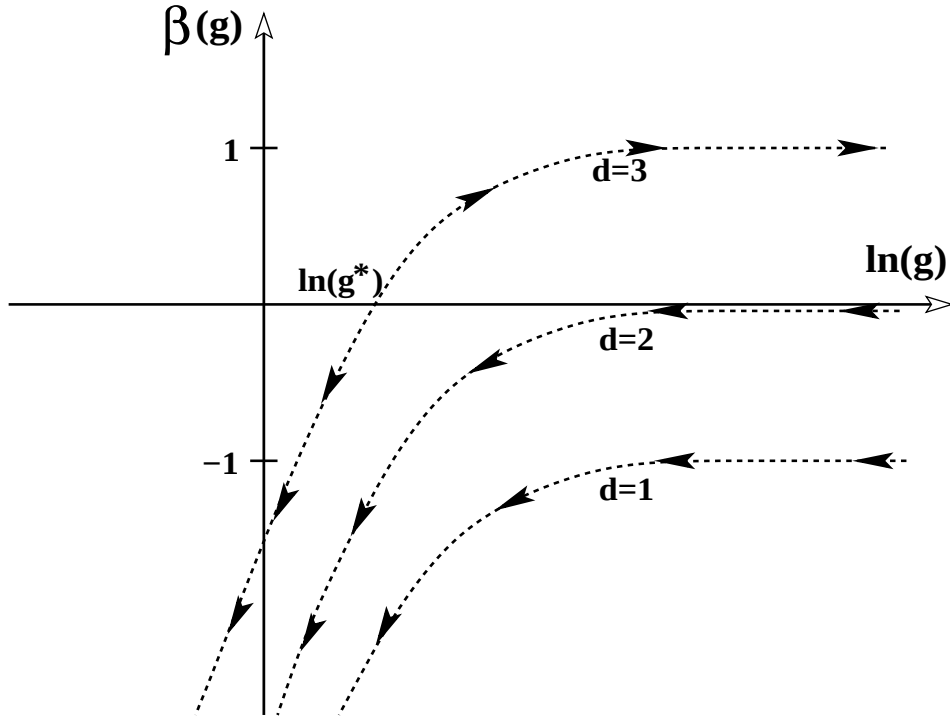


FIG. 1.6 – Fonction d'échelle $\beta(g) = d \ln(g)/d \ln(L)$. Le signe de $\beta(g)$ donne le sens de l'évolution (flèches) de la conductance adimensionnée g lorsque la taille du système L augmente.

du libre parcours moyen ℓ . Ce résultat était déjà connu antérieurement grâce au travail de MOTT et TWOSE (1956) [76].

En dimension deux, $\beta(g)$ est toujours négatif, il apparaît donc qu'à la limite thermodynamique le système est isolant^a. Ce qui signifie que même pour un désordre faible, il n'existe pas de véritables états étendus pour des systèmes bidimensionnels de grande taille ($L \rightarrow \infty$). Si on définit la longueur de localisation comme étant la longueur $L = l_{loc}^{2D}$ telle que la conductance $g(L)$ soit de l'ordre de 1 alors en utilisant pour $d = 2$ la correction (1.28), on a

$$l_{loc}^{2D} \propto \exp(g_0) \quad (1.30)$$

où g_0 est la conductance pour $L = \ell$. Bien que la longueur de localisation l_{loc}^{2D} puisse être très grande si $g_0 = g(\ell) \gg 1$, elle reste tout de même finie (pas de divergence).

En dimension trois, le résultat diffère des deux autres cas. Le point $g = g^*$ est instable, un écart relatif δg par rapport à g^* mène le système, lorsque l'on augmente L , vers un des régimes asymptotiques. Si $g_0 < g^*$, le système est alors isolant pour les tailles $L > \ell$. Par contre si $g_0 > g^*$ la fonction d'échelle β devient de l'ordre de 1 pour $L \rightarrow \infty$, exhibant ainsi le caractère ohmique du système. La position initiale de g_0 par rapport à g^* dépend de la position du niveau de Fermi ϵ_F par rapport à la barrière de

^aLe raisonnement présent n'inclut pas les interactions entre électrons. En effet, de récents travaux expérimentaux [57] mettent en évidence l'existence dans des systèmes bidimensionnels dopés d'une phase métallique induite par les interactions inter-particules.

mobilité ϵ_m . Ainsi en gardant le désordre fixe et en modifiant l'énergie de Fermi, il est possible de passer continûment de $g_0 < g^*$ à $g_0 > g^*$. En regardant β pour de faibles variations de ϵ_F près de ϵ_m on a

$$\beta(g) = \frac{1}{\nu} \left(\frac{g - g^*}{g^*} \right) = \frac{\delta g}{\nu}. \quad (1.31)$$

$1/\nu$ est alors la pente de $\beta(g)$ au point critique $g = g^*$ (voir FIG. 1.6). En intégrant (1.31) de $g = g_0 < g^*$ pour $L = \ell$ jusque $g \ll 1$, on obtient [64]

$$g(L) = g^* \exp(-B |\delta g|^\nu L/\ell). \quad (1.32)$$

L'équation (1.32) donne alors l'expression de la longueur de localisation en trois dimensions

$$l_{loc}^{3D} \propto \ell \delta g^{-\nu}. \quad (1.33)$$

Il apparaît clairement que lorsque ϵ_F s'approche de la barrière de mobilité ϵ_m , la longueur de localisation diverge avec un exposant critique ν .

Ainsi, à trois dimensions, il peut exister une phase métallique pour une certaine amplitude du désordre et surtout à partir d'une énergie donnée ϵ_m appelée barrière de mobilité. Comme on l'a dit dans la section 1.2.1 une telle phase apparaît dans le modèle d'Anderson tridimensionnel : en baissant l'amplitude du désordre on fait apparaître dans la bande des niveaux deux barrières de mobilité (voir FIG. 1.5) entre lesquelles les états du système deviennent délocalisés. Cette apparition des barrières de mobilité correspond à la transition d'Anderson qui nous servira de modèle de référence lorsque nous introduirons le désordre dans le problème de Cooper tridimensionnel.

1.2.3 Propriétés statistiques de la transition d'Anderson

1.2.3.a Domaines d'application des matrices aléatoires

Les propriétés statistiques des spectres quantiques de systèmes complexes comme les noyaux, les molécules ou les systèmes mésoscopiques, peuvent être décrites de manière universelle par la théorie des matrices aléatoires développée par WIGNER et DYSON [20, 71, 8]. Un Hamiltonien $\mathcal{H}$ appartenant à l'ensemble des matrices aléatoires possède une distribution de probabilité

$$P(\mathcal{H}) \propto \exp(-\beta \text{Tr } V(\mathcal{H})). \quad (1.34)$$

Le potentiel $V(\mathcal{H}) \propto \mathcal{H}^2$ est quadratique pour le cas d'une matrice aléatoire gaussienne, et β est la signature des symétries présentes dans les système :

- $\beta = 1$ s'il existe une symétrie par renversement du temps et si le spin des particules est conservé. $\mathcal{H}$ appartient alors à l'ensemble GOE des matrices gaussiennes aléatoires orthogonales,
- $\beta = 2$ si l'invariance par renversement du temps est brisée (typiquement en présence d'un champ magnétique). $\mathcal{H}$ appartient alors à l'ensemble GUE des matrices gaussiennes aléatoires unitaires,

- $\beta = 4$ si l'invariance par renversement du temps est conservée et si le spin des particules n'est pas conservé, par exemple s'il existe une interaction spin-orbit dans le système. $\mathcal{H}$ appartient alors à l'ensemble GSE des matrices gaussiennes aléatoires symplectiques.

L'idée de la théorie des matrices aléatoires^a est que les détails microscopiques des énergies propres de $\mathcal{H}$ importent peu, seul est important la moyenne des corrélations entre les différents niveaux d'énergie du système. En regardant la probabilité jointe des valeurs propres $\{E_n\}$ de $\mathcal{H}$,

$$P(\{E_n\}) \propto \exp \left[-\beta \left(-\sum_{i < j} \ln |E_i - E_j| + \sum_i V(E_i) \right) \right] \quad (1.35)$$

on s'aperçoit qu'on peut l'assimiler à une fonction de distribution classique de la mécanique statistique [8, 20, 81]. β joue alors le rôle de l'inverse de la température et les énergies E_i sont alors les positions de particules classiques. Le potentiel logarithmique dans (1.35) empêche donc les particules (les niveaux) de se rejoindre, il y a donc ce que l'on appelle une répulsion des particules (des niveaux). Le potentiel quadratique $V(E_i) \propto E_i^2$ empêche cependant les particules (les niveaux) de s'éloigner à l'infini.

La théorie des matrices aléatoires fut initialement introduite pour décrire les propriétés statistiques des résonances observées dans les expériences de diffusion de neutron sur des noyaux lourds. Cependant, la répulsion des niveaux et la rigidité spectrale caractéristiques des spectres des matrices aléatoires furent également observées lors de l'étude des fluctuations des énergies du spectre quantique du billard de Sinai [13]. BOHIGAS, GIANNONI et SCHMIT montrèrent au travers de cette étude [13] que la théorie des matrices aléatoires ne s'applique pas seulement à l'étude de systèmes complexes comportant une multitude de degrés de liberté (comme l'étude des résonances dans les noyaux lourds), mais s'applique aussi à l'étude de systèmes quantiques chaotiques comportant peu de degrés de liberté, comme par exemple une particule dans un billard irrégulier bidimensionnel : il existe alors un lien étroit entre le chaos quantique et la théorie des matrices aléatoires.

Un système constitué d'électrons diffusant au milieu d'impuretés dans un métal est aussi un système chaotique [74]. Rapidement, avec la diffusion des particules par les multiples potentiels induits par les impuretés, toutes les constantes du mouvement existantes pour un système sans désordre sont détruites. Par exemple, l'impulsion d'une particule $\mathbf{k}$ n'est plus un nombre quantique acceptable pour définir les états quantiques d'une particule dans un système désordonné, seuls les énergies des niveaux permettent de caractériser les différents états du système. Les premiers travaux utilisant les ensembles de matrices aléatoires de Wigner-Dyson pour étudier les propriétés électroniques de petits grains métalliques furent effectués en 1965 par GOR'KOV et ELIASHBERG [48]. Plus tard au début des années 80, EFETOV montra, par la méthode de la supersymétrie [21, 22, 23], que la fonction de corrélation des niveaux d'énergie d'une particule diffusive dans un grain métallique est similaire à celle obtenue dans le cas des ensembles de matrices aléatoires. Ainsi les ensembles de matrices aléatoires de Wigner-Dyson caractérisent le spectre énergétique de particules pouvant diffuser à travers l'ensemble du système ; elles

^aVoir les revues exhaustives sur le sujet de MEHTA [71] et de BEENAKKER [8].

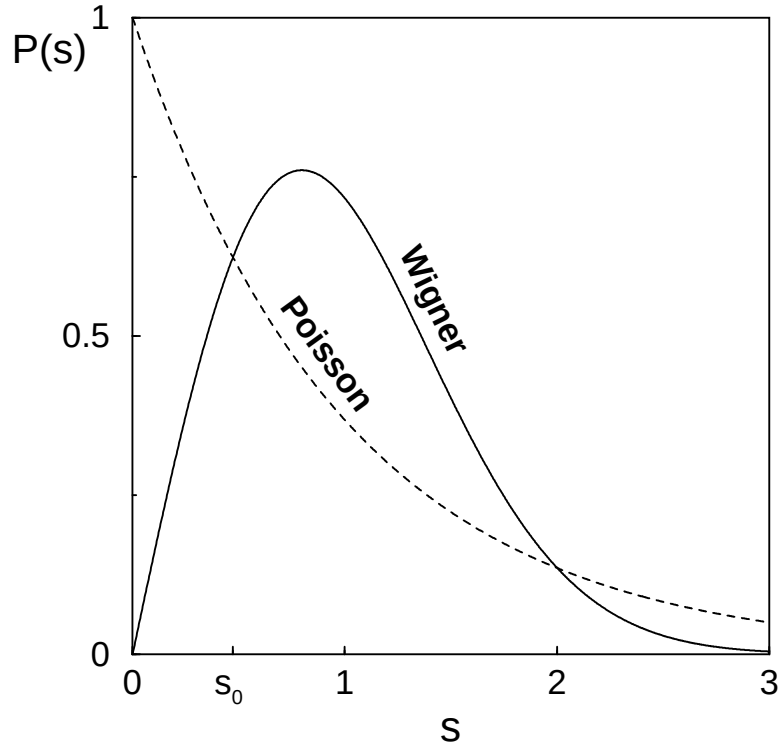


FIG. 1.7 – Distributions de Poisson et de Wigner.

caractérisent donc le spectre d'états étendus (délocalisés) de particules. Cependant, ceci n'est vrai que si l'étude du spectre se fait dans un intervalle d'énergie plus petit que l'énergie de Thouless E_T^a . En effet, pour $|E_i - E_j| \gg E_T$ l'interaction entre les niveaux dévie de sa forme logarithmique [2] décroissant alors sous forme de loi de puissance et devenant même attractive à trois dimensions [55].

Mentionnons enfin les études [75, 80], où il est montré que la distribution des écarts de niveaux de systèmes de fermions fortement corrélés suit la même loi que celle des matrices gaussiennes aléatoires. L'étude [75] porte sur les propriétés du spectre quantique du modèle $t - J_z - J_\perp$ où un trou seul est corrélé à un bain antiferromagnétique. L'étude [80] quant à elle porte sur les propriétés du spectre d'un modèle où un ou plusieurs états *intrus* sont couplés à une mer de Fermi composés d'états dont le spectre est Poissonien. Dans ces deux études, ce n'est plus le désordre, mais les corrélations dues à un grand nombre de particules qui induisent un spectre d'énergie chaotique obéissant à la théorie des matrices aléatoires.

1.2.3.b Distribution des écarts de niveaux

Ainsi pour étudier le régime métallique de la transition d'Anderson, nous pouvons nous attendre à ce que le spectre des niveaux d'énergies ait les même propriétés sta-

^aL'énergie de THOULESS [96] est l'inverse du temps de diffusion de la particule à travers le système, $E_T = \hbar D/L^2$, D est le coefficient de diffusion et L la taille linéaire du système (Voir la section 1.3.4)

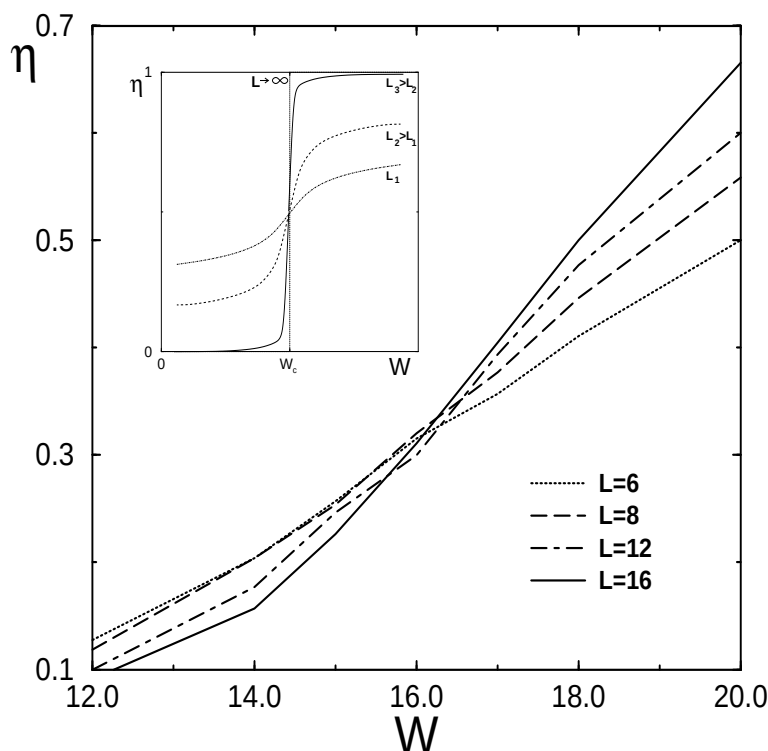


FIG. 1.8 – Paramètre η en fonction du désordre W pour différentes tailles L du système. Les données numériques sont celles obtenues dans [90] pour les états au milieu de la bande du modèle d'Anderson tridimensionnel. Encadré : Schéma de l'évolution de η lorsque la taille L du réseau augmente.

tistiques que celles des matrices aléatoires appartenant à l'ensemble GOE^a . Pour cet ensemble, la distribution des écarts en énergie entre des niveaux adjacents est correctement approximée par la distribution de WIGNER [71]

$$P_W(s) = \frac{\pi}{2} s \exp\left(-\frac{\pi}{4}s^2\right) \quad (1.36)$$

où s est l'énergie entre deux niveaux adjacents normalisée par rapport à l'espacement moyen δ , ainsi $\langle s \rangle = 1$. La répulsion des niveaux est traduite ici par le facteur s devant l'exponentielle, ainsi $P_W(s=0) = 0$, deux niveaux adjacents ont une probabilité nulle d'être confondus. La distribution de Wigner $P_W(s)$, tracée sur la FIG. 1.7, caractérisera donc les systèmes dont les états seront complètement étendus.

A l'opposé, le régime isolant de la transition d'Anderson est constitué d'états localisés. Deux états localisés, dont les énergies respectives sont proches l'une de l'autre, ne sont pas forcément proches dans l'espace. Ainsi, il n'y a pas de corrélations entre les différentes fonctions d'ondes et donc pas de répulsion des niveaux. Le spectre est alors comparable à celui d'un système intégrable. On s'attend à ce que la distribution des écarts de niveaux soit alors assimilable à la distribution de Poisson

$$P_P(s) = \exp(-s). \quad (1.37)$$

^aLes symétries en temps et par rapport au spin étant conservées.

En 1993, SHKLOVSKII *et al* [90] étudièrent la distribution statistique $P(s)$ des espacements de niveaux adjacents pour le modèle d'Anderson tridimensionnel. L'étude fut faite sur un intervalle énergétique symétrique centré au milieu de la bande spectrale. Pour caractériser la transition métal-isolant d'Anderson, les auteurs de [90] introduisirent le rapport η défini par

$$\eta = \frac{A - A_W}{A_P - A_W} \quad (1.38)$$

où $A = \int_{s_1}^{s_2} P(s) ds$ est le poids relatif sous la distribution $P(s)$ entre les écarts d'énergie s_1 et s_2 . Si $\eta \rightarrow 1$ la distribution $P(s)$ ressemble à celle de Poisson, le système est alors localisé. Inversement, si $\eta \rightarrow 0$ la distribution $P(s)$ est proche de celle de Wigner, le système est alors délocalisé.

Ainsi, pour le modèle d'Anderson tridimensionnel, η passe continûment d'une valeur proche de 0 pour des désordres W faibles à une valeur proche de 1 pour des désordres élevés. Cette transition devient de plus en plus abrupte à mesure que la taille L du système croît, définissant de manière précise un désordre critique W_c pour lequel le système entreprend une transition d'un régime métallique vers un régime isolant (voir FIG. 1.8). Pour les états se situant au centre de la bande du modèle d'Anderson tridimensionnel, la valeur critique de l'intensité du désordre est $W_c \approx (16 \pm 0.5) V$ [90, 67, 68, 56]. Nous adopterons dans l'exposé de nos travaux (CHAP. 2 et 4) la valeur de $W_c \simeq 16.5V$, récemment calculée dans [77], comme référence de la transition d'Anderson pour les états monoparticulaires au milieu de la bande.

Notons que, dans leur étude SHKLOVSKII *et al* [90] choisirent de prendre $s_1 = 2$ et $s_2 \rightarrow \infty$ dans la définition des poids A , A_P et A_W . Deux points de croisement existent entre les distributions de Poisson et de Wigner, à savoir $s = s_0$ et $s \approx 2$ (voir FIG. 1.7). Ainsi, la définition de η , prise dans l'étude [90], permet de comparer le poids A avec les poids de Poisson A_P et de Wigner A_W pour les *larges* espacements de niveaux ($s \geq 2$). Dans les travaux présentés à la section 2.3.1, nous choisirons au contraire de comparer le poids A avec les poids A_P et A_W pour les petits écarts de niveaux ($s < s_0 \simeq 0.4729$); nous prendrons alors $s_1 = 0$ et $s_2 = s_0$ dans la définition (1.38).

1.3 Deux particules en interaction dans un milieu aléatoire : Modèle TIP

Nous allons introduire ici un modèle constitué de deux particules sur un réseau désordonné couplées l'une à l'autre par une interaction locale (modèle appelé TIP pour *Two Interacting Particles*). Comme on l'a vu à la section précédente (section 1.2), sans interaction les fonctions d'ondes associées aux particules sont localisées en dimension un et deux et peuvent l'être aussi en dimension trois pour un désordre suffisamment fort. Il est alors intéressant de voir comment l'interaction influe sur cette localisation.

Ce modèle de deux particules en interaction dans un milieu aléatoire a été introduit en 1994 par SHEPELYANSKY. Son étude [87] montra que les deux particules en interaction locale, attractive ou répulsive, peuvent se propager par paire sur une distance bien plus grande que la longueur de localisation d'une particule sans interaction. Cet effet est indépendant du signe de l'interaction, ainsi même une interaction répulsive permet de

former une paire de particules se propageant de manière cohérente sur une distance plus grande que la longueur de localisation monoparticulaire.

Un résultat précurseur avait été établi auparavant par DOROKHOV [19] qui montra dans un cadre plus restreint la possibilité d'une augmentation de la distance de propagation des particules pour une interaction attractive forte à longue portée.

Nous allons présenter (sections 1.3.2 et 1.3.3) le raisonnement de SHEPELYANSKY qui a conduit à la dérivation de cet effet [87]. Nous présenterons ensuite le raisonnement alternatif d'IMRY [50] conduisant au même résultat en utilisant l'image des boîtes de Thouless et une extension de la théorie d'échelle de la conductance (section 1.2.2) appliquée à deux particules. Nous ferons ensuite une revue non exhaustive des différents travaux sur le modèle TIP (section 1.3.5) et nous finirons par l'introduction d'une mer de Fermi dans le système ce qui va conduire à une suppression de l'effet de délocalisation des paires TIP pour des énergies proches de l'énergie de Fermi (section 1.3.6).

1.3.1 Description du modèle TIP

Le modèle consiste à étudier deux particules régies chacune par le modèle de Anderson (1.22)

$$H_A = \sum_{\mathbf{n}} \epsilon_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}| + V \sum_{\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{m}| \quad (1.39)$$

et entre lesquelles on établit une interaction sur site^{ab}

$$H_U = U \sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{nn}\rangle \langle \mathbf{nn}|. \quad (1.40)$$

L'Hamiltonien complet pour les deux particules est alors^c

$$H = H_A \otimes \mathbf{1}_d + \mathbf{1}_d \otimes H_A + U \sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{nn}\rangle \langle \mathbf{nn}|. \quad (1.41)$$

Puisque le modèle TIP est construit à partir du modèle d'Anderson, il est clair que les propriétés de ce dernier vont jouer un rôle important. Ainsi, il est judicieux pour étudier le modèle TIP de réécrire l'Hamiltonien (1.41) dans la base préférentielle constituée des fonctions propres du modèle d'Anderson (1.39). Ainsi, connaissant les états propres $\{E_\alpha, |\phi_\alpha\rangle\}_{\alpha \in [1, L^d]}$ du Hamiltonien monoparticulaire H_A définis par

$$H_A |\phi_\alpha\rangle = E_\alpha |\phi_\alpha\rangle, \quad (1.42)$$

nous sommes en mesure de construire la base biparticulaire $\{|\alpha\beta\rangle\}_{\alpha \leq \beta}$ définie de la manière suivante

$$|\alpha\beta\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi_\alpha\rangle \otimes |\phi_\beta\rangle + |\phi_\beta\rangle \otimes |\phi_\alpha\rangle) & \text{si } \alpha \neq \beta \\ |\phi_\alpha\rangle \otimes |\phi_\alpha\rangle & \text{si } \alpha = \beta. \end{cases} \quad (1.43)$$

^a $\mathbf{n}$ désigne le vecteur position d'une particule sur le réseau d-dimensionnel.

^bLe ket $|\mathbf{nn}\rangle = |\mathbf{n}\rangle \otimes |\mathbf{m}\rangle$ dénote le produit tensoriel entre le ket $|\mathbf{n}\rangle$ appartenant à l'espace de la première particule et le ket $|\mathbf{m}\rangle$ appartenant à celui de la seconde.

^cL'opérateur $\mathbf{1}_d$ est l'opérateur identité.

Les fonctions d'ondes $|\alpha\beta\rangle$ à deux particules sans interaction (1.43) sont prises symétriques par rapport à l'échange des particules. En effet, l'interaction sur site H_U (1.40) n'affecte pas les fonctions d'ondes antisymétriques. Ces dernières constituent un sous-espace vectoriel inchangé par l'ajout de l'interaction et donc inintéressant pour notre étude^a.

En utilisant la base (1.43), l'Hamiltonien TIP (1.41) se réécrit

$$H = \sum_{\alpha,\beta} (E_\alpha + E_\beta) |\alpha\beta\rangle \langle\alpha\beta| + U \sum_{\alpha,\beta,\gamma,\delta} Q_{\alpha\beta\gamma\delta} |\alpha\beta\rangle \langle\gamma\delta| \quad (1.44)$$

où les énergies E_α sont les énergies propres du Hamiltonien d'Anderson (1.42) et où l'élément de matrice

$$UQ_{\alpha\beta\gamma\delta} = U \sum_{\mathbf{n}} \phi_\alpha^*(\mathbf{n}) \phi_\beta^*(\mathbf{n}) \phi_\gamma(\mathbf{n}) \phi_\delta(\mathbf{n}) \quad \text{avec } \phi_\alpha(\mathbf{n}) = \langle \mathbf{n} | \phi_\alpha \rangle \quad (1.45)$$

est l'énergie de transition entre les états $|\alpha\beta\rangle$ et $\langle\gamma\delta|$. Dans la section suivante, nous allons estimer cette énergie de transition.

1.3.2 Estimation des éléments $UQ_{\alpha\beta\gamma\delta}$ de la matrice d'interaction

Les éléments de la matrice d'interaction sont des sommes de produits de fonctions d'ondes du modèle d'Anderson. En dimension un, ces fonctions d'ondes sont toutes exponentiellement localisées sur une distance typique l_1 (longueur de localisation mono-particulaire),

$$\phi_\alpha(\mathbf{n}) = \frac{1}{\sqrt{2l_1}} \exp \left(-\frac{|\mathbf{n} - \mathbf{n}_\alpha|}{l_1} + i\theta_\alpha(\mathbf{n}) \right). \quad (1.46)$$

La fonction $\phi_\alpha(\mathbf{n})$ (1.46) est centrée sur un site de localisation $\mathbf{n}_\alpha$. Il existe par conséquent une relation biunivoque entre les fonctions d'onde noninteractives à un corps ϕ_α et les différents sites de localisation associés $\mathbf{n}_\alpha$. Les phases aléatoires $\theta_\alpha(\mathbf{n})$ assurent l'absence de corrélations entre les différentes amplitudes de probabilité sur les différents sites $\mathbf{n}$ et entre les différentes fonctions d'onde ϕ_α .

Ainsi, d'après la forme exponentielle (1.46) deux fonctions $\phi_\alpha(\mathbf{n})$ et $\phi_\beta(\mathbf{n})$ auront un recouvrement exponentiellement faible si $|\mathbf{n}_\alpha - \mathbf{n}_\beta| > l_1$ et donc l'état biparticulaire correspondant $|\alpha\beta\rangle$ sera très faiblement sensible à l'interaction (1.45). Ceci concerne la majorité des états biparticulaires $|\alpha\beta\rangle$ présents dans le système. Par contre les fonctions d'onde $\phi_\alpha(\mathbf{n})$ et $\phi_\beta(\mathbf{n})$ telles que $|\mathbf{n}_\alpha - \mathbf{n}_\beta| < l_1$ seront quant à elles réorganisées par l'interaction $UQ_{\alpha\beta\gamma\delta}$. Ce sont ces états $|\alpha\beta\rangle$ qui seront mélangés par l'interaction et qui nous intéressent dans notre étude.

Les éléments de matrice $Q_{\alpha\beta\gamma\delta}$ peuvent être considérés comme des variables aléatoires dont la moyenne est nulle puisqu'il n'existe pas de corrélation entre les différentes fonctions d'onde $\phi_\alpha(\mathbf{n})$,

$$\langle Q_{\alpha\beta\gamma\delta} \rangle = 0. \quad (1.47)$$

^aEn terme de spin de particule, l'interaction H_U (1.40) n'occasionne que des transitions entre états avec spin total nul (secteur $S_z = S_{1z} + S_{2z} = 0$).

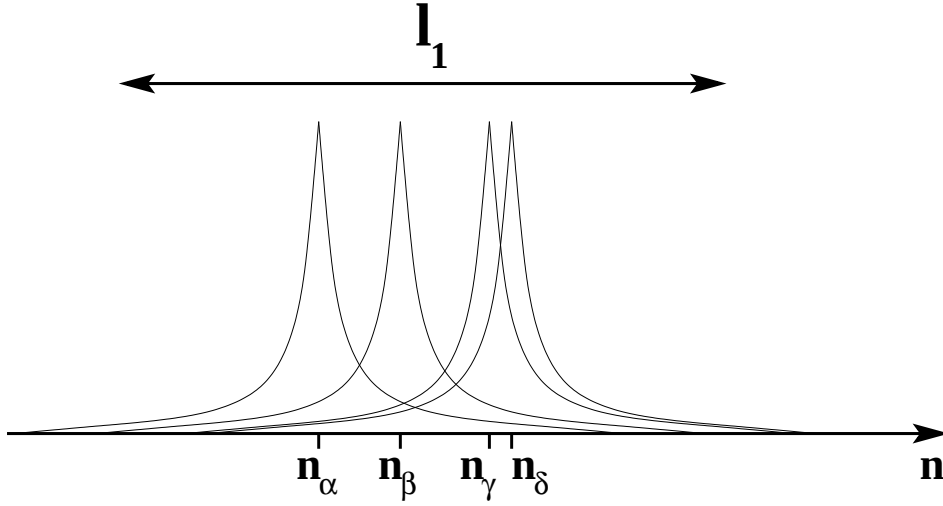


FIG. 1.9 – Recouvrement de quatre amplitudes de probabilités $\phi_\alpha(\mathbf{n})$, $\phi_\beta(\mathbf{n})$, $\phi_\gamma(\mathbf{n})$ et $\phi_\delta(\mathbf{n})$ (1.46). Le recouvrement n'est pas exponentiellement faible si les centres de localisation $\mathbf{n}_\alpha$, $\mathbf{n}_\beta$, $\mathbf{n}_\gamma$ et $\mathbf{n}_\delta$ sont tous situés dans une fenêtre spatiale de largeur l_1 .

Evaluons alors l'écart-type de l'élément d'interaction $UQ_{\alpha\beta\gamma\delta}$:

$$\langle (UQ_{\alpha\beta\gamma\delta})^2 \rangle^{\frac{1}{2}} \sim \frac{U}{l_1^2} \left\langle \left(\sum_{l_1 \text{ sites}} e^{-i\theta_\alpha(\mathbf{n}) - i\theta_\beta(\mathbf{n}) + i\theta_\gamma(\mathbf{n}) + i\theta_\delta(\mathbf{n})} \right)^2 \right\rangle^{\frac{1}{2}} \sim \frac{U}{l_1^{\frac{3}{2}}}. \quad (1.48)$$

La somme dans (1.48) est restreinte à une fenêtre spatiale de dimension l_1 contenant tous les sites de localisation $\mathbf{n}_\alpha$, $\mathbf{n}_\beta$, $\mathbf{n}_\gamma$ et $\mathbf{n}_\delta$. Les crochets $\langle \rangle$ dénotent ici la moyenne sur le désordre. L'intensité typique de la matrice d'interaction est par conséquent

$$U_{typ} = \langle (UQ_{\alpha\beta\gamma\delta})^2 \rangle^{1/2} \sim U/l_1^{3/2}. \quad (1.49)$$

1.3.3 Longueur de cohérence l_c des deux particules

Nous allons suivre ici un raisonnement dû à Shepelyansky [87, 88] permettant d'évaluer la longueur de corrélation des deux particules couplées par l'interaction. Ce raisonnement est basé sur le fait qu'il existe une relation directe entre l'espace de Hilbert constitué des fonctions d'ondes monoparticulaires d'Anderson et l'espace réel du réseau. Ainsi la diffusion des deux particules due à l'interaction à travers l'espace de Hilbert équivaut à une diffusion dans l'espace réel. Cette technique est similaire à celle utilisée dans l'étude de la localisation dynamique du rotateur pulsé [14, 15, 86].

Ainsi, en indexant les vecteurs $|\phi_\alpha\rangle$ de l'espace de Hilbert avec les indices de réseau $\mathbf{n}_\alpha$, il apparaît que seule une bande d'états biparticulaires sans interaction va être mélangée par l'interaction. Cette bande correspond aux états $|\alpha\beta\rangle$ tels que $|\mathbf{n}_\alpha - \mathbf{n}_\beta| < l_1$ (voir FIG. 1.10). Prenons à présent un état biparticulaire sans interaction $|\alpha\beta\rangle$ appartenant à cette bande, il sera couplé avec $b \sim l_1^2$ états biparticulaires $|\gamma\delta\rangle$ appartenant à cette même bande. Typiquement, ces états couplés sont contenus dans une fenêtre

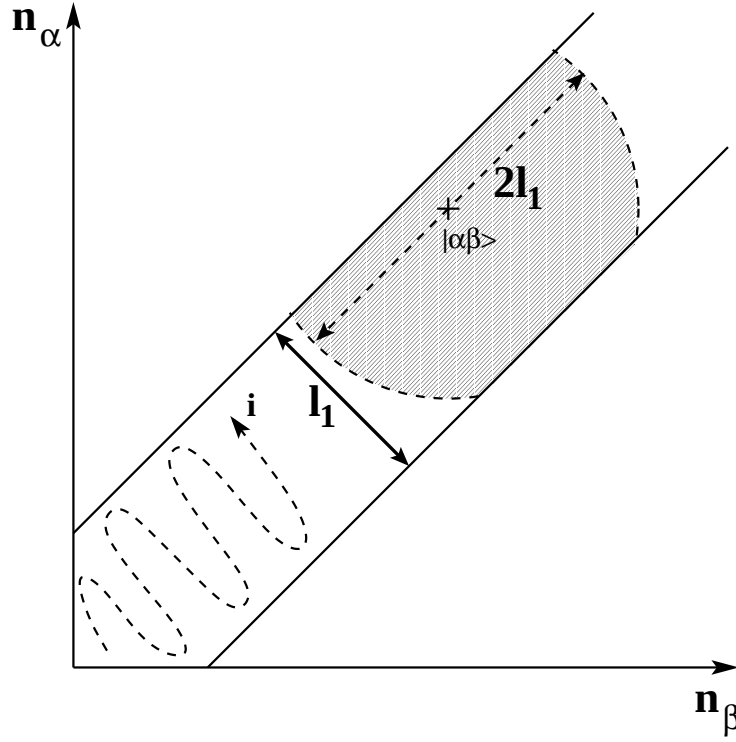


FIG. 1.10 – Représentation de l'espace de Hilbert des deux particules. Seuls les états dans la bande $|\mathbf{n}_\alpha - \mathbf{n}_\beta| < l_1$ sont concernés par l'interaction. Un état $|\alpha\beta\rangle$ sera couplé par l'interaction avec $b \sim l_1^2$ états (états dans la partie grisée).

énergétique de quelques V , ainsi la densité d'états biparticulaires couplés par l'interaction est $\rho_2 \sim l_1^2/V$. En utilisant la règle d'or de Fermi, on obtient le taux Γ de transition entre deux états biparticulaires ($|\alpha\beta\rangle \rightarrow |\gamma\delta\rangle$) induit par l'interaction

$$\Gamma \sim U_{typ}^2 \rho_2 \sim \frac{U^2}{V l_1}. \quad (1.50)$$

Sachant que pendant le temps Γ^{-1} la taille typique de la transition dans l'espace réel est l_1 , le coefficient de diffusion de la paire sur le réseau est alors

$$D_p \sim l_1^2 \Gamma \sim V \left(\frac{U}{V} \right)^2 l_1. \quad (1.51)$$

Considérons à présent une fenêtre d'énergie δE à travers laquelle nous regardons les états noninteractifs excités par la diffusion de la paire. Le nombre de ces états est $\Delta N \sim \Delta \mathbf{n}_\alpha l_1 \delta E / V$, où $\Delta \mathbf{n}_\alpha \sim (D_p t)^{1/2}$ est le nombre d'états *visités* par le centre de gravité de la paire et l_1 la distance séparant les deux particules. Tous les niveaux excités ΔN étant uniformément distribués dans l'intervalle d'énergie δE , l'espacement moyen des niveaux est alors donné par $\Delta \nu = \delta E / \Delta N$. La diffusion s'arrête après un temps caractéristique t^* donné par la relation d'incertitude entre temps et énergie

$$\Delta \nu \sim 1/t^*. \quad (1.52)$$

En effet la diffusion *classique* associée à un spectre continu ne peut se poursuivre au-delà d'un temps t^* qui correspond à l'établissement du régime quantique associé à un spectre discret dont l'espacement est $\Delta\nu$. Ainsi le temps limite de localisation t^* donné par (1.52)

$$t^* \sim (D_p t^*)^{1/2} \frac{l_1}{V} \sim D_p \left(\frac{l_1}{V} \right)^2 \quad (1.53)$$

va nous permettre de trouver la longueur de cohérence l_c de la paire

$$l_c \approx \Delta \mathbf{n}_\alpha \sim (D_p t^*)^{1/2} \sim l_1^2 \left(\frac{U}{V} \right)^2. \quad (1.54)$$

Ce résultat (1.54), établi en 1994 par SHEPELYANSKY [87], implique que deux particules couplées par une interaction locale ont la possibilité de se propager par paire de taille l_1 sur une distance l_c bien plus grande que la longueur de localisation individuelle l_1 de chaque particule. De plus cet effet est indépendant du signe de l'interaction : que l'interaction U soit attractive $U < 0$ ou répulsive $U > 0$ le facteur d'accroissement de la longueur de localisation à une dimension est toujours

$$\kappa = \frac{l_c}{l_1} \sim l_1 \left(\frac{U}{V} \right)^2. \quad (1.55)$$

Le fait que les deux particules forment effectivement une paire grâce à l'interaction a été confirmé dans une étude [109] basée sur la diagonalisation exacte du modèle TIP unidimensionnel. Cette étude [109] montre que les états TIP sont sensibles à un flux de Aharonov-Bohm de périodicité $h/2e$ correspondant à une entité composite de charge $2e$ formée par deux électrons.

1.3.4 Image des boîtes de Thouless et extension de la théorie d'échelle de la conductance pour deux particules

Dans cette section, nous allons exposer le raisonnement d'IMRY [50, 51] permettant de retrouver la longueur de cohérence l_c (1.55) à partir de l'image des boîtes de THOULESS [96] et d'une extension pour deux particules de la théorie d'échelle (section 1.2.2) de la conductance.

Considérons une particule dans une boîte métallique de volume L^d . La conductivité σ est alors donnée par la relation d'Einstein

$$\sigma = e^2 D n \quad (1.56)$$

où e est la charge de la particule, D son coefficient de diffusion dans la boîte et $n = \Delta_1^{-1} L^{-d}$ la densité d'états par unité de volume, les états à l'intérieur de la boîte étant uniformément espacés avec un espacement moyen Δ_1 . La conductance sans dimension g s'écrit alors

$$g = \frac{\hbar}{e^2} \sigma L^{d-2} = \frac{\hbar D}{L^2 \Delta_1}. \quad (1.57)$$

Dans l'équation (1.57), il apparaît l'énergie $E_T = \hbar D / L^2$, appelée énergie de Thouless, qui est associée au temps L^2 / D que mets la particule pour diffuser d'un bord à un autre

de la boîte. Si on place deux boîtes de volume L^d côte à côte, les états quantiques des deux boîtes seront couplés par l'intermédiaire d'éléments de matrice de l'ordre de E_T . Ainsi si $E_T \gg \Delta_1$ les états du système global seront une combinaison linéaire complexe des états des deux sous-systèmes (états étendus). En revanche, si $E_T \ll \Delta_1$ alors les états du système global seront décrits par des états de boîte faiblement perturbés et localisés sur une longueur équivalente à la taille L de la boîte.

Ainsi la conductance g est le rapport entre l'énergie de couplage de plusieurs boîtes et l'espacement des niveaux d'énergie d'une boîte

$$g = \frac{E_T}{\Delta_1}. \quad (1.58)$$

Nous pouvons généraliser cette formule pour la conductance g_2 associée à deux particules

$$g_2 \sim \frac{\Gamma}{\Delta_2} = \Gamma \rho_2. \quad (1.59)$$

Par analogie avec la conductance g associée à une particule, Δ_2 est l'espacement entre états biparticulaires noninteractifs ($\rho_2 = \Delta_2^{-1}$ est alors la densité d'états noninteractifs à deux particules) et Γ est l'énergie permettant aux deux particules de passer dans la boîte voisine.

Considérons à présent les deux particules dans une boîte de volume l_1^d . Sans interaction, même avec l'ajout d'une boîte à côté de la boîte initiale, les deux particules ne pourront sortir de la boîte puisque les états biparticulaires seront localisés à l'intérieur. Seul l'effet de l'interaction pourra coupler deux boîtes voisines et faire sortir les deux électrons de leur boîte initiale. L'énergie de transition Γ associée est donnée par la règle d'or de Fermi

$$\Gamma \sim U_{typ}^2 \rho_2(l_1) \sim \frac{U^2}{V l_1^d} \quad (1.60)$$

où $\rho_2(l_1) \sim l_1^{2d}/V$. La conductance g_2 devient alors pour $L = l_1$

$$g_2(l_1) \sim \left(\frac{U}{V}\right)^2 l_1^d. \quad (1.61)$$

On peut remarquer que g_2 peut devenir très grand alors qu'à la même échelle l_1 la conductance à une particule est $g \sim 1$. Si à présent on suppose que l'on peut appliquer la théorie d'échelle à la conductance $g_2(L)$, pour $g_2 \gg 1$ on doit retrouver la loi d'Ohm et donc

$$g_2(L) \propto g_2(l_1) \left(\frac{L}{l_1}\right)^{d-2}. \quad (1.62)$$

Ainsi en définissant l_c telle que $g_2(l_c) \sim 1$, on retrouve en dimension $d = 1$

$$\kappa = \frac{l_c}{l_1} \sim \Gamma \rho_2(l_1) \sim \left(\frac{U}{V}\right)^2 l_1 \quad (1.63)$$

qui est analogue au résultat (1.55) obtenu par SHEPELYANSKY [87]. Ce raisonnement d'IMRY basé sur la théorie d'échelle de la conductance a été ensuite justifié dans une étude analytique d'un modèle σ -nonlinéaire supersymétrique [31, 30, 32].

Pour finir signalons simplement le cas critique de la dimension deux. D'après (1.62), en dimension deux, la conductance g_2 est indépendante de la taille L du système

$$g_2(L) = g_2(l_1). \quad (1.64)$$

Ainsi par analogie avec la théorie d'échelle de la conductance pour une particule, on peut utiliser pour g_2 une formule analogue à (1.30)

$$l_c \sim \exp(g_2(l_1)) \gg g_2(l_1). \quad (1.65)$$

La longueur de localisation l_c pour deux particules TIP dans un système bidimensionnel est alors exponentiellement plus grande que celle dans un système à une dimension.

1.3.5 Matrice de bande aléatoire avec diagonale surimposée

Plusieurs confirmations de l'expression de la longueur de corrélation (1.55) furent données en utilisant l'analogie entre le modèle TIP et un modèle de matrice de bande aléatoire particulier [87]. En effet, si on indexe les états biparticulaires à l'aide d'un indice $\mathbf{i}$ parcourant l'espace $(\mathbf{n}_\alpha, \mathbf{n}_\beta)$ en "serpentant" le long de la diagonale $\mathbf{n}_\alpha = \mathbf{n}_\beta$ (voir FIG. 1.10), on obtient pour la matrice d'interaction une certaine matrice G . Cette matrice G est alors la superposition d'une matrice de bande $\zeta_{\mathbf{ij}}$ avec $b \sim l_1^2$ diagonales et d'une matrice diagonale $\eta_{\mathbf{ij}} = \eta_{\mathbf{i}}\delta_{\mathbf{ij}}$. Les éléments de matrice $\zeta_{\mathbf{ij}}$ correspondent aux termes d'interaction $UQ_{\alpha\beta\gamma\delta}$ qui, comme on l'a vu à la section 1.3.2, peuvent être considérées comme des variables aléatoires d'écart-type U_{typ} . Les éléments diagonaux surimposés $\eta_{\mathbf{i}}$ correspondent quant à eux aux énergies $E_\alpha + E_\beta$ des deux particules sans interaction. Ces énergies $\eta_{\mathbf{i}}$ fluctuent fortement dans l'intervalle d'énergie $\Delta \simeq 2(2V + W)$. La matrice $G_{\mathbf{ij}} = \zeta_{\mathbf{ij}} + \eta_{\mathbf{i}}\delta_{\mathbf{ij}}$ est alors ce que l'on appelle une matrice de bande aléatoire avec diagonale surimposée [*Superimposed Band Random Matrix* (SBRM)].

Ainsi la première des confirmations de (1.55) fut une étude numérique, incluse dans [87], utilisant la technique des matrices de transfert sur ce type de matrice SBRM. Cette technique permet de calculer l'exposant de Lyapunov minimal le long de la diagonale de la matrice aléatoire à étudier. L'inverse de l'exposant de Lyapunov donne la longueur de localisation l' dans l'espace indexé par $\mathbf{i}$. Pour trouver l'expression (1.55) de l_c il faut alors diviser l' par l_1 .

Ensuite des études analytiques sur les SBRM furent menées parallèlement par FRAHM & MÜLLER-GROELING [29] et par FYODOROV & MIRLIN [38] en empruntant le modèle σ nonlinéaire supersymétrique^a utilisé dans l'étude des matrices de bande aléatoires simples [35, 36, 37, 73]. Ces études [29, 38] permirent entre autres de confirmer analytiquement l'expression (1.55) de la longueur de localisation l_c et de retrouver la forme de Breit-Wigner de la densité locale^b d'états

$$\rho(E, \mathbf{i}) = \sum_{\lambda} |\Psi_{\lambda}(\mathbf{i})|^2 \delta(E - E_{\lambda}) = \frac{\Gamma_{BW}/2\pi}{(E - \eta_{\mathbf{i}})^2 + \Gamma_{BW}^2/4} \quad (1.66)$$

^aVoir [22, 23] pour une revue complète des techniques supersymétriques et en particulier du modèle σ nonlinéaire supersymétrique.

^bLocale dans l'espace des états biparticulaires indexés par $\mathbf{i}$ (voir le "serpentin" sur la FIG. 1.10).

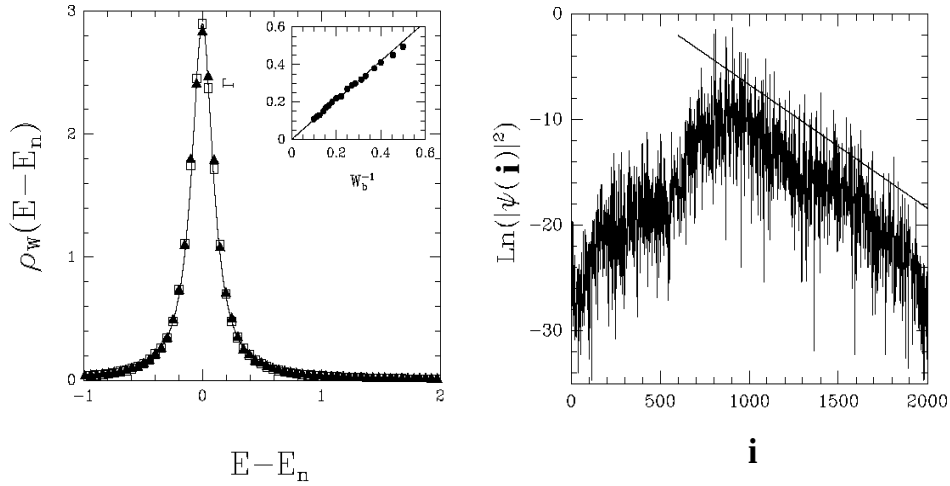


FIG. 1.11 – Distribution de Breit-Wigner de la densité locale d'états (à gauche) et représentation d'une fonction propre d'une matrice de bande aléatoire avec diagonale surimposée (à droite). Figures adaptées de [52].

trouvée auparavant de façon numérique par JACQUOD et SHEPELYANSKY [52]. Dans (1.66), $\{|\Psi_\lambda\rangle\}$ et $\{E_\lambda\}$ sont respectivement les vecteurs et valeurs propres de la matrice de bande G aléatoire avec diagonale fluctuante. La largeur de Breit-Wigner Γ_{BW} apparaît comme étant égale au taux de transition entre deux états biparticulaires noninteractifs, $\Gamma_{BW} \approx \Gamma \sim U^2/(Vl_1)$ [52, 29, 38]. La forme Lorentzienne (voir FIG. 1.11 à gauche) de la densité locale (1.66) implique que les états biparticulaires $|\mathbf{i}\rangle = |\alpha\beta\rangle$ d'énergie $\eta_{\mathbf{i}} = E_\alpha + E_\beta$ contribuant à un vecteur propre $|\Psi_\lambda\rangle$ sont tels que $|\eta_{\mathbf{i}} - E_\lambda| < \Gamma$. Ainsi, une fonction propre localisée $|\Psi_\lambda\rangle$ du modèle TIP possédera une structure très fluctuante (voir FIG. 1.11 à gauche) puisque deux états biparticulaires *successifs* $|\mathbf{i}\rangle$ et $|\mathbf{i} + \mathbf{1}\rangle$ peuvent chacun contribuer de façon très inégale à $|\Psi_\lambda\rangle$ ^a.

Il est possible également de calculer l'inverse ξ du *taux de participation* qui est un décompte du nombre d'états biparticulaires participant à une fonction d'onde TIP localisée $|\Psi_\lambda\rangle$. Ici, d'une manière pratique, ξ est en fait le nombre de “pics” comptés sur le carré de la fonction d'onde (voir FIG. 1.11 à droite), il peut être estimé [52] au produit entre la largeur de Breit-Wigner Γ et la densité $\rho_{int} \sim l_1 l_c / V$ d'états biparticulaires $|\alpha\beta\rangle$ à l'intérieur du domaine de localisation de $|\Psi_\lambda\rangle$,

$$\xi \sim \Gamma \rho_{int} \sim \left(\frac{U}{V}\right)^4 l_1^2. \quad (1.67)$$

ξ est à comparer avec $\xi_{\text{réseau}} \sim l_1 l_c \gg \xi$ qui est lui l'inverse du taux de participation calculé dans la base du réseau réel, à savoir le nombre de sites $|\mathbf{n}_\alpha \mathbf{n}_\beta\rangle$ occupés par la fonction d'onde $|\Psi_\lambda\rangle$. Le fait que $\xi \ll \xi_{\text{réseau}}$ montre la dépendance de l'inverse du

^aOn pourra par exemple avoir $|\eta_{\mathbf{i}} - E_\lambda| \ll \Gamma$ et $|\eta_{\mathbf{i}+1} - E_\lambda| \gg \Gamma$ pour deux états successifs $\mathbf{i}$ et $\mathbf{i} + \mathbf{1}$ le long du serpent indexé par $\mathbf{i}$ (voir FIG. 1.10).

taux de participation vis-à-vis de la base à partir de laquelle on le calcule^a. Cela montre également, que les fonctions d'ondes noninteractives se trouvant à l'intérieur du domaine de localisation $l_1 l_c$ d'une fonction d'onde TIP ne contribuent pas toutes à l'élaboration de celle-ci.

Signalons finalement d'autres travaux numériques [109, 33, 101, 92, 93, 28, 63, 105] confirmant tous l'effet d'augmentation de la longueur de localisation pour deux particules. Cependant tous ces travaux ne donnent pas le même comportement de l_c vis-à-vis de la longueur de localisation l_1 d'une particule sans interaction. Ainsi le comportement $l_c \propto l_1^{1.5}$ est trouvé dans [92, 104, 93, 63], $l_c \propto l_1^{1.65}$ dans [33] et $l_c \propto l_1^2$ [103, 28]. D'autre part il semblerait que l_c dépende linéairement de l'intensité $|U|$ de l'interaction [103] et non pas quadratiquement (1.55). Ceci s'explique par le fait que l'utilisation de la règle d'or de Fermi qui constitue le plus bas ordre de la théorie des perturbations est ici insuffisante, ainsi en resommant des séries infinies de diagrammes de perturbation les auteurs de [54] trouvèrent près du centre de la bande un comportement $l_c \propto |U|$ confirmant ainsi [103].

1.3.6 Mer de Fermi et barrière de mobilité

Jusqu'ici il était question de deux particules dans un milieu aléatoire couplées par une interaction locale. Ce modèle "à deux particules" peut néanmoins nous donner quelques indications intéressantes sur des systèmes plus réels comportant une densité finie de particules [50, 51]. Considérons des états à N -corps décrivant $N_1 + 2$ et N_2 particules dans deux boîtes adjacentes. L'interaction U_{typ} permet alors de faire une transition de ces états vers des états où les deux boîtes adjacentes comporteront respectivement N_1 et $N_2 + 2$ particules. On peut alors considérer les $N = N_1 + N_2$ particules comme constituant une mer de Fermi gelée. Les deux particules restantes sont alors des quasiparticules dotées d'un temps de vie infini. La mer de Fermi modifie alors sensiblement la densité ρ_2 d'états noninteractifs couplés par l'interaction. Pour une excitation ϵ au dessus du niveau de Fermi ϵ_F , on a naturellement

$$\rho_2(\epsilon_F + \epsilon) = \int_{\epsilon_F}^{\epsilon_F + \epsilon} \rho_1(E) \rho_1(\epsilon_F + \epsilon - E) dE. \quad (1.68)$$

La somme dans (1.68) est effectuée sur toutes les énergies accessibles au dessus de la mer de Fermi gelée. La coupure haute de la somme est due au fait que les deux particules ont une énergie totale fixe $\epsilon_F + \epsilon$. Ainsi pour des excitations $\epsilon \ll \Delta_1 = \rho_1^{-1}$ la densité ρ_2 (1.68) devient [50, 51]

$$\rho_2 \sim \epsilon \rho_1^2. \quad (1.69)$$

Il apparaît clairement que la densité ρ_2 d'états couplés par l'interaction est très faible proche du niveau de Fermi ($\epsilon \rightarrow 0$). Ceci implique qu'il n'est pas possible d'avoir d'états étendus $g_2 \gg 1$ près du niveau de Fermi puisque la conductance $g_2 \sim \Gamma \rho_2$ décroît alors avec le carré de l'énergie d'excitation ϵ

$$g_2 \sim \frac{U^2}{V^4} l_1^d \epsilon^2. \quad (1.70)$$

^aMême si dans le cas présent les fonctions d'onde noninteractives sont localisées et donc quasiment assignées à un seul site sur le réseau.

Il est par conséquent nécessaire de s'éloigner du niveau de Fermi afin de trouver une densité d'états ρ_2 à deux particules suffisamment élevée pour créer des états étendus. L'équation (1.70) montre qu'il faut une énergie d'excitation $\epsilon \sim V$ pour retrouver la conductivité g_2 (1.61) nécessaire à la délocalisation. Ceci fut vérifié dans une étude numérique [101, 102] de la fonction de Green à deux particules du système composé de deux quasiparticules au dessus d'une mer de Fermi.

Définissons la barrière de mobilité $\epsilon = E_{m_2}$ telle que $g_2 \sim 1$. De (1.70) on obtient

$$E_{m_2} \sim \frac{V}{U} \Delta_1 l_1^{d/2} \sim \frac{V^2}{U l_1^{d/2}}. \quad (1.71)$$

Ainsi pour des énergies d'excitation $\epsilon > E_{m_2}$, il existera des états biparticulaires délocalisés alors que pour $\epsilon < E_{m_2}$ tous les états biparticulaires seront localisés. La barrière de mobilité pour une particule est donnée par

$$E_{m_1} \sim \frac{V}{l_1^{1/\nu}} \quad (1.72)$$

où $\nu \geq 2/d$. La relation d'ordre entre les barrières de mobilité pour une particule E_{m_1} et pour deux particules E_{m_2} est alors établie

$$E_{m_1} > \frac{V}{l_1^{d/2}} \sim E_{m_2}. \quad (1.73)$$

Ce qui implique l'existence d'une bande énergétique d'excitation $E_{m_2} < \epsilon < E_{m_1}$ où les états biparticulaires sont délocalisés grâce à l'interaction alors que les états monoparticulaires sans interaction peuvent être localisés [50]. Ainsi, l'interaction sur site, attractive ou répulsive, permet d'abaisser la barrière de mobilité du système.

1.3.7 Note sur les travaux présentés

Il est à noter cependant, que la valeur (1.71) de la barrière de mobilité E_{m_2} donnée par IMRY [50] est établie en utilisant le taux de transition $\Gamma \sim U^2/Vl_1^d$ obtenu avec l'hypothèse d'ergodicité des fonctions d'onde monoparticulaires (1.46). JACQUOD et SHEPELYANSKY [54] montrèrent que Γ varie en fait avec l'énergie d'excitation ϵ au-dessus de la mer de Fermi. En considérant cette dépendance de Γ vis-à-vis de ϵ , la barrière de mobilité E_{m_2} est alors pour $U \sim V$ beaucoup plus faible que celle (1.71) estimée par IMRY [50], puisque d'après [54], E_{m_2} est de l'ordre de l'espacement moyen Δ_1 des niveaux monoparticulaires,

$$E_{m_2} \sim \Delta_1. \quad (1.74)$$

Comme $E_{m_2} \sim \Delta_1$, la densité ρ_2 d'états biparticulaires devient rapidement suffisante pour permettre la délocalisation, il semble alors peu probable de localiser les états TIP au-dessus de la mer de Fermi. Ceci est important dans le cadre des travaux présentés dans cet ouvrage (CHAP. 2,3 et 5), puisque à l'inverse, nous allons montrer qu'il est en fait possible de localiser l'état fondamental du modèle TIP attractif en présence d'une mer de Fermi. Et cela même pour une intensité du désordre pour laquelle les particules sans interaction sont délocalisées.

1.4 Théorie de la supraconductivité

Nous allons rappeler (section 1.4.1) les principaux résultats de la théorie de la supraconductivité introduite par BARDEEN, COOPER et SCHRIEFFER (BCS) en 1957. Cette théorie a permis de décrire une large classe de matériaux supraconducteurs à basse température et non-désordonnés. La méthode auto-cohérente de BOGOLUBOV-DE GENNES (section 1.4.2) est une méthode permettant d'étudier les systèmes supraconducteurs désordonnés en utilisant une approximation de champ moyen équivalente à celle utilisée dans la théorie BCS.

1.4.1 Théorie BCS

L'étude du problème de Cooper (section 1.1) montre que deux particules interagissant de manière attractive au-dessus d'une mer de Fermi forment une paire de particules liées. Si à présent un nombre macroscopique de particules s'extrait de la mer de Fermi, les paires ainsi formées vont interférer entre elles puisque le principe de Pauli interdit que deux paires n'occupent simultanément le même double état de Bloch ($\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow$). Ceci introduit alors une interaction résiduelle entre les différentes paires qui ne peuvent plus être traitées indépendamment comme dans le problème de Cooper.

Dans la section 1.1, nous avons vu que l'énergie de liaison est maximale pour les paires dont l'impulsion totale est $\mathbf{K} = \mathbf{0}$. Ainsi, l'Hamiltonien considéré par BARDEEN, COOPER et SCHRIEFFER (BCS) [7] comporte une interaction entre couple d'électrons d'impulsions opposées et de spins opposés. Cet Hamiltonien responsable de l'appariement des électrons est

$$\mathcal{H} = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} c_{\mathbf{k}'\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}'\downarrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow}. \quad (1.75)$$

Ici $\epsilon_{\mathbf{k}} = \hbar k^2/2m$ est l'énergie d'une particule libre de moment $\mathbf{k}$, les opérateurs $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$ ($c_{\mathbf{k}\sigma}$) sont respectivement, en seconde quantification, les opérateurs de création (annihilation) d'une quasiparticule d'impulsion $\mathbf{k}$ et de spin $\sigma = \uparrow$ ou $\downarrow$ et $n_{\mathbf{k}\sigma} = c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}$ est l'opérateur donnant le nombre de quasiparticules d'impulsion $\mathbf{k}$ et de spin σ . On suppose comme aux sections 1.1.1 et 1.1.2 que l'interaction attractive assistée par les phonons est dominante par rapport à l'interaction Coulombienne écrantée, ainsi $V_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} < 0$ dans (1.75).

Supposons que dans l'état fondamental tous les électrons soient appariés par paires de Cooper. Il est alors utile d'introduire les opérateurs

$$b_{\mathbf{k}}^\dagger = c_{\mathbf{k}\uparrow}^\dagger c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger \quad (1.76)$$

$$b_{\mathbf{k}} = c_{-\mathbf{k}\downarrow} c_{\mathbf{k}\uparrow} \quad (1.77)$$

qui sont respectivement les créateurs et annihilateur d'une paire d'électrons dans les états monoparticulaires ($\mathbf{k} \uparrow$) et ($-\mathbf{k} \downarrow$). Il faut cependant noter que ces opérateurs ne décrivent pas de réels bosons puisque leurs relations de commutation

$$[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}^\dagger] = 0 \text{ si } \mathbf{k} \neq \mathbf{k}' \quad (1.78)$$

$$[b_{\mathbf{k}}, b_{\mathbf{k}'}^\dagger] = 1 - (n_{\mathbf{k}\uparrow} + n_{-\mathbf{k}\downarrow}) \text{ si } \mathbf{k} = \mathbf{k}' \quad (1.79)$$

n'obéissent pas à la statistique de Bose-Einstein. Le terme $(n_{\mathbf{k}\uparrow} + n_{-\mathbf{k}\downarrow})$ apparaissant pour $\mathbf{k} = \mathbf{k}'$ est la manifestation du principe d'exclusion de Pauli ($b_{\mathbf{k}}^{\dagger 2} = b_{\mathbf{k}}^2 = 0$).

Dans l'expression de $\mathcal{H}$ (1.75) les termes du type $n_{\mathbf{k}\uparrow} + n_{-\mathbf{k}\downarrow}$ peuvent être remplacés par $2b_{\mathbf{k}}^{\dagger}b_{\mathbf{k}}$, puisque nous avons fait l'hypothèse que dans l'état fondamental l'existence d'un électron dans l'état $(\mathbf{k} \uparrow)$ implique l'existence d'un autre électron dans l'états $(-\mathbf{k} \downarrow)$. Ainsi l'Hamiltonien à considérer devient

$$\mathcal{H}_{BCS} = \sum_{\mathbf{k}} 2\epsilon_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger}b_{\mathbf{k}} + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} b_{\mathbf{k}'}^{\dagger}b_{\mathbf{k}}. \quad (1.80)$$

Dans [7], BARDEEN, COOPER et SCHRIEFFER proposèrent la fonction d'onde

$$|\Psi_{BSC}\rangle = \prod_{\mathbf{k}} \left(u_{\mathbf{k}} + v_{\mathbf{k}} b_{\mathbf{k}}^{\dagger} \right) |0\rangle \quad (1.81)$$

avec la condition de normalisation $|u_{\mathbf{k}}|^2 + |v_{\mathbf{k}}|^2 = 1$ pour décrire l'état fondamental de $\mathcal{H}_{BCS}$. Le paramètre $v_{\mathbf{k}}$ peut être alors interprété comme l'amplitude de probabilité de trouver deux particules condensées dans l'état $(\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow)$. $u_{\mathbf{k}}$ est alors l'amplitude de probabilité complémentaire.

1.4.1.a Gap supraconducteur Δ_0

L'Hamiltonien $\mathcal{H}_{BCS}$ (1.80) ne commute pas avec l'opérateur $\sum_{\mathbf{k},\sigma} n_{\mathbf{k}\sigma}$ donnant le nombre de particules dans le système. N n'étant pas fixé, la quantité à minimiser dans l'ensemble grand canonique est

$$W_0 = \langle \Psi_{BCS} | \mathcal{H}_{BCS} - \mu \sum_{\mathbf{k},\sigma} n_{\mathbf{k}\sigma} | \Psi_{BCS} \rangle \quad (1.82)$$

$$= \sum_{\mathbf{k}} 2(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu) |v_{\mathbf{k}}|^2 + \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^* u_{\mathbf{k}'}^* v_{\mathbf{k}'} \quad (1.83)$$

où le multiplicateur de Lagrange μ est le potentiel chimique. La minimisation de W_0 nous donne

$$|u_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{E_{\mathbf{k}}} \right), \quad (1.84)$$

$$|v_{\mathbf{k}}|^2 = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{E_{\mathbf{k}}} \right) \quad (1.85)$$

et

$$u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} = \frac{\Delta_{\mathbf{k}}}{2E_{\mathbf{k}}} \quad (1.86)$$

où $E_{\mathbf{k}} = [(\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu)^2 + |\Delta_{\mathbf{k}}|^2]^{\frac{1}{2}}$ est l'énergie nécessaire pour créer une quasiparticule d'impulsion $\mathbf{k}$ dans l'état supraconducteur. L'excitation $|\Delta_{\mathbf{k}}|$ est alors appelée le *gap supraconducteur*, il est donné par la relation

$$\begin{aligned} |\Delta_{\mathbf{k}}| &= - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \langle \Psi_{BCS} | b_{\mathbf{k}} | \Psi_{BCS} \rangle = - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} u_{\mathbf{k}}^* v_{\mathbf{k}} \\ &= - \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \frac{|\Delta_{\mathbf{k}'}|}{2E_{\mathbf{k}'}}. \end{aligned} \quad (1.87)$$

Ainsi pour un type d'interaction $V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ donné et pour une valeur de départ $|\widetilde{\Delta}_{\mathbf{k}}|$ du gap, l'équation intégrale (1.87) permet de déterminer $|\Delta_{\mathbf{k}}|$ de manière auto-cohérente.

Cherchons à présent une solution à (1.87) en prenant comme interaction

$$V_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \equiv \begin{cases} U < 0 & \text{si } |\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu| < \hbar\omega_D \text{ et } |\epsilon_{\mathbf{k}'} - \mu| < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}, \quad (1.88)$$

ce qui implique

$$|\Delta_{\mathbf{k}}| = \begin{cases} \Delta_0 & \text{si } |\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu| < \hbar\omega_D \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}. \quad (1.89)$$

Avec l'interaction (1.88), le gap est uniforme dans la fenêtre énergétique de largeur $2\hbar\omega_D$ centrée autour de la surface de Fermi. L'équation intégrale (1.87) devient alors

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{|U|}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{E_{\mathbf{k}'}} \\ &\approx \frac{|U|N_F}{2} \int_{\mu-\hbar\omega_D}^{\mu+\hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{\sqrt{(\epsilon - \mu)^2 + \Delta_0^2}} \\ &= |U|N_F \sinh^{-1} \left(\frac{\omega_D}{\Delta_0} \right) \end{aligned} \quad (1.90)$$

et ainsi dans la limite d'une interaction faible $|U|N_F \ll 1$ on obtient^a

$$\Delta_0 \approx 2\hbar\omega_D \exp \left(-\frac{1}{|U|N_F} \right). \quad (1.91)$$

1.4.1.b Température critique T_c

A température finie, l'équation intégrale (1.90) donnant le gap supraconducteur $\Delta(T)$ devient

$$1 = |U| \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{2E_{\mathbf{k}'}} (1 - 2f(E_{\mathbf{k}'})) \quad (1.92)$$

où $f(E_{\mathbf{k}}) = 1/(\exp(\beta E_{\mathbf{k}}) + 1)$ est la distribution de Fermi-Dirac. Le facteur 2 devant $f(E_{\mathbf{k}})$ dans (1.92) s'explique par le fait qu'il est possible de diagonaliser l'Hamiltonien $\mathcal{H}_{BCS}$ (1.80) à l'aide de deux jeux d'opérateurs fermioniques $\gamma_{0\mathbf{k}}^\dagger(\gamma_{0\mathbf{k}})$ et $\gamma_{1\mathbf{k}}^\dagger(\gamma_{1\mathbf{k}})$ créant-annihilant chacun deux types de quasiparticules fermioniques indépendantes et chacune d'énergie $E_{\mathbf{k}}$ ^b. Ainsi l'état fondamental de $\mathcal{H}_{BCS}$ peut être décrit par une superposition d'excitations de ces deux quasiparticules indépendantes.

La supraconductivité disparaît lorsque le gap $\Delta(T)$ s'évanouit. La température critique T_c est alors définie par

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{|U|}{2} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{1}{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu} \tanh \left(\frac{\epsilon_{\mathbf{k}} - \mu}{2k_B T_c} \right) \\ &\approx |U|N_F \int_0^{\mu+\hbar\omega_D} \frac{d\epsilon}{\epsilon - \mu} \tanh \left(\frac{\epsilon - \mu}{2k_B T_c} \right). \end{aligned} \quad (1.93)$$

^aL'expression de l'énergie de liaison Δ d'une paire de Cooper possède qualitativement la même forme que le gap supraconducteur Δ_0 . La différence réside dans l'argument de l'exponentielle qui pour Δ est le double de celui de Δ_0 .

^bCette diagonalisation de $\mathcal{H}_{BCS}$ s'opère grâce à la transformation $(c_{\mathbf{k}\uparrow}, c_{-\mathbf{k}\downarrow}^\dagger) \rightarrow (\gamma_{0\mathbf{k}}, \gamma_{1\mathbf{k}}^\dagger)$ de BOGOLUBOV-VALATIN [11, 12, 98] (voir section 1.4.2.b).

En supposant $k_B T_c \ll \hbar \omega_D$ et dans la limite des couplages faibles $N_F |U| \ll 1$, on trouve

$$k_B T_c \approx 1.14 \hbar \omega_D \exp \left(-\frac{1}{N_F |U|} \right). \quad (1.94)$$

On remarque ainsi que la température critique T_c du supraconducteur est proportionnel au gap énergétique Δ_0 ,

$$T_c \propto \Delta_0. \quad (1.95)$$

L'étude de (1.93) montre que le gap se comporte comme

$$\Delta(T) \sim \left(1 - \frac{T}{T_c} \right)^{1/2} \quad (1.96)$$

pour des températures T proches de T_c . Le gap s'annule donc à $T = T_c$ avec une pente infinie (FIG. 1.12), ceci est dans le cas présent le signe d'une transition de phase du second ordre. Cette transition fait passer l'état fondamental du système d'un état supraconducteur $T < T_c$ à un état métallique normal $T > T_c$. Le gap supraconducteur $\Delta(T)$ est par conséquent le *paramètre d'ordre* de cette transition.

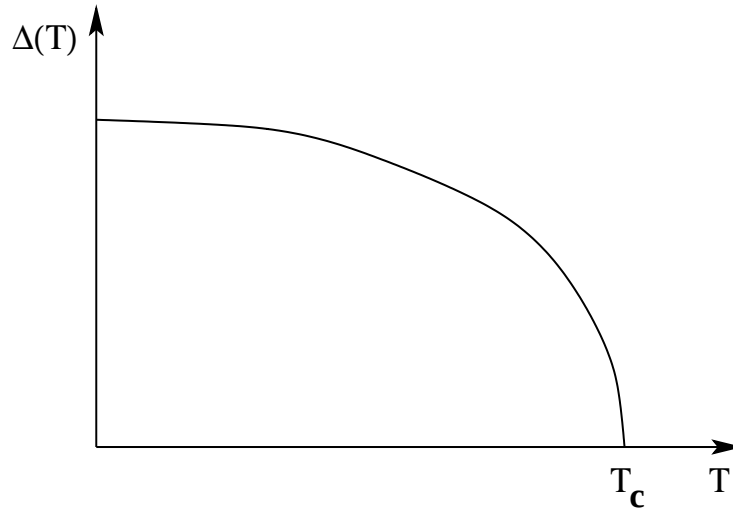


FIG. 1.12 – Représentation du gap supraconducteur $\Delta(T)$ en fonction de la température T .

1.4.1.c Énergie d'excitation d'une quasiparticule

Montrons brièvement que $E_{\mathbf{k}}$ est bien l'énergie d'excitation d'une quasiparticule et que Δ_0 est l'énergie de liaison d'une paire de Cooper appartenant à l'état fondamental BCS.

Ainsi, supposons que l'on veuille extraire de l'état fondamental $|\Psi_{BCS}\rangle$ une quasiparticule ($\mathbf{p} \uparrow$) initialement appartenant à une paire ($\mathbf{p} \uparrow, -\mathbf{p} \downarrow$). La quasiparticule ($-\mathbf{p} \downarrow$) sera alors dans l'impossibilité de se réappairer puisque toutes les autres quasiparticules sont condensées en paires de Cooper. La différence entre, l'énergie $\widetilde{W}_{-\mathbf{p}}$ de l'état où les

quasiparticules $(\mathbf{p} \uparrow)$ et $(-\mathbf{p} \downarrow)$ sont désappariées, et l'énergie W_0 de l'état fondamental (1.83), sera donc l'énergie d'excitation nécessaire à l'extraction de la quasiparticule $(\mathbf{p} \uparrow)$ de l'état fondamental. Ainsi en utilisant (1.84), (1.85) et (1.87),

$$\begin{aligned} \widetilde{W}_{-\mathbf{p}} - W_0 &= (\epsilon_{-\mathbf{p}} - \mu) + -2(\epsilon_{\mathbf{p}} - \mu)|v_{\mathbf{p}}|^2 - 2u_{\mathbf{p}}^* v_{\mathbf{p}} \sum_{\mathbf{k}'} V_{\mathbf{k}', \mathbf{p}} u_{\mathbf{k}'} v_{\mathbf{k}'}^* \\ &= E_{-\mathbf{p}} = E_{\mathbf{p}}. \end{aligned} \quad (1.97)$$

L'énergie $\widetilde{W}_{-\mathbf{p}} - W_0 = E_{-\mathbf{p}}$ est typiquement l'énergie nécessaire pour casser la paire $(\mathbf{p} \uparrow, -\mathbf{p} \downarrow)$. L'énergie minimale pour casser une paire est donc $\min_{\mathbf{k}} \{E_{\mathbf{k}}\} = \Delta(T)$. Ainsi pour $T = 0K$, l'énergie de liaison d'une paire de Cooper sur la surface de Fermi est Δ_0 .

Le système est composé d'un nombre macroscopique $2N \gg 1$ de quasiparticules. Ainsi on a $2(N - 1) + 1 \approx 2N + 1$, et l'énergie $\widetilde{W}_{-\mathbf{p}}$ de l'état fondamental à $2N$ particules auquel on a enlevé 1 paire de Cooper est sensiblement égale à l'énergie de l'état fondamental à $2N$ particules auquel on aurait ajouté 1 particule. Les deux états fondamentaux décrivent tous les deux un système avec une quasiparticule seule et une collection macroscopique de N paires de quasiparticules. Ainsi, en vertu de (1.97), $E_{\mathbf{k}}$ est bien l'énergie d'excitation d'une quasiparticule d'impulsion $\mathbf{k}$.

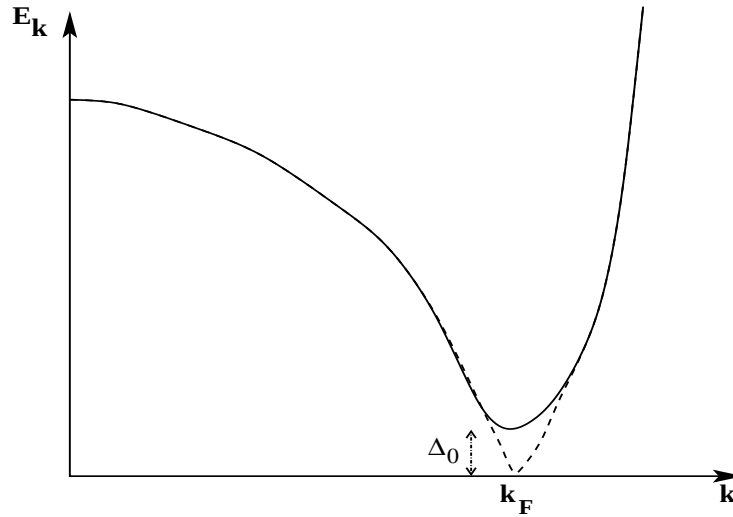


FIG. 1.13 – Énergie excitation $E_{\mathbf{k}}$ d'une quasiparticule en fonction de son impulsion $\mathbf{k}$ à $T = 0K$. Le tracé en pointillés correspond à l'énergie d'excitation d'une quasiparticule dans l'état normal. On voit que près du niveau de Fermi, l'énergie d'excitation dans l'état supraconducteur diffère de celle de l'état normal. Le gap entre ces deux énergies est donné par Δ_0 .

1.4.2 Traitement “champ moyen” et désordre : Méthode de Bogolubov-de Gennes

L'idée de la méthode de BOGOLUBOV-DE GENNES [17] est d'introduire, dans la théorie BCS, un potentiel aléatoire local $\Xi(\mathbf{r})$. Ce potentiel aléatoire va briser l'inva-

riance par translation de l'énergie potentielle vue par les électrons, il est alors préférable d'utiliser les opérateurs de l'espace réel $\Psi_\sigma(\mathbf{r})$ et $\Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$ définis par

$$\Psi_\sigma(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\sigma} \quad \text{et} \quad \Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{k}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger. \quad (1.98)$$

Les opérateurs $\Psi_\sigma(\mathbf{r})$ et $\Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$ obéissant aux règles d'anticommutation suivantes

$$\{\Psi_\sigma(\mathbf{r}), \Psi_{\sigma'}(\mathbf{r}')\} = \{\Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}), \Psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')\} = 0 \quad (1.99)$$

$$\{\Psi_\sigma(\mathbf{r}), \Psi_{\sigma'}^\dagger(\mathbf{r}')\} = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (1.100)$$

sont les opérateurs de création et d'annihilation de quasiparticules fermioniques de spin σ en un point $\mathbf{r}$ de l'espace. L'Hamiltonien BCS (1.75) peut alors être écrit à l'aide des opérateurs $\Psi_\sigma(\mathbf{r})$ et $\Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r})$,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{int} \\ &= \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \left[\frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + \Xi(\mathbf{r}) \right] \Psi_\sigma(\mathbf{r}) \\ &\quad - |U| \int d\mathbf{r} \Psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_\downarrow(\mathbf{r}) \Psi_\uparrow(\mathbf{r}) \end{aligned} \quad (1.101)$$

où $\Xi(\mathbf{r})$ est le potentiel aléatoire et où on a pris l'interaction de type onde s déjà utilisé dans la section précédente (1.88). Le nombre de particules n'étant toujours pas conservé, la quantité à minimiser est encore l'énergie donnée par l'Hamiltonien modifié

$$\mathcal{H} - \mu\mathcal{N} = \mathcal{H}_e - |U| \int d\mathbf{r} \Psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_\downarrow(\mathbf{r}) \Psi_\uparrow(\mathbf{r}) \quad (1.102)$$

où $\mathcal{N} = \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_\sigma(\mathbf{r})$ est l'opérateur associé au nombre de particules présentes dans le système.

1.4.2.a Approximation de “champ moyen”

L'approximation de champ moyen consiste à remplacer le terme d'interaction quartique “ Ψ^4 ” dans $\mathcal{H}_{int}$ par plusieurs termes quadratiques “ Ψ^2 ”. Ainsi, le terme d'interaction devient un opérateur pour une seule particule voyant un champ moyen associé aux différents opérateurs quadratiques “ Ψ^2 ”. Sous cette approximation l'équation (1.102) devient l'Hamiltonien effectif suivant

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{eff} &= \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} \Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \mathcal{H}_e \Psi_\sigma(\mathbf{r}) \\ &\quad + \sum_{\sigma} \int d\mathbf{r} W(\mathbf{r}) \Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_\sigma(\mathbf{r}) \\ &\quad + \int d\mathbf{r} \left[\Delta(\mathbf{r}) \Psi_\uparrow^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_\downarrow^\dagger(\mathbf{r}) + \Delta(\mathbf{r})^* \Psi_\downarrow(\mathbf{r}) \Psi_\uparrow(\mathbf{r}) \right]. \end{aligned} \quad (1.103)$$

L'Hamiltonien $\mathcal{H}_{eff}$ décrit un système de particules n'interagissant pas directement entre elles, mais via des champs moyens locaux $W(\mathbf{r})$, $\Delta(\mathbf{r})$ et $\Delta^*(\mathbf{r})$. Le terme $\Psi_\sigma^\dagger(\mathbf{r}) \Psi_\sigma(\mathbf{r})$

annihile et crée au point $\mathbf{r}$ une pseudo-particule de spin σ , par conséquent l'intensité de ce processus $W(\mathbf{r})$ est tout naturellement liée à l'amplitude de probabilité de trouver une quasiparticule de spin opposé $\bar{\sigma}$ au point $\mathbf{r}$. Ainsi, on doit avoir

$$W(\mathbf{r}) = -|U| \langle \Psi_{\bar{\sigma}}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\sigma}(\mathbf{r}) \rangle = -|U| \langle \Psi_{\sigma}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\bar{\sigma}}(\mathbf{r}) \rangle \quad (1.104)$$

où $\langle \quad \rangle = \langle \Psi_{BCS} | \quad | \Psi_{BCS} \rangle$. De la même façon, les termes $\Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r})$ [resp. $\Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r})$] créent [resp. détruisent] deux quasiparticules $\uparrow$ et $\downarrow$ au point $\mathbf{r}$. Les intensités des processus associés sont donc reliées aux amplitudes de probabilité d'annihiler [resp. de créer] deux quasiparticules de spins opposés au point $\mathbf{r}$. Ainsi, on a

$$\Delta(\mathbf{r}) = -|U| \langle \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle \quad \text{et} \quad \Delta^*(\mathbf{r}) = -|U| \langle \Psi_{\uparrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \Psi_{\downarrow}^{\dagger}(\mathbf{r}) \rangle. \quad (1.105)$$

La valeur du paramètre d'ordre n'est à présent plus constante comme dans le cas sans désordre (1.89), $\Delta(\mathbf{r})$ fluctue à présent d'un point à un autre sur le réseau, traduisant le fait que le désordre modifie localement l'amplitude de probabilité de condensation des paires.

1.4.2.b Diagonalisation de $\mathcal{H}_{eff}$ et auto-cohérence

Il est possible de diagonaliser $\mathcal{H}_{eff}$ grâce au jeu d'opérateurs $\gamma_{n\uparrow}$ et $\gamma_{n\downarrow}$ de BOGOLUBOV-VALATIN [11, 12, 98], qui sont des combinaisons linéaires des opérateurs fermioniques $\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r})$ et $\Psi_{\downarrow}(\mathbf{r})$,

$$\begin{aligned} \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) &= \sum_n (u_n(\mathbf{r}) \gamma_{n\uparrow} - v_n^*(\mathbf{r}) \gamma_{n\downarrow}^{\dagger}), \\ \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) &= \sum_n (u_n(\mathbf{r}) \gamma_{n\downarrow} + v_n^*(\mathbf{r}) \gamma_{n\uparrow}^{\dagger}). \end{aligned} \quad (1.106)$$

Les nouveaux opérateurs obéissent aux relations d'anticommutation fermionique

$$\{\gamma_{n\sigma}, \gamma_{n'\sigma'}\} = \{\gamma_{n\sigma}^{\dagger}, \gamma_{n'\sigma'}^{\dagger}\} = 0 \quad (1.107)$$

$$\{\gamma_{n\sigma}, \gamma_{n'\sigma'}^{\dagger}\} = \delta_{nn'} \delta_{\sigma\sigma'}. \quad (1.108)$$

La diagonalisation de $\mathcal{H}_{eff}$ se fait en fixant correctement les coefficients u_n et v_n dans la transformation (1.106) pour que l'on puisse écrire l'Hamiltonien sous la forme suivante

$$\mathcal{H}_{eff} = E_g + \sum_{n\sigma} \epsilon_n \gamma_{n\sigma}^{\dagger} \gamma_{n\sigma} \quad (1.109)$$

où E_g est l'énergie fondamentale de $\mathcal{H}_{eff}$ et ϵ_n l'énergie d'excitation de la quasiparticule fermionique créée par l'opérateur $\gamma_{n\sigma}^{\dagger}$. Il vient alors les équations dites de BOGOLUBOV [17]

$$\begin{pmatrix} \mathcal{H}_e + W(\mathbf{r}) & \Delta(\mathbf{r}) \\ \Delta^*(\mathbf{r}) & -\mathcal{H}_e - W(\mathbf{r}) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix} = \epsilon_n \begin{pmatrix} u_n \\ v_n \end{pmatrix}. \quad (1.110)$$

Ce système est à résoudre de manière auto-cohérente en fixant au début de l'étude des fonctions d'essais $\Delta'(\mathbf{r})$ et $W'(\mathbf{r})$ et en utilisant à chaque nouvelle itération les valeurs précédemment trouvées.

1.5 Transition Supraconducteur-Isolant

1.5.1 Nature du désordre

Un des exemples les plus intéressants de compétition entre interaction et désordre est le cas de la supraconductivité en milieu désordonné. La nature du désordre est alors essentiellement de deux types [47] :

Morphologique, c'est le cas par exemple des films bidimensionnels supraconducteurs. Ils peuvent être obtenus de différentes façons parmi lesquelles on peut citer :

- les méthodes par déposition de métal sur des substrats froids recouverts d'une pré-couche amorphe de Germanium (Ge) ou d'Antimoine (Sb) ; le désordre est alors établi à l'échelle atomique. Le type de film ainsi obtenu est homogène et ne contient pas *a priori* d'agrégats métalliques. La transition supraconducteur-isolant (SI) est modulée par l'épaisseur du film [49, 66]. La phase isolante apparaît lorsque l'on diminue suffisamment l'épaisseur du film.
- les méthodes par évaporation directe de métal à basse température sur un substrat sans pré-couche, le type de films obtenu est alors constitué d'une assemblée d'agrégats supraconducteurs. Le désordre est alors établi à l'échelle mésoscopique. Les températures de transition supraconductrices sont dans ce cas présent indépendante de l'épaisseur du film. C'est le couplage entre les différents agrégats qui module la transition SI. Ce type de système bidimensionnel peut alors être modélisé par une assemblée de jonctions Josephson couplées [47].

Chimique, c'est le cas par exemple des cristaux supraconducteurs à haute température. Le désordre est alors induit par le dopage en impuretés comme par exemple pour le cuprate $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ où l'on peut remplacer stochométriquement des atomes de Cuivre (Cu) par des atomes de Zinc (Zn) donnant ainsi le composé dopé $\text{YBa}_2(\text{Cu}_{1-x}\text{Zn}_x)_3\text{O}_{7-\delta}$. Ces composés supraconducteurs sont des supraconducteurs dont la température critique T_c est bien plus élevée que celle des supraconducteurs traditionnels. Leur étude est relativement complexe puisque aux problèmes dus au désordre vient s'ajouter le fait que jusqu'à présent la nature exacte de l'interaction^a menant à ce type de supraconductivité n'est pas encore très bien connue et d'ailleurs fait l'objet d'une recherche intense.

La plupart des matériaux étudiés sont bidimensionnels ou quasibidimensionnels car même pour le cas des cristaux comme le cuprate $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ la supraconduction s'opère dans des plans supraconducteurs de CuO_2 , le couplage entre les plans de CuO_2 étant alors contrôlé par la déplétion δ en oxygène (O).

1.5.2 Fluctuations du paramètre d'ordre

Les électrons dans les systèmes supraconducteurs se comportent collectivement comme une seule entité macroscopique caractérisée par ce qu'on appelle un paramètre d'ordre supraconducteur

$$\Phi = |\Phi| e^{i\phi}. \quad (1.111)$$

Dans la théorie BCS, le paramètre d'ordre est supposé homogène est constant à travers tout le système étudié. Sa suppression équivaut à la destruction de l'état de supracon-

^aLa symétrie de l'interaction n'est pas de type "s" comme dans la théorie BCS mais serait plutôt de type "d".

ductivité dans le système. Si le paramètre d'ordre Φ n'est pas nul et s'il possède une très longue cohérence de phase dans l'espace, l'état supraconducteur survit.

Toutefois en introduisant du désordre dans le système, des fluctuations spatiales vont altérer localement le paramètre d'ordre qui ne sera alors plus homogène à travers le système. Ces altérations peuvent intervenir à la fois sur l'amplitude $|\Phi|$ et sur la phase ϕ du paramètre d'ordre. Ces deux types de fluctuations possibles, qui sont sûrement combinés dans la réalité, impliquent séparément des effets différents.

La fluctuation de l'amplitude $|\Phi|$ peut conduire à la suppression du paramètre d'ordre. L'amplitude du paramètre d'ordre étant relié à l'énergie de liaison des paires de Cooper. La suppression de celui-ci entraîne par conséquent la destruction des paires de Cooper. Une résistance non nulle apparaît alors.

Par contre la fluctuation de la phase ϕ conduit à la destruction de la cohérence de phase entre les paires de Cooper à travers le système. Comme les fluctuations de la phase n'impliquent pas la disparition de l'amplitude du paramètre d'ordre, la phase isolante est donc constituée de paires de Cooper localisées. Il y a alors apparition d'une résistance bien que le paramètre d'ordre ne soit pas nul.

Deux types de modèles sont alors en concurrence : ceux pour lesquels la destruction de la supraconductivité est due aux fluctuations de la phase, et ceux pour lesquels ce sont les fluctuations de l'amplitude du paramètre d'ordre qui jouent un rôle essentiel.

1.5.2.a Fluctuations de la phase : Modèle de bosons en milieux désordonnés

Originellement, le modèle de bosons en milieux désordonnés fut introduit pour décrire la superfluidité de l'Hélium dans les milieux poreux. Dans le cas de la transition SI dans les systèmes bidimensionnels, FISHER *et al* [25] formulèrent l'hypothèse que l'ensemble des électrons du système est correctement décrit à $T = 0K$ par un ensemble de bosons de charge $2e$ évoluant dans un potentiel aléatoire. En effet, dans la phase supraconductrice, les électrons sont appariés sous forme de paires de Cooper (section 1.1) et peuvent donc être raisonnablement assimilés à des bosons composites de charge double de celle d'un électron. Par contre dans la phase localisée l'hypothèse d'assimilation des électrons en bosons composites est moins évidente : on suppose que pour les films supraconducteurs il existe deux températures critiques. La première T_c est celle pour laquelle le système entier opère une transition de phase d'un état macroscopique supraconducteur vers un état isolant due à la perte de la cohérence de phase du paramètre d'ordre à travers le système. La seconde est la température $T_{c0} > T_c$ qui est la température en dessous de laquelle les paires de Cooper se forment. Bien que le système soit isolant pour $T_c < T < T_{c0}$ (FIG. 1.14), localement le paramètre d'ordre n'est pas nul, ce qui fait que les paires de Cooper ainsi que le gap supraconducteur persistent dans la phase localisée. Les paires de Cooper sont alors localisées sur une distance de l'ordre de la longueur de cohérence du paramètre d'ordre. L'hypothèse principale réside dans le fait que lorsque la température critique T_c est amenée à zéro, T_{c0} reste non nulle (FIG. 1.14) ce qui implique que la phase isolante est constituée de paires de Cooper préformées. Ce scénario permet alors de considérer dans les deux phases, supraconductrice et isolante, les électrons comme appariés en entités bosoniques composites de charge $2e$.

De plus des travaux antérieurs [45, 46] à celui de FISHER *et al* [25] ont montré, qu'à une dimension, la transition SI d'un modèle d'électrons avec interaction attractive de

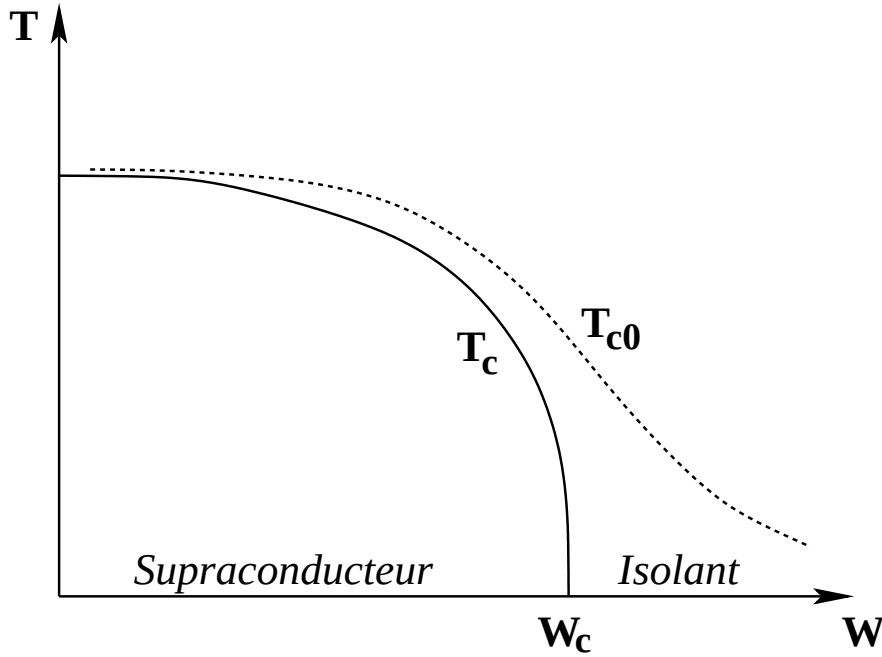


FIG. 1.14 – Schéma du diagramme de phase proposé dans [107] montrant la température T en fonction du désordre W pour la transition SI dans les films bidimensionnels supraconducteurs désordonnés. La ligne pleine représente la température critique de transition T_c et la ligne en pointillés représente la température T_{c0} en-dessous de laquelle les paires de Cooper se créent. W_c est le désordre critique de la transition à température nulle. Figure adaptée de [107].

type BCS appartient à la même classe d'universalité que la transition superfluide-isolant d'un modèle de bosons interagissant de manière répulsive. La théorie de FISHER *et al* [25] repose alors sur l'extension de ce modèle bosonique à deux dimensions. L'action Euclidienne du modèle [25]

$$\begin{aligned} \mathcal{S} = & \int d^d x d\tau \left[\psi^* \partial_\tau \psi + \frac{\hbar^2}{2m} |\nabla \psi|^2 + \mathcal{U}(x) |\psi|^2 \right] \\ & + \int d^d x d^d x' d\tau \mathcal{V}(x - x') \left[|\psi(x, \tau)|^2 - n_0 \right] \left[|\psi(x', \tau)|^2 - n_0 \right] \end{aligned} \quad (1.112)$$

décrit un système de bosons, caractérisé par la fonction d'onde ψ . ψ s'avère être ici l'analogue du paramètre d'ordre supraconducteur pour la transition superfluide-isolant. D'une part, ces bosons sont soumis à un potentiel aléatoire local $\mathcal{U}(x)$ et d'autre part ils sont soumis entre eux à une répulsion Coulombienne $\mathcal{V}(x) = (2e)^2/|x|$. Pour un potentiel aléatoire $\mathcal{U}(x)$ donné, la transition de phase entre un verre de Bose et une phase supraconductrice se produit lorsque la densité bosonique n_0 devient égale à une densité critique n_c . En effet, dans le cas d'un film supraconducteur avec désordre homogène l'augmentation de son épaisseur induit une augmentation de la concentration de porteurs de charge, et induit par conséquent, dans le cas d'une attraction entre électrons, une augmentation de la densité de paires de Cooper dans le système. Ainsi, en atteignant

une épaisseur critique et par la même occasion une densité critique de paires de Cooper, il se produit pour le film bidimensionnel une transition d'un état isolant vers un état supraconducteur [49, 66].

L'étude de FISHER *et al* [25] du modèle (1.112) ne suppose que des variations spatiales de la phase $\phi(x)$ du paramètre d'ordre $\psi(x) = |\psi|e^{i\phi(x)}$, l'amplitude $|\psi|$ restant constante à travers tout le système. Dans cette approximation, l'étude de la transition de phase à $T = 0K$ faite au travers d'une analyse des exposants critiques du système, révèle, au point de transition critique $n_0 = n_c$, l'existence d'une phase métallique caractérisée par une résistance universelle dont la valeur est proche de celle du quantum de résistance pour deux électrons $R_Q = h/(2e)^2$. Une étude numérique [107] basée sur l'étude Monte-Carlo du modèle de bosons en milieu désordonné ne considérant que les fluctuations de la phase du paramètre d'ordre confirme les résultats analytiques de FISHER [25, 24]. Plusieurs travaux expérimentaux montrent effectivement l'existence d'une phase métallique au point de transition, cependant la résistance correspondante ne semble pas être universelle selon les matériaux étudiés [49, 65, 66, 108] contrairement à ce qu'il est suggérer dans les travaux [25, 24, 107].

1.5.2.b Fluctuations de l'amplitude

D'autres approches basées sur la méthode de *champ moyen* de Bogolubov-de Gennes privilégient les fluctuations spatiales de l'amplitude du paramètre d'ordre supraconducteur [43, 42, 44, 34]. En effet à la section 1.4.2 nous avons vu que la méthode auto-cohérente de Bogolubov-de Gennes permet de considérer les variations spatiales de l'opérateur $\hat{\Delta}(\mathbf{r}) = -|U|\Psi_{\downarrow}(\mathbf{r})\Psi_{\uparrow}(\mathbf{r})$ donnant l'amplitude de condensation des paires. Le paramètre d'ordre $\Delta_{\text{op}}^2(\mathbf{l})$, quant à lui, est directement lié à cet opérateur $\hat{\Delta}(\mathbf{r})$ puisque

$$\Delta_{\text{op}}^2(\mathbf{l}) \propto \left\langle \sum_{\mathbf{r}} \hat{\Delta}(\mathbf{r}) \hat{\Delta}^{\dagger}(\mathbf{r} + \mathbf{l}) \right\rangle \quad (1.113)$$

pour les grandes distances $l = \|\mathbf{l}\|$.

GHOSAL, RANDERIA et TRIVEDI [43, 42] résolurent numériquement les équations de BdG de manière auto-cohérente pour le cas de systèmes désordonnés supraconducteurs de type s. Ils trouvèrent [43, 42] pour les forts désordres que la distribution de l'amplitude locale d'appariement (ou amplitude de condensation des paires) $\Delta(\mathbf{r}) = -|U| \langle \Psi_{\downarrow}(\mathbf{r}) \Psi_{\uparrow}(\mathbf{r}) \rangle$ est très étendue avec cependant un fort poids pour $\Delta(\mathbf{r}) \rightarrow 0$. De plus, pour la même intensité du désordre le gap énergétique dans le spectre d'excitation des quasiparticules demeure non nul. Cette persistance du gap pour les désordres élevés est due au fait que le système présente localement des îlots supraconducteurs, où $\Delta(\mathbf{r}) \neq 0$, entourés d'une mer isolante, où localement l'amplitude d'appariement s'annule $\Delta(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ (voir FIG. 1.15). La FIG. 1.15 montre également qu'on ne peut plus associer le paramètre d'ordre (et *a fortiori* l'amplitude d'appariement) avec le gap énergétique lorsque le désordre devient trop fort. Cette association n'est clairement valable que pour les systèmes faiblement désordonnés ou sans désordre.

Dans l'étude [43], une fois les fonctions d'ondes BdG obtenues, l'incorporation homogène de fluctuations spatiales dans la phase du paramètre d'ordre montre que la superfluidité du système diminue fortement lorsque le désordre augmente, puis disparaît

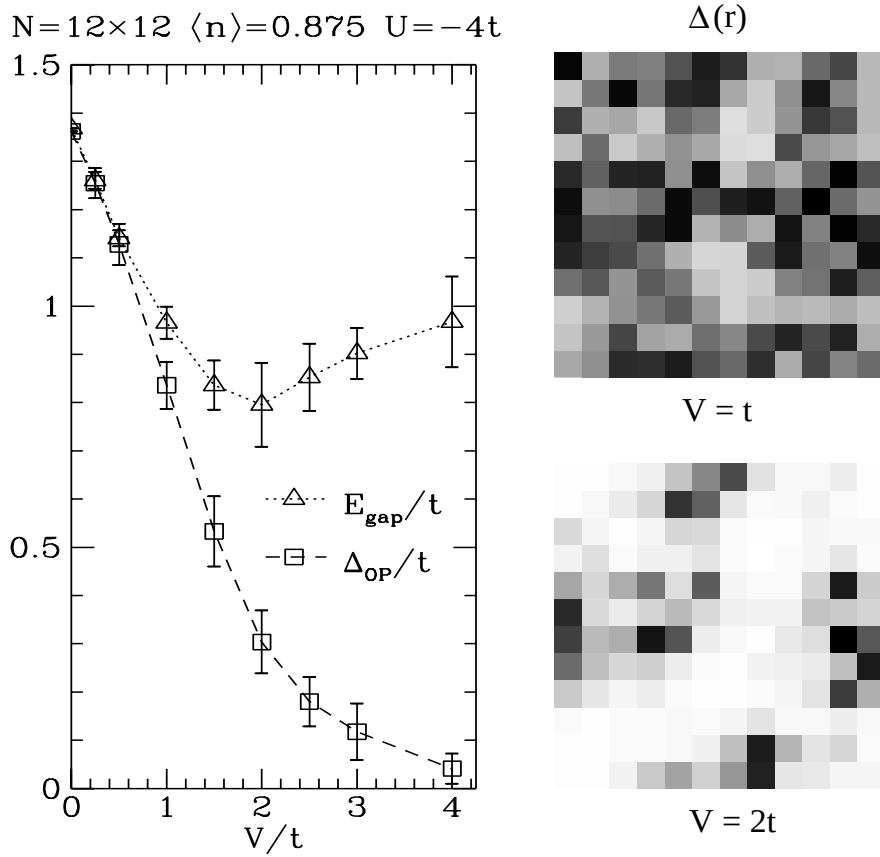


FIG. 1.15 – A gauche : Gap E_{gap} du spectre d'excitation des quasiparticules et paramètre d'ordre Δ_{op} en fonction du désordre V . A droite : Représentation spatiale de l'amplitude d'appariement $\Delta(\mathbf{r})$ pour la même configuration du désordre mais pour différentes intensité V du désordre. Les parties sombres correspondent aux valeurs les plus grandes de $\Delta(\mathbf{r})$, les plus claires correspondent à $\Delta(\mathbf{r}) \rightarrow 0$. Figures tirées de [43].

de manière abrupte pour une intensité du désordre critique donnée, suggérant ainsi la nécessité de conjuguer les deux types de fluctuations, sur l'amplitude et la phase, pour décrire convenablement la transition SI dans les milieux désordonnés.

Signalons finalement l'étude Monte-Carlo quantique [83] où les particules interagissent via une interaction attractive de Hubbard sans faire aucune hypothèse initiale sur l'appariement des particules. De cette façon, pour un système bidimensionnel, les auteurs de [83] montrèrent qu'avec l'augmentation de l'intensité du désordre le système entreprend une transition d'une phase supraconductrice vers une phase isolante ; cette transition s'opérant pour une certaine intensité du désordre.

1.5.2.c Travaux présentés

Pour les travaux présentés dans les chapitres suivants (CHAP. 2, 3 et 5) nous n'utiliserons ni l'assimilation des électrons en entités bosoniques utilisée dans la théorie de

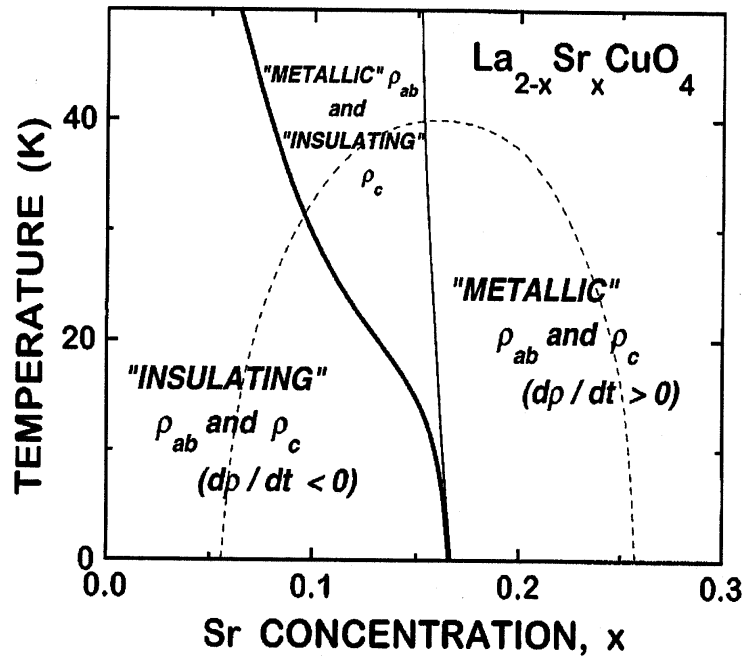


FIG. 1.16 – Diagramme de phase montrant, en l'absence de supraconductivité, le comportement des résistivités ρ_{ab} et ρ_c de l'état normal du composé $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ en fonction de la température et du dopage en Sr. La ligne en pointillés représente la température critique $T_c(x)$ du supraconducteur en l'absence de champ magnétique. Figure tirée de [10].

FISHER [25], ni l'approximation de champ moyen employé dans la théorie BCS et dans la méthode de BdG [43, 42]. D'une part nous prendrons le parti de garder la nature fermionique des particules pour étudier les effets conjugués du désordre et de l'interaction attractive sur la localisation/délocalisation des particules. Et d'autre part nous montrerons que l'approximation de champ moyen n'est pas capable de capturer les effets physiques essentiels dus au désordre. Pour ce faire nous étudierons au CHAP. 2 et 3 deux particules au-dessus d'une mer de Fermi couplées entre elles par une interaction attractive et locale. Cette étude constitue une généralisation du problème de Cooper [16] puisque nous introduirons d'une part le désordre dans le système et d'autre part nous permettrons à l'interaction de coupler également les états qui ne sont pas symétriques par renversement du temps (états biparticulaires non-diagonaux), contrairement à l'approche de champ moyen employée dans BCS et BdG. Au CHAP. 5 nous généraliserons le problème de Cooper avec désordre à l'étude d'un système plus réel composé de plusieurs particules ($N > 2$).

1.5.3 Lien entre la transition Supraconducteur-Isolant et la transition Métal-Isolant d'Anderson

L'état de supraconduction d'un système peut être détruit à partir de l'application d'un champ magnétique suffisamment élevé $\mathbf{B}_c$ amenant le système dans un état

dit normal. Des travaux expérimentaux [10] sous un intense champ magnétique pulsé ($\|\mathbf{B}\| = 61T$)^a ont permis de supprimer la supraconductivité dans les cuprates du type $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ (LSCO) et d'étudier par conséquent l'état normal de ceux-ci. Cette étude de l'état normal des composés LSCO s'est faite en fonction du dopage x en Strontium (Sr). Le dopage joue ici le rôle du désordre. Les résultats principaux de [10] sont résumés sur la FIG. 1.16 : En l'absence de supraconductivité, l'état normal entreprend une transition d'un état isolant pour les matériaux sous-dopés (x faible) vers un état métallique pour les matériaux avec dopage plus élevé (x fort). Pour une température $T \gtrsim 10K$, les comportements respectifs de la résistivité ρ_{ab} dans les plans ab perpendiculaires au champ magnétique et de la résistivité ρ_c selon le troisième axe cristallographique c sont différents. En augmentant le dopage x en Sr, le régime métallique s'établit d'abord dans les plans ab ($d\rho_{ab}/dx > 0$ et $d\rho_c/dx < 0$) puis finalement suivant les trois dimensions ($d\rho_{ab}/dx > 0$ et $d\rho_c/dx > 0$). A très basse température ($T \rightarrow 0K$) par contre la transition métal-isolant (MI) s'opère simultanément suivant les trois dimensions pour un dopage critique particulier x_c . Cela suggère que la transition MI est de nature tridimensionnelle et peut donc s'apparenter à la transition d'Anderson (voir section 1.2). De plus le dopage critique x_c pour lequel se produit la transition est très proche de ce qu'on appelle le dopage optimal, c'est-à-dire celui qui donne la plus grande température critique $T_c(x)$ du supraconducteur.

Une telle corrélation entre la transition supraconducteur-isolant (SI) et la transition MI fut également observée dans d'autres matériaux supraconducteurs comme les cuprates $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ [41], $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ [85]^b, $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ [27], $\text{Bi}_2\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CuO}_{6+\delta}$ [78]^c et les films de InO [40].

Dans ce type d'expériences [10, 41, 40, 27, 85, 78] assistées par un champ magnétique, il semble que la phase isolante (la phase métallique) ne soit pas induite par le champ magnétique [5]. Ce dernier au contraire en détruisant l'état de supraconductivité dévoile la nature intrinsèque de l'état normal du système étudié [5]. Ces matériaux apparaissent comme des systèmes dont l'état normal peut être décrit par un modèle présentant une transition métal-isolant, comme le modèle d'Anderson, et auquel on surimposerait l'effet de supraconduction. Dans cette optique nous étudierons dans un premier temps au CHAP. 2 deux particules évoluant sur un réseau désordonné d'Anderson tridimensionnel et couplées entre elles par une interaction attractive locale de Hubbard. Ceci constitue ce qu'on appellera *le problème de Cooper généralisé*. Nous étudierons ensuite ce même modèle en deux dimensions (2d) et sous l'influence d'un champ magnétique (CHAP. 3), puis nous étendrons notre modèle à plus de deux particules afin de prendre en compte un système à N-coprs (CHAP. 5).

^aLe champ magnétique est dirigé suivant l'axe cristallographique c perpendiculaire aux plans supraconducteurs du cristal.

^bCependant, il est à noter que les travaux [41, 85] indiquent la possibilité que l'état fondamental de l'état normal des cuprates YBaCuO demeure métallique à température nulle.

^cPour le cuprate $\text{Bi}_2\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CuO}_{6+\delta}$ le dopage critique x_c ne correspond pas à celui donnant la température critique $T_c(x)$ optimale.

Chapitre 2

Problème de Cooper généralisé

*J. Lages et D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. B, **62** (2000), 8665*
J. Lages, dans le proceeding “Electronic Correlations : from meso- to nano-physics”
(Rencontres de Moriond 2001)

2.1	Description du modèle	60
2.2	Étude de l'état fondamental	62
2.2.1	Distributions de probabilité	62
2.2.2	Diagramme de phase de la délocalisation / localisation	65
2.2.3	Énergie de liaison	68
2.2.4	Comparaison avec l'ansatz de Cooper	70
2.3	Étude des états excités	72
2.3.1	Distribution des écarts de niveaux d'énergie	72
2.3.2	Propriétés des fonctions d'onde des états excités	75
2.4	Conclusion	76

Nous allons étudier ici un modèle de deux particules situées au-dessus d'une mer de Fermi et couplées par une interaction attractive dans un milieu tridimensionnel aléatoire. Outre l'intérêt théorique d'étudier le modèle TIP (voir section 1.3) pour le cas particulier d'une interaction attractive en présence d'une mer de Fermi gelée, ce modèle constitue une généralisation du problème original de Cooper (voir section 1.1). Le problème de Cooper étant à l'origine de la théorie BCS de la supraconductivité (voir section 1.4), on peut alors espérer que l'étude d'un modèle le généralisant en incluant le désordre puisse éclairer notre compréhension de la supraconductivité en milieux désordonnés. La généralisation du problème de Cooper proposée ici consiste [60, 58] :

- d'une part, à **introduire du désordre**. Pour cela nous utiliserons le modèle d'Anderson tridimensionnel, pour lequel on connaît l'existence d'une transition métal-isolant pour un certain désordre critique. Comme il a été vu au chapitre précédent, il existe une forte corrélation entre la transition métal-isolant (MI) et la transition supraconducteur-isolant (SI). C'est pourquoi il est intéressant, pour étudier cette corrélation MI/SI, de fonder notre étude sur le modèle d'Anderson.

Nous étudierons donc l'effet d'une interaction attractive et locale entre les deux particules à proximité de la transition d'Anderson,

- d'autre part, à **abandonner l'ansatz de Cooper** qui consiste à autoriser seulement les transitions induites par l'interaction entre états symétriques par renversement du temps ($\mathbf{k} \uparrow, -\mathbf{k} \downarrow$) (voir section 1.1.2). Ici nous autoriserons toutes les transitions possibles induites par l'interaction dans une fenêtre énergétique où l'interaction est attractive. Notre méthode est alors exacte et sans approximation quant à l'appariement des états par l'interaction. Nous montrerons que effectivement il est nécessaire de considérer toutes les transitions possibles pour permettre la mise en évidence des différents phénomènes physiques dus aux effets conjugués du désordre et de l'interaction attractive.

2.1 Description du modèle

Supposons donc deux particules de spins opposés sur un réseau tridimensionnel de volume L^3 régies toutes deux par le modèle TIP (1.41) avec interaction attractive ($U < 0$)

$$H = H_1 \otimes \mathbf{1}_d + \mathbf{1}_d \otimes H_1 + U \sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{nn}\rangle \langle \mathbf{nn}|. \quad (2.1)$$

H_1 est l'Hamiltonien à une particule sans interaction. L'interaction $H_U = U \sum_{\mathbf{n}} |\mathbf{nn}\rangle \langle \mathbf{nn}|$ est l'interaction attractive de Hubbard couplant localement les particules sur le réseau. Utilisons à présent la base symétrisée (1.43) des états biparticulaires sans interaction

$$|\alpha\beta\rangle = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{2}} (|\phi_\alpha\rangle \otimes |\phi_\beta\rangle + |\phi_\beta\rangle \otimes |\phi_\alpha\rangle) & \text{si } \alpha \neq \beta \\ |\phi_\alpha\rangle \otimes |\phi_\alpha\rangle & \text{si } \alpha = \beta, \end{cases} \quad (2.2)$$

construite à l'aide des états monoparticulaires sans interaction $|\phi_\alpha\rangle$ définis naturellement par l'équation de Schrödinger $H_1|\phi_\alpha\rangle = E_\alpha|\phi_\alpha\rangle$. Dans cette base $\{|\alpha\beta\rangle\}_{\alpha<\beta}$ l'équation de Schrödinger du Hamiltonien TIP (2.1) s'écrit

$$(E_{\alpha'} + E_{\beta'})\chi_{\alpha'\beta'}^\lambda + U \sum_{\alpha,\beta} Q_{\alpha'\beta'\alpha\beta} \chi_{\alpha\beta}^\lambda = E^\lambda \chi_{\alpha'\beta'}^\lambda \quad (2.3)$$

où $|\chi^\lambda\rangle = \sum_{\alpha,\beta} \chi_{\alpha\beta}^\lambda |\alpha\beta\rangle$ est l'état propre de l'Hamiltonien TIP d'énergie E^λ . L'élément de matrice de transition induit par l'interaction entre les états biparticulaires noninteractifs $|\alpha\beta\rangle$ et $|\gamma\delta\rangle$ est

$$UQ_{\alpha\beta\gamma\delta} = U \sum_{\mathbf{n}} \phi_\alpha^*(\mathbf{n}) \phi_\beta^*(\mathbf{n}) \phi_\gamma(\mathbf{n}) \phi_\delta(\mathbf{n}) \quad \text{avec } \phi_\alpha(\mathbf{n}) = \langle \mathbf{n} | \phi_\alpha \rangle. \quad (2.4)$$

Dans le cas où l'Hamiltonien H_1 est celui d'une particule libre sur un réseau cristallin sans désordre, les états propres associés $|\phi_\alpha\rangle$ sont alors des ondes planes et les énergies propres associées E_α peuvent être indexées par des vecteurs d'onde $\mathbf{k}_\alpha$. Dans ce cas, la matrice de transition $UQ_{\alpha\beta\gamma\delta} \propto U\delta_{\mathbf{k}_\alpha+\mathbf{k}_\beta, \mathbf{k}_\delta+\mathbf{k}_\gamma}$ est une manifestation de la conservation de l'impulsion totale des deux particules au cours de la transition. L'ansatz de Cooper

considère en plus de cela que seuls les transitions entre états biparticulaires d'impulsion totale nulle $\mathbf{k}_\alpha + \mathbf{k}_\beta = \mathbf{0}$ sont importantes pour la supraconductivité. Ceci est justifiable pour le cas sans désordre (voir section 1.1.2). La condition $\mathbf{k}_\alpha + \mathbf{k}_\beta = \mathbf{0}$ implique que $E_\alpha = E_\beta \propto \mathbf{k}_\alpha^2 = \mathbf{k}_\beta^2$, l'ansatz de Cooper (1.15) s'écrit alors avec nos notations

$$E_F \leq E_\alpha = E_\beta \leq E_m \quad (2.5)$$

ou bien ce qui est équivalent

$$1 \leq \alpha = \beta \leq m. \quad (2.6)$$

si les indices $\{\alpha\}$ sont ordonnés et si l'indice du niveau de Fermi est fixé arbitrairement à $\alpha_F = 1$. Avec cet ansatz (2.6) l'équation (2.3) est alors analogue à l'équation de Schrödinger (1.10) du problème original de Cooper pour $\mathbf{K} = \mathbf{k}_\alpha + \mathbf{k}_\beta = \mathbf{0}$.

Dans le cas qui nous intéresse, les états monoparticulaires sont régis par le modèle d'Anderson (voir section 1.2.1)

$$H_1 = H_A = \sum_{\mathbf{n}} \epsilon_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}| + V \sum_{\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{m}| \quad (2.7)$$

où les énergies $\epsilon_{\mathbf{n}}$ sont distribuées aléatoirement et de façon homogène dans l'intervalle énergétique $[-W/2, W/2]$, où V est l'amplitude de probabilité de saut, et où $\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle$ dénote deux sites adjacents $\mathbf{n}$ et $\mathbf{m}$ sur le réseau. Dans ce cas, le désordre implique que les vecteurs d'onde $\mathbf{k}$ des particules ne sont plus de bons nombres quantiques pour indexer les états monoparticulaires. Comme on l'a vu (section 1.3.2) les éléments de la matrice de transition $UQ_{\alpha\beta\gamma\delta}$ peuvent alors être approximés par des variables aléatoires d'écart-type $U_{typ} \sim U/l_1^{3d/2}$ couplant de manière ergodique les états biparticulaires noninteractifs $|\alpha\beta\rangle$ et $|\gamma\delta\rangle$. Le désordre mélange non pas seulement les états biparticulaires $|\alpha\beta\rangle$ diagonaux obéissant à l'ansatz de Cooper ($\alpha = \beta$), mais aussi les états biparticulaires hors-diagonaux ($\alpha \neq \beta$). Nous proposerons alors la généralisation suivante de l'ansatz de Cooper (2.6),

$$2 \leq \alpha + \beta \leq M \quad (2.8)$$

où $M = 2m$. Ce nouvel ansatz (2.8) est donc la restriction imposée à la somme sur les indices α et β dans l'équation de Schrödinger du modèle TIP (2.3). Il englobe l'ansatz de Cooper (2.6) et permet de coupler grâce à l'interaction tous les états biparticulaires noninteractifs situés au-dessus de la mer de Fermi ($2 \leq \alpha + \beta$) dans une fenêtre énergétique de largeur $\omega_D \propto M\Delta_1$ (voir FIG. 2.1); $\Delta_1 \sim V/L^3$ étant l'espacement moyen des niveaux monoparticulaires du modèle d'Anderson (2.7). La fréquence ω_D est alors ce qu'on appelle la fréquence de Debye du système, c'est la largeur de la fenêtre d'énergie dans laquelle l'interaction peut être considérée comme attractive (voir section 1.1.1). Dans la suite de notre étude nous utiliserons le paramètre $\alpha = L^3/M \propto \omega_D^{-1}$, il sera gardé constant lorsque nous voudrions comparer les propriétés du modèle pour différentes tailles L du système, cela afin de garder la même fréquence de Debye^a.

Nous plaçons notre étude du modèle TIP (2.3) au demi-remplissage du spectre monoparticulaire, $\nu = 1/2$. Ainsi, la condition (2.8) gèle la moitié inférieure des états $|\phi_\alpha\rangle$ du spectre monoparticulaire noninteractif de l'Hamiltonien d'Anderson (2.7). Ces états

^aLes résultats présentés dans ce chapitre ont été obtenus pour $\alpha = 30$.

ne seront donc pas accessibles pour construire le modèle TIP (2.3). Aussi, le choix du remplissage $\nu = 1/2$, nous permet d'utiliser le fait qu'*au milieu de la bande* du modèle tridimensionnel d'Anderson la valeur du désordre pour laquelle se produit la transition métal-isolant est bien connue. Cette valeur critique du désordre est $W_c \simeq 16.5V$ (voir section 1.2.3).

Ainsi, l'étude du problème de Cooper généralisé repose sur la diagonalisation exacte pour plusieurs réalisations du désordre de l'équation de Schrödinger du modèle TIP (2.3) soumise à la contrainte de l'ansatz (2.8). Nous étudierons d'abord (section 2.2) l'état fondamental $|\chi^0\rangle$ du problème de Cooper généralisé (2.3), puis le spectre des états excités $\{|\chi^\lambda\rangle\}_\lambda$ de celui-ci (section 2.3).

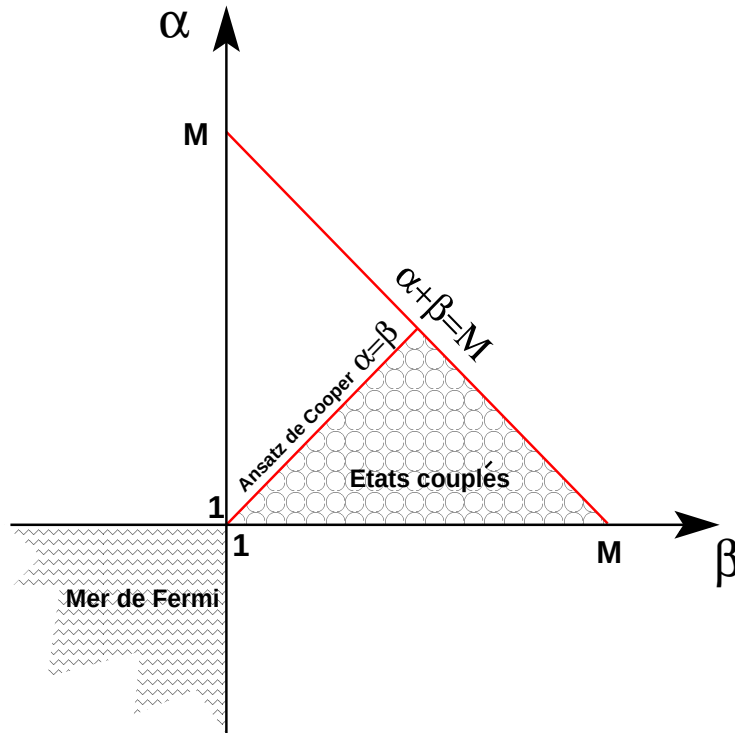


FIG. 2.1 – États biparticulaires couplés par l'interaction. Puisque l'interaction est invariante vis-à-vis de l'échange des rôles des deux particules, seuls les états symétriques s'avèrent être couplés par l'interaction.

2.2 Étude de l'état fondamental

2.2.1 Distributions de probabilité

L'étude directe de la fonction d'onde $|\chi^0\rangle$ de l'état fondamental de l'Hamiltonien du modèle TIP (2.3) nous permet d'étudier qualitativement la localisation des particules. Pour cela écrivons $|\chi^0\rangle$ dans la base du réseau en utilisant la relation $|\phi_\alpha\rangle = \sum_{\mathbf{n}} \phi_\alpha(\mathbf{n})|\mathbf{n}\rangle$ existant entre la base du réseau et la base des états monoparticulaires. La fonction d'onde

de l'état fondamental est alors obtenue sous la forme $|\chi^0\rangle = \sum_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2} \chi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2}^0 |\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2\rangle$. Définissons à présent la distribution $F^0(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2) = |\chi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2}^0|^2$ donnant la probabilité que les deux particules soient l'une sur le site $\mathbf{n}_1$ et l'autre sur le site $\mathbf{n}_2$. De $F^0(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$, nous pouvons alors définir deux distributions de probabilité :

- la distribution donnant la probabilité de présence d'une particule sur un site particulier $\mathbf{n}_1$ du réseau tridimensionnel

$$f(\mathbf{n}_1) = \sum_{\mathbf{n}_2} F^0(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2), \quad (2.9)$$

- la distribution donnant la probabilité que les deux particules soient *séparées* l'une de l'autre d'un vecteur $\mathbf{r} = \mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_2$

$$f_d(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}_2} F^0(\mathbf{n}_2 + \mathbf{r}, \mathbf{n}_2). \quad (2.10)$$

La distribution de probabilité f permet de mesurer l'extension spatiale d'une particule dans l'état fondamental $|\chi^0\rangle$. La distribution de probabilité f_d quant à elle permet de mesurer l'espacement relatif entre les deux particules dans l'état fondamental. Pour des raisons de représentation graphique, ces deux distributions de probabilités sont projetées sur un plan (x, y) du réseau tridimensionnel. La distribution projetée associée à $f(\mathbf{n}_1)$ est alors

$$f_p(n_{1x}, n_{1y}) = \sum_{n_{1z}} f(n_{1x}, n_{1y}, n_{1z}). \quad (2.11)$$

Nous définissons de même, $f_{pd}(r_{1x}, r_{1y})$, la distribution projetée associée à $f_d(\mathbf{r})$. Des exemples typiques de distributions $f_p(n_{1x}, n_{1y})$ et $f_{pd}(r_{1x}, r_{1y})$ sont montrés à la FIG. 2.2 pour une réalisation donnée du désordre. La troisième colonne de la FIG. 2.2 illustre la transition métal-isolant d'Anderson. En effet, sans interaction $f(\mathbf{n}_1)$ s'apparente à la densité de probabilité de présence d'une particule sur le réseau dans un état situé au centre de la bande du modèle d'Anderson. Nous constatons (FIG. 2.2, 3^{ème} colonne) que pour une intensité du désordre au-dessus du désordre critique ($W > W_c \simeq 16.5V$) la particule est localisée et qu'en-dessous ($W < W_c$) la particule est totalement délocalisée. Avec interaction attractive ($U < 0$), pour $W = 1.1W_c > W_c$, la localisation de l'état fondamental est amplifiée (FIG. 2.2, 1^{ère} colonne, 1^{ère} ligne) par rapport au cas sans interaction ($U = 0V$, FIG. 2.2, 3^{ème} colonne, 1^{ère} ligne) où la localisation est déjà présente.

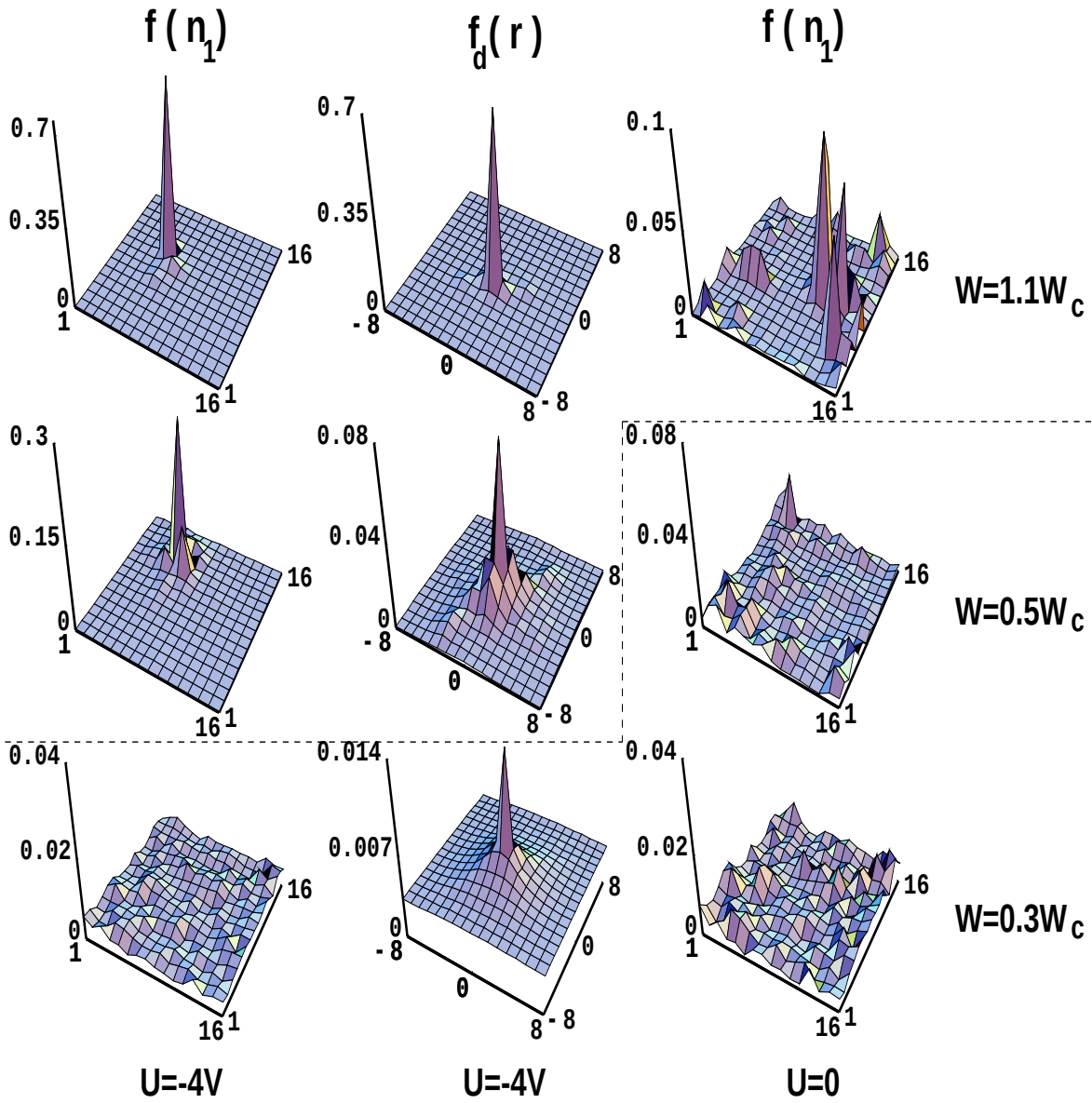


FIG. 2.2 – Distributions de probabilité pour l'état fondamental du modèle TIP attractif (2.3) projetées sur un plan (x, y) du réseau tridimensionnel : probabilité de présence pour une particule f_p pour une interaction $U = -4V$ (1^{ère} colonne), probabilité f_{pd} de position relative des deux particules sur le réseau pour $U = -4V$ (2^{ème} colonne), f_p sans interaction $U = 0$ (3^{ème} colonne). L'intensité du désordre est $W = 1.1W_c$ (1^{ère} ligne), $W = 0.5W_c$ (2^{nde} ligne) et $W = 0.3W_c$ (3^{ème} ligne). Les distributions de probabilité ont été calculées sur des réseaux tridimensionnels de taille linéaire $L = 16$ et projetées sur des plans de dimensions 16×16 . La fréquence de Debye est telle que $\alpha = 30$.

Cette localisation persiste pour un désordre $W = 0.5W_c < W_c$ (FIG. 2.2, 1^{ère} colonne, 2^{nde} ligne) alors que sans interaction l'image de la fonction d'onde d'une particule est délocalisée (FIG. 2.2, 3^{ème} colonne, 2^{nde} ligne). Cette phase localisée disparaît cependant de manière abrupte pour une intensité du désordre $W = 0.3W_c < W_c$. Il semble donc qu'il existe un désordre critique $W_s(U) < W_c$ en-dessous duquel les particules se trouvent être totalement délocalisées à travers tout le réseau. La colonne centrale de la FIG. 2.2 nous montre de plus une structure piquée autour de $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ pour $f_d(\mathbf{r})$; ceci est le signe que les deux particules restent proches l'une de l'autre aussi bien dans la phase localisée ($W > W_s(U)$) que dans la phase délocalisée ($W > W_s(U)$). Une telle transition dans le cas du problème à N -corps correspond à une transition entre une phase isolante (I) et une phase supraconductrice (S).

2.2.2 Diagramme de phase de la délocalisation / localisation

Afin de confirmer l'existence ou non de la transition de phase révélée à la section précédente pour une réalisation du désordre, il est nécessaire d'étudier de manière plus quantitative les propriétés de la fonction d'onde $|\chi^0\rangle$ de l'état fondamental. Pour cela calculons l'inverse ξ du taux de participation (ou IPR pour *inverse participate ratio*) définit par

$$\frac{1}{\xi} = \left\langle \sum_{\mathbf{n}} f^2(\mathbf{n}) \right\rangle. \quad (2.12)$$

Les crochets $\langle \rangle$ dénotent ici la moyenne faite sur plusieurs réalisations du désordre^a. Si les particules sont complètement délocalisées sur le réseau tridimensionnel, la probabilité de trouver une particule sur un site $\mathbf{n}$ est $f(\mathbf{n}) = 1/L^3$ quelque soit $\mathbf{n}$ et par conséquent $\xi = \xi_{\max} = L^3$. Par contre si les particules sont localisées sur un site, $\xi = 1$. L'inverse du taux de participation, ici calculé dans la base du réseau $\{|\mathbf{n}\rangle\}_{\mathbf{n}}$, compte le nombre de sites occupés par une particule dans l'état fondamental $|\chi^0\rangle$ du modèle TIP (2.3).

La FIG. 2.3 montre ξ en fonction du désordre pour une interaction $U = -4V$ et pour différentes tailles du système de $L = 8$ à $L = 14$. Il apparaît clairement qu'il existe un désordre critique $W_s(U = -4V) \simeq 0.4W_c$ au-dessus duquel ξ est indépendant de la taille L du système, ce qui traduit le fait que les particules sont alors localisées, et en-dessous duquel ξ varie en fonction du volume L^3 du réseau, ce qui traduit la délocalisation des particules dans l'état fondamental.

La FIG. 2.4 montre ξ en fonction du désordre W pour différentes interactions de $U = 0V$ à $U = -6V$. Si on compare ξ avec une interaction attractive ($U < 0$) et sans interaction ($U = 0V$) nous constatons que l'interaction ($U < 0$) réduit très fortement l'IPR ξ dans la région $W_s(U) < W < W_c$ où l'état d'une particule sans interaction est normalement délocalisé. Pour une taille donnée L du système, nous constatons (FIG. 2.4) que plus l'interaction est forte, plus l'effet de localisation s'accroît dans la phase localisée ($W_s(U) < W < W_c$), et plus l'effet de délocalisation s'accroît dans la phase délocalisée ($0 < W < W_s(U)$). La transition entre la phase délocalisée et la phase localisée devient par conséquent de plus en plus abrupte à mesure que l'intensité de l'interaction $|U|$ augmente.

^aPour tous les résultats présentés dans cette section, la moyenne de ξ a été faite sur une centaine de réalisations du désordre.

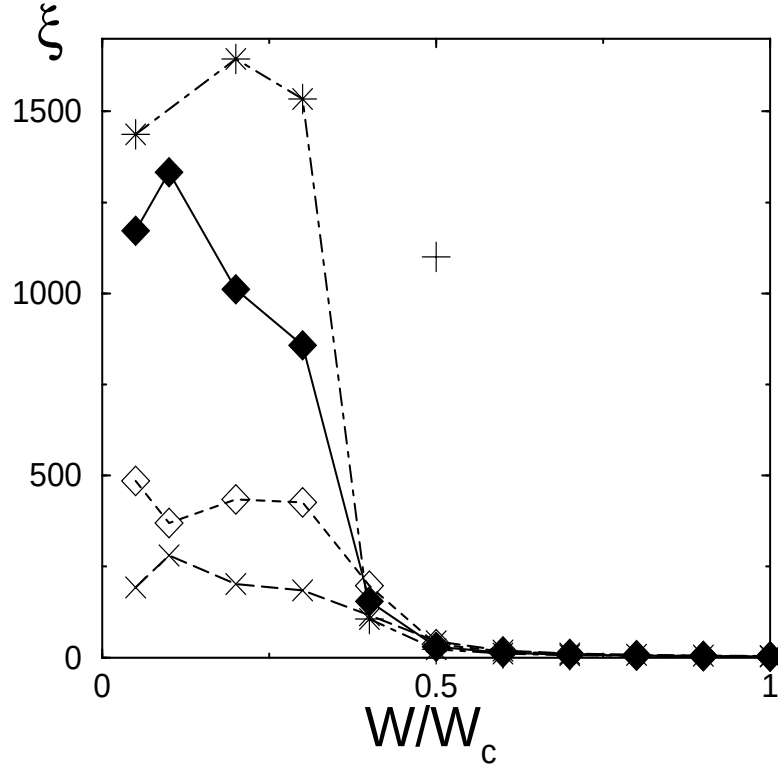


FIG. 2.3 – Inverse ξ du taux de participation en fonction de l'intensité du désordre W/W_c pour une interaction $U = -4V$ et des tailles du réseau $L = 8$ ($\times$), $L = 10$ ($\diamond$), $L = 12$ ($\blacklozenge$) et $L = 14$ ($*$). Le symbole (+) correspond à la valeur de ξ calculée en utilisant l'ansatz de Cooper pour le cas $U = -4V$, $L = 14$.

Afin de connaître plus précisément le bord $W_s(U)$ de la transition, nous comparons les variations relatives de $\xi(W, U)$ par rapport à celles de l'IPR $\xi(W_c, 0)$ obtenu sans interaction au point critique $W = W_c$ lorsque la taille L du système varie. La variation relative de $\xi(W, U)$ est

$$\Delta\xi(W, U) = \frac{\xi(W, U, L = 14) - \xi(W, U, L = 8)}{\xi(W, U, L = 8)} \quad (2.13)$$

lorsque la taille du système passe de $L = 8$ à $L = 14$. Ainsi, lorsque $\Delta\xi(W, U) > \Delta\xi(W_c, 0)$ l'état fondamental est considéré comme délocalisé et lorsque $\Delta\xi(W, U) < \Delta\xi(W_c, 0)$ l'état fondamental sera considéré comme localisé quelque soit la taille linéaire L du réseau. Il est à noter que le bord de délocalisation $W_s(U)$ dépend peu de la façon exacte dont on le définit, puisque pour $W = W_s(U)$ la variation de l'IPR ξ est très brutale (voir FIG. 2.3). Nous avons également vérifié que la variation de la fréquence de Debye ω_D n'affecte pas le bord de délocalisation $W_s(U)$ ^a. La définition de la délocalisation/localisation proposée ci-avant nous permet donc de tracer le diagramme de phase de la transition (voir FIG. 2.5). Ce diagramme montre que l'interaction amplifie la localisation de l'état fondamental de telle façon que celui-ci reste localisé dans

^aPar exemple W_s/W_c varie de 0.35 à 0.36 lorsque α varie de 30 à 15 pour $U = -4V$.

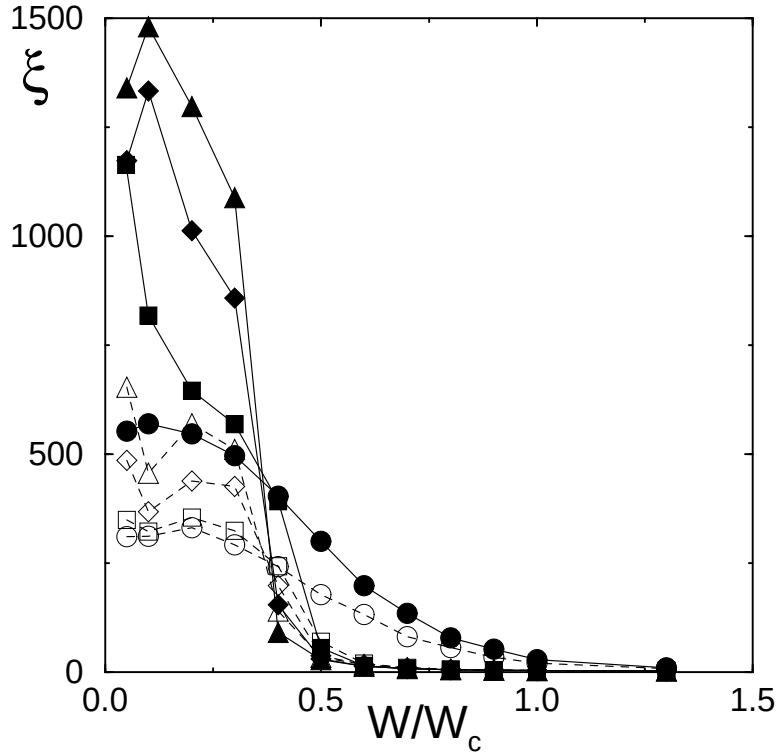


FIG. 2.4 – Inverse ξ du taux de participation en fonction de l'intensité du désordre W/W_c pour pour différentes intensités de l'interaction $U = 0V$ ($\circ$), $U = -2V$ ($\square$), $U = -4V$ ($\diamond$) et $U = -6V$ ($\triangle$). Les symboles vides/pleins correspondent à une taille du réseau $L = 10/L = 12$.

une région $W_s(U) < W < W_c$ où l'état fondamental de l'état normal sans interaction est délocalisé. *La phase isolante pénètre donc à l'intérieur de la phase qui normalement, sans interaction, est métallique.* Ceci est en accord avec le théorème d'Anderson qui prédit que l'ajout d'un faible désordre à un système supraconducteur n'affecte pas la supraconductivité. Pour une intensité donnée de l'interaction, la supraconductivité survit alors jusqu'à $W = W_s(U)$. La FIG. 2.2 (seconde ligne) montre de plus que la localisation des particules se fait par paire, nous baptiserons donc cette nouvelle phase située dans la région $W_s(U) < W < W_c$ de phase d'états biparticulaires localisées (phase BLS pour *Bi-particle Localized State phase*).

A faible désordre $W < W_s(U)$ la phase délocalisée réapparaît. Dans cette région $W < W_s(U)$, les particules semblent former une paire de Cooper délocalisée à travers tout le réseau (voir FIG. 2.2, troisième ligne). Ainsi par analogie au problème à N -corps nous pouvons qualifier cette phase de supraconductrice (S). La transition montrée à la FIG. 2.5 est alors une transition supraconducteur-isolant (SI).

Le bord de délocalisation présenté par la FIG. 2.5 peut être expliqué qualitativement de la manière suivante : les deux particules liées entre elles par l'interaction attractive forment une pseudo-particule de masse $m_p \approx 2m$ qui est le double de la masse m d'une particule. Sachant que l'amplitude de saut au plus proche voisin est inversement

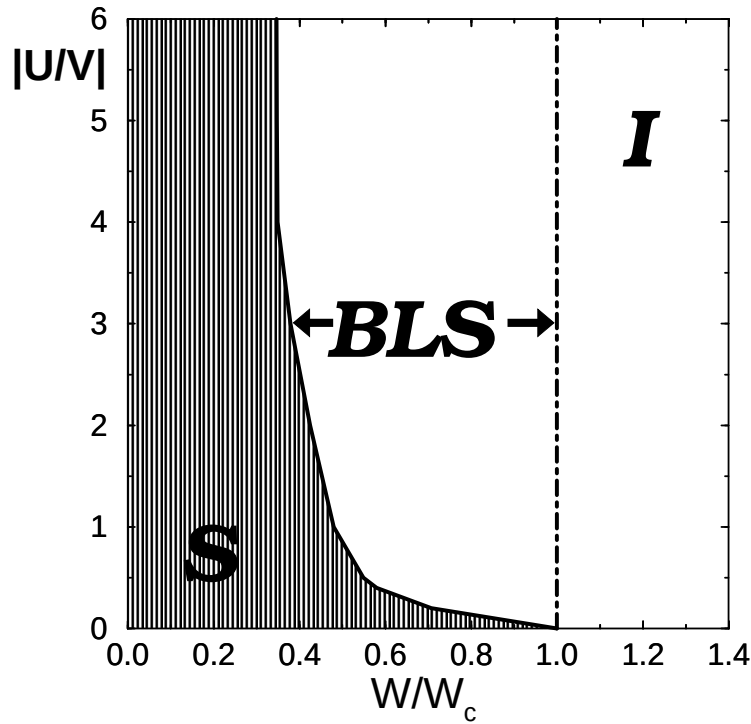


FIG. 2.5 – Diagramme de phase pour la transition entre la phase localisée BLS (isolante) et la phase délocalisée (supraconductrice S) de l'état fondamental du problème de Cooper généralisé. La ligne verticale en pointillés indique la transition métal-isolant d'Anderson en l'absence d'interaction.

proportionnel à la masse, l'amplitude de saut effective pour la pseudo-particule est alors la moitié de celle pour une particule sans interaction $V_{\text{eff}} \simeq V/2$. L'amplitude de probabilité de saut étant l'étalon d'énergie du système, l'intensité critique du désordre W_s menant à la localisation de la pseudo-particule est alors lui aussi diminué de moitié, $W_s/W_c \simeq 0.5$. Cet argument semble être correct pour $|U|$ fort (voir FIG. 2.5) mais n'est pas capable d'expliquer de manière précise la forme exacte de la fonction $W_s(U)$.

2.2.3 Énergie de liaison

Définissons l'énergie de liaison des deux particules par la différence

$$\Delta = 2E_F - E^0. \quad (2.14)$$

E^0 est l'énergie de l'état fondamental des deux particules couplées via l'interaction $U < 0$ et $2E_F$ est l'énergie de l'état fondamental sans interaction ($U = 0V$). L'énergie de liaison Δ est alors la mesure de l'instabilité du niveau de Fermi due à l'interaction attractive ($U < 0$). Dans le problème de Cooper original (voir section 1.1.2), $\Delta > 0$ est relié au gap d'excitation des quasiparticules de la théorie BCS (voir section 1.4.1). L'énergie de liaison Δ est alors proportionnelle à la température critique T_c du supraconducteur et inversement proportionnelle à la longueur de corrélation des paires de Cooper.

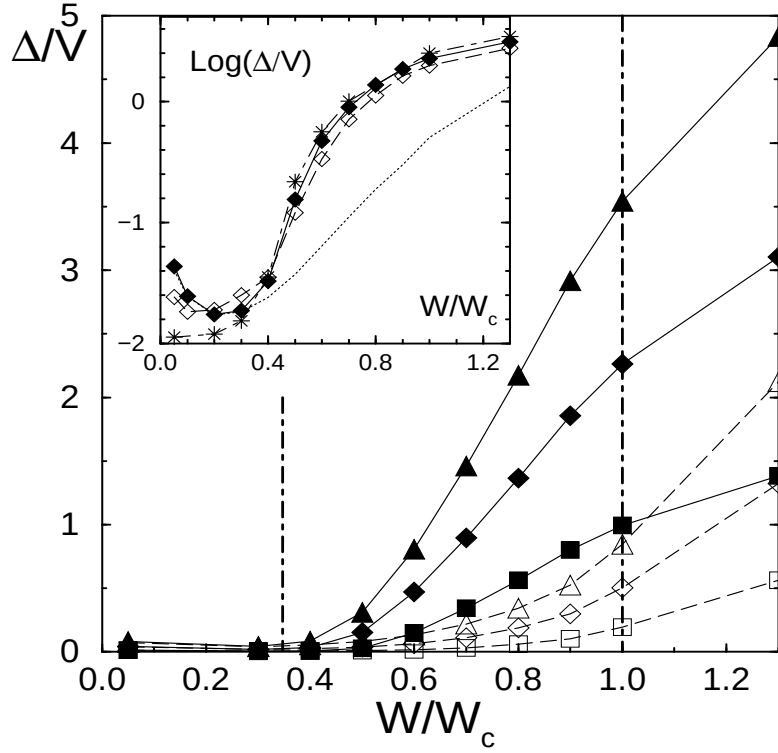


FIG. 2.6 – Énergie de liaison Δ en fonction du désordre W pour $L = 12$ et pour différentes interactions $U = -2V$ ($\square$), $U = -4V$ ($\diamond$), $U = -6V$ ($\triangle$) ; les symboles pleins correspondent aux valeurs calculées sans approximation, les symboles vides correspondent aux valeurs calculées avec l'ansatz de Cooper. Les lignes verticales marquent à $W = W_c$ la transition MI d'Anderson et à $W = W_s \simeq 0.35V$ la transition SI extraite de la FIG. 2.5 pour $|U| \geq 2$. La figure encadrée montre le cas $U = -4V$ pour $L = 10$ ($\diamond$), $L = 12$ ($\blacklozenge$), $L = 14$ ($*$) ; la courbe en pointillés montre Δ avec l'approximation de Cooper pour le cas $U = -4V$ et $L = 12$ (le logarithme est décimal).

La FIG. 2.6 montre l'énergie de liaison Δ en fonction du désordre W pour différentes intensités $|U|$ de l'interaction. Pour une interaction U donnée et pour $W > W_s(U)$, Δ croît de manière importante avec l'augmentation du désordre W^a . Cette rapide augmentation de Δ avec le désordre est due au fait qu'à fort désordre le taux de séparation Γ^{-1} des particules diminue fortement, ce qui augmente d'autant plus l'interaction effective entre elles [53]. Pour $W < W_s(U)$, la variation de l'énergie de liaison est négligeable en comparaison avec la variation subie lors du passage dans la phase BLS ($W_s(U) < W < W_c$).

Dans la phase localisée ($W > W_s(U)$), nous pouvons considérer que Δ et ξ correspondent aux valeurs attendues à la limite thermodynamique ($L \rightarrow +\infty$). En effet, l'analyse combinée des figures FIG. 2.3 et 2.6 montre que dans la phase localisée ($W > W_s$), la taille L du réseau est d'une part beaucoup plus grande que la longueur de localisation

^aPar exemple pour $U = -6V$, Δ est multipliée par ~ 35 lorsque le désordre varie de $W = W_s \simeq 0.35$ à $W = W_c$

des particules puisque ξ ne varie pas avec la taille (FIG. 2.3) et d'autre part beaucoup plus grande que la longueur de corrélation des deux particules puisque Δ reste constante lorsque L varie (voir l'encadré de la FIG. 2.6)^a. Ainsi nous pouvons interpréter les distributions piquées de $f_d(\mathbf{r})$ pour $W > W_s$ (FIG. 2.2) comme étant la manifestation de la formation dans l'état fondamental de paires de particules localisées dans la phase qui sans interaction est métallique.

Par contre, dans la phase délocalisée ($W < W_s$), l'énergie de liaison Δ ne se sature pas lorsqu'on fait varier la taille L du système et même diminue avec l'augmentation de celle-ci (voir l'encadré de la FIG. 2.6). Δ étant relié à la longueur de corrélation de la paire de particules, il est nécessaire de travailler avec des tailles de réseau L beaucoup plus grandes que celles utilisées ici (jusqu'à $L = 16$) pour atteindre la limite thermodynamique et étudier plus précisément la propagation des paires de Cooper dans ce régime délocalisé ($W < W_s$).

2.2.4 Comparaison avec l'ansatz de Cooper

L'ansatz de Cooper (2.6) ne considère dans le modèle TIP (2.3) que les éléments de matrice d'interaction $Q_{\alpha\beta\gamma\delta}$ tels que $\alpha = \beta$ et $\gamma = \delta$. Nous pouvons comparer nos résultats sans approximation avec ceux obtenus sous l'approximation de Cooper. La FIG. 2.6 montre l'énergie de liaison Δ_{Coop} obtenue avec l'ansatz de Cooper. Nous constatons que, pour des faibles valeurs du désordre ($W < W_s \simeq 0.35V$), $\Delta_{\text{Coop}} \simeq \Delta$ (voir l'encadré de la FIG. 2.6). A faible désordre l'ansatz de Cooper semble donc donner une valeur correcte de l'énergie de liaison des particules. Par contre au-delà de la transition ($W > W_s \simeq 0.35V$), l'énergie de liaison Δ_{Coop} donnée par l'ansatz de Cooper est beaucoup plus faible que celle donnée par le modèle exacte (FIG. 2.6)^b. Ceci nous amène à dire que les éléments hors-diagonaux $\alpha \neq \beta$ et $\gamma \neq \delta$ de la matrice d'interaction $Q_{\alpha\beta\gamma\delta}$ négligés dans l'approximation de Cooper jouent un rôle important dans la phase localisée à proximité de la transition d'Anderson.

La FIG. 2.7 compare les distributions de probabilité $f(\mathbf{n}_1)$ et $f_d(\mathbf{r})$ de l'état fondamental obtenues de manière exacte avec celles obtenues avec l'ansatz de Cooper dans la phase BLS ($W = 0.5W_c$ et $U = -4V$). La distribution $f(\mathbf{n}_1)$ obtenue avec l'approximation de Cooper est totalement homogène par rapport à la distribution réelle montrant la localisation des particules. De plus l'inverse du taux de participation obtenu pour l'ansatz de Cooper ($\xi \sim L^3$) est bien plus élevé que celui obtenu sans approximation ($\xi \sim 1$) pour $W = 0.5V$ et $U = -4V$ (voir symbole (+) sur la FIG. 2.3).

L'utilisation de l'approximation de champ moyen, à savoir ici l'ansatz de Cooper, n'est définitivement pas capable de capturer l'effet conjugué de l'attraction entre particules et du désordre, c'est-à-dire la localisation de paires de particules (phase BLS) à l'intérieur d'une phase qui sans interaction est normalement métallique (délocalisée).

^aPour $U = -4V$, $W = 0.4W_c$, Δ ne varie que d'environ 6% autour de la valeur $\Delta \simeq 0.035V$ lorsque le volume L^3 varie de 310% ($L = 10 \rightarrow 16$).

^bPar exemple pour $W = W_c$, l'énergie de liaison Δ est quatre fois plus élevée que Δ_{Coop} obtenue avec l'ansatz de Cooper.

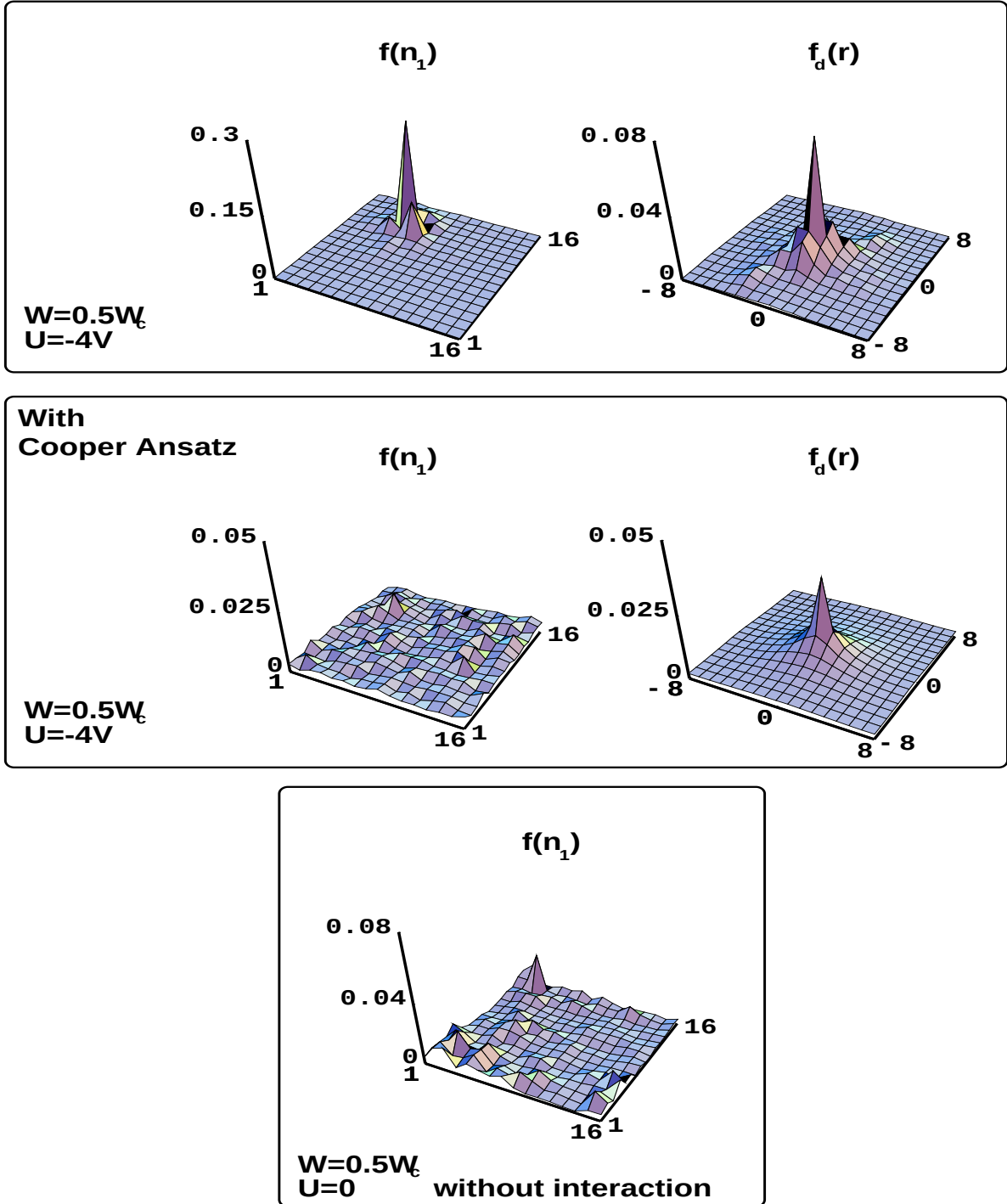


FIG. 2.7 – Distributions de probabilité $f(\mathbf{n}_1)$ et $f_d(\mathbf{r})$ calculées pour la même réalisation du désordre sans approximation (première ligne) et avec l'approximation de l'ansatz de Cooper (deuxième ligne). Les intensités du désordre et de l'interaction sont $W = 0.5W_c$ et $U = -4V$. La dernière ligne montre la distribution de probabilité de présence $f(\mathbf{n}_1)$ d'une particule dans un état situé au milieu du spectre du modèle d'Anderson pour $W = 0.5W_c$.

2.3 Étude des états excités

2.3.1 Distribution des écarts de niveaux d'énergie

Afin d'étudier la localisation des états excités $\{|\chi^\lambda\rangle\}_{\lambda>0}$ du problème de Cooper désordonné, nous déterminons la distribution des écarts d'énergie s entre niveaux d'énergie adjacents E^λ . A partir de la distribution $P(s)$ nous calculons le paramètre

$$\eta = \frac{\int_0^{s_0} [P(s) - P_W(s)] ds}{\int_0^{s_0} [P_P(s) - P_W(s)] ds}, \quad (2.15)$$

où

$$P_P(s) = \exp(-s) \quad (2.16)$$

est la distribution Poissonienne, et où

$$P_W(s) = \frac{\pi s}{2} \exp\left(-\frac{\pi s^2}{4}\right) \quad (2.17)$$

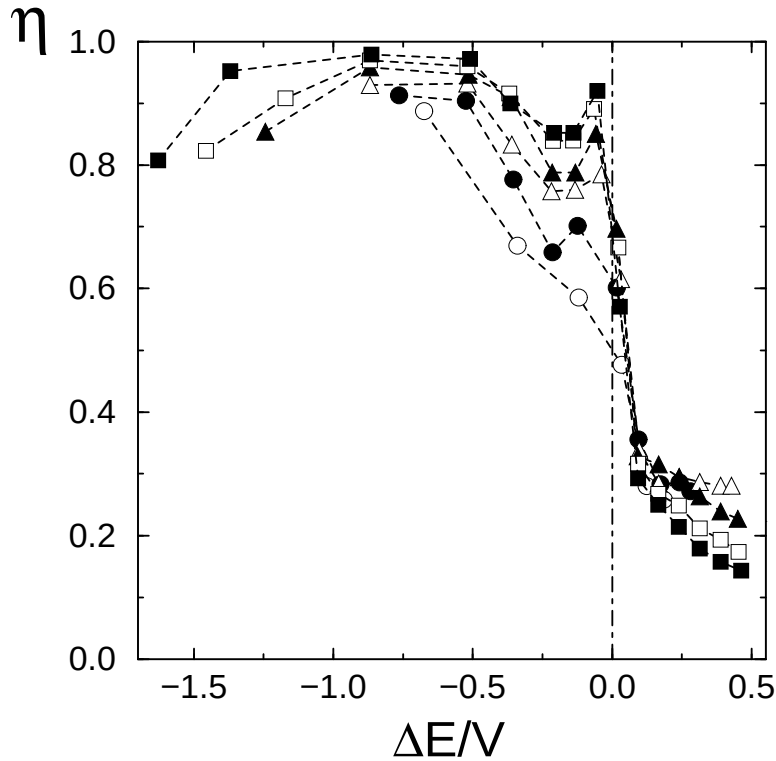


FIG. 2.8 – Paramètre η en fonction de l'énergie d'excitation ΔE pour $W = 18V > W_c$ et $U = -4V$ pour différentes tailles linéaires du réseau $L = 6$ ($\circ$), $L = 7$ ($\bullet$), $L = 8$ ($\triangle$), $L = 10$ ($\blacktriangle$), $L = 12$ ($\square$) et $L = 14$ ($\blacksquare$). Le nombre de réalisations du désordre est $N_D = 3000$ ($\alpha = 30$).

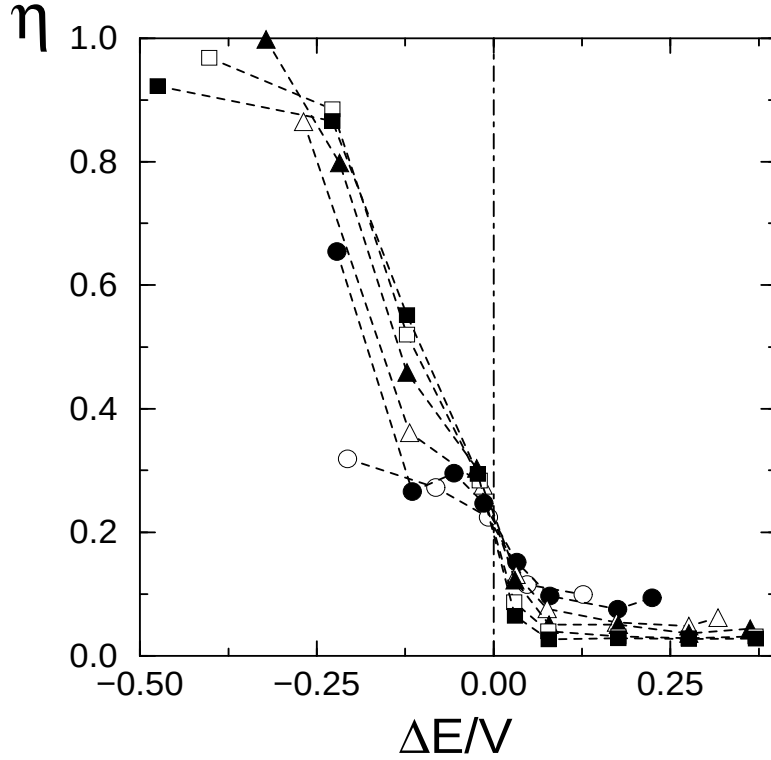


FIG. 2.9 – Paramètre η en fonction de l'énergie d'excitation ΔE pour $W = 12V < W_c$ et $U = -4V$ pour différentes tailles linéaires du réseau $L = 6$ ($\circ$), $L = 7$ ($\bullet$), $L = 8$ ($\triangle$), $L = 10$ ($\blacktriangle$), $L = 12$ ($\square$) et $L = 14$ ($\blacksquare$). Le nombre de réalisations du désordre est $N_D = 3000$ ($\alpha = 30$).

est la distribution de Wigner. Dans (2.15), $s_0 \simeq 0.4729$ est le point d'intersection des deux distributions $P_P(s)$ et $P_W(s)$ ^a. La distribution $P_P(s)$ (resp. $P_W(s)$) caractérise un système d'états localisés (resp. délocalisés). Ainsi, la variation de $\eta = 1$ ($P(s) = P_P(s)$) à $\eta = 0$ ($P(s) = P_W(s)$) caractérise une transition d'états localisés vers des états délocalisés. Ce paramètre η fut déjà utilisé avec succès par SHKLOVSKII *et al* [90] pour étudier la transition MI du modèle d'Anderson (voir section 1.2.3).

Sur les figures FIG. 2.8 et 2.9, η est représenté en fonction de l'énergie d'excitation ΔE des deux particules au-dessus de la mer de Fermi ; $\Delta E = E - 2E_F$ où E est l'énergie des deux particules en interaction dans un état excité.

Au-delà de la transition MI d'Anderson, $W > W_c$, les états monoparticulaires sans interaction sont bien localisés (voir FIG. 2.10 a). Avec l'interaction attractive la mer de Fermi devient instable puisque des états liés à deux particules apparaissent pour ($\Delta E < 0$). La FIG. 2.8 montre η pour $W = 18V > W_c \simeq 16.5V$ et $U = -4V$ pour différentes tailles du système ($L = 6 \rightarrow 14$). Nous constatons que pour les états $\Delta E < 0$, η tend rapidement vers 1 lorsque L croît de $L = 6$ à $L = 14$ suggérant ainsi qu'à la limite thermodynamique tous les états tels que $\Delta E^\lambda = E^\lambda - 2E_F < 0$ sont localisés.

^aVoir section 1.2.3.b.

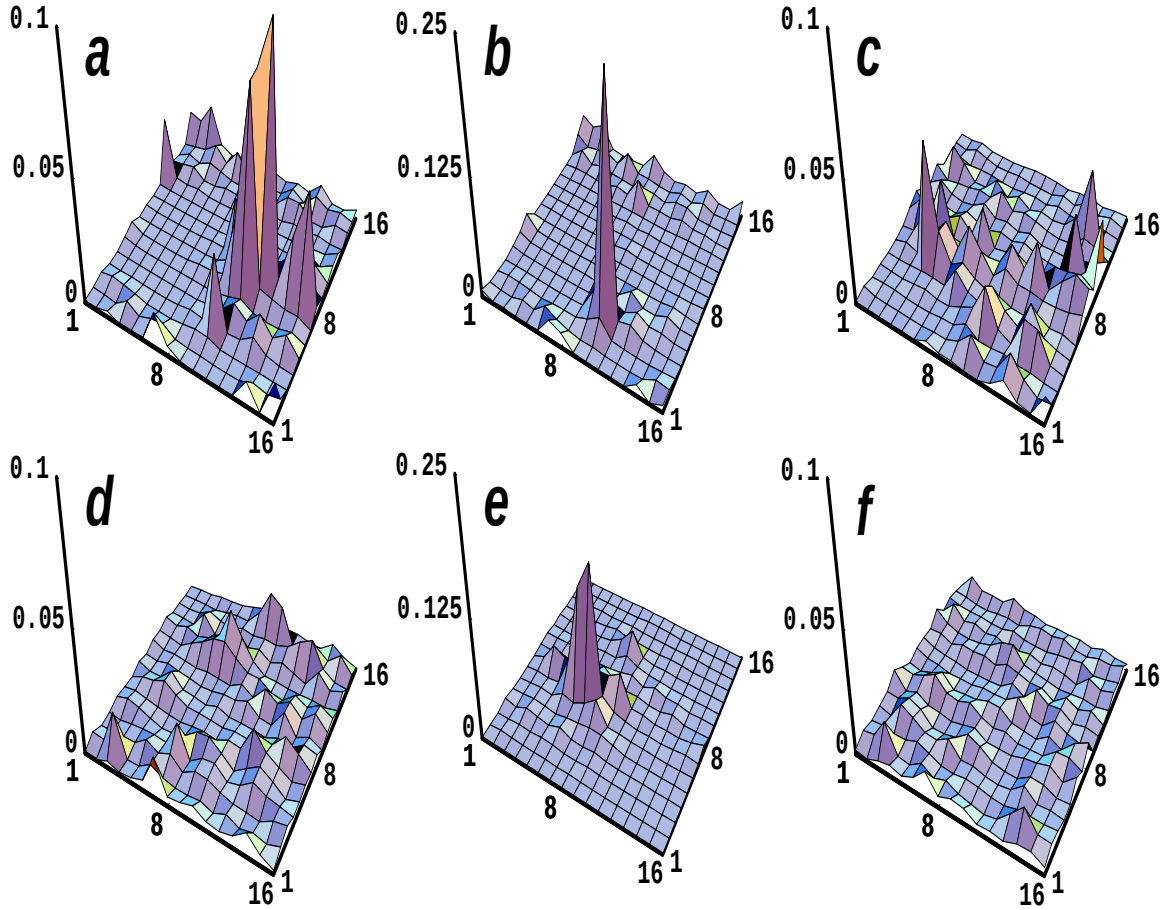


FIG. 2.10 – Densité de probabilité de présence $f^\lambda(\mathbf{n}_1) = \sum_{\mathbf{n}_2} |\chi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2}^\lambda|^2$ d'une particule dans l'état excité $|\chi^\lambda\rangle$ du modèle TIP (2.3). Ici la projection de $f^\lambda(\mathbf{n}_1)$ est représentée sur un plan (x, y) du réseau tridimensionnel. La taille du réseau est $L = 16$. $f^\lambda(\mathbf{n}_1)$ est présentée pour $W = 18V$ [(a) état fondamental sans interaction, (b) état excité $\lambda = 25$ avec $\Delta^\lambda \simeq -0.25V$ pour $U = -4V$ et (c) état excité $\lambda = 758$ avec $\Delta^\lambda \simeq 0.25V$ pour $U = -4V$] et pour $W = 12V$ [(d) état fondamental sans interaction, (e) état excité $\lambda = 83$ avec $\Delta^\lambda \simeq -0.05V$ pour $U = -4V$ et (f) état excité $\lambda = 512$ avec $\Delta^\lambda \simeq 0.125V$ pour $U = -4V$].

Pour $W > W_c$, les états monoparticulaires étant déjà localisés, l'attraction sur site $U < 0$ agit alors comme une contrainte supplémentaire forçant les deux particules de spins opposés à rester dans le même puit de potentiel (FIG. 2.10 b). Au-dessus du niveau de Fermi, η tend progressivement vers 0 indiquant que les états excités avec $\Delta E > 0$ sont délocalisés (FIG. 2.10 c). Cette délocalisation est due au fait qu'une interaction répulsive ou attractive entre deux particules détruit la localisation individuelle des particules et mène à la propagation d'une paire de taille l_1 (longueur de localisation monoparticulaire) sur une distance $l_c \gg l_1$ (voir section 1.3). Le facteur d'accroissement $\kappa = l_c/l_1$ est déterminé par le taux de transition Γ induit par l'interaction et la densité ρ_2 d'état couplés par cette même interaction, $\kappa = \Gamma\rho_2$ (voir section 1.3.4). Pour $\Delta E > 0$, ρ_2 croît linéairement avec l'énergie d'excitation ΔE (voir section 1.3.6) ce qui favorise la délocalisation des paires au-dessus de $E = 2E_F$ (FIG. 2.10 c).

En-dessous de la transition MI d'Anderson, $W < W_c$, les états noninteractifs monoparticulaires sont délocalisés (FIG. 2.10 d). La FIG. 2.9 montre η en fonction de l'énergie d'excitation ΔE pour $W = 12V < W_c \simeq 16.5V$. Il apparaît que l'état fondamental reste localisé ($\eta \simeq 1$) quelque soit la taille L du système, ce qui est cohérent avec l'étude faite à la section précédente de l'état fondamental du problème de Cooper généralisé. En effet, puisque $W_s(U = -4V) \simeq 5.8V < W < W_c \simeq 16.5V$, l'état fondamental appartient à la phase BLS où W_s est le bord de délocalisation de la transition SI trouvée à la section 2.2.2. Dans la région $-0.25V < \Delta E < 0$, bien que η diminue de $\eta \simeq 0.9$ à $\eta \simeq 0.25$, les paires de particules semblent rester localisées (FIG. 2.10 e). Pour $\Delta E > 0$, les états excités sont évidemment délocalisés (FIG. 2.10 f).

2.3.2 Propriétés des fonctions d'onde des états excités

Afin de caractériser les fonctions d'onde des états excités du problème de Cooper désordonné, nous calculons l'inverse du taux de participation dans la base des fonctions d'onde biparticulaires sans interaction $|\alpha\beta\rangle$,

$$\xi_2(E) = \left\langle \left(\sum_{\alpha,\beta} |\chi_{\alpha\beta}^\lambda|^4 \right)^{-1} \right\rangle_{E^\lambda \in [E-\epsilon, E+\epsilon]} . \quad (2.18)$$

Ici les crochets $\langle \rangle$ indiquent la moyenne sur $N_D = 400$ réalisations du désordre et sur un intervalle énergétique 2ϵ centré autour de E . $\xi_2(E)$ compte alors le nombre moyen d'états biparticulaires sans interaction $|\alpha\beta\rangle$ couplés par l'interaction pour construire un état excité $|\chi^\lambda\rangle$ du modèle TIP (2.3) tel que $E^\lambda \in [E - \epsilon, E + \epsilon]$. La FIG. 2.11 montre ξ_2 en fonction de l'énergie d'excitation ΔE pour $W < W_c$ et $W > W_c$. Pour $W = 18V$, les états biparticulaires sans interaction sont localisés, ainsi seuls quelques uns de ces états ($\xi_2 \simeq 5 - 10$) suffisent pour construire les états localisés avec $\Delta E < 0$ (FIG. 2.10 b). Le contraire advient pour $W = 12V$, les états excités occupent pour $\Delta E < 0$ plus d'états biparticulaires sans interaction ($\xi_2 \simeq 30$) que pour le cas $W = 18V$. En effet, pour $W < W_c$, les états sans interactions sont délocalisés, il est alors nécessaire de mélanger un grand nombre de ces états délocalisés pour permettre la localisation des états biparticulaires en interaction $|\chi^\lambda\rangle$ induite par les interférences quantiques.

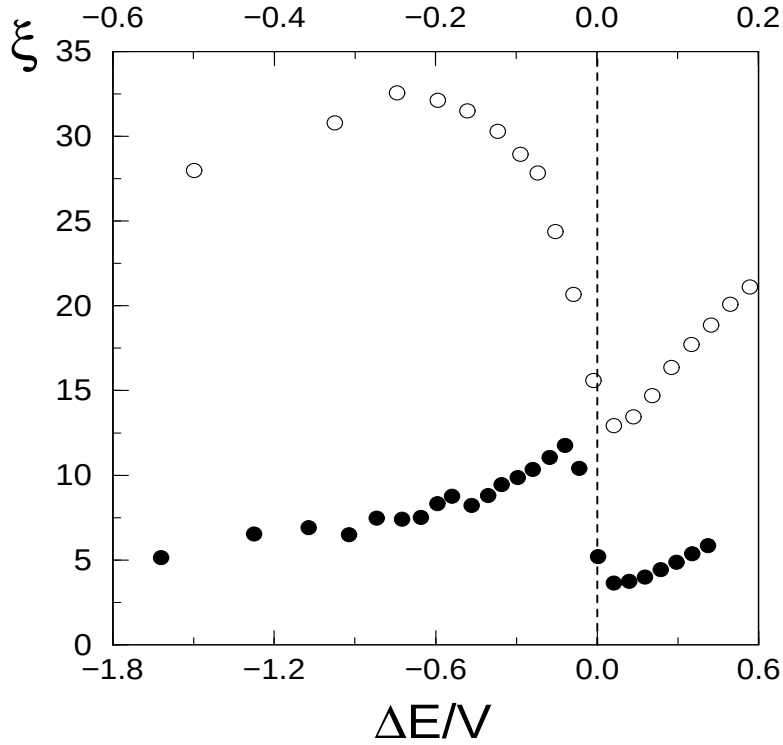


FIG. 2.11 – Inverse ξ_2 du taux de participation en fonction de l'énergie d'excitation ΔE pour $W = 12V$ (○) [ΔE est alors lue sur l'axe horizontal supérieur] et pour $W = 18V$ (●) [ΔE est alors lue sur l'axe horizontal inférieur]. L'intensité de l'interaction est $U = -4V$ et la taille du réseau est $L = 12$. $N_D = 300$ réalisations du désordre ont été nécessaires, $\alpha = 30$, $2\epsilon \simeq 0.05V$ pour $W = 18V$ et $2\epsilon \simeq 0.025V$ pour $W = 12V$.

2.4 Conclusion

Notre étude de l'état fondamental du problème de Cooper généralisé montre qu'en présence d'un désordre suffisamment fort, mais pour lequel les particules sans interaction sont encore délocalisées, il existe une intensité critique de l'interaction attractive à partir de laquelle les particules forment une paire localisée. Ce résultat ne peut pas être obtenu en utilisant l'approche de champ moyen que constitue l'ansatz de Cooper, puisqu'il est nécessaire de considérer toutes les transitions possibles à l'intérieur de la fenêtre énergétique de largeur $\hbar\omega_D$ au-dessus de la mer de Fermi. La localisation induite par l'interaction disparaît cependant pour les faibles intensités du désordre.

Les états excités du problème de Cooper généralisé restent localisés tant que leur énergie de liaison est définie, c'est-à-dire tant que $\Delta E < 0$. La phase BLS persiste donc pour les états excités. Pour $\Delta E > 0$, les particules sont délocalisées grâce à l'augmentation importante de la longueur de cohérence due à l'interaction.

Chapitre 3

Effet de l'interaction attractive sur les systèmes désordonnés bidimensionnels

J. Lages et D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. B, 64 (2001), 094502

3.1	Problème de Cooper généralisé bidimensionnel	78
3.1.1	Analyse des distributions de probabilité	78
3.1.2	Phase BLS	80
3.1.3	Énergie de liaison	85
3.2	Effet d'un champ magnétique	86
3.2.1	Introduction du champ magnétique	86
3.2.2	Altération de la phase BLS par le champ magnétique	88
3.3	Conclusion	91

Nous étudions ici le problème de Cooper généralisé en dimension 2. Nous avons vu (section 1.5.3) qu'il existait effectivement une forte corrélation entre la transition supraconducteur-isolant (SI) et la transition métal-isolant (MI) tridimensionnelle d'Anderson. Cependant, même si certaines expériences sur la transition SI sont faites sur des cristaux tridimensionnels, le couplage entre les différents plans supraconducteurs est relativement faible. Il s'avère alors pertinent d'étudier un modèle théorique de la transition SI pour des systèmes bidimensionnels. Nous allons donc étudier ici l'état fondamental du modèle bidimensionnel de deux particules couplées entre elles par une interaction attractive au-dessus d'une mer de Fermi gelée. L'équation de Schrödinger est analogue à celle (2.3) utilisée au chapitre précédent,

$$(E_{\alpha'} + E_{\beta'})\chi_{\alpha'\beta'}^0 + U \sum_{\alpha,\beta} Q_{\alpha'\beta'\alpha\beta} \chi_{\alpha\beta}^0 = E^0 \chi_{\alpha'\beta'}^0, \quad (3.1)$$

$\{E_{\alpha}\}_{\alpha}$ étant le spectre des énergies du modèle d'Anderson bidimensionnel, $\chi_{\alpha\beta}^0$ la composante $|\alpha\beta\rangle$ de la fonction d'onde de l'état fondamental $|\chi^0\rangle$, E^0 l'énergie fondamentale

et $UQ_{\alpha\beta\gamma\delta}$ l'élément de la matrice de transition entre les états biparticulaires $|\alpha\beta\rangle$ et $|\gamma\delta\rangle$. La somme sur α et β dans l'équation de Schrödinger (3.1) est soumise à l'ansatz général que nous avons introduit au chapitre précédent

$$2 \leq \alpha + \beta \leq M \quad (3.2)$$

où le niveau de Fermi est repéré arbitrairement par l'indice $\alpha_F = 1$ et où M est relié à la fréquence de Debye par la relation^a $\omega_D \propto M/L^2 = 1/\alpha$. Le niveau de Fermi est fixé ici par le facteur de remplissage $\nu = 1/2$, la moitié des états du spectre du modèle d'Anderson ($E_\alpha < E_F$) est alors gelée et ne contribue pas à la construction des états TIP régis par l'équation de Schrödinger (3.1).

3.1 Problème de Cooper généralisé bidimensionnel

3.1.1 Analyse des distributions de probabilité

La résolution de (3.1) nous permet d'obtenir la fonction d'onde $|\chi^0\rangle$ de l'état fondamental du problème de Cooper généralisé bidimensionnel. Nous pouvons alors en extraire les distributions de probabilité $f(\mathbf{n}_1)$ et $f_d(\mathbf{r})$ dont les définitions ont été données précédemment aux équations (2.9) et (2.10). La FIG. 3.1 nous montre pour la même réalisation du désordre des exemples types de ces distributions.

Sans interaction, pour les intensités du désordre considérées, $W = 2V$ et $W = 5V$, les deux particules étudiées sont délocalisées à travers tout le réseau bidimensionnel de taille $L = 40$ (FIGS. 3.1a et 3.1b). Sous l'action de l'interaction $U = -2V$, l'état fondamental reste délocalisé pour $W = 2V$; la distribution de probabilité de présence $f(\mathbf{n}_1)$ associée (FIG. 3.1c) n'est pas affectée par l'interaction si on la compare au cas noninteractif (comparer FIG. 3.1a et 3.1c). Par contre pour un désordre plus élevé, $W = 5V$, les propriétés de l'état fondamental (FIG. 3.1e) sont complètement changées par rapport au cas sans interaction (FIG. 3.1b) puisque les deux particules apparaissent localisées. La FIG. 3.1f indique que les deux particules se trouvent être fortement corrélées sur un domaine spatial bien plus restreint que la surface L^2 du réseau ; ceci suggère alors que les éventuels effets de taille finie n'affectent en rien ce phénomène de localisation des particules par paire sur le réseau.

^aSauf indication contraire, $\alpha = 15$ tout au long de cette étude sur le problème bidimensionnel de Cooper généralisé. Les résultats présentés ici ne varient pas avec α .

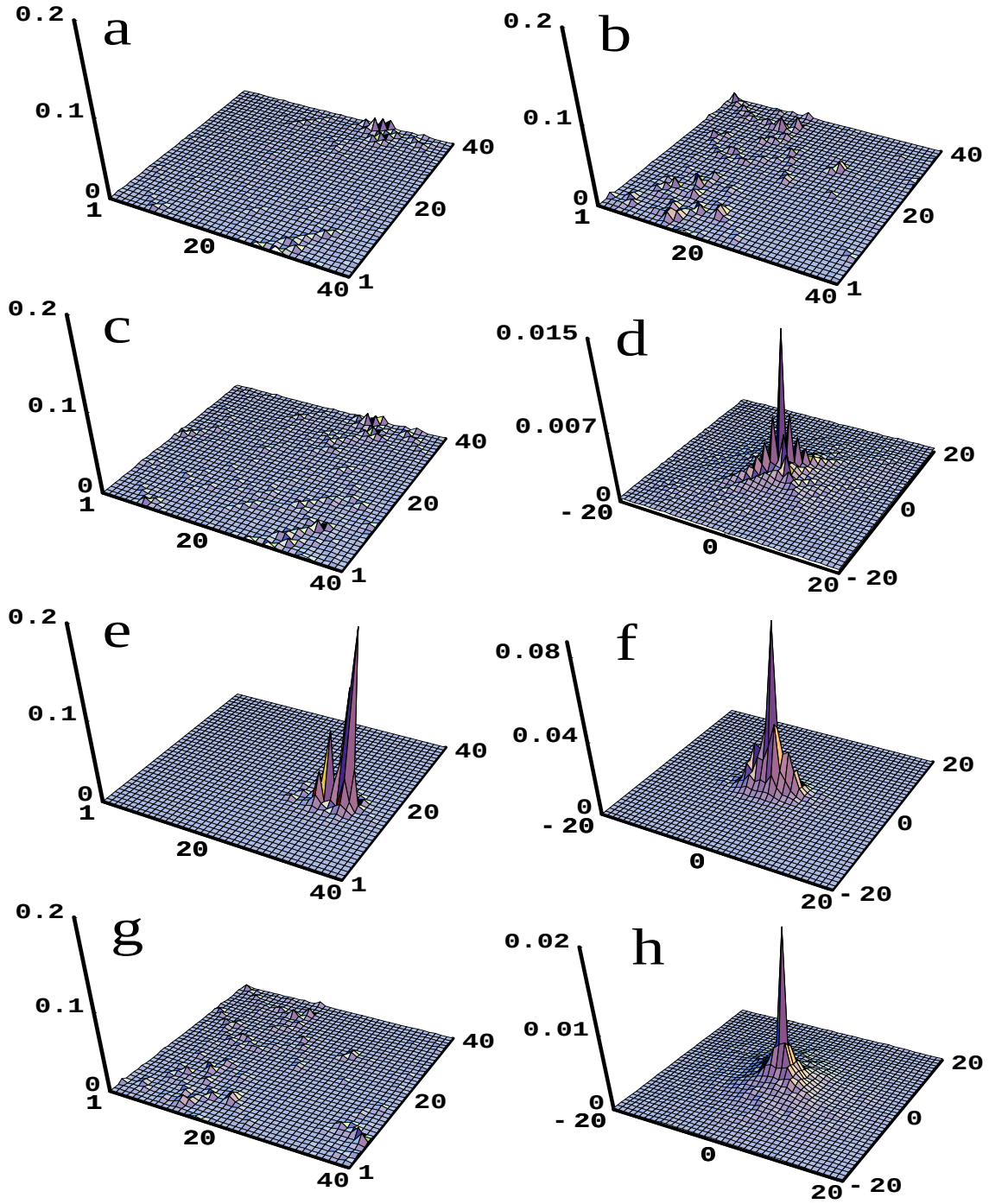


FIG. 3.1 – Distributions de probabilité pour les particules dans l'état fondamental du problème désordonné de Cooper bidimensionnel. La taille du réseau est $L = 40$. Les figures (a) et (b) montrent la probabilité de présence $f(\mathbf{n}_1)$ pour une particule sans interaction ($U = 0V$) et pour un désordre $W = 2V$ (a) et $W = 5V$ (b). Toutes les autres figures sont obtenues pour une interaction de Hubbard $U = -2V$. Les figures (c) et (d) montrent, pour $W = 2V$, la distribution $f(\mathbf{n}_1)$ (c) et la distribution $f_d(\mathbf{r})$ (d). Les mêmes distributions de probabilités que (c) et (d) sont montrées en (e) et (f) pour $W = 5V$ [$f(\mathbf{n}_1)$ pour (e) et $f_d(\mathbf{r})$ pour (f)]. Les figures (g) et (h) sont les analogues des figures (e) et (f) pour $W = 5V$ en utilisant l'approche de champs moyen de l'ansatz de Cooper. Toutes les figures ont été obtenues avec la même réalisation du désordre.

Cette localisation biparticulaire de l'état fondamental est obtenue par diagonalisation exacte du modèle (3.1) où toutes les transitions induites par l'interaction entre les états biparticulaires noninteractifs $|\alpha\beta\rangle$ sont permises dans une fenêtre énergétique de largeur $M\Delta$ au-dessus de la mer de Fermi (3.2). Il est alors intéressant de comparer ce résultat avec celui obtenu avec l'approximation de Cooper qui n'autorise que les transitions entre états biparticulaires diagonaux $|\alpha\alpha\rangle$. Seuls les éléments de la matrice de transition du type $Q_{\alpha\alpha\beta\beta}$ sont alors pris en compte dans l'équation de Schrödinger (3.1). L'état fondamental obtenu avec l'ansatz de Cooper pour $W = 5V$ et $U = -2V$ est illustré sur les figures FIG. 3.1g et 3.1h ; il apparaît clairement que celui-ci est totalement délocalisé à travers tout le réseau bidimensionnel. L'image de l'état fondamental renvoyée par l'ansatz de Cooper (FIG. 3.1g) est plus proche de celle de l'état fondamental délocalisé sans interaction (FIG. 3.1b) que de l'état fondamental réel en présence de l'interaction (FIG. 3.1e).

Les résultats exposés sur la FIG. 3.1 montrent que l'interaction attractive entre les deux particules mène à la localisation par paire dans un régime de désordre où les états noninteractifs sont totalement délocalisés. Cet effet de délocalisation induit par l'interaction n'est pas capturé par l'ansatz de Cooper, ce qui suggère, comme dans le cas tridimensionnel (voir CHAP. 2), que les éléments non-diagonaux de la matrice de transition jouent un rôle important pour l'établissement de celui-ci.

3.1.2 Phase BLS

En dimension deux, l'état fondamental d'un système désordonné (même faiblement) est toujours localisé (voir section 1.2.2). Ceci est strictement vrai à la limite thermodynamique lorsque la taille du système tend vers l'infini, $L \rightarrow \infty$. Ici, dans notre étude de systèmes de taille finie, la plus grande taille linéaire accessible numériquement avec notre méthode de diagonalisation exacte est $L = 40$. Pour cette taille ($L = 40$), l'état fondamental sans interaction^a apparaît délocalisé jusqu'à une intensité du désordre $W \approx 5V$, la localisation semblant timidement apparaître au-delà de $W \gtrsim 5V$ (voir l'inverse du taux de participation ξ pour $U = 0V$ sur la FIG. 3.2).

En revanche, en présence d'une interaction attractive, le bord de localisation apparaît nettement en $W_s \simeq 2V$ pour $U = -4V$ et en $W_s \simeq 3V$ pour $U = -2V$ (FIG. 3.2). En effet, pour $W < W_s$, ξ augmente avec l'augmentation de la taille du système et, pour $W > W_s$, ξ n'est plus sensible à cette même augmentation. L'abaissement induit par l'interaction du bord de délocalisation $W_s(U)$ montre par conséquent, que l'interaction attractive localise les paires de particules dans un régime de désordre pour lequel les particules sans interaction sont encore délocalisées pour les systèmes de tailles finies considérés ici. Comme pour le cas tridimensionnel (CHAP. 2), nous pouvons dire que la phase isolante, grâce à l'interaction attractive, pénètre à l'intérieur de la phase normalement (sans interaction) délocalisée. Les résultats exposés pour le cas bidimensionnel et tridimensionnel (CHAP. 2) sont qualitativement les mêmes : La phase d'états biparticulaires localisés (phase BLS) existe à deux et trois dimensions.

Cependant dans le cas bidimensionnel, il est impossible d'établir précisément un diagramme de phase de la transition SI comme au chapitre précédent pour le problème

^aEtat au milieu de la bande ($\nu = 1/2$) du modèle d'Anderson bidimensionnel pour $L = 40$.

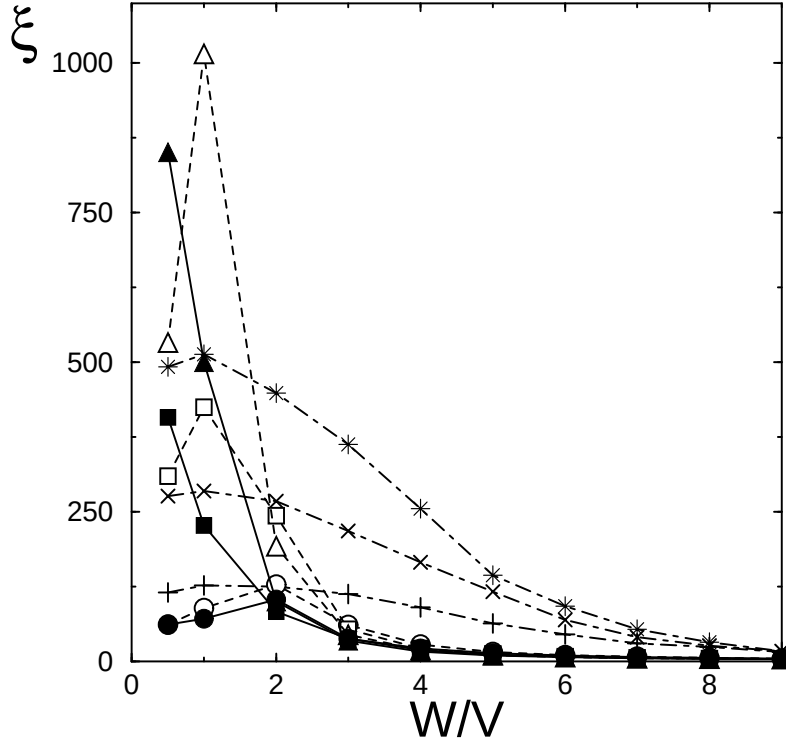


FIG. 3.2 – Inverse ξ du taux de participation (2.12) de l'état fondamental du problème de Cooper généralisé bidimensionnel en fonction du désordre W . Les lignes avec les symboles pleins correspondent à une interaction $U = -4V$, celles avec les symboles vides à $U = -2V$, et celles avec les symboles $(+, \times, *)$ à $U = 0V$. Les différents symboles correspondent à différentes tailles linéaires du réseau $L = 20$ ($\circ, +$), $L = 30$ ($\square, \times$) et $L = 40$ ($\triangle, *$).

de Cooper tridimensionnel généralisé. En effet, pour le problème monoparticulaire sans interaction le seuil critique de localisation W_c n'est pas précisément défini pour un système de taille finie; de plus nous rappelons que ce seuil critique n'existe pas à la limite thermodynamique pour les systèmes à deux dimensions : sans interaction l'état fondamental est localisé quelque soit l'intensité du désordre présent dans le système. Il est alors impossible comme au chapitre 2 de comparer la variation relative de ξ pour des paramètres (U, W) donnés avec la variation de ξ pour $(U = 0, W = W_c)$ lorsque la taille L du système varie. Néanmoins en présence d'une interaction entre particules pour un système bidimensionnel, rien n'interdit l'existence d'une transition d'un état délocalisé (étendu) vers un état localisé, ceci même à la limite thermodynamique. L'existence d'une transition métal-isolant a même été observée [57] dans des gaz bidimensionnels d'électrons de basses densités et à très basses températures. Cette transition semble être due [57] aux interactions entre électrons.

La FIG. 3.3a montre la variation de l'inverse ξ du taux de participation en fonction de la taille linéaire L du système pour deux intensités différentes du désordre, $W = 2V$ et $W = 5V$, et pour plusieurs intensités $|U|$ de l'interaction. Sans interaction, les états

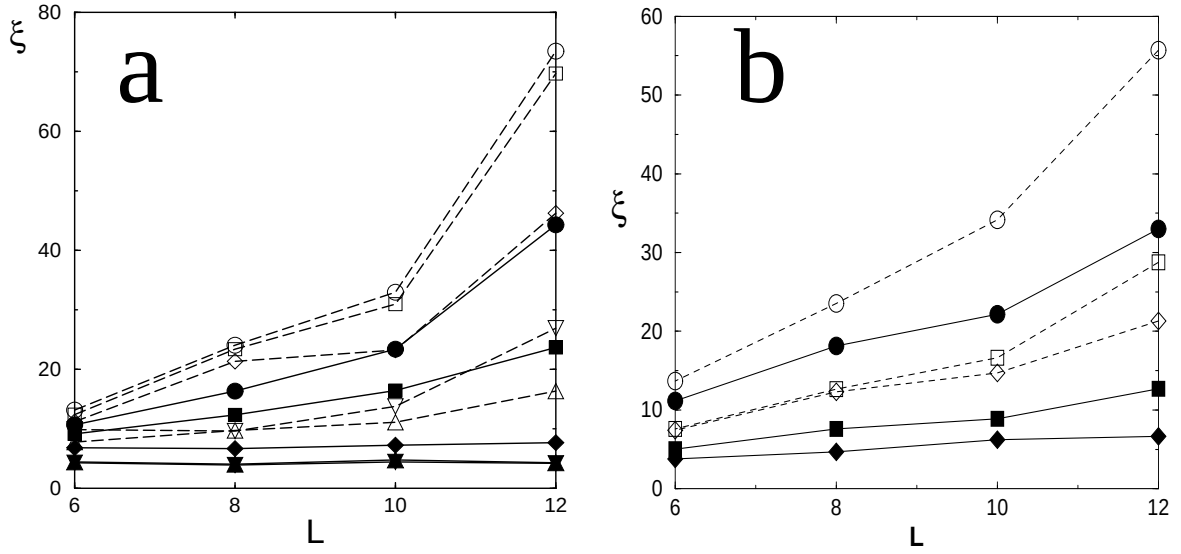


FIG. 3.3 – Inverse ξ du taux de participation en fonction de la taille linéaire L . Sur les figures (a) et (b), les lignes en pointillés et les symboles vides correspondent à un désordre de $W = 2V$, les lignes pleines et les symboles pleins correspondent à un désordre de $W = 5V$. Les résultats de la figure (a) ont été obtenus à partir de notre modèle, ceux de la figure (b) sont extraits de l'étude [95]. Pour la figure (a), $U = 0V$ ($\circ$), $U = -1V$ ($\square$), $U = -2V$ ($\diamond$) et $U = -4V$ ($\triangle$). Pour la figure (b), $U = 0V$ ($\circ$), $U = -4V$ ($\square$) et $U = -6V$ ($\diamond$). Ici le facteur de remplissage est $\nu = 1/4$. Pour notre modèle, $\alpha = 2$ et la moyenne a été faite sur 100 réalisations du désordre.

biparticulaires noninteractifs sont délocalisés pour ces intensités du désordre considérées (voir aussi FIG. 3.1a et b) et pour les tailles L considérées ($L = 6 \rightarrow 12$). L'interaction abaisse fortement ξ par rapport au cas noninteractif et pour $W = 5V$, ξ devient même insensible à l'augmentation de la taille pour des intensités de l'interaction $|U| \gtrsim 2V$ (FIG. 3.3a). Par contre pour $W = 2V$, ξ continue d'augmenter avec L pour $U = -2V$ (et même $U = -4V$). Ce comportement est qualitativement le même que celui observé dans l'étude Monte Carlo quantique du modèle de Hubbard attractif en présence de désordre [95]. La FIG. 3.3b présente l'inverse du taux de participation ξ pour une particule obtenu dans l'étude [95]^a. Dans cette étude, les paires de Cooper se localisent à partir d'une interaction critique $U_c \approx -4V$ pour un désordre de $W = 5V$ et restent, pour les tailles considérées $6 \leq L \leq 12$ ^b, délocalisées pour $W = 2V$. Les résultats des figures FIG. 3.3a et 3.3b sont qualitativement similaires, la différence quantitative est cependant présente : dans notre modèle biparticulaire la phase BLS semble, pour $W = 5V$, apparaître pour une intensité critique $U_c \approx -1.5V$ et non pas pour $U_c \approx -4V$ comme dans l'étude [95]. Cette différence de seuil est due au fait que les auteurs de [95]

^aLes résultats montrés à la FIG. 3.3a sont obtenus avec notre méthode en gelant le quart des niveaux monoparticulaires afin de pouvoir les comparer avec ceux de l'étude Monte Carlo quantique [95] faite au quart-remplissage ($\nu = 1/4$).

^bDans [95], seules les tailles $L \leq 12$ sont numériquement accessibles.

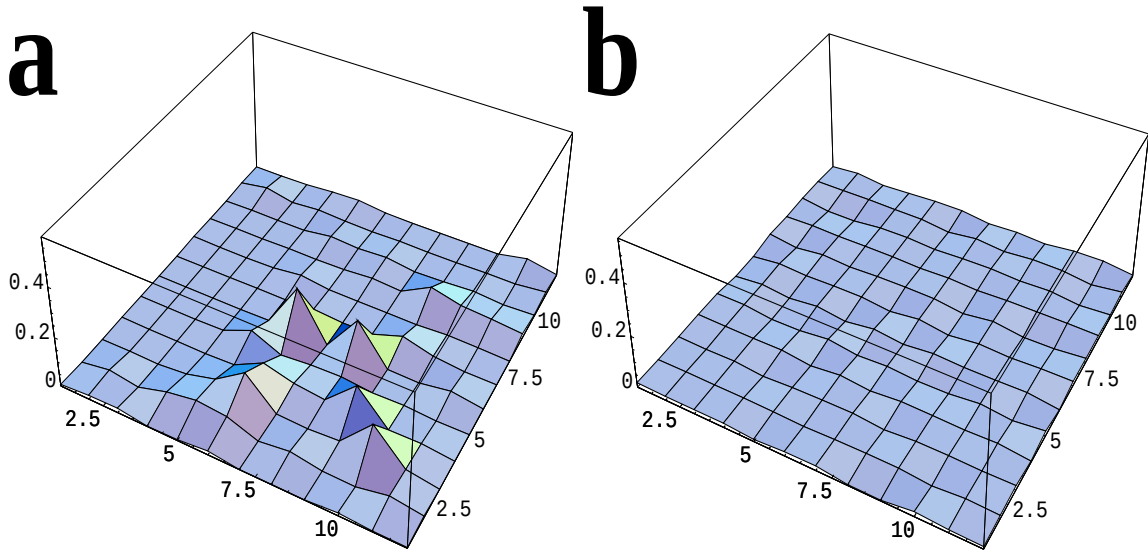


FIG. 3.4 – Distributions de charge $\delta\rho_{\mathbf{i}}$ pour deux particules à proximité du niveau de Fermi sur un réseau 12×12 avec $N = 72$ fermions et $W = 5V$. L'image (a) est obtenue par diagonalisation exacte pour $U = 0$. L'image (b) est obtenue à l'aide de la méthode auto-cohérente de BdG pour $U = -6V$. Données tirées de [95].

considèrent jusqu'à 74 fermions de spin $1/2$ traités de manière exacte^a par la méthode Monte-Carlo quantique. En effet, la présence d'autres fermions peut renormaliser l'intensité effective de l'interaction entre deux particules, et changer également l'intensité effective du désordre pour les fermions proches du niveau de Fermi.

L'étude [95] du modèle de Hubbard en présence de désordre présente pour différentes intensités du désordre et de l'interaction la différence $\delta\rho_{\mathbf{i}} = \rho_{\mathbf{i}}(N+2) - \rho_{\mathbf{i}}(N)$ entre les distributions de charge pour $N+2$ et N particules. $N = L^2/2$ est ici le nombre de particules correspondant au quart-remplissage, $\nu = 1/4$. En l'absence d'interaction, $U = 0$, la distribution $\delta\rho_{\mathbf{i}}$ est égale à deux fois la distribution de probabilité de présence d'une particule près du niveau de Fermi, $\delta\rho_{\mathbf{i}} = 2|\phi_{\alpha_F}(\mathbf{i})|^2$. En présence d'interaction, $\delta\rho_{\mathbf{i}}$ nous renseigne alors sur la localisation de la charge de deux particules à proximité du niveau de Fermi. Les figures FIG. 3.4 et 3.5, tirées de [95], montre des exemples types de la différence de distribution de charge $\delta\rho_{\mathbf{i}}$. La FIG. 3.4a montre la distribution $\delta\rho_{\mathbf{i}}$ pour le cas sans interaction, $U = 0$, et pour une intensité du désordre $W = 5V$. Cette distribution est quasiment homogène sur tout le réseau bidimensionnel, ceci indique que la longueur de localisation est ici bien plus grande que la taille L du réseau. À la limite thermodynamique, ($L \rightarrow \infty$), l'image de $\delta\rho_{\mathbf{i}} = 2|\phi_{\alpha_F}(\mathbf{i})|^2$ devrait indiquer la localisation des particules près du niveau de Fermi. La FIG. 3.4b montre la distribution $\delta\rho_{\mathbf{i}}$ calculée à l'aide de la méthode auto-cohérente de BdG (voir section 1.4.2) pour des intensité, $U = -6V$ et $W = 5V$, de l'interaction et du désordre. Il apparaît que l'approximation de champ moyen (BdG) lisse les fluctuations apparaissant dans le cas non interactif (FIG. 3.4a). La méthode de champ moyen de BdG donne alors une image délocalisée

^aaux erreurs statistiques près introduites par la décomposition de Trotter du temps imaginaire.

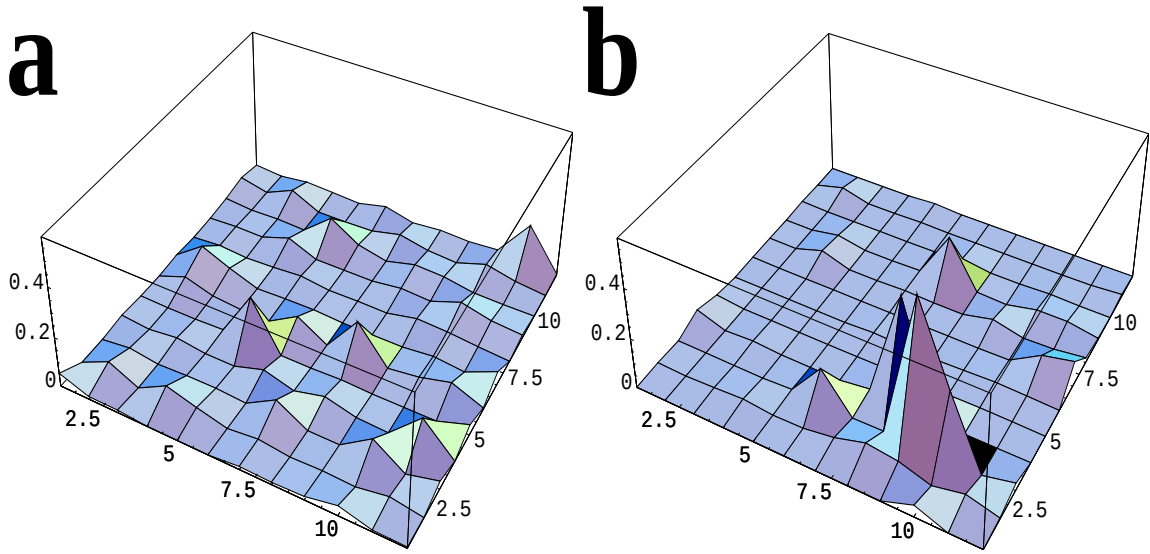


FIG. 3.5 – Distributions de charge $\delta\rho_i$ pour deux particules à proximité du niveau de Fermi obtenue à l'aide de la méthode Monte Carlo quantique pour un réseau 12×12 avec $N = 72$ fermions. L'intensité de l'interaction est $U = -6V$. La réalisation est ici la même que celle utilisée pour le FIG. 3.4. L'image (a) est obtenue pour une intensité du désordre $W = 2V$ et l'image (b) pour $W = 5V$. Données tirées de [95].

(métallique) des particules à proximité du niveau de Fermi. Les figures FIG. 3.5a et 3.5b quant à elles représentent $\delta\rho_i$ calculée sans approximation avec la méthode Monte Carlo quantique. Ces figures ont été obtenues avec la même réalisation du désordre que celle utilisée pour les figures FIG. 3.4a et FIG. 3.4b. La FIG. 3.5b correspond à la distribution $\delta\rho_i$ pour $W = 5V$ et $U = -6V$. Il apparaît clairement que la charge des deux particules au niveau de Fermi est localisée à l'intérieur du réseau, ce qui est qualitativement différent du résultat obtenu par la méthode BdG (FIG. 3.4b). La méthode de champ moyen de BdG, à l'instar de l'ansatz de Cooper pour le problème à deux particules, est incapable de donner l'image correcte de la localisation des paires de particules à proximité de la mer de Fermi. Comme dans le cas du problème de Cooper généralisé, pour un désordre suffisamment faible, la phase BLS disparaît au profit d'une phase délocalisée supraconductrice (FIG. 3.5a). La transition supraconducteur-isolant se situe alors dans un régime de désordre pour lequel les particules sans interaction sont délocalisées.

La comparaison des deux études, la nôtre et celle utilisant la méthode Monte Carlo quantique [95], montre que l'approche des *deux particules en interaction au-dessus d'une mer de Fermi gelée* capture les propriétés physique essentielles du système mais donne des valeurs quantitativement différentes. En un sens, cette comparaison est similaire à celle qui existe entre le problème original de Cooper (section 1.1) et la théorie BCS (section 1.4.1).

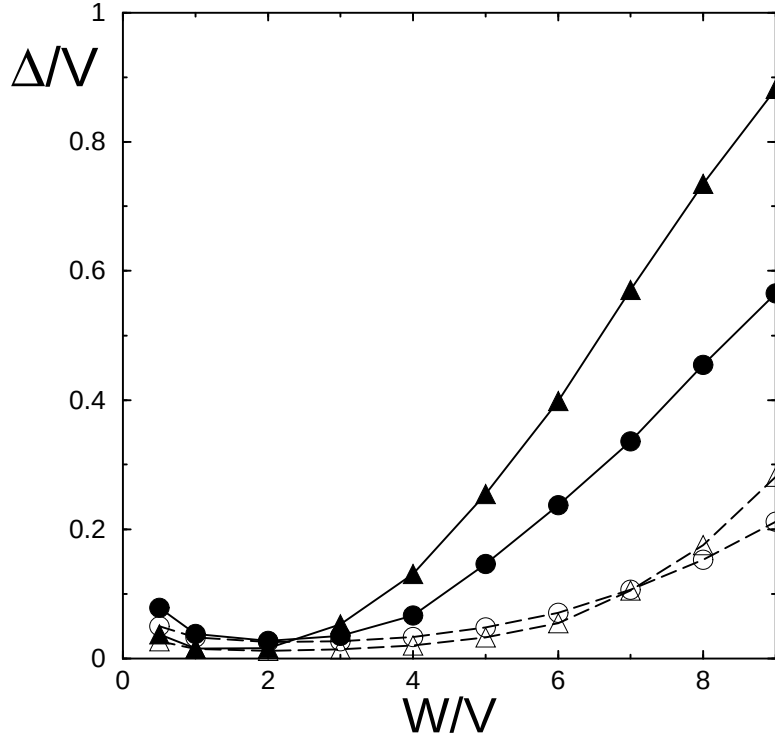


FIG. 3.6 – Dépendance de l'énergie de liaison Δ vis-à-vis du désordre W pour $U = -2V$. Les tailles linéaires du réseau sont $L = 20$ ($\circ$) et $L = 40$ ($\triangle$). Les données obtenues par diagonalisation exacte sont représentées par les symboles et lignes pleines, celles obtenues avec l'ansatz de Cooper sont représentées par les symboles vides et les lignes pointillées.

3.1.3 Énergie de liaison

La FIG. 3.1g montre clairement que l'approximation de l'ansatz de Cooper ne permet pas de révéler la phase d'états biparticulaires localisés. La différence entre la solution donnée par la diagonalisation exacte du modèle (2.3) et la solution de champs moyen donnée par l'ansatz de Cooper peut être également mise en évidence grâce à l'énergie de liaison entre les particules, $\Delta = E^0(0) - E^0(U)$. L'énergie $E^0(U)$ est celle de l'état fondamental des deux particules en présence de l'interaction U ; on a en particulier $E^0(0) = 2E_F$. La FIG. 3.6 nous montre la dépendance de Δ vis-à-vis du désordre pour une interaction fixe $U = -2V$.

Dans la phase BLS, $W > W_s \approx 3V$, l'énergie de couplage Δ obtenue par la diagonalisation exacte est beaucoup plus grande que celle obtenue avec l'ansatz de Cooper qui conduit à des états délocalisés (FIG. 3.1g). Ceci implique que du point de vue énergétique la phase BLS est beaucoup plus favorable que les solutions basées sur l'approximation de champs moyen comme par exemple la solution de BdG [95]. Ceci s'explique par le fait que dans la phase BLS, les paires sont localisées et par conséquent les particules restent proches l'une de l'autre ce qui a pour effet d'accroître l'intensité du couplage entre les particules, baissant ainsi l'énergie du fondamental.

En revanche pour $W < W_s$ les paires sont délocalisées. Les valeurs données par l'ansatz de Cooper et par la diagonalisation exacte sont très proches (FIG. 3.6). L'approximation de Cooper est alors valable pour les désordres faibles, ce qui est en accord avec le théorème d'Anderson [4, 6].

Puisque pour deux particules la phase BLS est favorable à une phase délocalisée, il est naturel de penser que pour une densité finie de particules ($N > 2$) cette phase reste prédominante. Cette hypothèse est en très bon accord avec les simulations numériques utilisant la technique Monte Carlo quantique [95]. Un autre argument en faveur de la phase BLS peut être donné pour le cas d'un système avec un nombre fini de particules ($N > 2$) : Supposons que le facteur ν de remplissage du système pour une particule sans interaction soit proche de la valeur critique ν_c du bord de mobilité, avec cependant $\nu > \nu_c$. Les particules en-dessous de ν_c sont naturellement localisées. La densité de paires de particules en interaction est alors proportionnelle à $|\nu - \nu_c|$ et devient très faible si $|\nu - \nu_c| \ll \nu$. Dans ce régime particulier, les paires au-dessus de ν_c sont très éloignées les unes des autres et par conséquent l'approximation consistant à considérer l'ensemble des particules du système comme une assemblée d'entités biparticulaires régies par notre modèle TIP (3.1) est justifiées ; c'est pourquoi il est intéressant de généraliser le problème de Cooper désordonné à un ensemble ($N > 2$) de particules de spin 1/2 (voir Chap. 5).

3.2 Effet d'un champ magnétique

3.2.1 Introduction du champ magnétique

Nous introduisons ici un champ magnétique $\mathbf{B} = B\mathbf{e}_z$ perpendiculaire au réseau bidimensionnel^a. Il est intéressant de caractériser les propriétés de la phase BLS sous l'action d'un tel champ magnétique. Dans cette optique, l'Hamiltonien monoparticulaire est alors modifié par rapport à (2.7) de la manière suivante

$$H_1 = \sum_{\mathbf{n}} \epsilon_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}| + V \sum_{\mathbf{n}} [\mathcal{T}(\mathbf{n}) + \mathcal{T}^\dagger(\mathbf{n})]. \quad (3.3)$$

$\mathcal{T}(\mathbf{n})$ et $\mathcal{T}^\dagger(\mathbf{n})$ sont les opérateurs de translation d'un site $\mathbf{n}$ à ses plus proches voisins^b

$$\mathcal{T}(\mathbf{n}) = \mathcal{T}_{M_x}(\mathbf{n}) |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n} + \mathbf{e}_x| + \mathcal{T}_{M_y}(\mathbf{n}) |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n} + \mathbf{e}_y| \quad (3.4)$$

où

$$\mathcal{T}_{M_{x[y]}}(\mathbf{n}) = \exp \left(-\frac{iq}{\hbar c} \int_{\Gamma_{x[y]}(\mathbf{n})} \mathbf{A}(\mathbf{n}') \cdot d\mathbf{n}' \right) \quad (3.5)$$

sont les opérateurs de translations magnétiques le long des chemins $\Gamma_x = (\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n} + \mathbf{e}_x)$ et $\Gamma_y = (\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n} + \mathbf{e}_y)$ (FIG. 3.7). Dans (3.5), q est la charge d'une particule, c la célérité de la lumière et $\mathbf{A}$ le potentiel vecteur associé au champ magnétique $\mathbf{B} = \nabla \wedge \mathbf{A}$. Nous choisissons la jauge de Landau pour fixer la forme du potentiel vecteur $\mathbf{A}(\mathbf{n}) = -n_y B \mathbf{e}_x$. Avec cette jauge les opérateurs (3.5) deviennent $\mathcal{T}_{M_x}(\mathbf{n}) = \exp(2\pi i \gamma n_y)$ et $\mathcal{T}_{M_y}(\mathbf{n}) = 1$

^a $\{\mathbf{e}_x, \mathbf{e}_y, \mathbf{e}_z\}$ sont les notations pour les trois vecteurs orthonormés choisis. $\mathbf{e}_x$ et $\mathbf{e}_y$ définissent le plan du réseau, $\mathbf{e}_z$ est alors normal au réseau.

^bLe pas du réseau carré est $a = 1$.

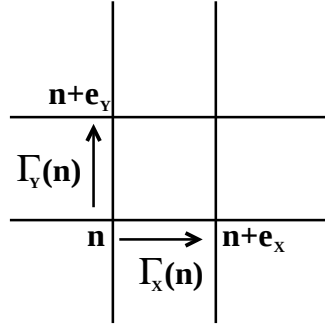


FIG. 3.7 – Représentation des chemins $\Gamma_x = (\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n} + \mathbf{e}_x)$ et $\Gamma_y = (\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n} + \mathbf{e}_y)$ sur le réseau bidimensionnel.

où $\gamma = qB/hc$ est le flux magnétique. Sur le réseau carré bidimensionnel les conditions périodiques aux bords impliquent que la topologie effective du système est celle d'un tore de rayons longitudinal et transversal $R_l = R_t = L$ (FIG. 3.8). Le champ magnétique étant perpendiculaire en tout point de la surface du tore, une particule parcourant un contour fermé quelconque doit acquérir un flux total nul. Ainsi, cette topologie impose une quantification du flux traversant le réseau,

$$\gamma = \frac{m}{R_l} = \frac{m}{R_t} = \frac{m}{L} \quad (3.6)$$

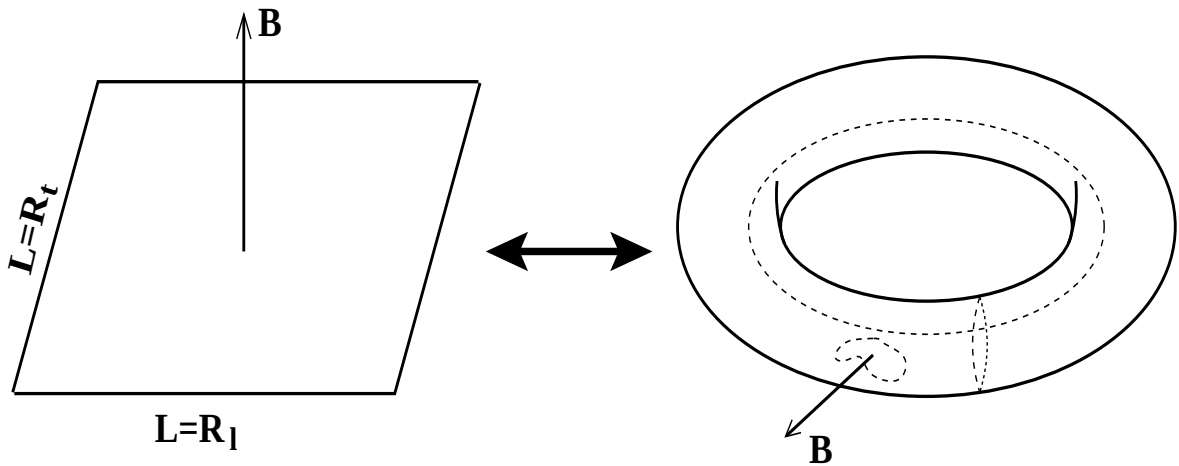


FIG. 3.8 – Topologie effective du réseau bidimensionnel avec conditions périodiques aux bords.

où $m \in [0, L - 1]$. Le Hamiltonien monoparticulaire (3.3) s'écrit alors

$$\begin{aligned} H_1 = & \sum_{\mathbf{n}} \epsilon_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}| \\ & + \sum_{\mathbf{n}} \left(e^{2\pi i \gamma n_y} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n} + \mathbf{e}_x| + |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n} + \mathbf{e}_y| \right) \\ & + \sum_{\mathbf{n}} \left(e^{-2\pi i \gamma n_y} |\mathbf{n} + \mathbf{e}_x\rangle \langle \mathbf{n}| + |\mathbf{n} + \mathbf{e}_y\rangle \langle \mathbf{n}| \right). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Si $\gamma = 0$, cet Hamiltonien est alors celui du modèle d'Anderson sans champ magnétique H_A (2.7). Rappelons que le désordre est toujours introduit à l'aide des énergies $\epsilon_{\mathbf{n}}$ aléatoirement distribuées dans l'intervalle énergétique $[-W/2, W/2]$. Notre étude du modèle TIP avec champ magnétique se fonde alors sur l'Hamiltonien (3.7) ; la procédure est la même qu'à la section précédente où $\mathbf{B} = \mathbf{0}$: Nous cherchons l'état fondamental du modèle (2.3) écrit dans la base des états biparticulaires noninteractifs construite à l'aide des fonctions propres du Hamiltonien monoparticulaire avec champ magnétique H_1 (3.7). Les états biparticulaires accessibles grâce à l'interaction obéissent toujours à la restriction générale (3.2).

3.2.2 Altération de la phase BLS par le champ magnétique

La FIG. 3.9 présente les distributions de probabilité $f(\mathbf{n})$ et $f_d(\mathbf{r})$ extraites de l'état fondamental du problème bidimensionnel de Cooper généralisé avec champ magnétique. Sur un réseau de taille $L = 40$ et pour des intensités fixes du désordre et de l'interaction ($W = 3V/U = -2V$), différentes valeurs du flux magnétique ont été utilisées $\gamma = 0$, $\gamma = \frac{2}{40}$ et $\gamma = \frac{5}{40}$ (FIG. 3.9). Sans champ magnétique, $\gamma = 0$, la probabilité de présence d'une particule $f(\mathbf{n})$ est bien localisée par l'interaction (1^{ère} ligne, FIG. 3.9). Cependant, lorsque γ augmente la localisation est détruite suggérant qu'il existe un seuil de flux γ_c en-dessous duquel les paires de particules en interaction restent localisées ($\gamma < \gamma_c$, 2^{nde} ligne, FIG. 3.9) et au-dessus duquel les particules sont totalement délocalisées ($\gamma > \gamma_c$, 3^{ème} ligne, FIG. 3.9). De plus pour $\gamma > \gamma_c$, la distribution relative $f_d(\mathbf{r})$ est moins piquée autour de $\mathbf{r} = \mathbf{0}$ par rapport au cas $\gamma < \gamma_c$ indiquant une augmentation importante de la taille des paires de particules.

La FIG. 3.10 montre l'inverse ξ du taux de participation en fonction du désordre pour une intensité fixe $U = -2V$ de l'interaction et pour différentes valeurs du flux magnétique γ . Dans la phase délocalisée $W < W_s(U)$, l'ajout d'un champ magnétique accroît ξ pour une intensité du désordre W fixée. Ainsi pour $W < W_s(U)$, le champ magnétique amplifie la délocalisation des particules. Le champ magnétique change également le bord de délocalisation $W_s(\gamma)$. Ainsi, pour $U = -2V$ et $\gamma = 0.1$ on obtient $W_s(\gamma = 0.1) \approx 4V$ alors que sans champ magnétique $W_s(\gamma = 0) \approx 3V$. Si on définit $W_s(\gamma)$ comme étant l'intensité du désordre au-delà de laquelle ξ n'augmente plus avec la taille L du système, nous pouvons approximativement tracer le diagramme de phase (W, γ) montrant W_s en fonction du flux magnétique γ (voir l'encadré de la FIG. 3.10). Deux effets apparaissent clairement :

D'une part, pour un flux γ fixe, l'augmentation de l'intensité $|U|$ de l'interaction permet à la phase BLS de s'étendre vers les désordres W plus faibles pénétrant ainsi

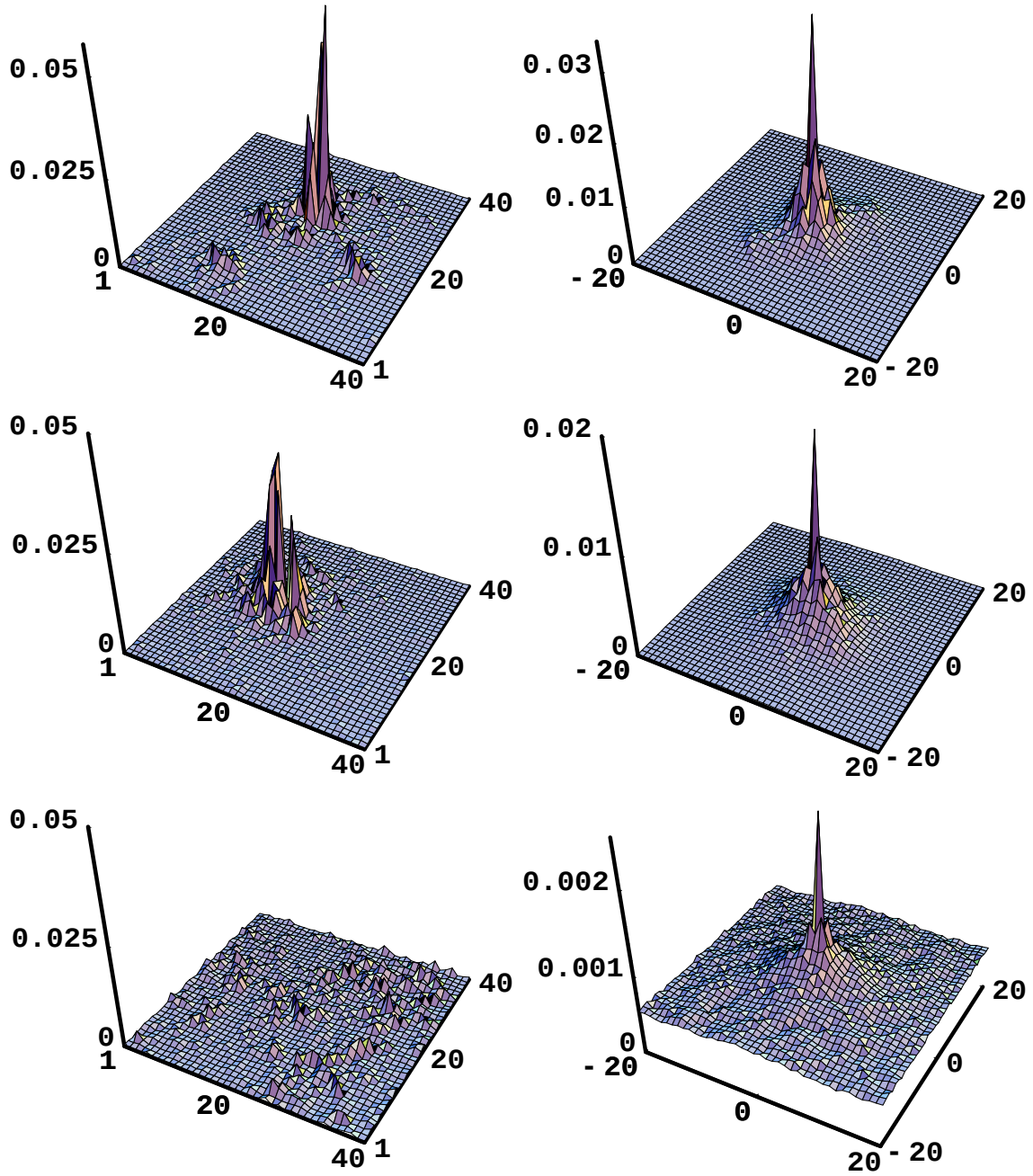


FIG. 3.9 – Distributions de probabilité $f(\mathbf{n})$ et $f_d(\mathbf{r})$ correspondant à l'état fondamental des deux particules en interaction sur un réseau de taille linéaire $L = 40$ avec un désordre de $W = 3V$ et une interaction $U = -2V$. La colonne de gauche montre la distribution de probabilité de présence pour une particule $f(\mathbf{n})$ et celle de droite la distribution de probabilité $f_d(\mathbf{r})$. Les différentes lignes montrent l'état fondamental des deux particules TIP pour différentes valeurs du flux magnétique γ : 1^{ère} ligne $\gamma = 0$, 2^{nde} ligne $\gamma = 2/40$ et 3^{ème} ligne $\gamma = 5/40$.

plus avant dans la phase délocalisée. Ce phénomène est analogue à celui déjà décrit dans le cas sans champ magnétique (section 3.1).

D'autre part, pour une interaction U donnée, W_s augmente avec le flux magnétique γ , ce qui implique que la phase délocalisée s'étend aux désordres plus forts au dépend de la phase BLS. Ainsi, il est possible grâce au champ magnétique $\mathbf{B}$ de délocaliser dans l'état fondamental les paires de particules qui sans champ magnétique sont localisées dans la phase BLS. Ceci est illustré à la FIG. 3.11 où il apparaît que ξ croît fortement avec la taille du réseau lorsque $\gamma > \gamma_c$. Ceci est en accord avec le fait connu [72] que le champ magnétique accroît la longueur de localisation monoparticulaire.

Bien que les résultats montrés aux figures FIG. 3.10 et 3.11 pour les tailles de systèmes considérés (jusqu'à $L = 40$) indiquent une délocalisation induite par le champ magnétique, il est difficile de déterminer numériquement les propriétés de l'état fondamental des particules dans cette phase délocalisée. Dans le cadre de notre méthode, il est difficile de répondre à la question de savoir si la supraconductivité (la structure de paires de Cooper délocalisées) survit ou si le champ magnétique mène le système vers un régime métallique (électrons délocalisés sans appariement par paires).

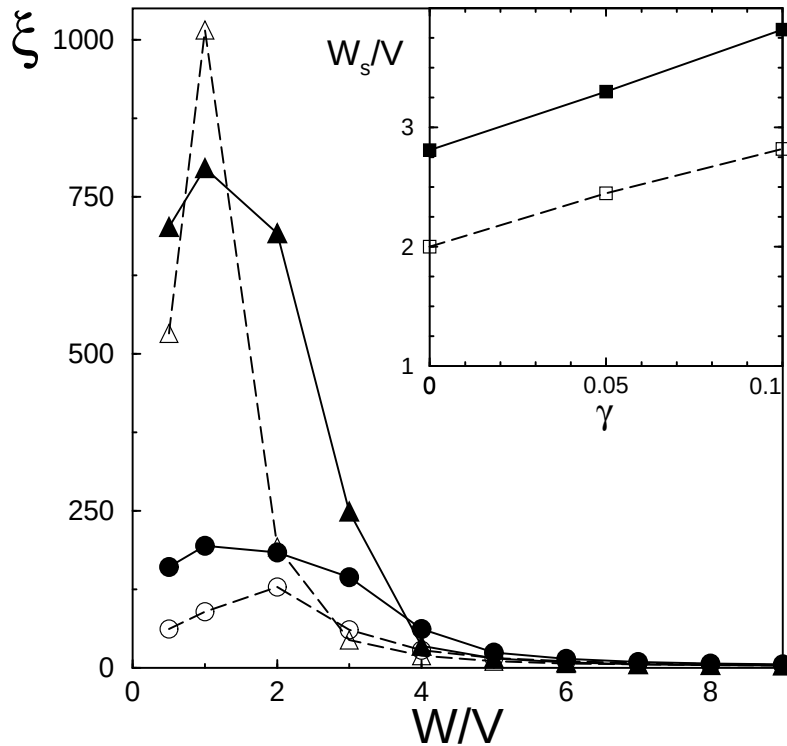


FIG. 3.10 – Dépendance de l'inverse ξ du taux de participation de l'état fondamental vis-à-vis du désordre W et du flux magnétique γ . L'intensité de l'interaction est $U = -2V$. Les symboles vides/pleins correspondent à $\gamma = 0/\gamma = 0.1$ pour différentes tailles du réseau $L = 20$ ($\circ$) et $L = 40$ ($\triangle$). L'encadré montre le diagramme de phase (W_s, γ) ; la ligne pleine correspond à $U = -2V$ et celle en pointillés à $U = -4V$. La phase BLS se trouve alors dans la région $W > W_s$.

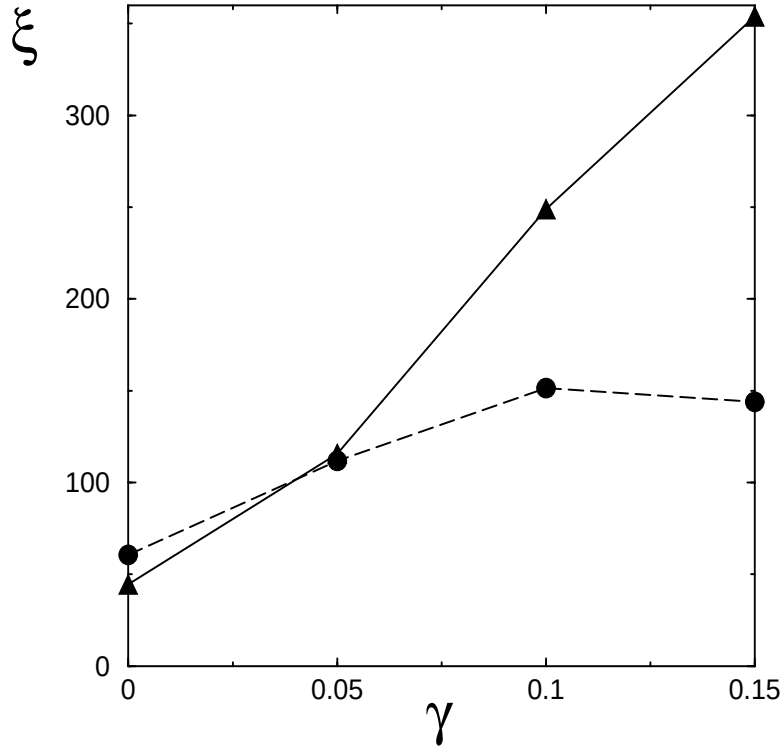


FIG. 3.11 – Dépendance de l'inverse ξ du taux de participation de l'état fondamental vis-à-vis du flux magnétique γ pour deux tailles de réseau $L = 20$ (●) et $L = 40$ (▲). Ici l'intensité de l'interaction est $U = -2V$ et l'intensité du désordre est $W = 3V$.

Il est cependant intéressant de calculer l'énergie de liaison Δ dans l'état fondamental des deux particules en interaction en présence du champs magnétique. Dans le problème de Cooper original (section 1.1), Δ est relié à l'inverse de la taille de la paire de Cooper. La FIG. 3.12 montre la dépendance de l'énergie de liaison Δ de la paire de Cooper vis-à-vis du flux magnétique γ dans le cas ($U = -2V, W = 3V$) déjà présenté à la FIG. 3.11. Dans le régime délocalisé ($\gamma < \gamma_c$), Δ varie faiblement avec l'accroissement de la taille L du système, alors que pour $\gamma > \gamma_c$, Δ diminue de deux à trois fois entre $\gamma \approx 0.05$ et $\gamma \approx 0.15$. Ceci peut être une indication de la suppression de la supraconductivité induite par un champ magnétique de flux $\gamma > \gamma_c$. Il serait toutefois intéressant de pouvoir accéder à des tailles de réseau bien plus grandes que celles accessibles numériquement à ce jour ($L = 40$) pour pouvoir répondre définitivement sur la nature exacte de cette phase délocalisée induite par le champ magnétique.

3.3 Conclusion

Nous venons d'étudier le problème de Cooper généralisé sur un réseau bidimensionnel où le désordre est introduit par le modèle d'Anderson. Nos résultats montrent que près du niveau de Fermi l'interaction attractive de Hubbard entre deux particules crée, dans un régime où les états monoparticulaires noninteractifs sont totalement délocalisés, une

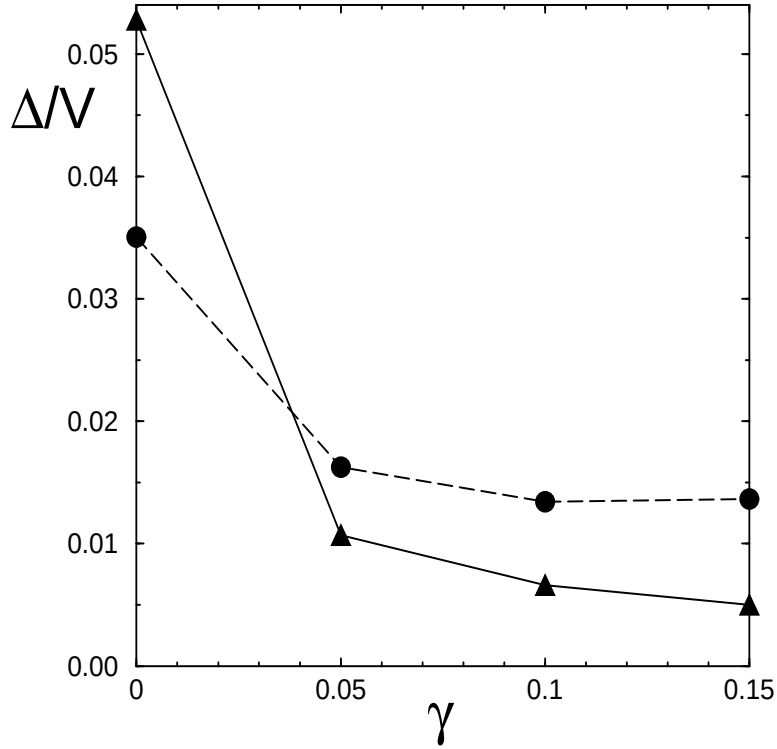


FIG. 3.12 – Énergie de liaison Δ en fonction du flux magnétique γ pour $L = 20$ (●) et $L = 40$ (▲). Les intensités de l'interaction et du désordre sont les mêmes que celles utilisées à la Fig. 3.11 : $U = -2V$ et $W = 3V$.

paire localisée sur le réseau. L'énergie de liaison de paires comme celle-ci est bien plus grande que celle donnée par l'ansatz de Cooper (approximation de champs moyen). Ainsi, d'un point de vue énergétique il est plus favorable d'avoir un isolant constitué de paires de particules localisées plutôt qu'un supraconducteur constitué des usuelles paires de Cooper délocalisées. Il apparaît donc une nouvelle phase bidimensionnelle d'états biparticulaires localisés (phase BLS) dans le régime de désordre où les états monoparticulaires noninteractifs sont étendus (métalliques). Ce résultat est en accord qualitatif avec l'étude Monte Carlo quantique [95]. Cette phase BLS est différente de celle pouvant être obtenue avec les approches de champs moyen, que ce soit avec l'ansatz de Cooper, la solution BCS ou bien la solution BdG. Cette phase BLS peut être néanmoins détruite par l'introduction d'un champ magnétique qui amène le système biparticulaire à se délocaliser ; la phase délocalisée résultante, métallique ou supraconductrice, est difficile à caractériser avec notre modèle.

Chapitre 4

Interaction attractive à longue portée

J. Lages et D. L. Shepelyansky, Eur. Phys. J. B, 21 (2001), 129

4.1	Description du modèle	95
4.2	Couplage fort $U \gg V$: Analogie avec le modèle d'Anderson tridimensionnel	96
4.2.1	Topologie induite par la géométrie de l'interaction	96
4.2.2	Longueur de localisation de l'anneau	96
4.3	Couplage modéré $U \sim V$: Délocalisation à proximité du niveau de Fermi	98
4.3.1	Image de la délocalisation de l'anneau	99
4.3.2	Étude des états liés	102
4.4	Conclusion	104


 'interaction, quelle soit attractive ou même répulsive, peut détruire la localisation monoparticulaire et mener à la délocalisation de paires de particules (section 1.3). Cette propagation cohérente des paires se fait sur une distance l_c bien plus grande que la longueur de localisation monoparticulaire l_1 . Le facteur d'accroissement de la longueur de localisation est alors $\kappa = l_c/l_1 = \Gamma\rho_2$ où ρ_2 est la densité d'états couplés par l'interaction et Γ le taux de transition entre ces états induit par l'interaction. Lorsque $\kappa \sim 1$, les éléments de la matrice de transition deviennent comparables avec l'écart moyen d'énergie entre deux états biparticulaires sans interaction, la localisation d'Anderson commence alors à se détruire. Pour les états excités loin au-dessus du niveau de Fermi, la densité ρ_2 des états biparticulaires est très grande devant celle des états monoparticulaires ρ , la délocalisation peut alors se produire même pour de faibles intensités de l'interaction si la longueur de localisation monoparticulaire est suffisamment grande (section 1.3). Cependant, pour des énergies d'excitation faibles ϵ juste au-dessus du niveau de Fermi, la densité d'états couplés par l'interaction ρ_2 décroît avec ϵ puisque $\rho_2 \simeq \epsilon\rho^2$ (section 1.3.6). Par conséquent, le facteur d'accroissement κ décroît

également avec ϵ ce qui implique que la délocalisation des paires est fortement supprimée à proximité de la mer de Fermi (section 1.3.6).

Dans ce chapitre la délocalisation n'est pas due au fait que la densité d'états ρ_2 couplés par l'interaction est suffisamment grande ($\rho_2 \gg \rho$) mais est due à des effets géométriques liés à la forme de l'interaction adoptée. En effet, nous montrerons avec un modèle d'interaction à longue portée particulier qu'il est possible de délocaliser des paires de particules à proximité du niveau de Fermi, ce qui ouvre de nouvelle possibilité de délocalisation induite par l'interaction dans des régimes où les particules sans interaction sont localisées.

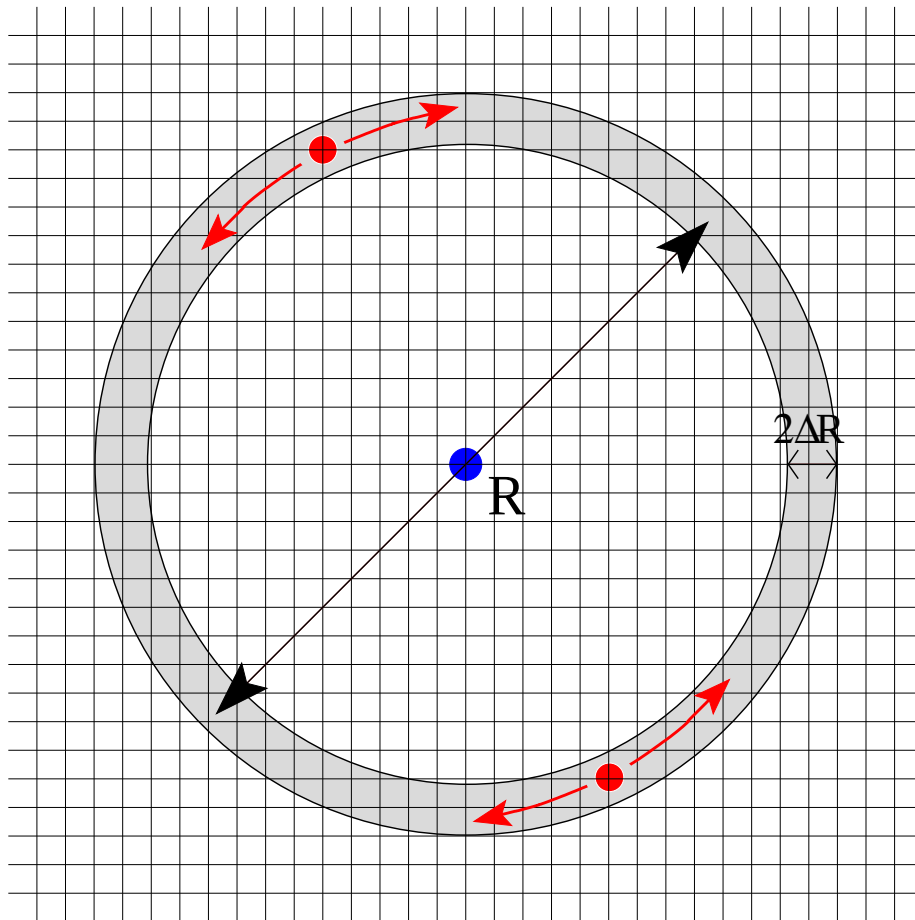


FIG. 4.1 – Schéma représentant les deux particules couplées par l'interaction attractive à longue portée (4.2).

4.1 Description du modèle

Notre modèle comporte une interaction attractive à longue portée entre deux particules évoluant sur un réseau bidimensionnel désordonné. L'équation de Schrödinger décrivant ce modèle est alors

$$\begin{aligned}
 & (\epsilon_{\mathbf{n}_1} + \epsilon_{\mathbf{n}_2} + \mathcal{U}(\mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_2)) \chi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2}^\lambda + \\
 & V \left(\chi_{\mathbf{n}_1 + \mathbf{e}_x, \mathbf{n}_2}^\lambda + \chi_{\mathbf{n}_1 - \mathbf{e}_x, \mathbf{n}_2}^\lambda + \chi_{\mathbf{n}_1 + \mathbf{e}_y, \mathbf{n}_2}^\lambda + \chi_{\mathbf{n}_1 - \mathbf{e}_y, \mathbf{n}_2}^\lambda + \right. \\
 & \left. \chi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2 + \mathbf{e}_x}^\lambda + \chi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2 - \mathbf{e}_x}^\lambda + \chi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2 + \mathbf{e}_y}^\lambda + \chi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2 - \mathbf{e}_y}^\lambda \right) = E^\lambda \chi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2}^\lambda. \quad (4.1)
 \end{aligned}$$

Ici, $\mathbf{n}_1$ ($\mathbf{n}_2$) sont les vecteurs de position des deux particules sur le réseau bidimensionnel comportant L^2 sites et des conditions aux bords périodiques. V est l'amplitude de saut entre sites adjacents et $\epsilon_{\mathbf{n}_1}$ ($\epsilon_{\mathbf{n}_2}$) sont les énergies aléatoires du modèle d'Anderson distribuées de façon homogène dans l'intervalle $[-W/2, W/2]$. Les vecteurs $|\chi^\lambda\rangle = \sum_{\mathbf{n}_1 > \mathbf{n}_2} \chi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2}^\lambda |\mathbf{n}_1 \mathbf{n}_2\rangle^a$ et les énergies E^λ déterminent le $\lambda^{\text{ième}}$ état propre de l'équation de Schrödinger (4.1). L'interaction à longue portée ne dépend que de la distance^b $r = \|\mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_2\|$ entre les deux particules sur le réseau périodique

$$\mathcal{U}(r) = \begin{cases} U < 0 & \text{si } |r - R| \leq \Delta R \\ 0 & \text{sinon} \end{cases}. \quad (4.2)$$

Les deux particules ne sont alors couplées que si elles se situent à une distance $R \pm \Delta R$ l'une de l'autre. Ainsi, l'interaction entre particules n'est présente que sur un anneau de diamètre R et de largeur ΔR (voir FIG. 4.1). Nous supposons dans notre étude que $R \gg \Delta R > 1$. Sans interaction, $U = 0$, les états propres de (4.1) sont donnés par le produit tensoriel de deux états monoparticulaires du modèle d'Anderson. En présence du désordre, ces états sont en dimension deux toujours localisés pour $L \rightarrow \infty$ (section 1.2.2). En fait, pour les systèmes bidimensionnels de taille finie que nous utiliserons (jusque $L = 40$) ceci n'est pas vrai pour toutes les intensités W du désordre. Pour observer la délocalisation induite réellement par l'interaction (4.2), nous nous placerons donc dans un régime de désordre $W \gtrsim 6V$ où les états du modèle d'Anderson bidimensionnel pour les tailles considérées ici ($L = 20 \rightarrow 40$) sont effectivement bien localisés.

^aLa relation d'ordre “ $>$ ” entre $\mathbf{n}_1$ et $\mathbf{n}_2$ dans l'expression de $|\chi^\lambda\rangle$ indique symboliquement que les états biparticulaires sont symétrisés vis-à-vis de l'échange des deux particules entre elles. Seuls les états symétriques sont sensibles à l'interaction adoptée.

^bLes conditions périodiques imposées aux bords impliquent l'existence de plusieurs distances effectives entre deux points quelconques du réseau. Nous choisirons toujours la plus courte à savoir :

$$r = \sqrt{\min \left\{ (n_{1x} - n_{2x})^2, (n_{1x} + L - n_{2x})^2 \right\} + \min \left\{ (n_{1y} - n_{2y})^2, (n_{1y} + L - n_{2y})^2 \right\}}.$$

4.2 Couplage fort $|U| \gg V$: Analogie avec le modèle d'Anderson tridimensionnel

4.2.1 Topologie induite par la géométrie de l'interaction

Dans cette limite où l'intensité $|U|$ de l'interaction attractive est grande devant l'amplitude de saut V et devant l'intensité W du désordre, les états biparticulaires induits par l'interaction forment une bande d'énergie de largeur $\delta E \simeq 16V$ autour de $E \simeq -|U|$ (FIG. 4.2). Les états de cette bande sont tels que les deux particules évoluent exclusivement^a à l'intérieur d'un anneau dont le centre, confondu avec le centre de masse des deux particules, peut se mouvoir sur le réseau bidimensionnel (FIG. 4.1). L'interaction (4.2) implique que les deux particules doivent être placées en vis-à-vis sur l'anneau d'interaction. Le seul mouvement permis par l'interaction d'intensité $|U| \gg V$ est la rotation conjointe des deux particules autour de leur centre de masse (FIG. 4.1) puisque ce mouvement conserve leur énergie. Les degrés de liberté effectifs du système composé des deux particules soumises à l'interaction (4.2) pour $|U| \gg V$ sont au nombre de trois : un degré de liberté pour la rotation conjointe des deux particules sur l'anneau et deux degrés de liberté pour le mouvement de leur centre de masse sur le réseau. Nous pouvons par conséquent assimiler les

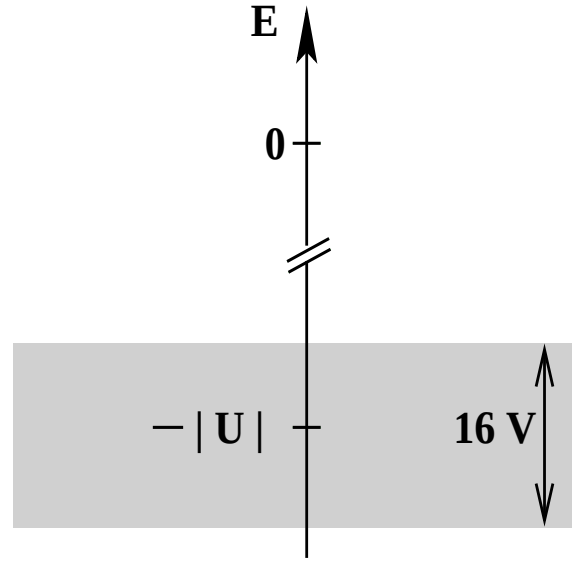


Fig. 4.2: Bande d'états créés par l'interaction $|U| \gg V$

deux particules régies par l'équation de Schrödinger (4.1) pour $|U| \gg V$ à une pseudoparticule évoluant dans un réseau tridimensionnel régi par le modèle d'Anderson. Ce réseau effectif est constitué de plans bidimensionnels analogue à celui sur lequel le centre de masse de l'anneau évolue. Le nombre de sites à l'intérieur de l'anneau, $M_R \approx 2\pi R \Delta R$ détermine alors le nombre de ces plans bidimensionnels placés les uns au-dessus des autres le long de la troisième dimension. Cette troisième dimension effective est due à la rotation conjointe des deux particules le long de l'anneau. Le réseau tridimensionnel effectif possède ainsi les dimensions $L_x = L_y = L$ et $L_z = M_R$ (FIG. 4.3).

4.2.2 Longueur de localisation de l'anneau

Dans ce modèle tridimensionnel qui régit la pseudoparticule, l'intensité du désordre est approximativement $2W$ puisque le terme diagonal du modèle d'Anderson pour la pseudoparticule est à présent la somme des deux énergies ϵ_{n_1} et ϵ_{n_2} de l'équation de Schrödinger (4.1). Si on suppose $\Delta R \gg 1$, un site est couplé sur l'anneau avec $Z^\odot = 8$ autres sites alors que pour un modèle monoparticulaire tridimensionnel, un site est couplé à $Z^{3D} = 6$ autres sites. Pour les états au milieu du spectre du modèle d'Anderson à trois dimensions, la transition métal-isolant apparaît pour un désordre $W_c^{3D} \simeq 16.5V = 2.75Z^{3D}V$

^aEn effet, le coût énergétique pour sortir de l'anneau est prohibitif puisque $|U| \gg V$.

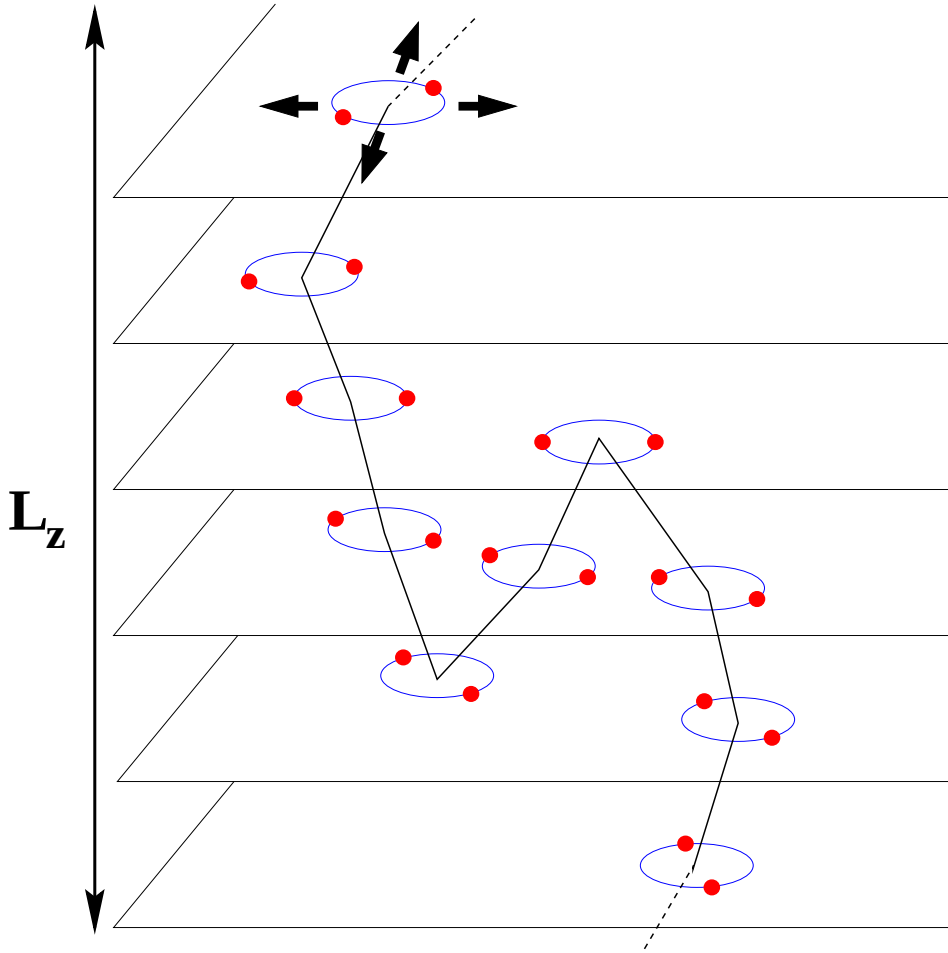


FIG. 4.3 – Schéma du mouvement lié des deux particules (anneau) sur le réseau quasi-bidimensionnel effectif de dimension $L_x = L_y = L$ et $L_z = M_R$. L'anneau peut diffuser sur les différents plans, et chaque plan correspond à une position différente des particules sur l'anneau.

(section 1.2.3). Ainsi, en faisant l'analogie entre les deux particules sur l'anneau et la pseudoparticule correspondante évoluant dans le modèle d'Anderson tridimensionnel, nous pouvons écrire

$$\frac{2W_c^\odot}{Z^\odot V} = \frac{W_c^{3D}}{Z^{3D} V} \simeq 2.75 \quad (4.3)$$

ce qui nous donne une estimation $W_c^\odot \approx 11V$ de l'intensité critique du désordre en-dessous de laquelle des états délocalisés peuvent apparaître au milieu du spectre du modèle étudié (4.1). En dessous de $W = W_c^\odot$, les éléments de la matrice de transition induits par l'interaction deviennent comparables avec l'espacement moyen des niveaux d'énergie des états biparticulaires sans interaction, ces derniers sont alors fortement mélangés par l'interaction. Cela mène à une augmentation conséquente de la longueur de localisation des deux particules lorsque $W < W_c^\odot$. En nous référant à la théorie d'échelle de la localisation (section 1.2.2), il nous est possible d'estimer la longueur de localisation l_c des deux particules. Cette dernière croît alors exponentiellement à

proximité de $W = W_c^\odot$, passant de $l_c \sim 1$ pour $W > W_c^\odot$ à $l_c \sim \exp(g)$ pour $W < W_c^\odot$. La conductance g (section 1.3.4) est donnée par le rapport entre l'énergie de Thouless

$$E_T = \frac{D}{L^2} \sim \frac{V}{L^2} \left(\frac{V}{W} \right)^2 \quad (4.4)$$

et l'écart moyen entre les niveaux d'énergie à l'intérieur du réseau quasi-bidimensionnel

$$\Delta_1 \sim \frac{V}{L^2 L_z}. \quad (4.5)$$

Ainsi dans le régime de désordre $W < W_c^\odot$, la longueur de localisation des deux particules peut être estimée à

$$l_c \sim \exp \left(2\pi R \Delta R \left(\frac{W_c^\odot}{W} \right)^2 \right). \quad (4.6)$$

Nous avons fait, ici, l'hypothèse suivante, $l_1 > \Delta R > 1$. En effet, si $\Delta R \gg 1$, les états résultant de l'interaction (4.2) avec $|U| \gg V$ sont de simples produits de deux états monoparticulaires localisés. Toujours par analogie avec le modèle tridimensionnel d'Anderson, on s'attend à ce qu'au milieu de la bande il existe des états délocalisés où les deux particules se meuvent sur un anneau dont le centre diffuse à travers tout le réseau bidimensionnel. Comme pour le modèle d'Anderson tridimensionnel, lorsque W décroît la barrière de mobilité doit approcher le bas du spectre d'énergie.

4.3 Couplage modéré $U \sim V$: Délocalisation à proximité du niveau de Fermi

Le cas présenté dans la section précédente, $|U| \gg V$ est une limite du modèle (4.1) que nous cherchons à étudier. En dehors de cette limite, c'est-à-dire pour $U \sim V$, la question est de savoir si l'interaction permet aussi de créer des états biparticulaires délocalisés similaires à ceux décrits pour le cas $|U| \gg V$. Nous étudierons particulièrement cette délocalisation des particules à proximité du niveau de Fermi.

Pour résoudre l'équation de Schrödinger (4.1), nous utilisons la même procédure que celle employée pour le problème de Cooper généralisé (CHAP. 2 et 3) : Nous réécrivons l'équation de Schrödinger (4.1) dans la base d'états symétrisés $\{|\alpha\beta\rangle\}_{\alpha>\beta}$ (2.2) construite à l'aide des fonctions d'onde des états monoparticulaires noninteractifs $\{E_\alpha, |\phi_\alpha\rangle\}$ du modèle d'Anderson bidimensionnel. L'équation de Schrödinger (4.1) devient alors

$$(E_\alpha + E_\beta)\chi_{\alpha\beta}^\lambda + U \sum_{\gamma\delta} Q_{\alpha\beta\gamma\delta} \chi_{\gamma\delta}^\lambda = E^\lambda \chi_{\alpha\beta}^\lambda. \quad (4.7)$$

Les éléments de matrice $UQ_{\alpha\beta\gamma\delta}$ correspondent à la réécriture de l'interaction à longue portée (4.2) dans la base symétrisée $\{|\alpha\beta\rangle\}_{\alpha>\beta}$ des états biparticulaires sans interaction. Comme cela a été fait pour le problème de Cooper généralisé (CHAP. 2 et 3), nous imposons à l'équation de Schrödinger (4.7) la restriction suivante

$$2 \leq \gamma + \delta \leq M. \quad (4.8)$$

La borne inférieure de l'inégalité (4.8) impose que les états monoparticulaires accessibles aux particules se situent au-dessus du niveau de Fermi ($\alpha_F = 1$). Nous plaçons ici notre étude au demi-remplissage, $\nu = 1/2$, où $E_{\alpha_F} \approx 0$. La borne supérieure indique une coupure à haute énergie des états monoparticulaires accessibles. L'interaction à longue portée couple par conséquent les niveaux biparticulaires sans interaction se situant dans une fenêtre énergétique de largeur $\omega_D \propto M/L^2$. Nous fixons tout au long de ce chapitre le paramètre $\alpha = L^2/M \approx 15$ de manière à garder la fréquence de Debye indépendante de la taille L du système^a.

4.3.1 Image de la délocalisation de l'anneau

Après résolution de l'équation de Schrödinger (4.7), nous réécrivons les états propres $\{|\chi^\lambda\rangle\}$ dans la base du réseau $\{|\mathbf{n}\rangle\}$ afin de pouvoir extraire pour un état propre λ donné la distribution de la probabilité de présence d'une particule sur le réseau

$$f^\lambda(\mathbf{n}_1) = \sum_{\mathbf{n}_2} |\chi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2}^\lambda|^2 \quad (4.9)$$

et la distribution de la probabilité

$$f_d^\lambda(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}_2} |\chi_{\mathbf{n}_2 + \mathbf{r}, \mathbf{n}_2}^\lambda|^2 \quad (4.10)$$

où $\mathbf{r} = \mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_2$. $f_d^\lambda(\mathbf{r})$ mesure la probabilité que les deux particules soit *séparées* d'un vecteur $\mathbf{r}$ l'une par rapport à l'autre. La FIG. 4.4 montre des exemples des distributions de probabilité $f^\lambda(\mathbf{n}_1)$ et $f_d^\lambda(\mathbf{r})$ pour différentes énergies de liaison $\Delta E^\lambda = E^\lambda - 2E_F$ entre les deux particules dans l'état λ . L'état fondamental sera ainsi repéré par $\Delta E^0 = -\Delta$. En présence de l'interaction à longue portée (4.2), les deux particules dans l'état fondamental $\lambda = 0$ du modèle (4.7) sont localisées (FIG. 4.4b). Les deux particules se trouvent alors à une distance approximative R l'une de l'autre (FIG. 4.4e). Il existe cependant des états excités $\lambda > 0$ avec $-\Delta < \Delta E < 0$ qui sont délocalisés grâce à l'interaction attractive à longue portée (FIG. 4.4c). Les deux paires dans ces états délocalisés peuvent alors se mouvoir à l'intérieur d'un anneau de diamètre approximatif R (FIG. 4.4f). Ceci est en accord total avec la discussion du cas $|U| \gg V$ (section 4.2). Ainsi, l'image de la distribution de probabilité $f(\mathbf{n}_1)$ (FIG. 4.4c) dépeint la délocalisation du centre de masse de l'anneau et l'image de la distribution de probabilité $f_d(\mathbf{r})$ (FIG. 4.4f) dépeint la rotation des deux particules autour du centre de masse de l'anneau. Il est à remarquer que cette délocalisation est obtenue dans un régime de désordre pour lequel les états monoparticulaires sont tous localisés (FIG. 4.4a). Cette délocalisation induite par l'interaction attractive à longue portée disparaît néanmoins lorsque l'intensité du désordre est suffisamment élevée (FIG. 4.4d).

^aLes résultats présentés ne sont pas affectés par le doublement de α par exemple.

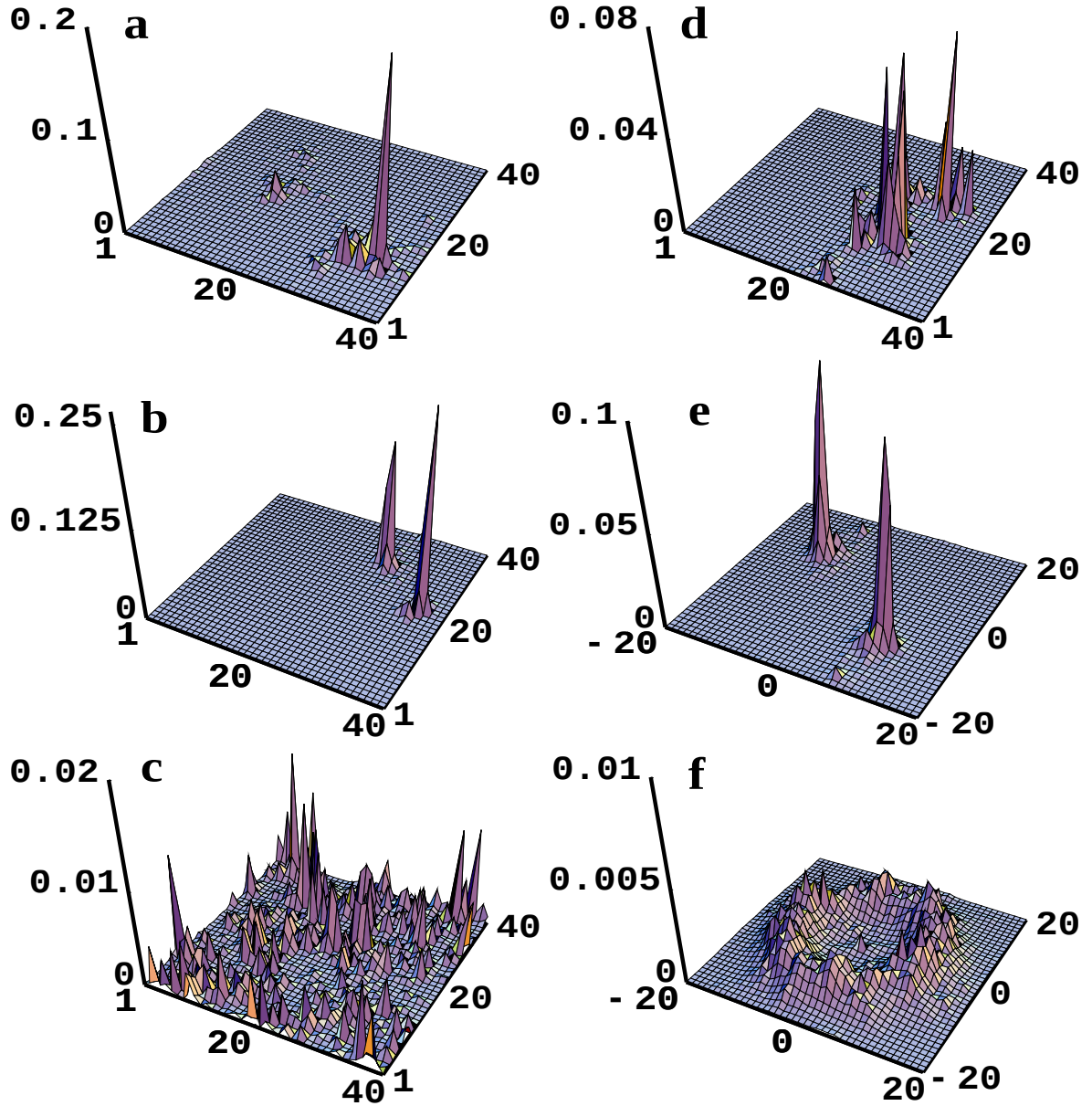


FIG. 4.4 – Distributions des probabilités $f^\lambda(\mathbf{n}_1)$ et $f_d^\lambda(\mathbf{r})$ pour les états $|\chi^\lambda\rangle$ du modèle (4.7) pour un réseau de taille linéaire $L = 40$, un rayon d'interaction $R = 12$ et une largeur $\Delta R = 1$. La colonne de gauche correspond à la probabilité de présence f^λ d'une particule pour $W = 8V$: (a) dans l'état fondamental sans interaction ($U = 0$) ; (b) dans l'état fondamental avec énergie de liaison $\Delta E = -1.05V$ pour $U = -2V$; (c) état couplé avec $\Delta E = -0.19V$ pour $U = -2V$. La colonne de droite présente : (d) f^λ pour un état couplé d'énergie de liaison $\Delta E \approx -0.19V$ comparable à celle du cas (c) pour $W = 12V$ et $U = -2V$; (e) probabilité f_d associée au cas (b) ; (f) f_d associée au cas (c).

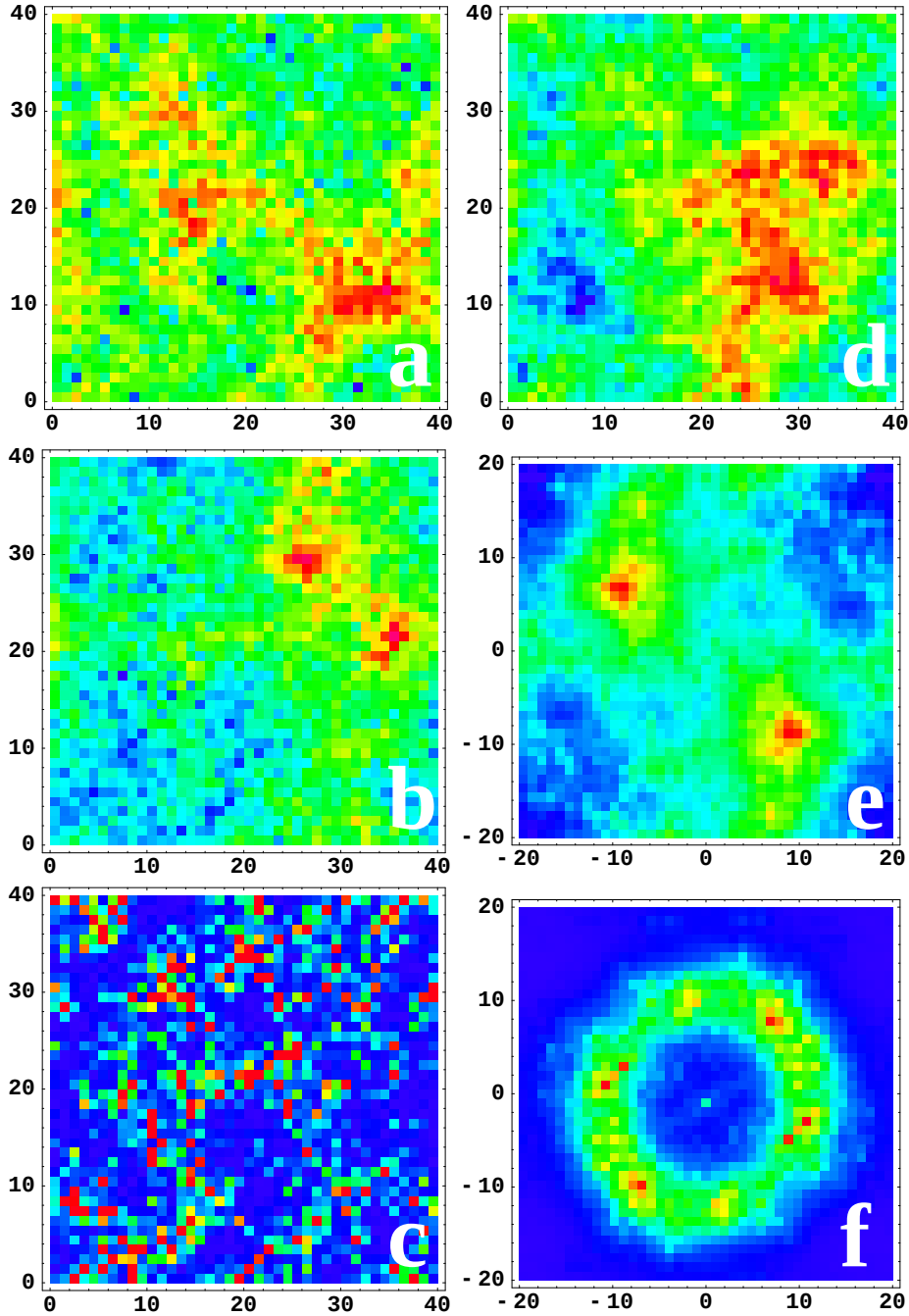


FIG. 4.5 – Distributions des probabilités $f^\lambda(\mathbf{n}_1)$ et $f_d^\lambda(\mathbf{r})$ de la FIG. 4.4 représentées sous forme de densités de probabilité sur le réseau. L'ordre des figures est respecté. La couleur bleue foncée correspond à un minimum de la distribution de probabilité et la couleur rouge à un maximum. Les intensités des figures (a,b,d,e) sont données en échelle logarithmique tandis que les intensités sur les figures (c,f) sont données en échelle linéaire. La couleur bleue foncée/rouge correspond à : (a) $f = 1.3 \times 10^{-10}/f = 0.2$, (b) $f = 1.1 \times 10^{-9}/f = 0.26$, (c) $f = 1.5 \times 10^{-6}/f = 0.014$, (d) $f = 1.14 \times 10^{-11}/f = 0.073$, (e) $f_d = 3.8 \times 10^{-7}/f_d = 0.1$, (f) $f_d = 1.5 \times 10^{-5}/f_d = 0.0032$.

4.3.2 Étude des états liés $\Delta E < 0$

Seuls les états biparticulaires liés, c'est-à-dire avec $\Delta E^\lambda < 0$, nous intéressent. Ces états forment des paires de taille R qui se trouvent être soit localisées (FIG. 4.4b et e) soit délocalisées (FIG. 4.4c et f). L'énergie de couplage de la paire formée dans l'état $|\chi^\lambda\rangle$ est alors $-\Delta E^\lambda$; cette énergie peut s'apparenter à l'énergie nécessaire pour briser la structure de paire.

Ainsi pour étudier les propriétés des états dont l'énergie de liaison est $\Delta E < 0$, nous calculons l'inverse $\xi(E)$ du taux de participation défini par

$$\xi(E^\lambda) = \left\langle \sum_{\mathbf{n}} [f^\lambda(\mathbf{n})]^2 \right\rangle^{-1}. \quad (4.11)$$

$\xi(E^\lambda)$ compte ici le nombre de sites du réseau occupés par une particule dans l'état $|\chi^\lambda\rangle$ dont l'énergie de liaison est $\Delta E^\lambda < 0$. La FIG. 4.6 montre $\xi(E)$ en fonction de ΔE pour

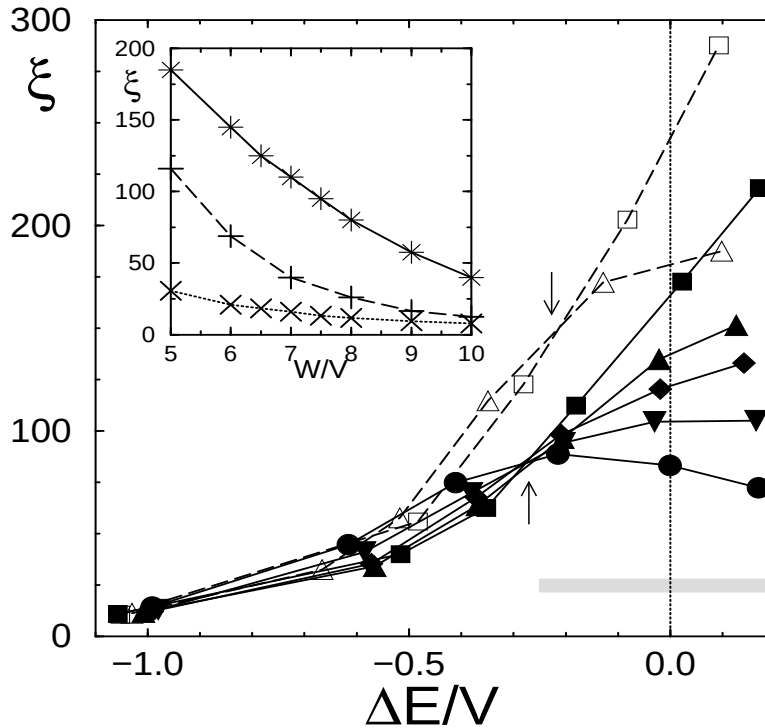


FIG. 4.6 – Dépendance de l'inverse ξ du taux de participation vis-à-vis de l'énergie de liaison ΔE pour $U = -2V, W = 8V$ et $\Delta R = 1$: $L = 20$ ($\circ$), $L = 22$ (∇), $L = 26$ ($\diamond$), $L = 30$ ($\triangle$) et $L = 40$ ($\square$) ; les symboles pleins (vides) sont pour $R = 8$ ($R = 12$) ; la zone grisée horizontale montre les variations de $\xi(E)$ avec $E = E_F$ et $U = 0$ pour $20 \leq L \leq 40$. La transition vers la délocalisation s'opère à ΔE_c qui est indiquée par les flèches. La figure encadrée montre la dépendance de ξ vis-à-vis du désordre W pour $R = 8$: ($\times$) $U = -2V, L = 30$; (+) sans interaction $U = 0$ et $L = 30$; (*) états dont l'énergie de liaison est ΔE_c pour $U = -2V$.

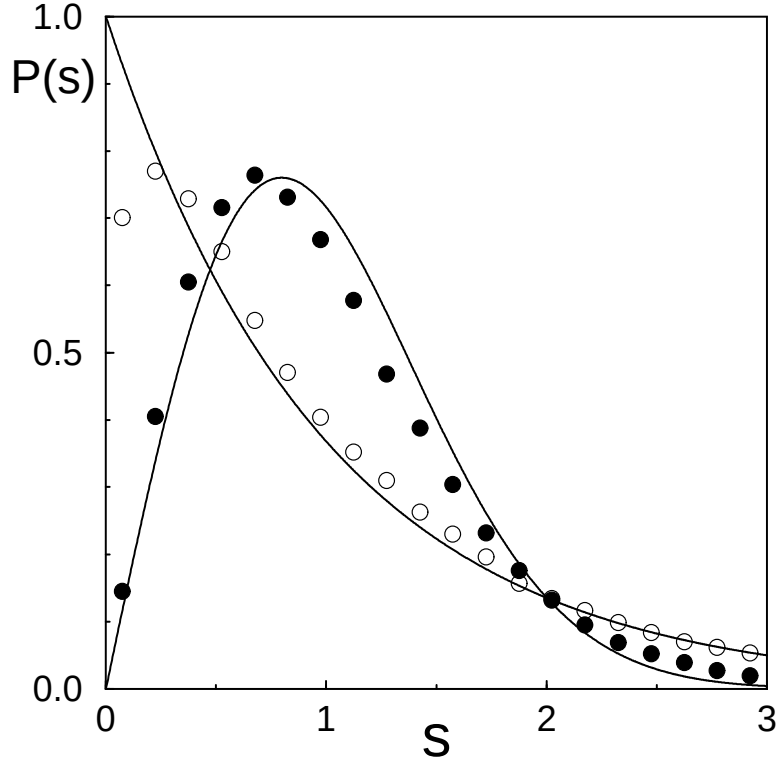


FIG. 4.7 – Distribution $P(s)$ des écarts de niveaux d'énergie adjacents pour les états couplés par l'interaction avec $L = 30$, $U = -2V$, $W = 8V$, $R = 8$ et $\Delta R = 1$: (o) dans la phase localisée près de l'état fondamental à l'intérieur de l'intervalle d'énergie $-\Delta < \Delta E < -3\Delta/4$ et (•) dans la phase délocalisée pour les états à l'intérieur de l'intervalle d'énergie $-\Delta/4 < \Delta E < 0$. Ici $\Delta E_c \approx -0.3\Delta$. Environ 3000 réalisations du désordre ont été utilisées, donnant un nombre total de niveaux d'énergie 3×10^4 (o) [7.5×10^4 (•)] qui ont permis de construire les distributions $P(s)$.

différentes tailles linéaires L du réseau et pour différentes intensités du désordre W . Il apparaît que près de l'état fondamental, l'interaction crée des états qui sont localisés sur de plus petits domaines que ceux sans interaction. Ceci est visible dans l'encadré de la FIG. 4.6 qui indique que l'inverse ξ du taux de participation est bien plus faible pour l'état fondamental avec interaction que sans interaction ($U=0$). Ainsi, près de l'état fondamental, la localisation est amplifiée par l'interaction attractive à longue portée (4.2). En fait, pour $-\Delta < \Delta E < \Delta E_c < 0$, $\xi(E)$ décroît même avec l'augmentation de la taille L du réseau indiquant que les états à l'intérieur de cet intervalle d'énergie sont localisés. Cependant, lorsque l'énergie de liaison ΔE est telle que $\Delta E_c < \Delta E < 0$, la situation s'inverse, ξ croît de manière significative avec l'augmentation de la taille du réseau tandis que la variation de ξ pour $U = 0$ reste négligeable lorsque L varie dans les mêmes proportions (voir zone grisée horizontale sur la FIG. 4.6). L'énergie de liaison critique ΔE_c peut alors être définie comme le seuil d'énergie où $\xi(E)$ est indépendant de la taille L du système (voir flèches sur la FIG. 4.6). L'énergie ΔE_c détermine alors le seuil de mobilité pour les états créés par l'interaction attractive à longue portée (4.2) ;

ainsi pour des intensités fixes U et W de l'attraction et du désordre, les états propres du système sont localisés pour $-\Delta < \Delta E < \Delta E_c$ et sont délocalisés pour $\Delta E_c < \Delta E < 0$ (des exemples de tels états sont montrés à la FIG. 4.4). Nous constatons (FIG. 4.6) que pour $L = 40$, ξ est multiplié par 30 lorsque ΔE varie de $-\Delta$ à 0. Cette variation s'accroît avec l'augmentation de la taille L du réseau et du rayon d'interaction R . Ceci s'explique par le fait que lorsque L et R augmentent, le système étudié se rapproche de plus en plus du modèle d'Anderson tridimensionnel (section 1.2.3).

Dans les deux régions de part et d'autre de $\Delta E = \Delta E_c$, les états propres possèdent radicalement des structures différentes (FIG. 4.4). Le passage d'une région à l'autre, implique également un changement dans la distribution des écarts de niveau $P(s)$ (voir FIG. 4.7). Ainsi, près de l'état fondamental, la distribution $P(s)$ est proche de la distribution Poissonienne $P_P(s) = \exp(-s)$ qui caractérise typiquement la phase localisée d'Anderson (section 1.2.3). Par contre pour $\Delta E_c < \Delta E < 0$, $P(s)$ s'approche de la distribution de Wigner $P_W(s) = (\pi s/2) \exp(-\pi s^2/4)$ qui caractérise d'ordinaire une phase délocalisée (section 1.2.3). L'étude de la distribution des écarts entre les niveaux d'énergie créés par l'interaction corrobore l'image de la transition déjà constatée avec l'inverse ξ du taux de participation (FIG. 4.6) et avec les distributions de probabilités $f(\mathbf{n}_1)$ et $f_d(\mathbf{r})$ (FIG. 4.4).

Intéressons nous à présent au bord de délocalisation ΔE_c pour les états couplés $|\chi^\lambda\rangle$ par l'interaction attractive à longue portée. La FIG. 4.8 montre l'évolution de ΔE_c et de $\Delta E^0 = -\Delta$ en fonction de l'intensité du désordre W et de l'interaction U . Avec l'augmentation de W et de U , l'énergie de liaison de l'état fondamental croît, contrairement au bord de délocalisation $\Delta E_c < 0$ qui disparaît^a pour un désordre W suffisamment fort. D'après la FIG. 4.8, tout les états possédant une énergie de liaison $\Delta E < 0$ sont localisés pour $W > W_c^\circ \approx 9.5V$ pour $U = -2V$ et $W > W_c^\circ \approx 8V$ pour $U = -V$. Au-dessus d'une intensité du désordre W_c° il n'existe plus aucun état lié $\Delta E < 0$ qui soit délocalisé. L'augmentation de l'intensité de l'interaction accroît par conséquent la plage de désordre à l'intérieur de laquelle il existe des états liés délocalisés. L'interaction (4.2) induit ici la délocalisation des particules. Nous remarquons que les valeurs de W_c° obtenues pour $U = -V$ et $U = -2V$ sont proches de la valeur $W_c^\circ \approx 11V$ obtenue dans la limite $|U| \gg V, W$. Cela nous indique que la physique de la délocalisation pour le cas d'une interaction modérée $U \sim V$ est similaire à celle pour le cas d'une interaction forte (section 4.2). Finalement, lorsque le désordre est faible, ΔE_c se rapproche de la valeur de l'énergie de liaison de l'état fondamental. Ceci indique qu'à faible désordre la délocalisation a lieu dès les premiers états excités.

4.4 Conclusion

Nous avons montré qu'une interaction attractive à longue portée entre deux particules mène à l'apparition d'états diffusifs délocalisés à proximité du niveau de Fermi dans un système qui sans interaction ne comporte que des états localisés.

L'analogie entre un modèle biparticulaire bidimensionnel et le modèle monoparticulaire d'Anderson tridimensionnel a été aussi étudiée pour le cas d'une interaction

^a“disparaît” veut dire que l'énergie $\Delta E_c = E_c - 2E_F$ devient positive, elle ne correspond plus alors à une énergie de liaison.

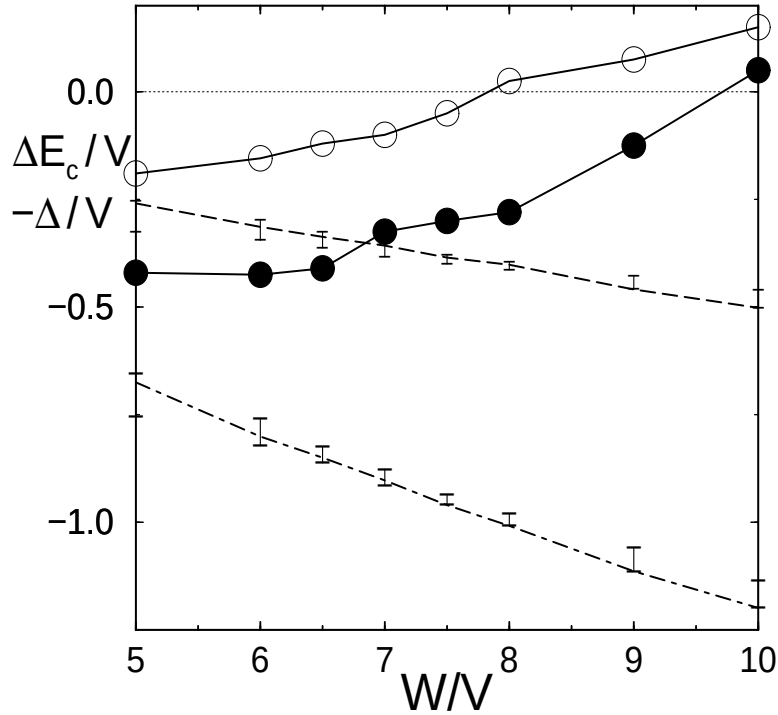


FIG. 4.8 – Dépendance du bord de délocalisation ΔE_c et de l'énergie de liaison de l'état fondamental $-\Delta$ vis-à-vis de l'intensité du désordre W . Les valeurs de ΔE_c sont indiquées respectivement par les symboles (○) et (●) pour $U = -V$ et $U = -2V$. L'énergie de liaison de l'état fondamental $-\Delta$ est donnée par les lignes en pointillés pour $U = -V$ (ligne pointillée supérieure) et pour $U = -2V$ (ligne pointillée inférieure). La taille du système est $L = 30$. Les traits verticaux donne la variation de $-\Delta$ pour une variation de la taille du réseau $20 \leq L \leq 30$.

Coulombienne [89]. Dans cette étude [89], seuls les états excités ont été étudiés et la délocalisation fut attribuée au rapport élevé ρ_2/ρ entre la densité d'états biparticulaires noninteractifs couplés par l'interaction et la densité d'états monoparticulaire. Ici dans notre modèle, la condition $\rho_2/\rho \gg 1$ n'apparaît pas comme nécessaire, ce sont principalement les effets induits par la géométrie de l'interaction qui occasionnent la délocalisation des paires de particules.

Il serait intéressant de comprendre quels seraient les effets d'une telle délocalisation pour des systèmes comportant un grand nombre de particules avec une interaction à longue portée attractive. Il est possible que le modèle que nous venons d'étudier soit aussi pertinent pour le cas d'électrons soumis à la répulsion Coulombienne. En effet, dans cette situation pour un faible désordre, chaque électron oscille autour de sa position d'équilibre et l'interaction à deux corps peut alors être considérée comme une attraction harmonique effective [26].

Notre modèle peut aussi correspondre au cas d'une attraction Coulombienne à longue portée entre des excitations électron-trou dans un semi-conducteur. Dans un fort champs magnétique, les électrons/trous évoluent sur des trajectoires circulaires de rayon égale au rayon cyclotron. Ces "cercles" ainsi formés évoluent alors lentement le long d'un cercle

plus grand formé par une ligne équipotentielle d'interaction Coulombienne. Ainsi sans désordre, un tel système correspond assez fidèlement à notre modèle d'anneau dont la largeur serait le diamètre cyclotron. En présence de désordre, le déplacement de l'anneau peut être localisé par les effets quantiques ou délocalisé pour un désordre en-dessous de l'intensité critique de localisation.

Chapitre 5

Extension du problème de Cooper généralisé au cas de plusieurs corps ($N > 2$)

*J. Lages, G. Benenti et D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. B, **63** (2001), 214516*

5.1	Description du modèle à N-corps	108
5.2	Étude du gap d'appariement	111
5.3	Localisation des paires	114
5.3.1	Occupation spatiale du réseau	114
5.3.2	Suppression du paramètre d'ordre supraconducteur	115
5.3.3	Phase BLS	118
5.4	Conclusion	120

ans ce chapitre, nous allons étudier les propriétés des paires de Cooper sur un réseau désordonné bidimensionnel. Nous considérons ici N fermions chacun de spin $1/2$ évoluant sur un réseau bidimensionnel d'Anderson et couplés entre eux par l'interaction attractive de Hubbard. Comme pour le problème de Cooper généralisé ($N = 2$), nous considérerons que ces N fermions peuvent interagir entre eux au-dessus d'une mer de Fermi composée d'un ensemble de fermions "gelés". Nous étudierons plus particulièrement l'état fondamental d'un tel modèle qui constitue, pour le cas d'une densité finie de particules ($2 \leq N < \infty$), une extension du problème de Cooper généralisé (voir CHAP. 2 et 3).

L'étude de ce modèle présente de multiples intérêts :

- L'extension du problème de Cooper généralisé permet d'étudier la phase BLS pour un nombre $N \geq 2$ de particules. En effet, à proximité de la mer de Fermi, dans une fenêtre énergétique petite en comparaison avec l'énergie de Fermi, les paires de quasiparticules sont très éloignées les unes des autres. L'approximation la plus brutale serait de considérer l'ensemble des N quasiparticules comme $N/2$ paires régies indépendamment les unes des autres par le modèle TIP (2.3) du

problème de Cooper généralisé (voir CHAP. 2 et 3). Ici, dans le modèle que nous allons décrire, les N quasiparticules interagissent toutes entre elles, les paires de quasiparticules ne sont pas indépendantes les unes des autres. Nous verrons que l'interaction résiduelle existante entre les paires n'affecte pas la phase BLS qui s'avère être alors un nouvel état des systèmes à N -corps ($2 \leq N < \infty$).

- L'approche proposée ne fait aucune hypothèse sur l'appariement des quasiparticules : à l'intérieur de la fenêtre énergétique dont la largeur est déterminée par la fréquence de Debye du système, toutes les transitions entre états monoparticulaires sont autorisées^a. Cette approche est alors différente des approches de champs moyen comme celle de BdG (voir section 1.4.2 et 1.5.2).
- Dans le modèle présenté, la nature fermionique des particules est pleinement prise en compte. Cette dernière n'est pas masquée par l'approximation consistant à assimiler les paires de fermions à des entités bosoniques, comme cela est envisagé dans la théorie des bosons désordonnés de FISHER *et al* (voir section 1.5.2). La transition supraconducteur-isolant est ici étudiée comme résultante des effets combinés du désordre et de l'interaction attractive locale entre les porteurs de charges fermioniques.
- Notre modèle peut être aussi pertinent pour l'étude théorique de petits grains supraconducteurs. En effet, récemment un grand intérêt a été porté à l'étude de l'énergie de couplage des paires de particules dans de tels systèmes où l'espacement moyen des niveaux électroniques est comparable au gap supraconducteur [9, 69, 91, 99, 100]. De plus les propriétés des paires dans des systèmes de petites tailles peuvent être reliées à celles des paires dans la phase localisée où le mouvement des paires est restreint à s'effectuer l'intérieur du domaine de localisation.

5.1 Description du modèle à N -corps

Considérons N fermions en interaction sur un réseau bidimensionnel désordonné de L^2 sites. L'Hamiltonien régissant ces fermions est alors défini par l'équation

$$H = -V \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle, \sigma} c_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{j}\sigma} + \sum_{\mathbf{i}\sigma} \epsilon_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i}\sigma} + U \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i}\uparrow} n_{\mathbf{i}\downarrow}, \quad (5.1)$$

où $c_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger$ ($c_{\mathbf{i}\sigma}$) est l'opérateur de création (d'annihilation) d'un fermion de spin σ sur le site $\mathbf{i}$, $n_{\mathbf{i}\sigma} = c_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{i}\sigma}$ est l'opérateur donnant le nombre d'occupation du site $\mathbf{i}$ par les fermions de spin σ . L'énergie V est l'amplitude de probabilité de saut d'un site $\mathbf{i}$ à un site adjacent sur le réseau, V caractérise alors l'énergie cinétique des fermions. Les énergies sur sites $\epsilon_{\mathbf{i}}$ sont choisies de façon aléatoire et homogène dans l'intervalle énergétique $[-W/2, W/2]$. L'énergie U mesure l'intensité de l'attraction sur site de Hubbard ($U < 0$). Des conditions périodiques aux bords sont prises dans les deux directions spatiales du réseau bidimensionnel. La diagonalisation de l'Hamiltonien (5.1) se fera dans les sous-espaces vectoriels caractérisés par un spin total $S_{\text{total}}^z = 0$ lorsqu'on étudiera un nombre N pair de fermions et $S_{\text{total}}^z = 1/2$ lorsque N sera impair.

^aEn particulier, l'ansatz de Cooper qui ne couple que les états biparticulaires noninteractifs diagonaux (voir section 2.1) n'est pas utilisé dans notre approche.

Sans interaction, $U = 0$, l'Hamiltonien à N -corps (5.1) décrit le modèle monoparticulaire d'Anderson bidimensionnel dont les états sont localisés à la limite thermodynamique quelque soit le désordre introduit dans le système.

Pour $W = 0$, l'Hamiltonien (5.1) est alors celui du modèle de Hubbard attractif sans désordre. Ce modèle possède en dimension deux une transition supraconductrice avec $T_c \neq 0$ lorsque le remplissage ν est différent de $1/2$. Nous prendrons ici $\nu = 1/4$.

Le *modus operandi* pour étendre le problème de Cooper généralisé à une densité finie de particules ($2 \leq N < \infty$) est le suivant :

- i. Nous cherchons les énergies propres $\{E_\alpha\}_{\alpha \in [1, L^2]}$ et les états propres (ou orbitales) $\{|\phi_\alpha\rangle\}_{\alpha \in [1, L^2]}$ du problème monoparticulaire en diagonalisant de façon exacte l'Hamiltonien d'Anderson (section 1.2.1).
- ii. L'Hamiltonien (5.1) est ensuite réécrit dans la base des orbitales $\{|\phi_\alpha\rangle\}_{\alpha \in [1, L^2]}$,

$$H = \sum_{\alpha, \beta} E_\alpha d_{\alpha\sigma}^\dagger d_{\alpha\sigma} + U \sum_{\alpha, \beta, \gamma, \delta} Q_{\alpha\beta\gamma\delta} d_{\alpha\uparrow}^\dagger d_{\beta\downarrow}^\dagger d_{\delta\downarrow} d_{\gamma\uparrow} \quad (5.2)$$

où $d_{\alpha\sigma}^\dagger = \sum_{\mathbf{i}} \phi_\alpha(\mathbf{i}) c_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger$ est l'opérateur créant une quasiparticule de spin σ dans l'orbitale $|\phi_\alpha\rangle$. Les termes

$$U Q_{\alpha\beta\gamma\delta} = U \sum_{\mathbf{i}} \phi_\alpha^*(\mathbf{i}) \phi_\beta^*(\mathbf{i}) \phi_\gamma(\mathbf{i}) \phi_\delta(\mathbf{i}) \quad (5.3)$$

sont les éléments de la matrice de transition induite par l'interaction attractive de Hubbard ($U < 0$).

- iii. Comme dans le cas du problème de Cooper généralisé (CHAP. 2 et 3), nous introduisons une mer de Fermi en restreignant les sommes dans l'Hamiltonien (5.2) aux orbitales $|\phi_\alpha\rangle$ dont l'énergie est supérieure à celle du niveau de Fermi, E_{α_F} . Ainsi, les indices α des orbitales étant ordonnés par ordre d'énergies croissantes, la condition sur les indices de l'Hamiltonien (5.2) devient $\alpha, \beta, \gamma, \delta > \alpha_F$. Le facteur de remplissage est $\nu = \alpha_F / L^2 = 1/4$ ce qui correspond (avec la dégénérescence de spin) à $2\alpha_F$ fermions gelés. Les autres fermions forment alors N quasiparticules en interaction au-dessus de la mer de Fermi.
- iv. Supposons l'espace de Hilbert $\mathcal{E}$ sous-tendu par les fonctions d'ondes à N particules $\{|F_l\rangle\}$ construites à l'aide des orbitales monoparticulaires $\{|\phi_\alpha\rangle\}_{\alpha \in [1, L^2]}$ telles que

$$|F_l\rangle \propto \left[\bigotimes_{\alpha} p_{\alpha\uparrow} |\phi_\alpha \uparrow\rangle \right] \otimes \left[\bigotimes_{\alpha} p_{\alpha\downarrow} |\phi_\alpha \downarrow\rangle \right] \quad (5.4)$$

où $p_{\alpha\sigma} = 0$ ou 1 suivant que l'orbitale monoparticulaire $|\phi_\alpha\rangle$ est ou n'est pas occupée par un fermion de spin σ . On a évidemment $\sum_{\alpha\sigma} p_{\alpha\sigma} = N$ et $\sum_{\alpha} (p_{\alpha\uparrow} - p_{\alpha\downarrow}) = 0$ ou ± 1 puisque nous nous intéressons au secteur de spin $S_{\text{total}}^z = 0$ (N pair) et $S_{\text{total}}^z = 1/2$ (N impair). Pour entretenir la similarité de notre modèle à N -corps avec celui du problème de Cooper généralisé, l'espace de Hilbert $\mathcal{E}$ dans lequel on travail est tronqué par une coupure à *haute énergie* qui est l'extension de celle utilisée (2.8) pour le problème de Cooper généralisé,

$$\sum_i (\alpha_i - \alpha_F) \leq M. \quad (5.5)$$

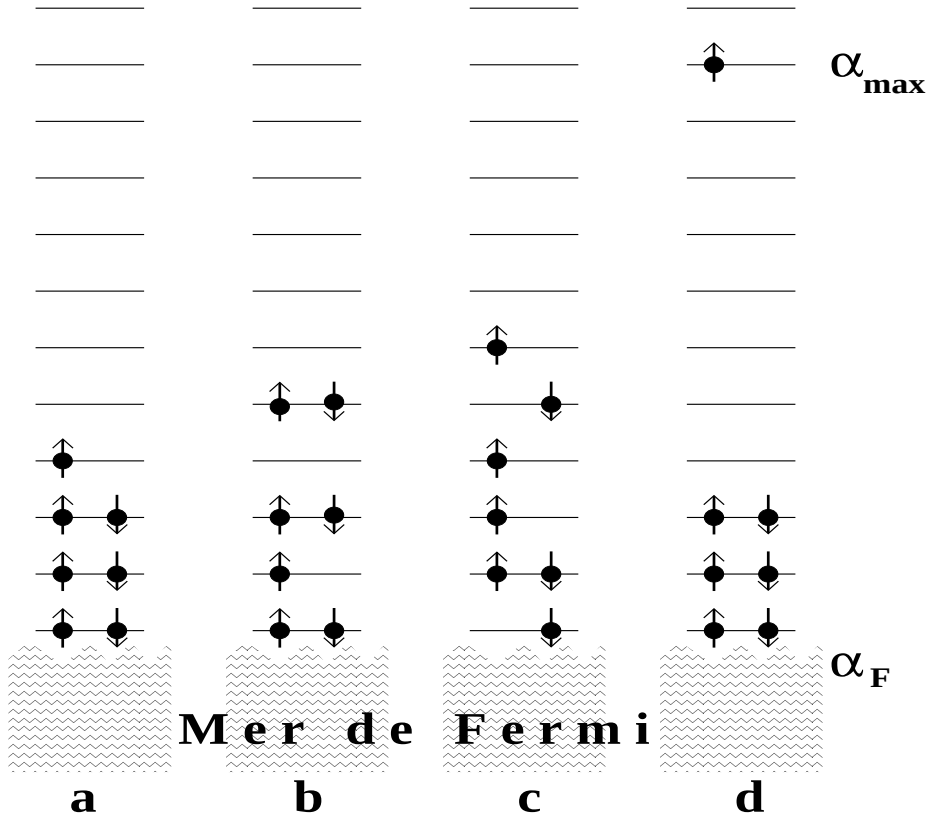


FIG. 5.1 – Exemple d'états à N particules sans interaction. Les différents niveaux (traits) correspondent à des orbitales monoparticulaires $|\phi_\alpha\rangle$ ordonnées de bas en haut par énergies croissantes. Dans les exemples choisis ici, le nombre de particule est impair, $N = 4 \uparrow + 3 \downarrow = 7$. L'état (a) représente l'état N -particulaire “le plus bas” en énergie. L'état (d) représente un état dont l'énergie est la plus grande autorisée par la restriction (5.5), à savoir $\sum_i (\alpha_i - \alpha_F) = M = 23$. Dans (d) les particules occupent comme dans (a) les niveaux d'énergie monoparticulaires les plus bas à l'exception d'un spin $\uparrow$. Le niveau monoparticulaire $|\phi_{\alpha_{\max}}\rangle$ dans lequel se trouve ce spin est l'orbitale la plus haute accessible par une quasiparticule. La restriction (5.5) implique que $\alpha_{\max} - \alpha_F = M - 12 = 11$. Les états N -particulaires (b) et (c) sont des états intermédiaires tels que $\sum_i (\alpha_i - \alpha_F) = 20 \leq M$ pour (b) et $\sum_i (\alpha_i - \alpha_F) = 23 \leq M$ pour (c).

Chaque état $|F_l\rangle$ de l'espace de Hilbert tronqué obéit à la restriction (5.5) où α_i est la $i^{\text{ème}}$ orbitale occupée par un fermion de spin $\uparrow$ ou $\downarrow$ dans l'état $|F_l\rangle$. Des exemples typiques de descriptions d'états $|F_l\rangle$ à N particules sans interaction sont présentés à la FIG. 5.1 [voir commentaires de légende]. L'état fondamental $|\Psi^0\rangle$ des N particules régies par l'Hamiltonien (5.2) sera exprimé dans la base des déterminants de Slater construits à l'aide des états N -particulaires non interactifs $\{|F_l\rangle\}$. Il est à noter que la restriction (5.5) introduit de nouveau une fréquence de Debye dans le système, $\omega_D \propto M/L^2$.

- v. L'état fondamental $|\Psi^0\rangle$ du Hamiltonien (5.2) soumis aux conditions **iii** et **iv** est alors déterminé numériquement en utilisant l'algorithme de diagonalisation de Lanczös [94].

Nous considérerons dans la suite jusqu'à $N = 8$ fermions en interaction pouvant opérer des transitions entre $M = 20$ orbitales monoparticulaires. Les variations de la coupure M ne change qualitativement pas les résultats présentés ici.

5.2 Étude du gap d'appariement

Intéressons nous à l'énergie $E^0(U)$ de l'état fondamental des N particules en interaction ($U < 0$) régies par le modèle décrit précédemment. Pour cela définissons la quantité

$$E_p(N) = E^0(U = 0) - E^0(U). \quad (5.6)$$

L'énergie $E_p(N)$ mesure alors l'instabilité de la mer de Fermi causée par l'introduction

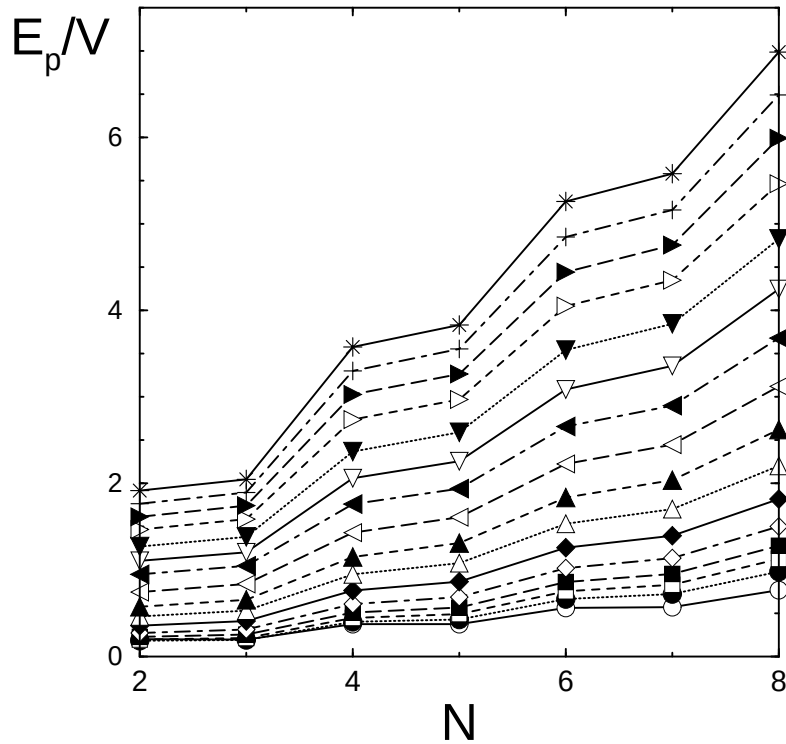


FIG. 5.2 – Dépendance de l'énergie d'appariement E_p vis-à-vis du nombre N de particules présentes dans le système. Chaque courbe correspond à une intensité du désordre différente ; W varie progressivement de $W = 0$ (courbe du bas) à $W = 15V$ (courbe du haut) par pas de $\Delta W = 1V$. La taille linéaire du système est $L = 10$ et la coupure des orbitales est telle que $M = 12$. L'interaction entre les particules est $U = -4V$. E_p a été obtenue après avoir fait la moyenne sur $N_R = 100$ réalisations du désordre.

de l'attraction de Hubbard ($U < 0$) entre N particules. Appelons cette énergie $E_p(N)$, l'énergie d'appariement des N particules. La FIG. 5.2 montre, pour différentes intensités du désordre, E_p en fonction du nombre N de particules en interaction au-dessus de la mer de Fermi. Cette figure révèle l'existence d'un effet *pair-impair* dans l'évolution E_p

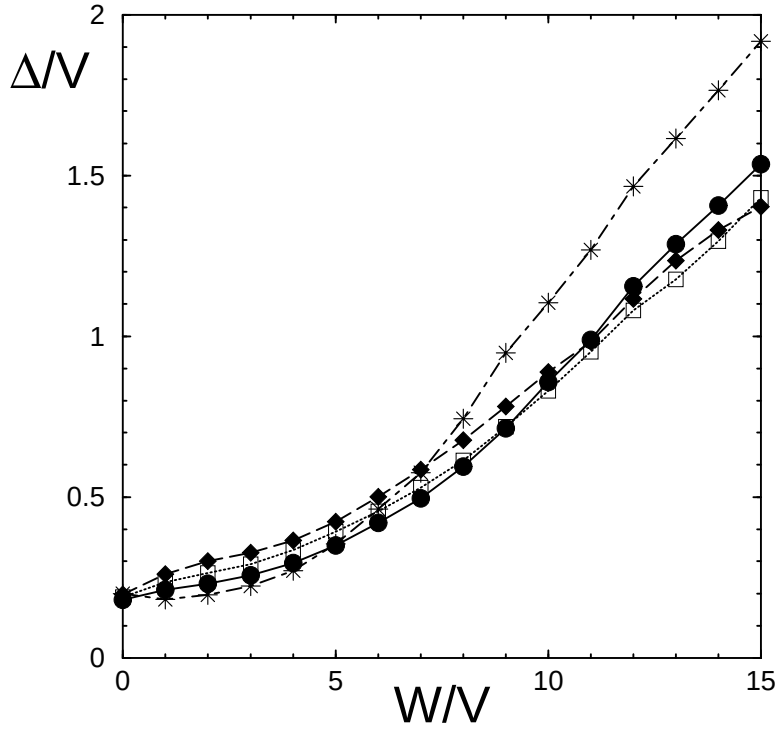


FIG. 5.3 – Gap d'appariement $\Delta(N) = E_p(N) - E_p(N - 1)$ en fonction du désordre W . Les données de $E_p(N)$ sont prises de la FIG. 5.2, $N = 2$ (*), $N = 4$ (●), $N = 6$ (□) et $N = 8$ (◆).

en fonction de N : lorsque N devient pair l'augmentation de l'énergie d'appariement E_p est beaucoup plus grande que lorsque N devient impair. Ceci s'interprète par le fait que lorsqu'une quasiparticule supplémentaire est ajoutée à un système contenant un nombre N impair de quasiparticules, cette dernière peut s'apparier et former une nouvelle paire réduisant ainsi l'énergie de l'état fondamental grâce au couplage négatif $U < 0$; E_p croît alors fortement. Dans le cas inverse, lorsqu'une quasiparticule supplémentaire est ajoutée à un système comportant un nombre N pair de quasiparticules, cette dernière ne pourra pas créer une paire de quasiparticules supplémentaire. Dans un supraconducteur idéal (sans désordre) décrit par la théorie BCS (section 1.4.1), toutes les particules forment des paires, une particule *impaire* supplémentaire ne peut alors qu'interagir faiblement avec les paires supraconductrices déjà existantes, ce qui explique l'augmentation faible mais tout de même présente de E_p lorsque N devient impair.

Le saut d'énergie

$$\Delta(N) = E_p(N) - E_p(N - 1) \quad (N \text{ pair}) \quad (5.7)$$

existant entre une valeur de $E_p(N)$ pour un nombre impair $N - 1$ de quasiparticules et la valeur suivante pour un nombre pair N de quasiparticules peut être interprété comme étant l'énergie nécessaire pour briser (former) une paire supraconductrice. Dans le cas d'un supraconducteur idéal régi par la théorie BCS, $\Delta(N)$ s'apparente

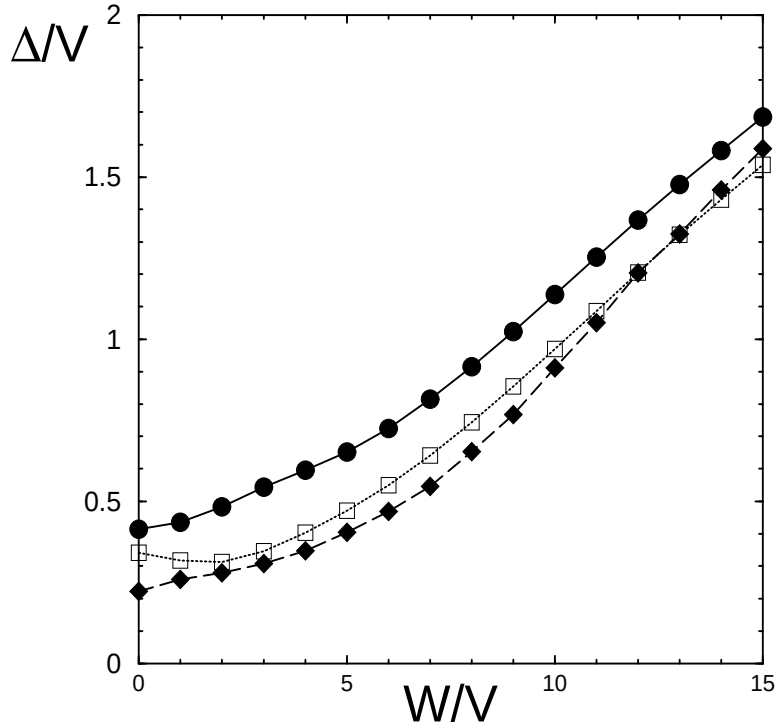


FIG. 5.4 – Gap d'appariement Δ [moyenne entre $\Delta(N=2)$ et $\Delta(N=4)$] en fonction du désordre W , pour $L=6$ ($\circ$), $L=8$ ($\square$) et $L=10$ ($\diamond$). Le rapport $M/L^2 \approx 0.2$ est gardé constant pour tout L .

par conséquent au gap supraconducteur Δ (section 1.4.1). Cette façon (5.7) d'extraire le gap est également utilisée dans les expériences [18, 97] de mesure d'effet tunnel de paires de Cooper à l'intérieur d'îlots supraconducteurs. D'autres travaux [69, 99], utilisent une définition alternative du gap d'appariement à savoir

$$\Delta'(N) = -(E^0(N, U) - 2E^0(N-1, U) + E^0(N-2, U)) \quad \text{avec } N \text{ pair.} \quad (5.8)$$

Si on néglige les variations du niveau de Fermi lors de l'ajout de deux particules supplémentaires, on obtient

$$\Delta'(N) \approx E_p(N) - 2E_p(N-1) + E_p(N-2) = \Delta(N) - \Delta(N-1) \approx \Delta(N) \quad (5.9)$$

puisque N est pair et que le saut pour un nombre pair N de particules est beaucoup plus important que celui pour $N-1$ impair, $\Delta(N) \gg \Delta(N-1)$ (voir FIG. 5.2). Ainsi, les deux définitions (5.7) et (5.8) du gap d'appariement $\Delta(N)$ sont ici similaires.

La FIG. 5.3 montre $\Delta(N)$ en fonction du désordre pour $N=2, 4, 6, 8$ particules. Pour $N > 2$, les différents sauts d'énergie $\Delta(N)$ se superposent. Le gap d'appariement $\Delta(N)$ croît avec l'intensité W du désordre. En effet lorsque le désordre augmente les particules sont progressivement piégées dans des minima de potentiel de plus en plus profonds. La taille effective des paires de particules se réduit alors fortement ce qui fait croître le couplage effectif entre les particules et donc le gap d'appariement Δ . Le cas $N=2$ est

particulier (voir FIG. 5.3). En effet, pour deux particules, seule une paire peut exister dans le système, alors que pour $N > 2$ plusieurs paires peuvent interagir entre elles. Cette interaction résiduelle entre paires n'est pas présente pour le cas biparticulaire, qui explique la différence constatée sur la FIG. 5.3 dans le gap d'appariement $\Delta(N)$. Ceci laisse suggérer également que les “effets à N -corps” apparaissent déjà pour un système composé de $N = 4$ particules puisque pour $N > 2$ les courbes de $\Delta(N)$ se superposent.

La FIG. 5.4 montre la dépendance du gap d'appariement Δ vis-à-vis de la taille L du réseau bidimensionnel. La fréquence de Debye devant être indépendante de la taille L du réseau, nous gardons le rapport $M/L^2 \approx 0.2$ constant lorsque nous faisons varier L . L'énergie Δ se sature avec l'augmentation de la taille L du réseau pour les désordres forts $W \geq 12V$ (FIG. 5.4) alors que pour les faibles désordres Δ ne se sature toujours pas pour une taille $L = 10$. Ceci suggère que pour les faibles désordres la taille $1/\Delta$ des paires de particules est encore comparable à la taille L du réseau ; la limite thermodynamique n'est toujours pas atteinte dans ce régime pour $L = 10$.

5.3 Localisation des paires

5.3.1 Occupation spatiale du réseau

Pour étudier la localisation des particules sur le réseau bidimensionnel, il est possible d'étendre la définition (2.12) de l'inverse du taux de participation utilisée aux chapitres précédents. Pour cela définissons ξ comme la fraction des sites du réseau bidimensionnel occupés par la fonction d'onde collective $|\Psi^0\rangle$ de l'état fondamental des N fermions,

$$\xi = \frac{N^2}{2L^2 \sum_{\mathbf{i}, \sigma} \rho_{\mathbf{i}\sigma}^2} \quad (5.10)$$

où $\rho_{\mathbf{i}\sigma} = \langle \Psi^0 | n_{\mathbf{i}\sigma} | \Psi^0 \rangle$ est, dans l'état fondamental, la densité de charge de spin σ sur le site $\mathbf{i}$. Ainsi, ξ varie entre la valeur maximale $\xi_{\max} = 1$ si les particules sont totalement délocalisées ($\rho_{\mathbf{i}\sigma} = N/2L^2 \quad \forall \mathbf{i}$) et la valeur minimale $\xi_{\min} = N/2L^2$ si les particules sont toutes localisées ($\rho_{\mathbf{i}\sigma} = 1$ si $\mathbf{i}$ est un site occupé par une des particules de spin σ , $\rho_{\mathbf{i}\sigma} = 0$ sinon). La FIG. 5.5 montre la fraction ξ des sites occupés en fonction du désordre pour différentes tailles L du système. Deux régimes distincts apparaissent : pour les faibles intensités du désordre, $W \lesssim 2V$, la fonction d'onde à N particules $|\Psi^0\rangle$ est étendue à travers tout le réseau puisque $\xi \approx 1$, ceci est ce qu'on peut appeler le *régime supraconducteur*. Par contre pour les désordres forts, $W \gtrsim 5V$, ξ décroît avec la taille du réseau ($\xi \propto 1/L^2$), on est alors en présence d'un *régime localisé*.

L'encadré de la FIG. 5.5 montre les variations de ξ en fonction de W pour $L = 8$ et $L = 10$ en conservant une densité, $N/L^2 \simeq 0.06$, constante de fermions mobiles au-dessus de la mer de Fermi. Les deux courbes, pour $L = 8$ et $L = 10$, se superposent exactement suggérant que $\xi(W)$ est une fonction indépendante de la taille du système à la limite thermodynamique. La diminution de $\xi(W)$ lorsque W augmente est alors le signe de la localisation des paires de Cooper par le désordre.

La comparaison de ξ pour les cas avec et sans interaction est également présentée à la FIG. 5.5. Il apparaît clairement que l'interaction amplifie la localisation des particules,

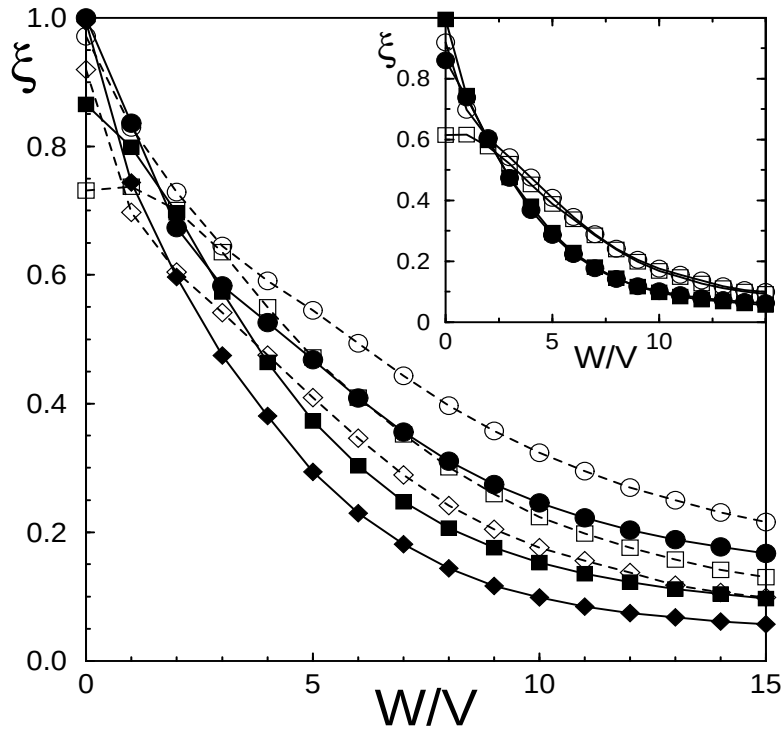


FIG. 5.5 – Fraction ξ des sites occupés par les particules dans l'état fondamental en fonction du désordre W , pour $M/L^2 \approx 0.2$, $U = -4V$ (symboles pleins) et $U = 0$ (symboles vides). Figure principale : $N = 6$ particules, $L = 6$ (○), $L = 8$ (□) et $L = 10$ (◇). Encadré : ξ pour une densité de fermions mobiles constante $N/L^2 \approx 0.06$; $N = 4$, $L = 8$ (○) et $N = 6$, $L = 10$ (□).

confirmant ainsi les résultats présentés dans l'étude du problème de Cooper généralisé tridimensionnel (CHAP. 2) et bidimensionnel (CHAP. 3). Pour les fortes intensités du désordre, $W \gtrsim 2V$, la fraction ξ des sites occupés par la fonction d'onde à N -corps est bien plus faible pour une interaction $U = -4V$ que pour le cas sans interaction $U = 0V$. Cette tendance semble cependant être inversée pour $W \lesssim 2V$. Ceci pouvant s'expliquer par le fait que pour un système bidimensionnel, les particules sans interactions se trouvent être toutes localisées à la limite thermodynamique et ceci quelque soit le désordre $W \neq 0$ présent dans le système. Par contre, en présence de l'attraction de Hubbard, pour une faible intensité W du désordre, le système est formé de paires supraconductrices qui sont par définition délocalisées. Ainsi, à la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$, pour W faible, on aura $\xi(U = 0) \rightarrow 0$ et $\xi(U) \rightarrow 1$.

5.3.2 Suppression du paramètre d'ordre supraconducteur

Les résultats présentés sur la FIG. 5.5 concernant la fraction ξ de sites occupés par la fonction d'onde *macroscopique* $|\Psi^0\rangle$ indique qu'il existe une évolution d'un régime délocalisé (supraconducteur) de l'état fondamental vers un régime localisé (isolant) lorsque le désordre augmente. Sans désordre l'état fondamental du modèle N -particulaire

(5.2) décrit un état supraconducteur. Avec l'introduction du désordre il est intéressant de caractériser la survie de l'état supraconducteur. Pour cela définissons la fonction de corrélation spatiale

$$P_s(\mathbf{r}) = \langle \Psi^0 | \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{i}} \Delta_{\mathbf{i}+\mathbf{r}} \Delta_{\mathbf{i}}^\dagger | \Psi^0 \rangle \quad (5.11)$$

où l'opérateur $\Delta_{\mathbf{i}}^\dagger = c_{\mathbf{i}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{i}\downarrow}^\dagger$ ($\Delta_{\mathbf{i}} = c_{\mathbf{i}\downarrow} c_{\mathbf{i}\uparrow}$) crée (annihile) une paire de quasiparticules sur le site $\mathbf{i}$. $P_s(\mathbf{r})$ est une fonction mesurant la corrélation spatiale entre les différentes paires de quasiparticules *séparées* entre elles par un vecteur $\mathbf{r}$ sur le réseau bidimensionnel. Pour un état supraconducteur de type *onde s*,

$$\Delta_{\text{op}} = \sqrt{P_s \left(\mathbf{r}_{\text{max}} = \left\{ \frac{L}{2}, \frac{L}{2} \right\} \right)} \quad (5.12)$$

est le paramètre d'ordre de la transition supraconducteur-isolant^a. La suppression du paramètre Δ_{op} est le signe de la destruction de l'état supraconducteur du système (voir section 1.4.1 et 1.5.2).

^aDans la définition (5.12), le paramètre d'ordre Δ_{op} est défini grâce à la fonction $P_s(\mathbf{r}_{\text{max}})$ mesurant la corrélation des paires de quasiparticules sur la distance effective la plus grande $\|\mathbf{r}_{\text{max}}\| = L/\sqrt{2}$ accessible sur le réseau bidimensionnel de taille linéaire L avec conditions périodiques aux bords.

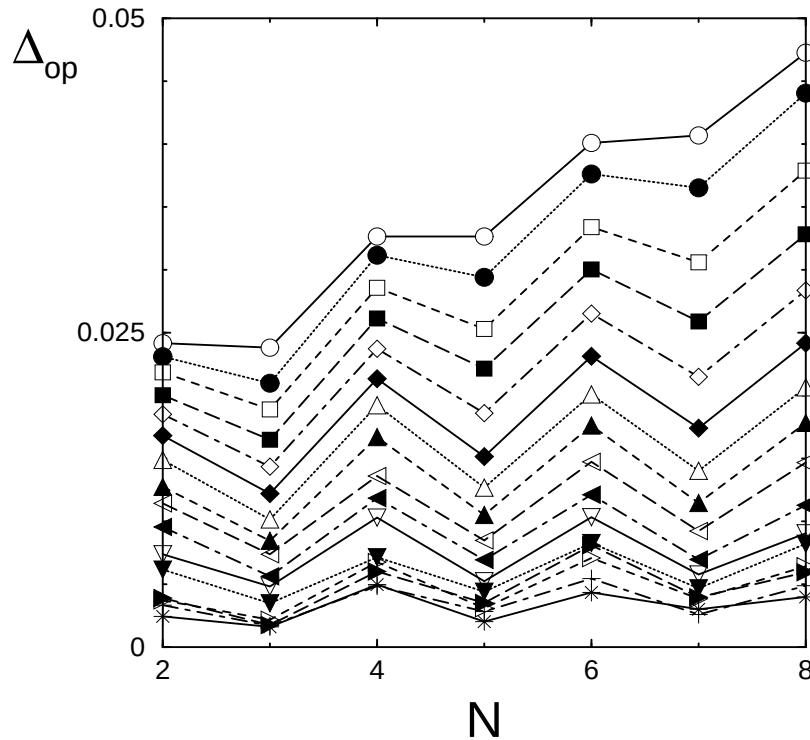


FIG. 5.6 – Dépendance du paramètre d'ordre Δ_{op} vis-à-vis du nombre N de particules pour différentes intensités W du désordre, de $W = 0$ (ligne du haut) à $W = 15V$ (ligne du bas) par pas de $\Delta W = 1V$. La taille linéaire du système est $L = 10$ et la coupure orbitale est $M = 12$.

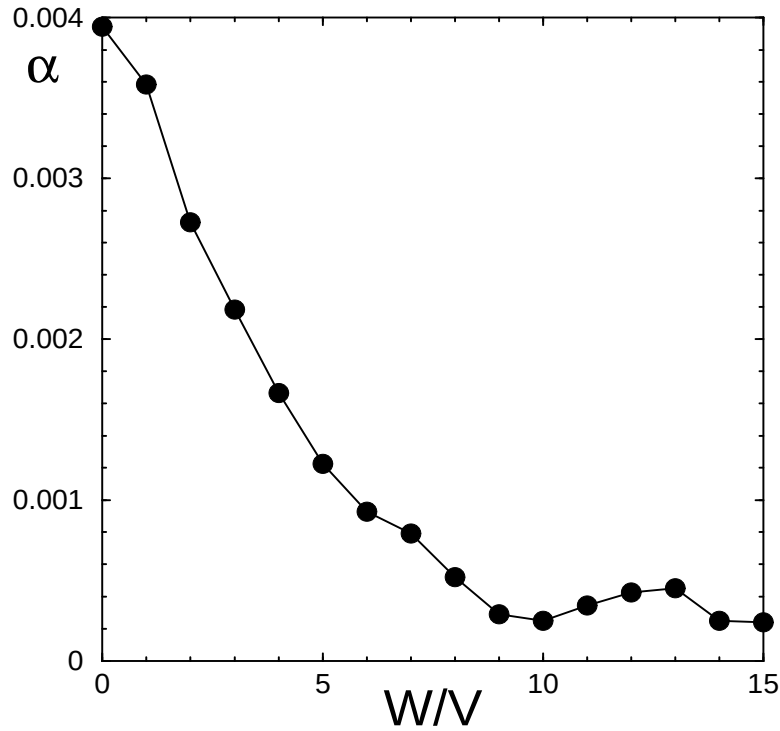


FIG. 5.7 – Pente α du paramètre d'ordre Δ_{op} en fonction du désordre W . α est extraite à partir de la régression linéaire des données de la FIG. (5.6) présentant Δ_{op} en fonction de N .

La FIG. 5.6 montre Δ_{op} vis-à-vis du nombre de quasiparticules en interaction au-dessus de la mer de Fermi. Le paramètre d'ordre Δ_{op} est fortement supprimé par le désordre W . Ceci est en accord avec les résultats de l'étude Monte Carlo quantique [83] de l'Hamiltonien (5.1). Cet effet est d'autant plus prononcé que le nombre de particules dans le système est grand (FIG. 5.6). Nous pouvons remarquer que Δ_{op} croît de façon linéaire avec le nombre de paires de quasiparticules présentes dans le système. Ceci est naturel pour un état supraconducteur décrit par la fonction d'onde macroscopique de la théorie BCS^a

$$|\Psi^0\rangle \propto \prod_{\gamma} (1 + g_{\gamma} b_{\gamma}^{\dagger}) |0\rangle. \quad (5.13)$$

En effet, l'équation (5.13) décrit une superposition cohérente de paires de Cooper totalement délocalisées sur tout le réseau. Nous avons vu (CHAP. 2 et 3) que cette approximation de champs moyen (5.13) est justifiée pour les faibles désordres. Ainsi dans ce régime, le fait que toutes les paires de Cooper soient délocalisées sur tout le réseau bi-dimensionnel implique que la fonction de corrélation (5.11) est proportionnelle au carré

^aDans l'équation (5.13), l'opérateur $b_{\gamma}^{\dagger} = d_{\gamma\uparrow}^{\dagger} d_{\gamma\downarrow}^{\dagger}$ est l'opérateur de création d'une paire de quasiparticule ($\uparrow, \downarrow$) dans l'orbitale $|\phi_{\gamma}\rangle$ et $g_{\gamma} \propto v_{\gamma}/u_{\gamma}$ est un paramètre variationnel de la théorie BCS (section 1.4.1)

du nombre de paires présentes dans le système^a

$$P_s(\mathbf{r}) \approx \langle 1 \text{ paire } \uparrow\downarrow | \Delta_{\mathbf{r}} \Delta_{\mathbf{0}}^\dagger | 1 \text{ autre paire } \uparrow\downarrow \rangle \times \frac{N}{2} \times \frac{N}{2}. \quad (5.14)$$

Ainsi, le paramètre d'ordre est proportionnel au nombre de paires de quasiparticules dans le système,

$$\Delta_{\text{op}} = \sqrt{P_s(\mathbf{r}_{\text{max}})} \propto \alpha \frac{N}{2} \quad (5.15)$$

où $N = 2m$ avec $m \in \mathbb{N}$ et où α est un paramètre donnant la pente de la variation du paramètre d'ordre avec le nombre de paires de quasiparticules. La FIG. 5.7 montre la pente α tirée des régressions linéaires des données de la FIG. 5.6 en fonction du désordre W présent dans le système. Dans le régime supraconducteur (W faible), $\alpha \neq 0$ car chaque nouvelle paire supraconductrice ajoutée au système va contribuer d'une manière cohérente au paramètre d'ordre. La suppression de cette quantité α avec le désordre est mise en évidence à la FIG. 5.7, montrant une transition d'un état supraconducteur vers un état isolant.

5.3.3 Phase BLS

L'étude de la fraction ξ de sites occupés par $|\Psi^0\rangle$ (FIG. 5.5) et l'étude du paramètre d'ordre (FIG. 5.6 et 5.7) mettent en évidence une transition modulée par le désordre entre une phase supraconductrice et une phase isolante. Même si sur la (FIG. 5.5), le changement de phase apparaît comme un *lent* “cross-over” entre le régime délocalisé (W faible) et le régime localisé (W fort), l'étude qualitative dans l'état fondamental de la distribution de charge $\rho_{i\sigma}$ sur le réseau montre que la transition est en fait plus abrupte. La FIG. 5.8 montre $\rho_{i\uparrow}$ pour l'état fondamental de $N = 4$ particules en interaction au-dessus de la mer de Fermi. Sans interaction $U = 0V$, pour une intensité du désordre $W = 3V$ (FIG. 5.8a) et $W = 4V$ (FIG. 5.8b), l'état fondamental des $N = 4$ particules est délocalisé sur tout le réseau bidimensionnel. Pour une attraction fixe, $U = -4V$, l'état fondamental pour un désordre $W = 3V$ reste toujours délocalisé (FIG. 5.8c) alors que pour $W = 4V$ l'état fondamental est complètement modifié exhibant une localisation prononcée de deux paires de particules (FIG. 5.8d)^b. La FIG. 5.8 montre donc que la transition SI est beaucoup plus brutale que ne le suggère l'étude de la fraction ξ de sites occupés par $|\Psi^0\rangle$ (5.5).

Il est intéressant d'étudier qualitativement la relation entre la phase isolante du modèle à N -corps étudié ici et la phase BLS mise en évidence dans l'étude du problème de Cooper généralisé (CHAP. 2 et 3). La FIG. 5.9 montre, pour $U = -4V$ et $W = 4V$, d'une part, la densité de charge

$$\rho_{i\sigma} = \langle \Psi_{N=4}^0 | n_{i\sigma} | \Psi_{N=4}^0 \rangle \quad (5.16)$$

^aLa délocalisation des particules fait que tous les sites $\mathbf{i}$ du réseau apportent, au travers de la somme $\sum_{\mathbf{i}} \Delta_{\mathbf{i}+\mathbf{r}} \Delta_{\mathbf{i}}^\dagger$, la même contribution à $P_s(\mathbf{r})$. Nous supposons également que g_γ ne varie que très faiblement à proximité du niveau de Fermi et que le nombre de particules en interaction est bien plus petit que le nombre des particules gelées sous la mer de Fermi, $N \ll 2\alpha_F$.

^bEn effet, N étant paire, les rôles des fermions de spin $\uparrow$ et de spin $\downarrow$ sont interchangeables, par conséquent la distribution de charges $\rho_{i\uparrow}$ pour les fermions de spins $\uparrow$ est la même que celle $\rho_{i\downarrow}$ pour les fermions de spins $\downarrow$. Ainsi, l'image FIG. 5.8d correspond à la localisation de deux paires de fermions de spins opposés ($\uparrow, \downarrow$).

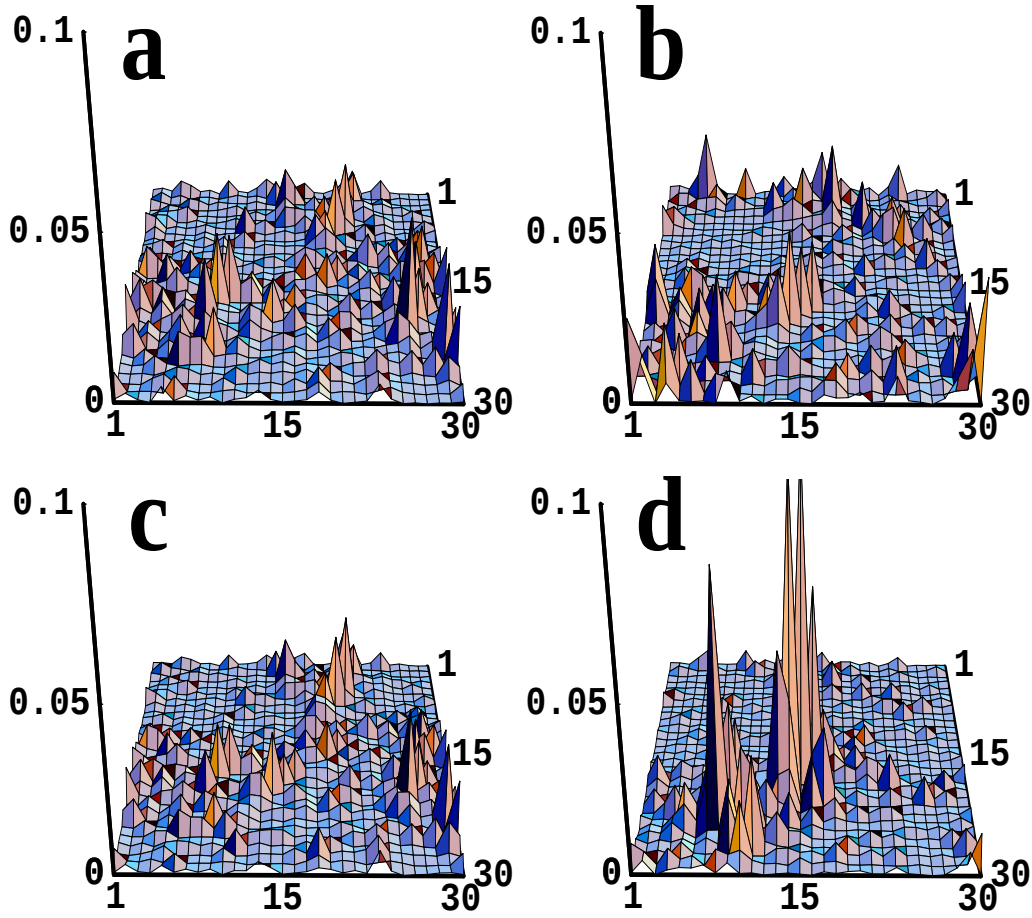


FIG. 5.8 – Distributions de charge $\rho_{i\sigma} = \langle \Psi_{N=4}^0 | c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} | \Psi_{N=4}^0 \rangle$ dans l'état fondamental $|\Psi_{N=4}^0\rangle$ de $N = 2 \uparrow + 2 \downarrow = 4$ particules pour (a) $U = 0, W = 3V$, (b) $U = 0, W = 4V$, (c) $U = -4V, W = 3V$, (d) $U = -4V, W = 4V$. La taille du réseau est $L = 30$ et $\alpha =$. Les distributions de charge des figures (a),(b),(c) et (d) ont été toutes calculées avec la même réalisation du désordre. Les distributions de charge pour $\sigma = \uparrow$ ou $\sigma = \downarrow$ sont identiques puisque le nombre de particules $N = 4$ est pair.

de l'état fondamental de $N = 4$ particules régies par le modèle à N -corps (FIG. 5.9a), et d'autre part, les distributions de charge $f^0(\mathbf{i})$ et $f^1(\mathbf{i})$ respectivement de l'état fondamental (FIG. 5.9b) et du premier état excité (FIG. 5.9c) du problème de Cooper généralisé (CHAP. 3) impliquant deux particules sur un réseau bidimensionnel désordonné couplées au-dessus de la mer de Fermi par une interaction attractive. Il apparaît clairement que la distribution de charge de l'état fondamental à $N = 4$ particules (FIG. 5.9a) est la somme de la distribution de charge de l'état fondamental (FIG. 5.9b) et celle du premier état excité (FIG. 5.9c) du problème de Cooper généralisé. La FIG. 5.9d représente la distribution

$$\tilde{\rho}_{i\sigma} = \langle \Psi_{N=4}^0 | n_{i\sigma} | \Psi_{N=4}^0 \rangle - f^0(\mathbf{i}) - f^1(\mathbf{i}) \quad (5.17)$$

Cette distribution $\tilde{\rho}_{i\sigma}$ est quasiment nulle sur tout l'ensemble du réseau bidimensionnel confirmant le fait que dans la phase localisée, l'état fondamental à N -corps calculé avec

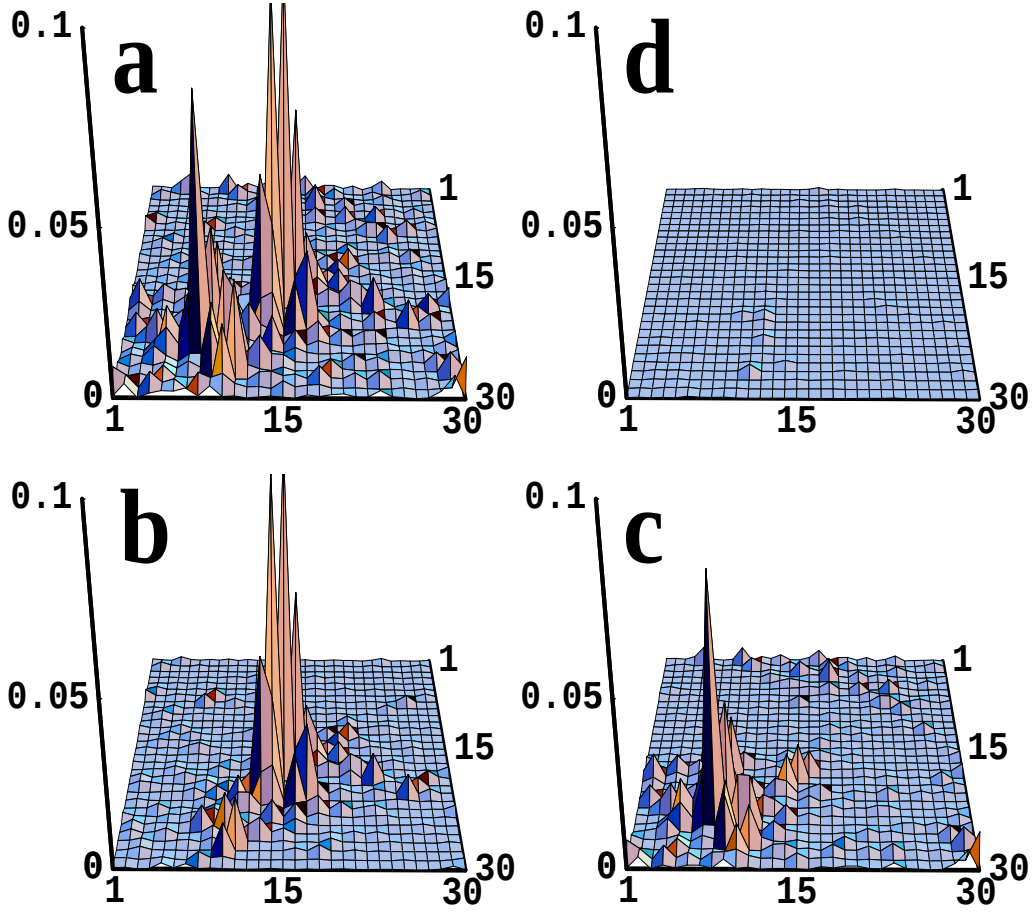


FIG. 5.9 – Distributions de charge pour $U = -4V$, $W = 4V$, $L = 30$: (a) $\rho_{i\sigma} = \langle \Psi_{N=4}^0 | c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} | \Psi_{N=4}^0 \rangle$ distribution de charge dans l'état fondamental de $N = 4$ particules dans le modèle à N corps étudié [analogue à l'image FIG. 5.8d], (b) $f^0(\mathbf{i})$ distribution de charge de l'état fondamental du problème de Cooper généralisé, (c) $f^1(\mathbf{i})$ distribution de charge du premier état excité du problème de Cooper généralisé, (d) différence $\tilde{\rho}_{i\sigma} = \rho_{i\sigma} - (f^0(\mathbf{i}) + f^1(\mathbf{i}))$ entre la distribution présentée en (a) et la somme de celles présentées en (b) et (c).

le modèle décrit à la section 5.1 est la superposition des $N/2$ premiers états BLS du problème de Cooper généralisé. L'hypothèse consistant à considérer les N particules localisée comme étant appariées dans les états BLS du problème à deux particules est alors justifiée. Le problème de Cooper généralisé est donc pertinent pour l'étude des paires de Cooper dans la phase isolante de la transition SI.

5.4 Conclusion

Dans cette étude nous avons observé la localisation de paires de Cooper pour des petits agrégats ($N = 2 \rightarrow 8$) de particules sur un substrat bidimensionnel désordonné.

Chapitre 5. Extension du problème de Cooper généralisé au cas de plusieurs corps ($N > 2$)

Nous avons montré que l'énergie d'appariement possède une asymétrie pair-impair avec le nombre de particules : cet effet sur la parité, caractéristique dans les nanojonctions supraconductrices [18], survit et est même renforcé en présence du désordre. Le désordre amplifie fortement le gap d'appariement des particules et dans le même temps mène à la localisation des paires de particules (*isolant avec gap*). Ainsi, dans la phase localisée induite par l'action conjuguée du désordre et de l'attraction de Hubbard, la destruction des paires de Cooper doit permettre d'accroître le transport dans le système. Cela est consistant avec la chute brutale de la résistivité observée dans les expériences [39, 79] lors de l'application d'un champ magnétique ; un *cross-over* se produit alors entre un isolant formé de paires de Cooper et un isolant électronique.

La phase BLS obtenue pour deux particules dans le problème de Cooper généralisé survit également lorsque $N > 2$ particules sont considérées. Ceci renforce alors l'idée que, dans la phase localisée induite par l'interaction, il est possible d'assimiler les N fermions, évoluant sur un réseau bidimensionnel et soumis entre eux à l'attraction de Hubbard, à une collection de paires de fermions régies par le modèle de Cooper généralisé que nous avons introduit aux chapitres 2 et 3.

Conclusion générale

Au cours de ce travail, nous avons étudié l'effet du désordre et de l'interaction, locale et attractive, sur la localisation de particules quantiques. Nous avons montré que lorsqu'on établit, au-dessus d'une mer de Fermi, une interaction attractive de Hubbard entre deux particules évoluant toutes deux sur un réseau désordonné d'Anderson, il apparaît, pour un régime de désordre où les particules sans interaction sont habituellement délocalisées, une phase d'états biparticulaires localisés. Cette phase BLS, qui existe aussi bien à deux qu'à trois dimensions, est cependant détruite lorsque le désordre devient suffisamment faible ; les paires de particules se délocalisent alors sur l'ensemble du réseau. Qualitativement, nous pouvons dire que l'interaction attractive locale crée une pseudoparticule dont la masse est le double de celle d'une particule seule, diminuant par conséquent par deux, par rapport au cas sans interaction, l'intensité critique du désordre pour laquelle la transition entre états délocalisés et localisés se produit. Cette phase BLS persiste également pour les états excités de notre modèle tant que ceux-ci possèdent une énergie propre inférieure à l'énergie $2E_F$ de deux particules sur la surface de Fermi.

Le modèle que nous avons étudié ici est une généralisation, pour le cas de systèmes désordonnés, du problème de Cooper. En effet, ce dernier consiste en l'absence de désordre à coupler, au-dessus d'une mer de Fermi, deux particules via une interaction attractive. Cette interaction couple les états biparticulaires noninteractifs symétriques par renversement du temps, c'est-à-dire ceux pour lesquels les deux particules possèdent une impulsion opposée l'une de l'autre. Cet appariement particulier des quasiparticules fut utilisé avec succès dans la théorie BCS pour décrire une large classe de supraconducteurs non désordonnés. Pour le cas désordonné, le *théorème d'Anderson* prédit que la supraconductivité n'est pas affectée par les impuretés non magnétiques tant qu'il existe une densité suffisante d'états biparticulaires symétriques par renversement du temps pour pouvoir former les paires de Cooper. Ce théorème n'est valable que pour les faibles intensités du désordre. En effet nous montrons qu'avec l'augmentation du désordre les résultats obtenus avec l'ansatz de Cooper ne permettent plus de décrire correctement les effets conjugués du désordre et de l'interaction attractive. Pour révéler la phase BLS, il est alors nécessaire de prendre en compte toutes les transitions entre états biparticulaires noninteractifs qui sont permises par l'attraction locale induite par les phonons.

Dans notre modèle, la transition entre la phase d'états délocalisés et la phase BLS s'accompagne d'un changement de comportement dans l'évolution de l'énergie de liaison des paires avec l'intensité du désordre. Dans la phase d'états délocalisés, l'énergie de liaison diminue très faiblement avec l'augmentation du désordre ; les résultats obtenus avec et sans l'ansatz de Cooper sont identiques : seuls les états biparticulaires symétriques

contribuent à cette phase supraconductrice. Les effets du désordre sont faible en comparaison avec ceux de l'interaction attractive menant à la supraconductivité. L'énergie de liaison des paires est alors essentiellement due à l'interaction. Par contre dans la phase BLS, l'énergie de liaison croît très fortement avec l'augmentation du désordre. L'attraction locale agit comme une contrainte supplémentaire pour les particules les forçant à se localiser par paires bien en-dessous du bord de localisation des particules sans interaction. Pour une intensité donnée du désordre, l'énergie de liaison obtenue avec notre modèle est bien plus importante que celle obtenue avec l'ansatz de Cooper. La phase BLS est d'un point de vue énergétique bien plus favorable à la phase d'états délocalisés obtenue avec l'ansatz de Cooper.

L'application d'un champ magnétique perpendiculaire à un réseau bidimensionnel désordonné altère la phase BLS : Le bord de localisation des particules est alors déplacé vers les intensités du désordre plus élevées, laissant apparaître à la place de la phase BLS, une phase délocalisée. Cette phase bien que difficile à caractériser dans le cadre de notre étude, semble être métallique : en effet, le champ magnétique d'une part altère la structure de paire formée par les particules et d'autre part diminue fortement l'énergie de liaison de celles-ci.

Dans le cas des modèles à N -corps, l'appariement proposé par Cooper correspond à une approximation de champ moyen. Une étude [95] utilisant la méthode Monte Carlo quantique pour traiter un grand nombre de fermions confirme, d'une part l'existence de la phase BLS trouvée dans le cadre de notre modèle, et d'autre part l'inadaptation des techniques de champ moyen, comme la méthode de BdG, à décrire de manière correcte la supraconductivité en présence de désordre.

Nous avons également étendu le problème de Cooper généralisé au cas d'un nombre $N > 2$ de fermions. Cette extension permet alors d'étudier N fermions couplés par l'attraction de Hubbard au-dessus d'une mer de Fermi. L'état fondamental des N fermions opère alors une transition d'un état supraconducteur vers un état isolant lorsque l'intensité du désordre augmente. Cette transition est caractérisée par la suppression induite par le désordre du paramètre d'ordre supraconducteur. A l'instar de l'énergie de liaison des particules dans la phase BLS du problème de Cooper généralisé, le gap d'appariement des quasiparticules augmente avec le désordre. Dans le même temps, le paramètre d'ordre de la supraconductivité est fortement diminué. Ainsi, dans la phase localisée, le gap d'appariement n'est plus lié au paramètre d'ordre comme cela est le cas dans une phase supraconductrice. Dans la phase BLS, notre système est alors un *isolant avec gap*.

Notre extension du problème de Cooper généralisé confirme l'existence de la phase BLS dans un système où il existe plusieurs paires de quasiparticules corrélées. En fait nous montrons que dans la phase BLS, l'assimilation des N fermions à une collection de paires de fermions régis par le modèle de Cooper généralisé constitue, pour une densité faible de particules, une très bonne approximation.

Indépendamment du reste, nous avons également présenté l'étude d'un modèle de deux particules dans un milieu aléatoire bidimensionnel couplées au-dessus du niveau de Fermi par une interaction à longue portée particulière. Pour une forte intensité de cette interaction, ce modèle biparticulaire est assimilable à un modèle d'Anderson effectif. A la lumière de cette assimilation nous avons estimé une intensité critique du désordre en-dessous de laquelle les particules sont délocalisées. La fonction d'onde des deux particules

Conclusion générale

possède alors *la forme* d'un anneau diffusant à travers tout le réseau bidimensionnel. Pour une intensité modérée de l'interaction, l'état fondamental du modèle est toujours localisé. Cependant, à partir d'une certaine énergie d'excitation, les états de ce modèle se trouvent être délocalisés pour des intensités du désordre qui sans interaction mènent à la localisation. Ce nouveau type de délocalisation proche du niveau de Fermi est essentiellement dû à la topologie effective du modèle induite par la géométrie particulière de l'interaction à longue portée.

Publications

Liste des travaux publiés durant la préparation de cette thèse.

- Articles ayant un lien direct avec ce travail de thèse (inclus ci-après) :
 - **J. Lages** et D. L. Shepelyansky, *Cooper problem in the vicinity of the Anderson transition*, Phys. Rev. B **62** (2000), 8665.
 - **J. Lages**, *Excited States of the Cooper Problem in a Three-Dimensional Disordered System*, à paraître dans le proceeding *Electronic Correlations : from meso- to nano-physics* des “Rencontres de Moriond 2001”.
 - **J. Lages** et D. L. Shepelyansky, *Phase of biparticle localized states for the Cooper problem in two-dimensional disordered systems*, Phys. Rev. B **64** (2001), 094502.
 - **J. Lages**, G. Benenti et D. L. Shepelyansky, *Disordered Hubbard model with attraction : The coupling energy of Cooper pairs in small clusters*, Phys. Rev. B **63** (2001), 214516.
 - **J. Lages** et D. L. Shepelyansky, *Delocalization of two-particle ring near the Fermi level of 2d Anderson model*, Eur. Phys. J. B **21** (2001), 129.
- Autres articles :
 - A. Bérard, **J. Lages** et H. Mohrbach, *Restoration of Angular Lie Algebra Symmetries from a Covariant Hamiltonian*, soumis à J. Math. Phys. (**gr-qc/0110005**).
 - A. Bérard, **J. Lages** et H. Mohrbach, *Classical spinning particle assuming a covariant Hamiltonian*, en préparation.

Physical Review B 62 (2000), 8665

Cooper problem in the vicinity of the Anderson transition

J. Lages et D. L. Shepelyansky

Cooper problem in the vicinity of the Anderson transition

J. Lages and D. L. Shepelyansky*

Laboratoire de Physique Quantique, UMR 5626 du CNRS, Université Paul Sabatier, F-31062 Toulouse Cedex 4, France

(Received 17 May 2000)

We study numerically the ground state properties of the Cooper problem in the three-dimensional Anderson model. It is shown that attractive interaction creates localized pairs in the metallic noninteracting phase. This localization is destroyed at sufficiently weak disorder. The phase diagram for the delocalization transition in the presence of disorder and interaction is determined.

The pioneering experimental results for normal-state resistivity of high-temperature superconductors demonstrated a striking correlation between the optimal doping with maximal T_c in the superconducting phase and the Anderson metal-insulator transition (MIT) in the normal phase obtained in a strong pulsed magnetic field.¹ Namely, the MIT in strong magnetic field takes place at such a doping for which T_c is maximal at zero magnetic field. More recent experiments on the superconductor-insulator transition (SIT) in three dimensions (3D),²⁻⁴ which were done in various materials at different dopings and magnetic fields, also reveal close correlation between these transitions even if it is possible that the normal state remains metallic in some materials.^{2,4} These experimental results put forward the important theoretical problem of interaction effects in the vicinity of Anderson transition in 3D. However, the full understanding of this problem is very difficult since even the origin of the high- T_c phase is not yet established completely. Due to that it would be interesting to understand the effects of interaction and disorder in a more simple model of generalized Cooper problem⁵ of two quasiparticles above the frozen Fermi sea which interact via the attractive Hubbard interaction in the presence of disorder. In spite of apparent simplicity of this problem it is rather nontrivial. Indeed, even if the great progress has been reached recently in the investigation of localized one-particle eigenstate properties,⁶ the analytical expressions for the interaction induced matrix elements in the localized phase and in the MIT vicinity are still absent. Furthermore, the recent results for the problem of two interacting particles (TIP) in the localized phase demonstrated that the interaction effects for excited states can qualitatively change the eigenstate structure leading to the appearance of delocalization.⁷⁻¹⁰ Due to that the investigation of the ground state properties of the above model in the vicinity of the Anderson transition in 3D represents an interesting unsolved problem which can shed light on the origin of SIT in the presence of disorder.

To investigate the above problem we study numerically the ground state properties of two particles with Hubbard on site attraction ($U < 0$) in 3D Anderson model at half filling. In this case the one particle eigenstates are determined by the Schrödinger equation

$$E_{\mathbf{n}}\psi_{\mathbf{n}} + V(\psi_{\mathbf{n}-1} + \psi_{\mathbf{n}+1}) = E\psi_{\mathbf{n}}, \quad (1)$$

where $\mathbf{n}$ is the site index on the 3D lattice with periodic boundary conditions applied, V is the nearest-neighbor hop-

ping and the random on-site energies E_i are homogeneously distributed in the interval $[-W/2, W/2]$. It is well known that at half filling (the band center with $E=0$) the MIT takes place at $W_c/V \approx 16.5$ with the insulating and metallic phases at $W > W_c$ and $W < W_c$ respectively (see, e.g., Refs. 11,12). To study this problem with interaction it is convenient to write its Hamiltonian in the basis of noninteracting eigenstates of the Anderson model that gives

$$(E_{m_1} + E_{m_2})\chi_{m_1, m_2} + U \sum_{m'_1, m'_2} Q_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} \chi_{m'_1, m'_2} = E\chi_{m_1, m_2}. \quad (2)$$

Here χ_{m_1, m_2} are eigenfunctions of the TIP problem written in one-particle eigenbasis ϕ_m with eigenenergies E_m . The transition matrix elements Q_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} are obtained by rewriting the Hubbard interaction in the noninteracting eigenbasis of model (1). The Fermi sea is introduced by restricting the sum in Eq. (2) to $m'_{1,2} > 0$ with unperturbed energies $E_{m'_{1,2}} > E_F$. The value of the Fermi energy $E_F \approx 0$ is determined by the filling factor μ which is fixed at $\mu = 1/2$. To have more close similarity with the Cooper problem we also introduce the high energy cutoff defined by the condition $1 \leq m'_1 + m'_2 \leq M$. Such a rule gives an effective phonon frequency $\omega_D \propto M/L^3$ where L is the linear lattice size. Since the frequency ω_D should be independent of L we keep the ratio $\alpha = L^3/M$ constant when varying L . The majority of data are obtained for $\alpha \approx 30$ (Ref. 13) but we checked that its variation by few times did not affect the results. Due to on-site nature of the Hubbard interaction only symmetric configurations are considered.

In fact the first studies of the model (2) with the frozen Fermi sea had been done by Imry⁸ with the aim to analyze the delocalization effect of TIP in the proximity of Fermi level at finite particle density. This model was also studied numerically in Ref. 14 where it was shown that near E_F the interaction becomes effectively stronger comparing to the ergodic estimate used in Refs. 7,8. However the above studies^{8,14} were concentrated on the properties of excited states in the repulsive case $U > 0$. On the contrary here we analyze the ground state properties for the attractive case. Since $U < 0$, then even in the limit of large system size L the particles are always close to each other in the ground state

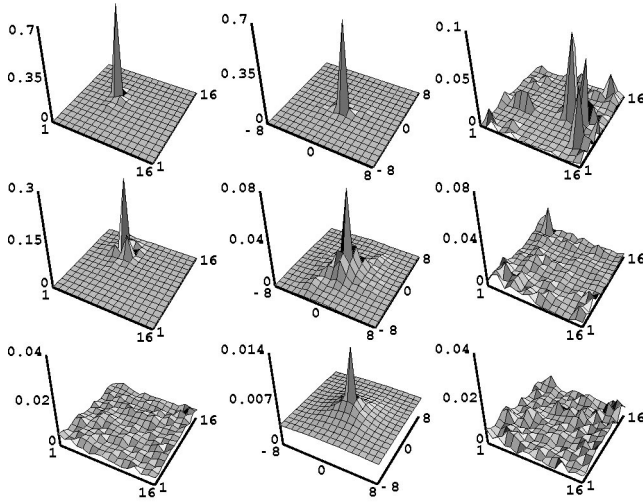


FIG. 1. Probability distributions for TIP in the ground state projected on the (x,y) plane: one particle probability f_p for interaction $U = -4V$ (left column), interparticle distance probability f_{pd} for $U = -4V$ (center column), f_p for $U = 0$ (right column); the disorder strength is $W/W_c = 1.1$ (upper line), $W/W_c = 0.5$ (middle line), $W/W_c = 0.3$ (bottom line). All data are given for the same realization of disorder for the system size $L = 16$ (see text for details). Upper line corresponds to the insulating noninteracting phase while two others are in the metallic one at $U = 0$.

that is qualitatively different from the case $U > 0$. In this way the model (2) represents the generalized Cooper problem in the presence of disorder.

To study the characteristics of the ground state $\chi_{m_1, m_2}^{(0)}$ we diagonalize numerically the Hamiltonian (2) and rewrite the eigenfunction in the original lattice basis $|\mathbf{n}\rangle$ with the help of relation between lattice basis and one particle eigenstates $|\mathbf{n}\rangle = \sum_m R_{\mathbf{n}, m} \phi_m$. As the result of this procedure we determine the two particle probability distribution $F(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$ in the ground state (here $\mathbf{n}_{1,2}$ mark the positions of the two particles), from which the one particle probability $f(\mathbf{n}_1) = \sum_{\mathbf{n}_2} F(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$ and the probability of interparticle distance $f_d(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}_2} F(\mathbf{r} + \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_2)$ with $\mathbf{r} = \mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_2$ are extracted. For graphical presentation these probabilities are projected on (x,y) plane that gives $f_p(n_x, n_y) = \sum_{n_z} f(n_x, n_y, n_z)$ and $f_{pd}(x,y)$, respectively. The typical examples of projected probability distributions f_p and f_{pd} for different values of disorder W are shown in Fig. 1. They clearly show that in the presence of interaction the ground state remains localized not only in the noninteracting localized phase ($W > W_c$) but also in the phase delocalized at $U = 0$ ($W < W_c$). However the localized interacting phase abruptly disappears if disorder W becomes smaller than some critical value $W_s(U) < W_c$. For $W < W_s$ the ground state becomes delocalized over the whole lattice. At the same time the peaked structure of the interparticle distance distribution f_{pd} clearly shows that the particle dynamics remains correlated. In this sense we can say that the pairs exist for any strength of disorder but for $W > W_s$ they are localized while for $W < W_s$ they become delocalized. We assume that such a transition should correspond to the transition from insulating to superconducting phase in the many-body problem.

To analyze this transition in a more quantitative way we

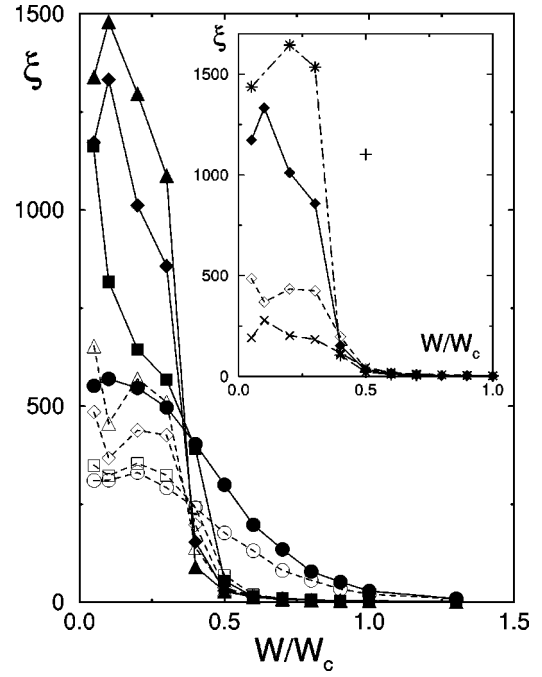


FIG. 2. Dependence of IPR ξ on the rescaled disorder strength W/W_c for $U = 0$ ($\circ$), $U = -2V$ ($\square$), $U = -4V$ ($\diamond$), $U = -6V$ ($\triangle$) (empty/full symbols are for $L = 10/L = 12$). The inset shows the data for $U = -4V$ at $L = 8$ ($\times$), 10 ($\diamond$), 12 (full diamond), 14 (*); ξ obtained in the Cooper approximation (see text) for $U = -4V$, $L = 14$ is shown by (+). Statistical error bars are smaller than symbol size. Lines are drawn to adapt an eye.

determine the inverse participating ratio (IPR) ξ for one particle probability: $1/\xi = \langle \sum_{\mathbf{n}} f^2(\mathbf{n}) \rangle$, where brackets mark the averaging over 100 disorder realizations. Physically, ξ counts the number of sites occupied by one particle in the ground state. Its variation with system size L is shown in Fig. 2 for different strength of interaction and disorder. This figure shows that in the localized interacting phase $W > W_s(U)$ the ξ value remains finite and independent on size L while in the delocalized phase it grows proportionally to the total number of sites L^3 . To find the critical disorder strength W_s we compare the relative change of ξ with L ($8 \leq L \leq 14$) with its relative change for the noninteracting case at the critical point $W = W_c$. Then $W_s(U)$ is defined as such a disorder at which the relative variation of ξ at $|U| > 0$ becomes larger than in the case $U = 0$. We note that near the transition the change of ξ with W is so sharp that the delocalization border is not really sensitive to the choice of definition. We also checked that the change of ω_D does not affect significantly the border $W_s(U)$.¹⁶ The phase diagram for SIT defined in the way described above is presented in Fig. 3. It shows that the interaction makes localization stronger so that the localized (insulating) phase penetrates in the noninteracting (normal) metallic phase. However, for sufficiently weak disorder delocalization takes over. This is in agreement with the Anderson theorem according to which a weak disorder in metallic phase does not affect superconductivity.¹⁵ Qualitatively we can say that the attraction creates a pair with a total mass (m_p) twice larger than the one particle mass and due to that the critical disorder strength for localization becomes twice smaller ($W_s/W_c \approx 0.5$) since the effective hopping $V_{eff} \propto 1/m_p$. Of course

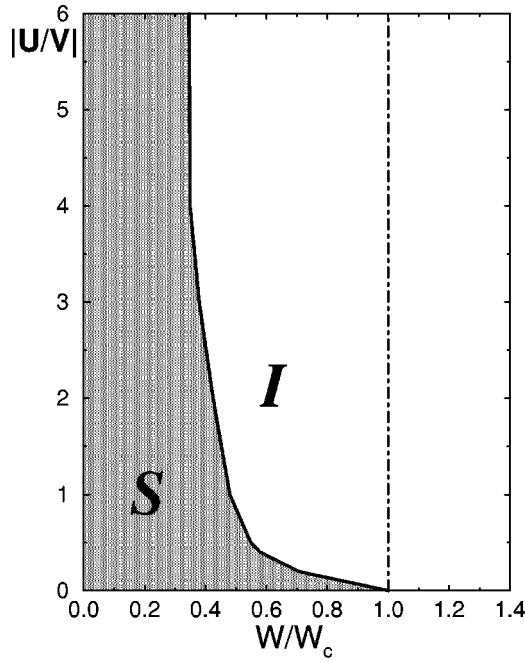


FIG. 3. Phase diagram for transition from localized (insulating I) to delocalized (superconducting S) phase in the ground state of the generalized Cooper problem (2). Vertical dashed line shows the Anderson transition in absence of interaction.

this argument is not sufficient to explain the exact border $W_s(U)$ obtained numerically but it gives a reasonable estimate in the case of strong interaction. Further studies are required to explain the form of the border.

Another interesting physical characteristic is the coupling energy Δ of two particles in the presence of interaction. Its value is equal to $\Delta = 2E_F - E_g$ where E_g is the ground state energy in the presence of interaction and $2E_F$ is equal to E_g at $U=0$. In the standard Cooper problem $\Delta > 0$ is related to the BCS gap and determines the correlation length of the pair.¹⁷ It is interesting to understand how Δ varies with the disorder strength W at fixed interaction U . This dependence is presented in Fig. 4. It clearly shows that Δ grows significantly with the increase of W at constant interaction U . We attribute the physical origin of this growth to the fact that at stronger disorder the rate of separation between particles becomes smaller that enhances enormously the interaction between them, hence Δ , as it was discussed in Ref. 14. The dependence of Δ on W is changed drastically near W_s that is related to the delocalization transition.

On the same figure we compare the exact value of Δ , found numerically in the model (2), with its value Δ_C obtained by the Cooper approximation (mean field value). In this approximation only the matrix elements Q_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} with $m_1 = m_2$ and $m'_1 = m'_2$ are kept in Eq. (2) that corresponds to the original Cooper ansatz.⁵ The comparison shows that at weak disorder Δ_C is very close to exact Δ (see the inset where dotted line coincides with full diamonds for $W/W_c < 0.35$) while when approaching the Anderson transition and beyond it ($W/W_c > 0.35$) Δ_C becomes much smaller than Δ . This leads to the conclusion that the nondiagonal matrix elements ($m_1 \neq m_2$ and $m'_1 \neq m'_2$), neglected in the Cooper approximation, play an important role near MIT. This is also clear from Fig. 1 according to which the local-

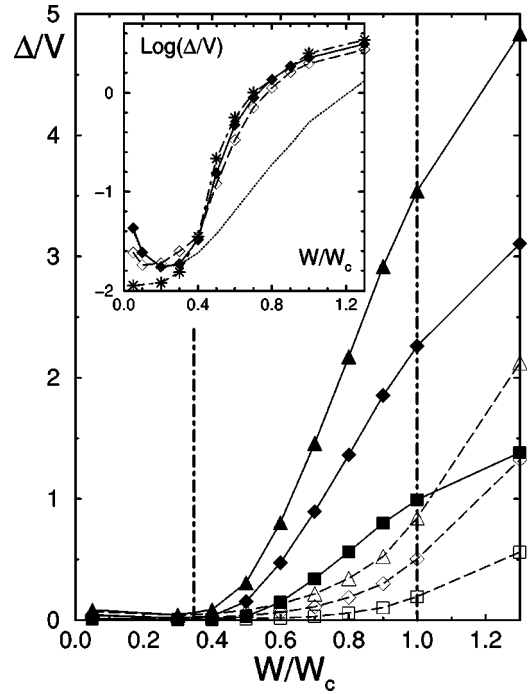


FIG. 4. Variation of the ground state coupling energy Δ in the model (2) with the rescaled disorder strength W/W_c for $L = 12$ and different interaction $U = -2V$ (full box), $U = -4V$ (full diamond), $U = -6V$ (full triangle); the open symbols are for the same U values but in the Cooper approximation (see text). The vertical dashed line $W/W_c = 1$ marks the MIT at $U = 0$; the other vertical dashed line $W/W_c = 0.35$ marks approximately the SIT line from Fig. 3 for $|U| \geq 2$. The inset shows the case $U = -4V$ for $L = 10$ ($\diamond$), $L = 12$ (full diamond), $L = 14$ (*); the dotted line shows the Cooper approximation case with $U = -4V$ and $L = 12$ from the main figure; logarithm is decimal.

ized states exist in the noninteracting metallic phase while according to the Cooper approximation pairs should be delocalized for $W < W_c$. Indeed, for example the graphical image as in Fig. 1 shows that for $U = -4V$, $W = 0.5W_c > W_s$ the probability f_p obtained in the Cooper approximation from Eq. (2) is completely delocalized contrary to the real case in which the ground state is localized (Fig. 1). In addition to this case the average IPR within the Cooper approximation is much larger than its real value obtained without approximation (see inset in Fig. 2).

The data presented in the insets of Figs. 2 and 4 clearly show that in the localized interacting phase $W > W_s$ the lattice size is sufficiently larger than the localization length and the values of ξ and Δ correspond to the limit $L \rightarrow \infty$.¹⁸ Indeed, for example for $W = 0.4W_c$, $U = -4V$ the value of Δ varies only by 6% around the average $\Delta = 0.035V$ when L changes from 10 to 16. On the contrary, the first order correction in U to Δ , computed over noninteracting delocalized eigenstates, drops 4 times ($\propto 1/L^3$). This fact, in combination with other data in the inset of Fig. 4 and a peaked probability distribution in interparticle distance $f_d(\mathbf{r})$ in the middle column of Fig. 1, clearly shows the formation of localized pairs in the noninteracting metallic phase. At the same time for weak disorder $W/W_c < 0.2$ the asymptotic value of Δ becomes very small and very large values of L are required to reach it. Such large L are also desirable to see better the

propagation of pairs with large size. We note that Δ increases strongly in the metallic noninteracting phase at $W_s < W < W_c$. However in this region the TIP pair remains localized due to interaction that does not allow to obtain a gain in the value of $\Delta \approx T_c$. It would be interesting to find some possibility to delocalize the pair in this region and to keep large Δ at the same time.

In conclusion, our numerical studies of the generalized Cooper problem show that at sufficiently strong disorder, at which, however, the noninteracting particles are still delocalized (noninteracting metallic phase), the attractive interaction with a strength larger than some critical value leads to localization of pairs in the ground state, contrary to the Cooper ansatz. This localization, however, disappears at sufficiently weak disorder in agreement with the Anderson theorem.¹⁵ The phase diagram for the transition to delocalized states is determined as a function of disorder and interaction. The

appearance of SIT in the normal (noninteracting particles) metallic phase is in a qualitative agreement with the experiments⁴ which show that the “ground state” of the normal state of YBCO is metallic. Indeed, an applied magnetic field effectively decreases the attraction U between quasiparticles and also eliminates the supraconducting gap that should drive the system to the normal (noninteracting particles) metallic phase. This is in a qualitative agreement with our results according to which the decrease in interaction strength U can lead to a more delocalized state. However, further studies of the generalized Cooper problem with a magnetic field are required for a quantitative analysis of magnetic field effects.

We thank V. V. Flambaum, K. Frahm, and O. P. Sushkov for stimulating discussions, and the IDRIS in Orsay and the CICT in Toulouse for access to their supercomputers.

*URL: <http://w3-phystheo.ups-tlse.fr/~dima>

¹G. S. Boebinger, Y. Ando, A. Passner, T. Kimura, M. Okuya, J. Shimoyama, K. Kishio, K. Tamasaku, N. Ichikawa, and S. Uchida, Phys. Rev. Lett. **77**, 5417 (1996).

²V. F. Gantmakher, L. P. Kozeeva, A. N. Lavrov, D. A. Pushin, D. V. Shovkun, and G. E. Tsydynzhapov, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **65**, 834 (1997) [JETP Lett. **65**, 870 (1997)].

³V. F. Gantmakher, M. V. Golubkov, V. T. Dolgoplov, G. E. Tsydynzhapov, and A. A. Shashkin, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **68**, 337 (1998) [JETP Lett. **68**, 363 (1998)].

⁴K. Segawa and Y. Ando, cond-mat/9908124 (unpublished).

⁵L. N. Cooper, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).

⁶A. Mirlin, Phys. Rep. **326**, 259 (2000).

⁷D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **73**, 2607 (1994); p. 201 in Ref. 10.

⁸Y. Imry, Europhys. Lett. **30**, 405 (1995); p. 211 in Ref. 10.

⁹D. Weinmann, A. Müller-Groeling, J.-L. Pichard, and K. Frahm, Phys. Rev. Lett. **75**, 1598 (1995); p. 221 in Ref. 10.

¹⁰*Correlated Fermions and Transport in Mesoscopic Systems*, edited by T. Martin, G. Montambaux, and J. Trân Thanh Vân (Editions Frontières, Gif-sur-Yvette, 1996).

¹¹B. I. Shklovskii, B. Shapiro, B. R. Sears, P. Lambrianides, and H. B. Shore, Phys. Rev. B **47**, 11 487 (1993).

¹²T. Ohtsuki, K. Slevin, and T. Kawarabayashi, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, 655 (1999).

¹³In this case we found that $\omega_D/V \approx 0.5W/W_c + 0.1$.

¹⁴Ph. Jacquod and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **78**, 4986 (1997).

¹⁵P. W. Anderson, J. Phys. Chem. Solids **11**, 26 (1959); P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Benjamin, New York, 1966), p. 157.

¹⁶For example $W_s/W_c \approx 0.35/0.36$ for $\alpha = 30/15$ at $U = -4V$.

¹⁷For $U < 0$ the value of Δ is always positive, however, one should also show that Δ is independent of system size L to attribute to it the usual meaning of coupling energy. The data in the inset of Fig. 4 clearly show that this is the case unless the size of the pair becomes comparable with the lattice size available for our numerical simulations.

¹⁸We checked that for $W > W_s$, e.g., $W = 12V$, $U = -4V$, the excited states with $E - 2E_F < 0$ also remain localized, J. Lages and D. L. Shepelyansky (unpublished).

Proceeding *Electronic Correlations : from meso- to nano-physics* des “Rencontres
de Moriond 2001”

Excited States of the Cooper Problem in a Three-Dimensional Disordered System

J. Lages

EXCITED STATES OF THE COOPER PROBLEM IN A THREE-DIMENSIONAL DISORDERED SYSTEM

JOSÉ LAGES

*Laboratoire de Physique Quantique, UMR 5626 du CNRS, Université Paul Sabatier, F-31062 Toulouse
Cedex 4, France*

This work presents the study of the excited states of the Cooper problem in the three-dimensional Anderson model. It is shown that the excited pair states remain localized while their excitation energy ΔE is negative. For $\Delta E > 0$ the particles are delocalized over the three-dimensional lattice.

The Cooper problem¹ is the cornerstone of the well known BCS theory for superconductivity. Even if the Cooper problem deals with only two interacting particles (TIP) above a frozen Fermi sea, it nevertheless captures the essential physical features of the superconducting states. Indeed, in comparison with the BCS theory, the solution of the Cooper problem leads to the appearance of coupled states with a qualitatively correct coupling energy and pair size. Then it seems natural that the study of the Cooper problem with disorder could provide a useful step in the understanding of the superconductivity in presence of relatively strong disorder. The first studies on the Cooper problem with disorder were done for three-dimensional² and two dimensional³ systems. These studies^{2,3} were focused on the properties of the ground state of two particles above a frozen Fermi sea coupled via an on-site attractive Hubbard interaction. This interaction creates a phase of bi-particle localized states (BLS) in the regime of disorder where non-interacting states are delocalized. At the same time the mean-field solution of the Cooper problem (Cooper ansatz) gives delocalized pairs. This shows that the non-diagonal matrix elements of interaction play an important role in presence of disorder. These TIP results are in qualitative agreement with recent many-body investigations^{4,5} of the ground state of the attractive Hubbard model with disorder.

Here the studies are concentrated on the properties of excited TIP states. For that purpose we introduce the Anderson Hamiltonian for one-particle,

$$H_1 = \sum_{\mathbf{n}} E_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}| + V \sum_{\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{m}| \quad (1)$$

where $\mathbf{n}$ and $\mathbf{m}$ are the index vectors on the three-dimensional lattice with periodic conditions, $\langle, \rangle$ denotes nearest neighbor sites, V is the hopping term and the random on-site energies $E_{\mathbf{n}}$ are homogeneously distributed in the energy interval $\left[-\frac{W}{2}, \frac{W}{2}\right]$, where W is the disorder strength. To study the effects of the attractive interaction ($U < 0$) on two particles near the Fermi sea we generalize the Cooper approach¹ for the disordered case. We write the TIP Hamiltonian in the basis of one-particle eigenstates of the Hamiltonian (1). In this basis the Schrödinger equation for TIP reads

$$(E_{m_1} + E_{m_2}) \chi_{m_1, m_2}^{\lambda} + U \sum_{m'_1, m'_2} Q_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} \chi_{m'_1, m'_2}^{\lambda} = E_{\lambda} \chi_{m_1, m_2}^{\lambda}. \quad (2)$$

Here E_m are the one-particle eigenenergies corresponding to the one-particle eigenstates $|\phi_m\rangle$ of H_1 and $\chi_{m_1, m_2}^{\lambda}$ are the components in the non-interacting eigenbasis $|\phi_{m_1} \otimes \phi_{m_2}\rangle$ of the λ^{th} TIP eigenstate $|\chi^{\lambda}\rangle$ corresponding to the eigenenergy E_{λ} . The matrix elements $U Q_{m_1, m_2, m'_1, m'_2}$ give the interaction induced transitions between non-interactive eigenstates $|\phi_{m_1} \otimes \phi_{m_2}\rangle$ and $|\phi_{m'_1} \otimes \phi_{m'_2}\rangle$. These matrix elements are obtained by writing the Hubbard interaction in the non-interactive eigenbasis of the model (1). In analogy with the original Cooper problem¹ the

summation in (2) is done over the non-interacting states above the Fermi level, in the labelling $E_{m'_{1,2}} > E_F$ corresponds to $m'_{1,2} > 0$. The Fermi energy is determined by a fixed filling factor $\nu = 1/2$. To keep similarity with the Cooper problem we restrict the summation on $m'_{1,2}$ by the condition $1 < m'_1 + m'_2 < M$. In this way the cut-off of M unperturbed orbitals introduces an effective phonon frequency $\omega_D \propto M/L^3 = 1/\alpha$ where L is the linear system size. When varying L we keep α fixed so that the phonon frequency is independent of the system size. All the data in this work are obtained with $\alpha = 30$ but we also checked that the results are not sensitive to the change of α .

In order to analyze the properties of the TIP excited states of the disordered Cooper problem we compute the energy level spacing distribution $P(s)$ obtained by the diagonalization of (2). From $P(s)$ we calculate

$$\eta = \frac{\int_0^{s_0} [P(s) - P_{WD}(s)] ds}{\int_0^{s_0} [P_P(s) - P_{WD}(s)] ds}. \quad (3)$$

Here $P_P(s) = \exp(-s)$ and $P_{WD}(s) = \frac{\pi s}{2} \exp\left(-\frac{\pi s^2}{4}\right)$ are respectively the Poisson and the Wigner-Dyson distributions, and $s_0 \simeq 0.4729$ is their intersection point. In this way, η varies from 1 [$P(s) = P_P(s)$] to 0 [$P(s) = P_{WD}(s)$] and thus characterizes a transition from localized to delocalized states. For example for the one-particle problem this method allows to detect efficiently the Anderson transition⁶.

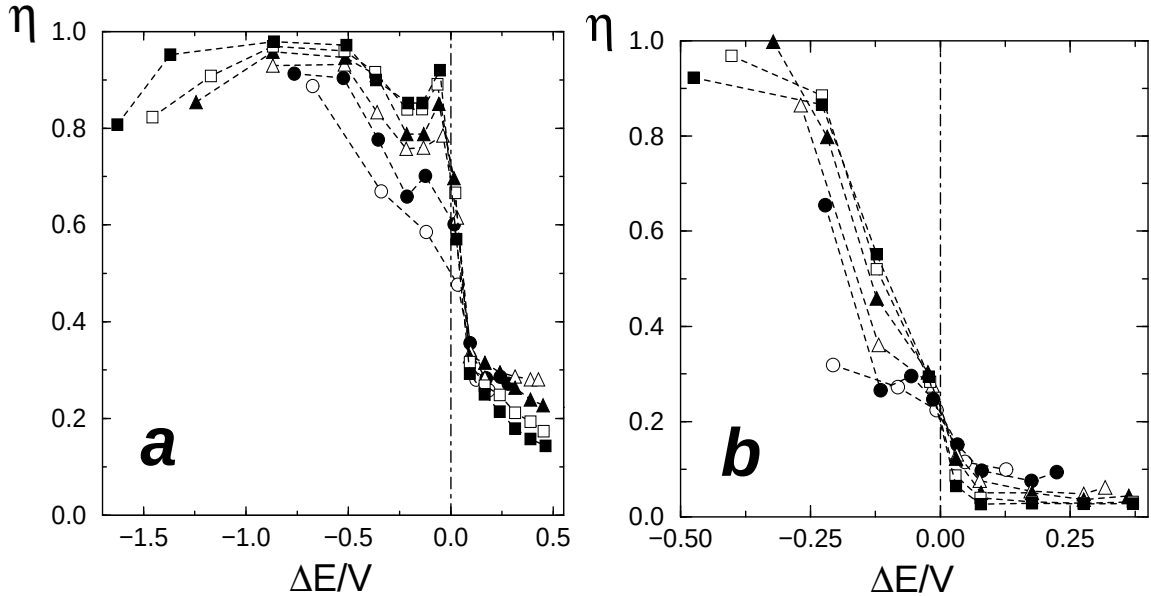


Figure 1: Dependence of η on the excitation energy ΔE for (a) $W = 18V > W_c \simeq 16.5V$ and (b) $W = 12V < W_c$. The interaction strength is $U = -4V$ and the linear lattice size is $L = 6$ (o), 7 (•), 8 (△), 10 (full triangle), 12 (square) and 14 (full square). The number of disorder realization used is $N_D = 3000$ and $\alpha = 30$.

In Fig. 1, η is shown for disorder strength $W = 18V$ (a) and $W = 12V$ (b), an interaction strength $U = -4V$ and for different linear lattice size, from $L = 6$ up to $L = 14$. η is presented versus the excitation energy $\Delta E = E - 2E_F$ where E is the energy of the two interacting particles. Without interaction for $W = 18V > W_c \simeq 16.5V$ ^a the one particle states are well localized (see Fig. 2a). When the on-site Hubbard attraction is switched on, coupled states appear below the Fermi energy of two non-interacting particles ($\Delta E < 0$). Fig. 1a clearly shows that at the thermodynamic limit the coupled states with $\Delta E < 0$ are localized ($\eta \rightarrow 1$). As

^a At the band center $W_c \simeq 16.5V$ is the critical value of the disorder at which the Anderson transition occurs^{6,7}.

$W > W_c$ all the non-interacting orbitals are localized in the lattice basis. The on-site attractive interaction acts as an additional constraint forcing the two particles (with opposite spin) to stay together in the same well of potential (see Fig. 2b). Above the Fermi energy, η tends slowly to 0 indicating that these unbounded states ($\Delta E > 0$) are delocalized. This delocalization is due to the fact that an interaction (repulsive or attractive) between particles destroys single particle localization and leads to a propagation of pairs of size l_1 over a distance l_c much larger than l_1 ^{8,9}. The enhancement factor κ is then determined by the density ρ_2 of two-particle states coupled by the interaction and the interaction induced transition rate Γ_2 between noninteracting states, so that $\kappa = \Gamma_2 \rho_2$. For $\Delta E > 0$ the density ρ_2 grows with the excitation energy ($\rho_2 \propto \Delta E$)⁹ that strongly enhances the delocalization of pairs (see Fig. 2c).

In Fig. 1b, η is shown for $W = 12V < W_c$. For this regime the non-interacting one-particle states are delocalized (see Fig. 2d). For the different linear lattice size L the ground state is still localized ($\eta \simeq 1$) in agreement with². Indeed as $W/W_c \simeq 0.72 > W_s/W_c \simeq 0.35$ the TIP ground state is in the BLS phase, where W_s is the critical value of the disorder for the superconductor-insulator transition found in² for TIP pairs. In the region $-0.25V < \Delta E < 0$ although η drops from 0.9 to 0.25 a certain localization of TIP pairs still remains (see Fig. 2e). For $\Delta E > 0$, the TIP states become delocalized (see Fig. 2f).

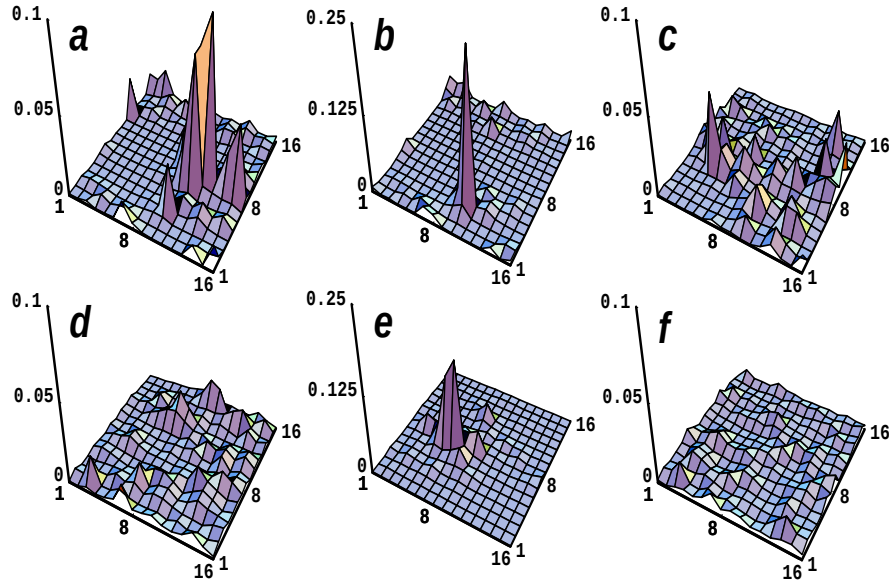


Figure 2: One-particle probability distribution $f_\lambda(\mathbf{n}_1) = \sum_{\mathbf{n}_2} |\chi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2}^\lambda|^2$ extracted from TIP eigenstates $|\chi^\lambda\rangle$ and projected on a (x,y)-plane. The linear lattice size is $L = 16$. $f_\lambda(\mathbf{n}_1)$ is presented for $W = 18V$ [(a) ground state without interaction, (b) excited states $\lambda = 25$ with $\Delta E_\lambda \simeq -0.25V$ for $U = -4V$ and (c) excited states $\lambda = 758$ with $\Delta E_\lambda \simeq 0.25V$ for $U = -4V$] and for $W = 12V$ [(d) ground state without interaction, (e) excited states $\lambda = 83$ with $\Delta E_\lambda \simeq -0.05V$ for $U = -4V$ and (f) excited states $\lambda = 512$ with $\Delta E_\lambda \simeq 0.125V$ for $U = -4V$].

In order to characterize the wave function properties of the excited states of the disordered Cooper problem, we compute

$$\xi(E) = \left\langle \left(\sum_{m_1, m_2} |\chi_{m_1, m_2}^\lambda|^4 \right)^{-1} \right\rangle_{E_\lambda \in [E-\epsilon, E+\epsilon]} \quad (4)$$

where the brackets mark the averaging over $N_D = 400$ realizations of the disorder and over an energy interval 2ϵ centered on E . The inverse participation ratio (IPR) $\xi(E)$ counts the average number of non-interacting states $|\phi_{m_1} \otimes \phi_{m_2}\rangle$ occupied by the TIP wave functions belonging to

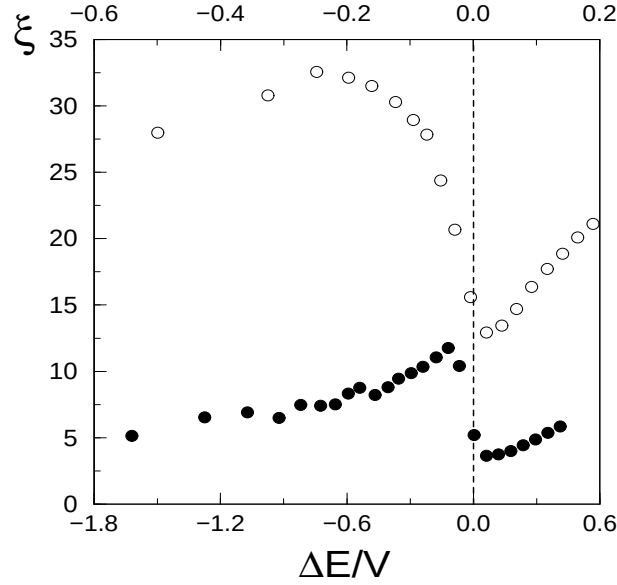


Figure 3: IPR ξ as a function of the coupling energy ΔE for a disorder strength $W = 12$ (○) [$\Delta E/V$ is then read on the upper horizontal axis] and $W = 18$ (●) [$\Delta E/V$ is then read on the lower horizontal axis]. The interaction strength is $U = -4V$ and the linear lattice size $L = 12$. $N_D = 300$ disorder realization are used, $\alpha = 30$, $2\epsilon \simeq 0.05$ for $W = 18$ and $2\epsilon \simeq 0.025$ for $W = 12V$.

energy interval $[E - \epsilon, E + \epsilon]$. Fig. 3 shows the IPR as a function of the coupling energy ΔE for $W > W_c$ and $W < W_c$. For $W = 18V$ as the one-particle noninteracting states are localized, only few of these states ($\xi \simeq 5 - 10$) are enough to build the TIP localized states with $\Delta E < 0$. On the contrary for $W = 12V$ the TIP localized states ($\Delta E < 0$) occupy more noninteracting states ($\xi \simeq 30$) than for $W = 18V$ (Fig. 3). Indeed, for $W < W_c$ the one-particle noninteracting states are delocalized and it is necessary to have a sufficient number of these states to see the TIP eigenstates localization induced by the quantum interferences.

In conclusion, the study of the excited states of the disordered Cooper problem shows that the BLS phase found in ^{2,3,4} exists for TIP eigenstates with energy $\Delta E < 0$. This phase is destroyed for TIP eigenstates above the Fermi level $\Delta E > 0$.

Acknowledgments

I thank D.L Shepelyansky for useful and stimulating discussions.

References

1. L.N. Cooper, *Phys. Rev.* **104**, 1189 (1956).
2. J. Lages and D.L. Shepelyansky, *Phys. Rev. B* **62**, 8665 (2000).
3. J. Lages and D.L. Shepelyansky, cond-mat/0104194.
4. B. Srinivasan and D.L. Shepelyansky, cond-mat/0102055.
5. J. Lages, G. Benenti, D.L. Shepelyansky, cond-mat/0101265, to appear in *Phys. Rev. B*.
6. B. I. Shklovskii, B. Shapiro, B. R. Sears, P. Lambrianides and H. B. Shore, *Phys. Rev. B* **47**, 11487 (1993).
7. T.Ohtsuki, K.Slevin, T.Kawarabayashi, *Ann. Physik (Leipzig)* **8**, 655 (1999).
8. D.L. Shepelyansky, *Phys. Rev. Lett.* **73**, 2607 (1994).
9. Y. Imry, *Europhys. Lett.* **30**, 405 (1995).

Physical Review B 64 (2001), 094502

Phase of biparticle localized states for the Cooper problem in two-dimensional disordered systems

J. Lages et D. L. Shepelyansky

Phase of biparticle localized states for the Cooper problem in two-dimensional disordered systems

J. Lages and D. L. Shepelyansky*

Laboratoire de Physique Quantique, UMR 5626 du CNRS, Université Paul Sabatier, F-31062 Toulouse Cedex 4, France

(Received 11 April 2001; published 31 July 2001)

The Cooper problem is studied numerically for the Anderson model with disorder in two dimensions. It is shown that the attractive Hubbard interaction creates a phase of biparticle localized states in the regime where noninteracting states are delocalized. This phase cannot be obtained in the mean-field approximation and the pair coupling energy is strongly enhanced in this regime. The effects of magnetic field are studied and it is shown that under certain conditions they lead to delocalization.

DOI: 10.1103/PhysRevB.64.094502

PACS number(s): 74.20.-z, 74.25.-q, 74.40.+k

I. INTRODUCTION

Recently a great deal of attention has been paid to investigation of the superconductor-insulator transition (SIT) in systems with disorder. Various approaches are used to study this problem including analytical theoretical methods,^{1,2} intensive numerical simulations of many-body quantum systems with quantum Monte Carlo methods,^{3,4} as well as mean field numerical simulations.⁵⁻⁷ These theoretical studies are stimulated by challenging experiments on the SIT in disordered films^{8,9} and high- T_c superconductors.^{10,11} The results obtained in Ref. 10 show an interesting correlation between the optimal doping and the Anderson transition in the normal phase obtained by application of a strong pulsed magnetic field. Even if the experiments^{10,11} are done with three-dimensional crystals the coupling between two-dimensional planes is relatively weak and the two-dimensional effects should play an important role. Due to that, it is relevant to study the SIT in two-dimensional disordered systems. In the case of weak disorder the Anderson theorem^{12,13} guarantees that the superconductivity is not affected by disorder. However it is not obvious if the theorem is still valid in the presence of relatively strong disorder. It is quite possible that in this regime the interplay of disorder and interaction can lead to the appearance of new physical effects. The theoretical investigation of this regime is however rather difficult. The existing analytical methods are not well adapted to the regime of strong interaction and disorder. At the same time the numerical studies also meet with serious difficulties. Indeed the direct diagonalization methods are restricted to relatively small system size since the Hilbert space grows exponentially with the number of particles.^{14,15} The quantum Monte Carlo methods are not so sensitive to a huge size of the Hilbert space but still they are restricted to systems of quite moderate size (for example lattices of 8×8 sites in Ref. 4).

In view of the above numerical difficulties it is natural to develop the approach introduced by Cooper¹⁶ and to study the problem of two particles with attractive interaction near the frozen Fermi sea in the presence of disorder. Even if the original Cooper problem of two particles without disorder does not reproduce exactly the BCS theory of the many-body problem it nevertheless captures the essential physical properties of the system and gives the appearance of coupled

states with a qualitatively correct coupling energy and correlation length. Without disorder the Cooper problem can be solved exactly. However in the presence of disorder the situation becomes more complicated even for only two interacting particles (TIP). Indeed, for relatively strong disorder even the matrix elements of interaction between noninteracting eigenstates cannot be obtained analytically and due to that the problem should be studied numerically. The first numerical studies of the Cooper problem in the presence of disorder were done in Ref. 17 for two particles with attractive Hubbard interaction in the three-dimensional Anderson model. These studies showed that the interaction can lead to localization of pairs in the noninteracting metallic phase. This result is qualitatively different from the mean-field solution of the Cooper problem in the presence of disorder (Cooper ansatz), which gives delocalized pairs for the same parameters. This shows that the nondiagonal interaction-induced matrix elements play an important role and lead to new physical effects, which are not captured by the mean-field approximation.

In this paper we study the Cooper problem on a two-dimensional lattice with disorder described by the Anderson model. Our numerical studies show that near the Fermi level the attractive Hubbard interaction between two particles creates localized pairs in the regime where noninteracting eigenstates are well delocalized (extended). The coupling energy of these pairs is much larger than the coupling energy given by the mean-field solution (Cooper ansatz). Therefore energetically it is more favorable to have an insulator with localized pairs instead of usual weakly coupled delocalized Cooper pairs. This result indicates the appearance of a new phase of biparticle localized states (BLS phase), which appears in the regime when noninteracting states are extended (metallic). It is in a qualitative agreement with the quantum Monte Carlo studies obtained recently in Toulouse.¹⁸ This BLS phase is qualitatively different from the BCS solution, which corresponds to weakly coupled delocalized pairs.

The paper is organized as follows. The properties of the BLS phase without magnetic field are discussed in Sec. II. The effects of perpendicular magnetic field on the ground-state properties in the presence of interaction and disorder are analyzed in Sec. III. The discussion of the results is presented in the last section.

II. GROUND-STATE PROPERTIES WITHOUT MAGNETIC FIELD

To study the Cooper problem of two interacting particles in the presence of disorder we use the two-dimensional Anderson model. In this model the one-particle eigenstates are determined by the Hamiltonian

$$H_1 = \sum_{\mathbf{n}} E_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}| + V \sum_{\langle \mathbf{n}, \mathbf{m} \rangle} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{m}|, \quad (1)$$

where $\mathbf{n}$ and $\mathbf{m}$ are index vectors on the two-dimensional square lattice with periodic boundary conditions, V is the nearest-neighbor hopping term, and the random on-site energies $E_{\mathbf{n}}$ are homogeneously distributed in the energy interval $[-W/2, W/2]$, where W is the disorder strength. This one-particle model has been extensively studied by different authors, see for example Ref. 19. For the two-particle problem on this two-dimensional lattice we consider on-site attractive Hubbard interaction between particles of strength $U < 0$. We consider the particles in the singlet state with zero total spin so that the spatial wave function is symmetric with respect to particle permutation (interaction is absent in the triplet state).

To investigate the effects of interaction between particles near the Fermi level we generalize the Cooper approach for the case with disorder. To do that we rewrite the TIP Hamiltonian in the basis of one-particle eigenstates of the Hamiltonian (1). In this basis the Schrödinger equation for TIP reads

$$(E_{m_1} + E_{m_2}) \chi_{m_1, m_2} + U \sum_{m'_1, m'_2} Q_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} \chi_{m'_1, m'_2} = E \chi_{m_1, m_2}. \quad (2)$$

Here E_m are the one-particle eigenenergies corresponding to the one-particle eigenstates $|\phi_m\rangle$ and χ_{m_1, m_2} are the components of the TIP eigenstate in the noninteracting eigenbasis $|\phi_{m_1}, \phi_{m_2}\rangle$. The matrix elements $U Q_{m_1, m_2, m'_1, m'_2}$ give the interaction-induced transitions between noninteracting eigenstates $|\phi_{m_1}, \phi_{m_2}\rangle$ and $|\phi_{m'_1}, \phi_{m'_2}\rangle$. These matrix elements are obtained by rewriting the Hubbard interaction in the noninteracting eigenbasis of model (1). In the analogy with the original Cooper problem¹⁶ the summation in Eq. (2) is done over the states above the Fermi level with eigenenergies $E_{m'_{1,2}} > E_F$ with $m'_{1,2} > 0$. The Fermi energy $E_F \approx 0$ is determined by a fixed filling factor $\nu = \frac{1}{2}$. To keep the similarity with the Cooper problem we restrict the summation on $m'_{1,2}$ by the condition $1 < m'_1 + m'_2 \leq M$. In this way the cutoff with M unperturbed orbitals introduces an effective phonon frequency $\omega_D \propto M/L^2 = 1/\alpha$ where L is the linear system size. When varying L we keep α fixed so that the phonon frequency is independent of system size. All the data in this work are obtained with $\alpha = 15$ but we also checked that the results are not sensitive to the change of α . We note that a similar TIP model was considered for the problem of two repulsive quasiparticles near the Fermi level in Refs. 20 and 21. However, there the studies mainly addressed the proper-

ties of excited states while here we will investigate only the properties of the ground state in the case of an attractive interaction. We also note that the attractive case in one dimension was discussed in Refs. 22 and 23.

To determine the characteristics of the ground state of the generalized Cooper problem (2) we solve numerically the Schrödinger equation. After that we rewrite the obtained ground state in the original lattice basis with the help of the relation between the lattice basis and one-particle eigenstates $|\mathbf{n}\rangle = \sum_m R_{\mathbf{n}, m} |\phi_m\rangle$. As a result of this procedure we obtain the two-particle probability distribution $F(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$ from which we extract the one-particle probability $f(\mathbf{n}) = \sum_{\mathbf{n}_2} F(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$ and the probability of interparticle distance $f_d(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}_2} F(\mathbf{r} + \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_2)$ with $\mathbf{r} = \mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_2$.

Typical examples of such probability distributions are presented in Fig. 1. Without interaction, at given disorder strength $W = 2V$ and $W = 5V$ both particles are delocalized on the lattice of given size $L = 40$. In the presence of interaction $U = -2V$ the ground state remains delocalized for $W = 2V$ and the probability distribution is rather similar to the case of $U = 0$ [compare Figs. 1(a) and 1(c)]. On the contrary for $W = 5V$, interaction completely changes the ground-state properties leading to a clear localization of both particles near each other [compare Figs. 1(b) and 1(e)]. The wave function is localized in a rather compact way and the finite size of the lattice definitely does not affect this localization. Figure 1(f) shows that in this localized state the particles remain correlated close to each other. This biparticle localized ground state is obtained by exact diagonalization of Eq. (2) where all nondiagonal interaction-induced matrix elements are taken into account. It is interesting to compare this solution with the mean-field approximation (Cooper ansatz) in which only diagonal terms are taken into account. Within the Cooper ansatz the particles occupy the same noninteracting orbitals and only matrix elements Q_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} with $m_1 = m_2$ and $m'_1 = m'_2$ are kept in Eq. (2). The ground state obtained from the Cooper ansatz is shown in Figs. 1(g) and 1(h) and is clearly delocalized contrarily to the strongly localized ground state obtained from exact diagonalization of Eq. (2) and shown in Figs. 1(e) and 1(f). In fact the ground state from the Cooper ansatz is closer to the delocalized noninteracting eigenstate in Fig. 1(b) than to the real eigenstate in Fig. 1(e) in the presence of interaction. The results of Fig. 1 definitely show that the attractive interaction leads to localization of pairs in the regime when noninteracting states are delocalized. This localization is not captured by the Cooper ansatz, which neglects nondiagonal matrix elements and due to that misses the essential physical effect.

In order to study the ground-state properties of our model in a more quantitative way it is convenient to compute the inverse participation ratio (IPR) ξ defined as $\xi^{-1} = \langle \sum_{\mathbf{n}} f^2(\mathbf{n}) \rangle$ where the brackets mark the averaging over N_D disorder realizations (typically $N_D = 100$). Physically, ξ gives the number of lattice sites occupied by one particle in the TIP ground state. The dependence of the IPR ξ on the disorder strength W is shown in Fig. 2 for different strengths of interaction U and different system sizes L . In the absence of interaction, for finite system sizes used in our numerical

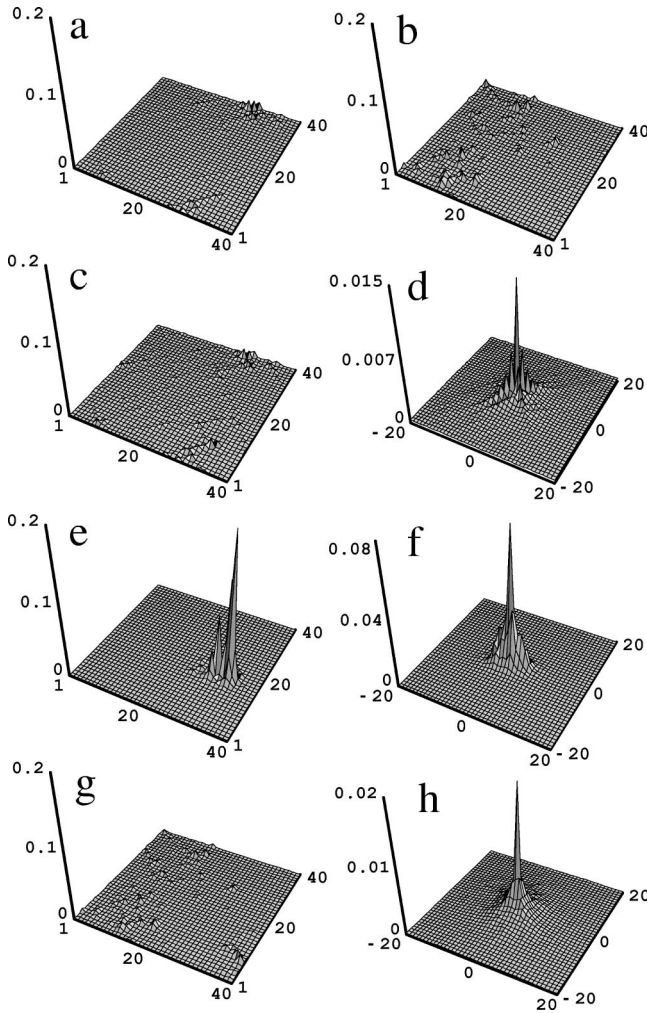


FIG. 1. Ground-state probability distributions of two interacting particles for the Cooper problem with disorder on a lattice of linear size $L=40$. The cases (a) and (b) show the one-particle probability distribution $f(\mathbf{n})$ in the absence of interaction ($U=0V$) for the disorder strength $W=2V$ (a) and $W=5V$ (b). All other cases are obtained for the Hubbard interaction $U=-2V$. The cases (c) and (d) show the one-particle probability $f(\mathbf{n})$ (c) and the interparticle distance probability $f_d(\mathbf{r})$ (d) for $W=2V$. The same probabilities are shown in cases (e) and (f) for $W=5V$ [$f(\mathbf{n})$ for (e) and $f_d(\mathbf{r})$ for (f)]. The cases (g) and (h) present the probabilities for the same $W=5V$ as in cases (e) and (f) however here the ground state is obtained in the mean-field approximation of the Cooper ansatz. All data are given for the same realization of disorder.

simulations ($L \leq 40$), the ground state is delocalized for disorder $W \leq 5V$ and it becomes localized for $W > 5V$. On the contrary in the presence of interaction the TIP ground state becomes localized for $W > W_c \approx 2V$ at $U = -4V$ and for $W > W_c \approx 3V$ at $U = -2V$. Indeed for $W < W_c$ the IPR ξ starts to grow significantly with the increase of the system size L that corresponds to pair delocalization. The decrease of the W_c value induced by the attractive interaction shows that the attraction leads to localization of pairs inside the noninteracting delocalized phase. This effect is absent in the mean-field approximation where the ground state remains well delocalized [compare Figs. 1(e) and 1(g)]. This phenomenon is

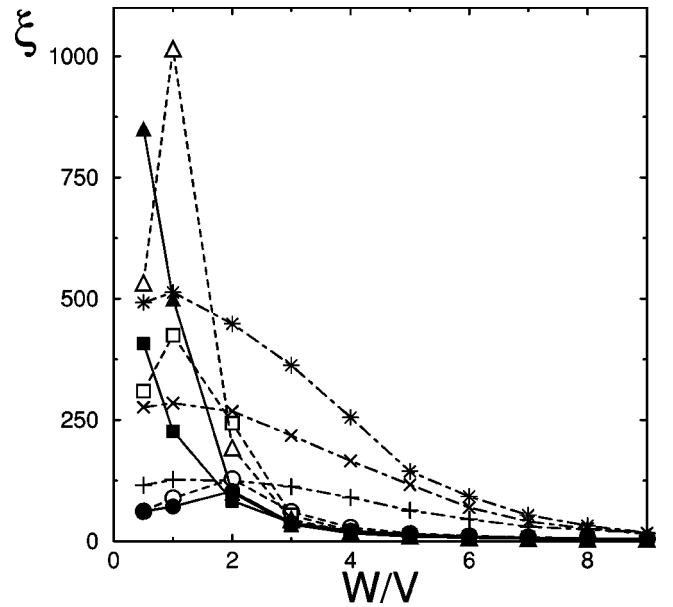


FIG. 2. Dependence of the inverse participation ratio ξ of the TIP ground state on the disorder W/V . The full lines with full symbols correspond to an interaction strength $U=-4V$, the dashed ones with open symbols to $U=-2V$, and the dot-dashed ones to $U=0V$ (+, ×, *). Different symbols correspond to different linear sizes of the lattice $L=20$ (○, +), $L=30$ (□, ×), and $L=40$ (△, *).

similar to the situation in the three-dimensional Anderson model for which the localization of pairs was discussed in Ref. 17. As in Ref. 17 we attribute this phenomenon to the increase of the effective mass m_{eff} of the pair ($V \propto 1/m_{\text{eff}}$) that leads to a decrease of the critical disorder strength ($W_c \sim V \propto 1/m_{\text{eff}}$). For strong attraction the mass is approximately doubled so that the value of W_c is decreased by a factor of 2 compared to the noninteracting case. The numerical data in two and three dimensions presented here and in Ref. 17 are in satisfactory agreement with this estimate.

The dependence of IPR ξ on the system size L for $W=2V$ and $W=5V$ is shown in Fig. 3 for different values of interaction U . For $L \leq 12$ the noninteracting states are delocalized. The introduction of interaction decreases significantly the IPR value and for $W=5V$ the TIP ground state is localized for $|U| \geq 2V$. On the contrary for $W=2V$ the IPR still grows with L for $U=-2V$. This behavior is qualitatively similar to the numerical data obtained in Ref. 18 by the projected quantum Monte Carlo method (see Fig. 3 of Ref. 18). According to Ref. 18 the pairs at quarter filling become localized at $U/V \approx -4$ for $W=5V$ and remain delocalized for $W=2V$ (only sizes $L \leq 12$ were accessible by this method). While the qualitative behavior is similar (compare Fig. 3 with Fig. 3 in Ref. 18) the quantitative difference between the two sets of data is definitely present. For example in our Fig. 3 at $W=5V$ the states become localized approximately at $U/V \approx -1.5$ and not at $U/V \approx -4$ as in Ref. 18. We attribute this quantitative difference to the fact that in Ref. 18 up to 74 real spin fermions were present and were treated exactly (up to statistical errors) by the quantum Monte Carlo method. The presence of other fermions can

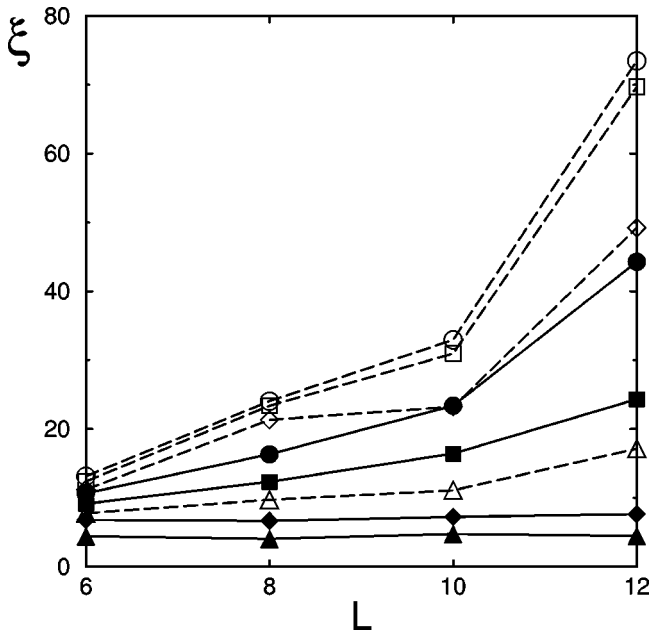


FIG. 3. IPR ξ as a function of the linear size L . Dashed lines and open symbols are for $W/V=2$ and full lines and full symbols are for $W/V=5V$, with $U/V=0$ ($\circ$), -1 ($\square$), -2 (diamond), and -4 ($\triangle$). The average is done over 100 disorder realizations. Here, the filling factor is $\nu = \frac{1}{4}$ and $\alpha = L^2/M = 2$.

renormalize the effective strength of interaction between two particles. Also it can change the effective strength of disorder for fermions near the Fermi level. The comparison between the two figures shows that the TIP approach captures the qualitative physical properties of the system but quantitatively it gives different values. In a sense this situation is similar to the comparison between the Cooper approximation and the BCS theory.

The difference between exact diagonalization of the TIP Hamiltonian (2) and the mean-field solution given by the Cooper ansatz is also clearly seen in the coupling energy of the pair $\Delta = E_g(U=0) - E_g(U)$. Here E_g is the TIP ground-state energy in the presence of interaction U . For $U=0$ we have $E_g(U=0) = 2E_F$. The dependence of Δ on the disorder strength W is shown in Fig. 4 for $U = -2V$. In the BLS phase at $W > W_c \approx 3V$ the coupling energy Δ obtained from exact diagonalization becomes significantly larger than the value of Δ given by the mean-field approximation based on delocalized states. This shows that energetically the BLS phase is more favorable than the mean-field Bogolubov-de Gennes solution.²⁴ The physical reason for the increase of Δ compared to the mean-field value is related to localization: the pairs are localized and particles remain closer to each other, which effectively increases the coupling strength between them.²⁵ On the contrary for $W < W_c$ when the pairs are delocalized the exact solution gives the values of Δ , which are close to the mean-field value. This is in agreement with the Anderson theorem according to which the mean field remains valid in the regime with weak disorder.

The fact that for TIP the BLS phase is energetically more favorable than the mean-field solution indicates that also at finite particle density the BLS phase will be more favorable.

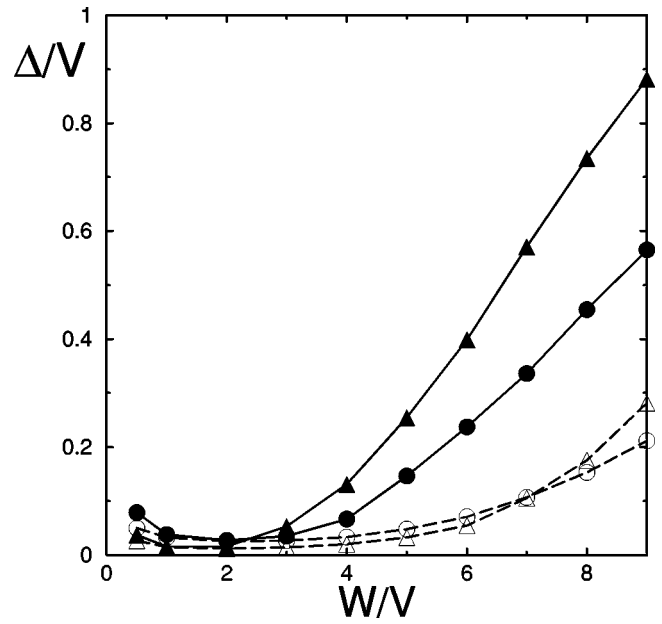


FIG. 4. Dependence of the coupling energy Δ on the disorder strength W for $U = -2V$. The linear lattice size is $L=20$ ($\circ$) and $L=40$ ($\triangle$); data are obtained by exact diagonalization of the TIP model (solid lines, full symbols) and by mean-field approximation from the Cooper ansatz (dashed lines, empty symbols).

This indication is in agreement with the quantum Monte Carlo computations presented in Ref. 18. It is also possible to give another argument in favor of the BLS phase. Suppose that the filling factor ν is close to the critical value ν_c at the mobility edge of noninteracting particles (but $\nu > \nu_c$). Then it is natural that all particles below the mobility edge are localized. Then the density of interacting pairs above ν_c is proportional to $|\nu - \nu_c|$ and is relatively low for $|\nu - \nu_c| \ll \nu$. In this regime the pairs above ν_c are well separated and the TIP approximation we discuss in this paper should be rather reasonable. Of course in the next step the residual interaction between pairs should be taken into account.²⁶ In this picture it is clear that the BLS phase is energetically more favorable compared to the delocalized mean-field solution.

III. GROUND-STATE PROPERTIES WITH MAGNETIC FIELD

It is interesting to understand how the TIP properties in the BLS phase are affected by a magnetic field $\mathbf{B}$ perpendicular to the two-dimensional lattice. In this case the one-particle Hamiltonian takes the form

$$H_1 = \sum_{\mathbf{n}} E_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}| + V \sum_{\mathbf{n}} [T(\mathbf{n}) + T^*(\mathbf{n})], \quad (3)$$

where $T(\mathbf{n})$ and $T^*(\mathbf{n})$ are the translation operators from site $\mathbf{n}$ to its nearest neighbors

$$T(\mathbf{n}) = T_{M_x}(\mathbf{n}) |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n} + \mathbf{e}_x| + T_{M_y}(\mathbf{n}) |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n} + \mathbf{e}_y|. \quad (4)$$

Here $\mathbf{e}_x$ and $\mathbf{e}_y$ are the unitary vectors on the two-dimensional lattice and

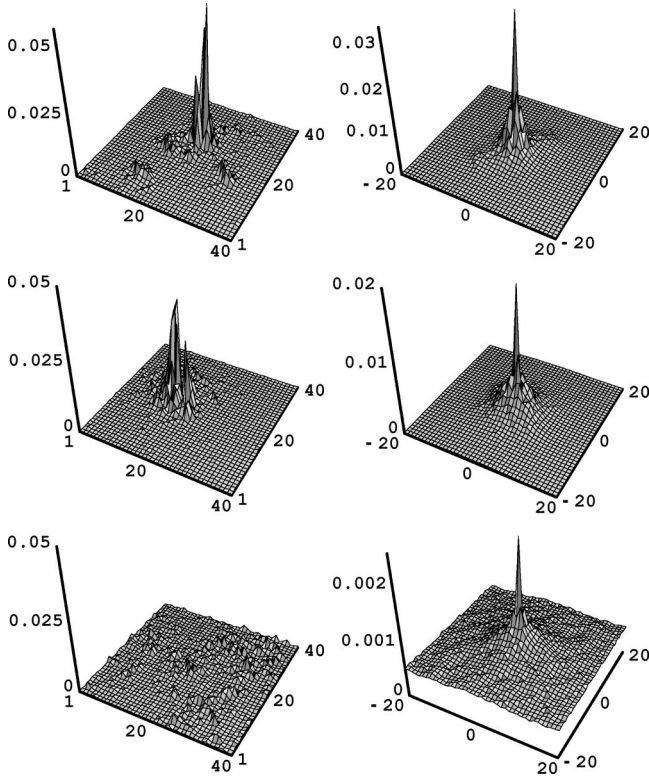


FIG. 5. Ground-state probability distributions of two interacting particles in a lattice of linear size $L=40$, with disorder strength $W=3V$ and interaction strength $U=-2V$; the left column shows the probability distribution $f(\mathbf{n})$ and the right one the interparticle probability distribution $f_d(\mathbf{r})$. The different rows present the TIP ground state for different values of the magnetic flux γ : top row $\gamma=0$, middle row $\gamma=2/40$, and bottom row $\gamma=5/40$.

$$T_{M_{\mathbf{x}(\mathbf{y})}}(\mathbf{n}) = \exp\left(-\frac{iq}{\hbar c} \int_{\Gamma_{\mathbf{x}(\mathbf{y})}(\mathbf{n})} \mathbf{A} \cdot d\mathbf{n}'\right) \quad (5)$$

are the magnetic translation operators along paths $\Gamma_{\mathbf{x}}(\mathbf{n}) = (\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n} + \mathbf{e}_{\mathbf{x}})$ and $\Gamma_{\mathbf{y}}(\mathbf{n}) = (\mathbf{n} \rightarrow \mathbf{n} + \mathbf{e}_{\mathbf{y}})$. For convenience we choose the Landau's gauge for the magnetic field $\mathbf{A} = -n_y B \mathbf{e}_{\mathbf{x}}$. The magnetic translation operators are then determined as $T_{M_{\mathbf{x}}} = \exp(2\pi i \gamma n_y)$ and $T_{M_{\mathbf{y}}} = 1$ with $\gamma = qB/\hbar c$. Due to the periodic boundary conditions the effective topology of the two-dimensional lattice is that of a torus with a transversal and a longitudinal radius $R_t = R_l = L$. This topology implies flux quantization on the lattice so that $\gamma = m/L$ with $m \in [0, L-1]$. Then the one-particle Hamiltonian (3) can be explicitly written as

$$H_1 = \sum_{\mathbf{n}} E_{\mathbf{n}} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n}| + \sum_{\mathbf{n}} (e^{2\pi i \gamma n_y} |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n} + \mathbf{e}_{\mathbf{x}}| + |\mathbf{n}\rangle \langle \mathbf{n} + \mathbf{e}_{\mathbf{y}}|) + \sum_{\mathbf{n}} (e^{-2\pi i \gamma n_y} |\mathbf{n} + \mathbf{e}_{\mathbf{x}}\rangle \langle \mathbf{n}| + |\mathbf{n} + \mathbf{e}_{\mathbf{y}}\rangle \langle \mathbf{n}|). \quad (6)$$

We study now the ground state of the TIP Hamiltonian constructed with this new one-particle Hamiltonian H_1 (6). This Hamiltonian is written in the preferential basis of non-interacting eigenstates of Eq. (6), which leads to the Schrödinger

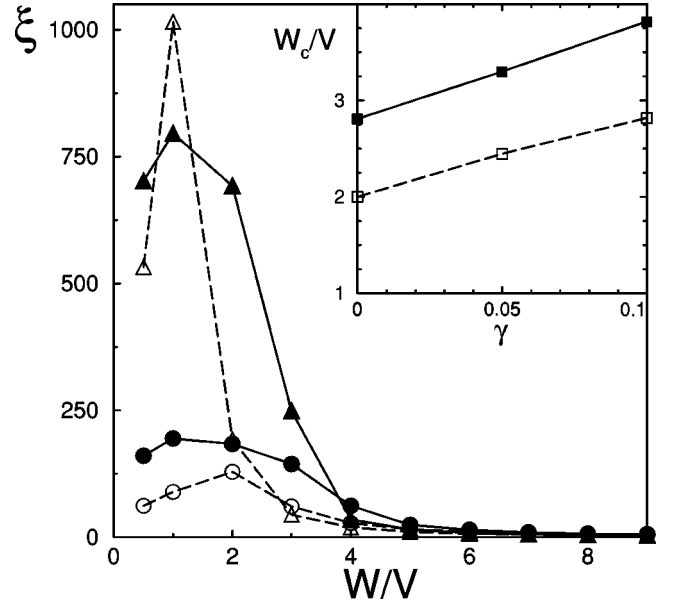


FIG. 6. Dependence of the inverse participating ratio ξ of the TIP ground state on the disorder W/V and magnetic flux γ . The interaction strength for the main figure is $U=-2V$. Empty/full symbols correspond to $\gamma=0/\gamma=0.1$, with different linear lattice sizes $L=20$ ($\circ$) and $L=40$ ($\triangle$). The inset shows the phase diagram in the plane of W_c/V and γ ; the full line corresponds to $U=-2V$ and the dashed line to $U=-4V$; the BLS phase is at $W > W_c$.

equation of the form (2). As in the case with $\mathbf{B}=0$ we use the probability distributions $f(\mathbf{n})$, $f_d(\mathbf{r})$, and the IPR ξ to depict the ground-state properties of the TIP problem in the presence of a magnetic field. Thus Fig. 5 represents the TIP probability distributions for a system of linear size $L=40$ and fixed disorder and interaction strengths ($W=3V, U=-2V$). The data are shown for different magnetic-flux ratios $\gamma=0, \gamma=2/40$, and $\gamma=5/40$. At $\gamma=0$ the one-particle probability is well localized by interaction (first row of Fig. 5). However, with the increase of magnetic flux γ the localization is destroyed. The data of Fig. 5 suggest that there exists a critical magnetic flux γ_c below which the TIP pairs remain localized ($\gamma < \gamma_c$, middle row of Fig. 5) and above which pairs become totally delocalized ($\gamma > \gamma_c$, bottom row of Fig. 5). At the same time for $\gamma > \gamma_c$ the interparticle distance probability distribution $f_d(\mathbf{r})$ is less peaked. Hence for $\gamma > \gamma_c$ the size of the pair is significantly increased.

The ground-state properties can be studied in a more quantitative way with the help of the IPR ξ defined above. Figure 6 represents the dependence of ξ on the disorder strength W for a fixed interaction $U=-2V$. Data are shown for different values of magnetic flux γ . They clearly show that the introduction of magnetic field leads to an increase of ξ at a fixed value of W . Thus the magnetic field enhances the delocalization of particles for $\gamma > \gamma_c(U)$ and $W < W_c(U)$. On the contrary for $\gamma < \gamma_c(U)$ and $W > W_c(U)$ the variation of ξ with an lattice size L is weak and usually here there is a small decrease of ξ with an increase of L (see Fig. 6). The delocalization transition can be determined as the point where ξ is independent of the lattice size (crossing point). An

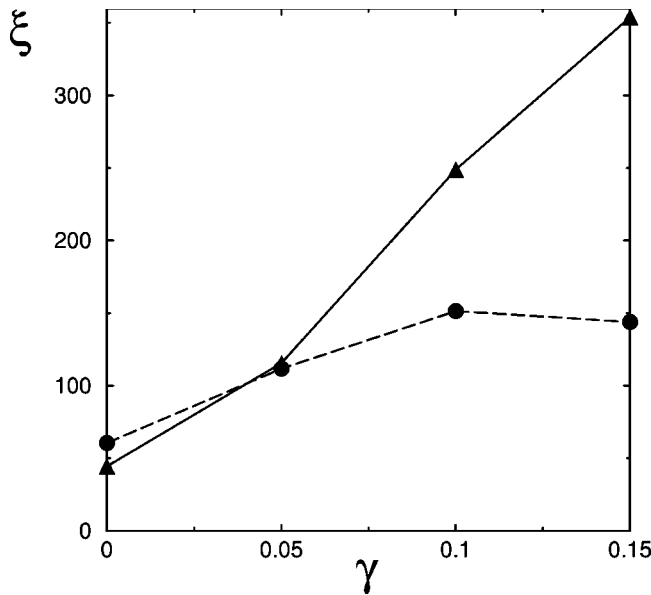


FIG. 7. Dependence of the inverse participation ratio ξ of the TIP ground state on the magnetic flux γ for two lattice sizes $L=20$ (●) and $L=40$ (triangle). Here the interaction strength is $U=-2V$ and the disorder strength is $W=3V$.

approximate phase diagram in the plane (W, γ) obtained in this way is shown in the inset of Fig. 6. With the increase of interaction the localized phase penetrates deeper in the region of weak disorder. The fact that a magnetic field can delocalize pairs inside the BLS phase is also illustrated in Fig. 7 where the IPR ξ is enormously increased by the magnetic flux. This result is in agreement with a general fact known for noninteracting particles that the localization length is increased by a magnetic field.¹⁹ While the delocalization induced by a magnetic field is clearly illustrated by Figs. 6 and 7 it is rather difficult to determine numerically the properties of pairs in the delocalized phase. In this phase an effective pair size becomes too large to investigate numerically. The question of whether the superconductivity survives or if a magnetic field drives the system to a metallic regime is difficult to answer in the frame of our numerical approach.

For a better understanding of both localized and delocalized phases we studied the dependence of the pair coupling energy Δ on the strength of the magnetic field. In the standard Cooper problem Δ is related to the BCS gap and determines the Cooper pair size $l_{pair} \propto 1/\Delta$. Figure 8 shows the dependence of Δ on the magnetic field for different lattice sizes and for the case $U=-2V$ and $W=3V$, already used in Fig. 7. In the localized regime with $\gamma < \gamma_c \approx 0.04$ the value of Δ varies weakly with the growth of L . In contrast, for $\gamma > \gamma_c$ its value decreases in two to three times. This can be

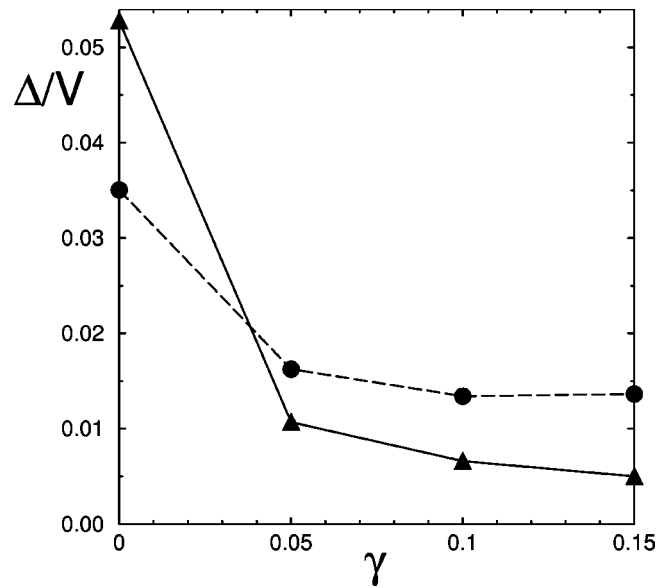


FIG. 8. Pair coupling energy Δ as a function of magnetic flux γ for $L=20$ (●) and $L=40$ (triangle). The interaction and disorder strengths are as in Fig. 7: $U=-2V$ and $W=3V$.

considered an indication that the superconductivity is significantly suppressed by magnetic field for $\gamma > \gamma_c$. However, a significant increase of L is required to investigate the properties of pairs in the delocalized regime.

IV. CONCLUSION

The present studies show that in the presence of disorder the attractive Hubbard interaction leads to localization of pairs and the appearance of a phase with biparticle localized states that is located inside the noninteracting metallic regime. This BLS phase cannot be obtained in the mean-field approximation. It is shown that it can be destroyed by the introduction of a magnetic field, which drives the system to delocalization. In the BLS phase the pair coupling energy is much larger than the value obtained in the mean-field approximation. This indicates that the BLS phase is energetically more preferable compared to the mean-field solution. The results obtained for two particles (one pair) are in qualitative agreement with the recent results obtained with the quantum Monte Carlo method in Ref. 18.

ACKNOWLEDGMENTS

It is our pleasure to thank G. Benenti and B. Srinivasan for stimulating discussions. We thank the IDRIS in Orsay and the CalMiP in Toulouse for access to their supercomputers.

*Email address: <http://w3-phystheo.ups-tlse.fr/~dima>

¹A. Larkin, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, 785 (1999).

²K. A. Matveev and A. I. Larkin, Phys. Rev. Lett. **78**, 3749 (1997).

³M. Wallin, E. S. Sørensen, S. M. Girvin, and A. P. Young, Phys. Rev. B **49**, 12 115 (1994).

⁴R. T. Scalettar, N. Trivedi, and C. Huscroft, Phys. Rev. B **59**, 4364 (1999).

⁵M. Franz, C. Kallin, A. J. Berlinsky, and M. I. Salkola, Phys. Rev. B **56**, 7882 (1997).

⁶A. Ghosal, M. Randeria, and N. Trivedi, Phys. Rev. B **63**,

- 020505(R) (2001).
- ⁷P. J. H. Denteneer, R. T. Scalettar, and N. Trivedi, Phys. Rev. Lett. **83**, 4610 (1999).
 - ⁸A. M. Goldman and N. Marković, Phys. Today **51** (11), 39 (1998).
 - ⁹V. F. Gantmakher, M. V. Golubkov, V. T. Dolgoplov, G. E. Tsydynzhapov, and A. A. Shashkin, Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. **68**, 337 (1998) [JETP Lett. **68**, 363 (1998)].
 - ¹⁰G. S. Boebinger, Y. Ando, A. Passner, T. Kimura, M. Okuya, J. Shimoyama, K. Kishio, K. Tamasaku, N. Ichikawa, and S. Uchida, Phys. Rev. Lett. **77**, 5417 (1996).
 - ¹¹K. Segawa and Y. Ando, J. Low Temp. Phys. **117**, 1175 (1999).
 - ¹²P. W. Anderson, J. Phys. Chem. Solids **11**, 26 (1959).
 - ¹³A. A. Abrikosov and L. P. Gorkov, Zh. Éksp. Teor. Fiz. **35**, 1558 (1959) [Sov. Phys. JETP **8**, 1090 (1959)].
 - ¹⁴G. Montambaux, D. Poilblanc, J. Bellissard, and C. Sire, Phys. Rev. Lett. **70**, 497 (1993).
 - ¹⁵E. Dagotto, Rev. Mod. Phys. **66**, 763 (1994).
 - ¹⁶L. N. Cooper, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).
 - ¹⁷J. Lages and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. B **62**, 8665 (2000).
 - ¹⁸B. Srinivasan and D. L. Shepelyansky, cond-mat/0102055 (unpublished).
 - ¹⁹A. Mirlin, Phys. Rep. **326**, 259 (2000).
 - ²⁰Y. Imry, Europhys. Lett. **30**, 405 (1995).
 - ²¹Ph. Jacquod and D. L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **78**, 4986 (1997).
 - ²²F. von Oppen, T. Wettig, and J. Müller, Phys. Rev. Lett. **76**, 491 (1996); *Correlated Fermions and Transport in Mesoscopic Systems*, edited by T. Martin, G. Montambaux, and J. Trân Thanh Vân (Editions Frontieres, Gif-sur-Yvette, 1996) p. 235.
 - ²³M. A. N. Araújo, M. Dzierzawa, C. Aebischer, and D. Baeriswyl, Physica B **244**, 9 (1998).
 - ²⁴P. G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys* (Benjamin, New York, 1966).
 - ²⁵In the BLS phase at $W > 3V$ the value of Δ obtained by exact diagonalization (full symbols) demonstrates some increase with the change of L from $L=20$ to $L=40$. We attribute this to the fact that at larger L the pair in the ground state can choose a more profound minimum appearing due to statistical fluctuations that gives some growth of Δ .
 - ²⁶The first step in direct numerical investigations of a few interacting spin fermions above the frozen Fermi sea was done in J. Lages, G. Benenti, and D.L. Shepelyansky, Phys. Rev. B **63**, 214516 (2001). However in this approach it is difficult to reach large system sizes since the condition $M/L^2 = \text{const}$ leads to a strong growth of the matrix size with the number of particles.

Physical Review B 63 (2001), 214516

Disordered Hubbard model with attraction : The coupling energy of Cooper pairs in small clusters

J. Lages, G. Benenti et D. L. Shepelyansky

Disordered Hubbard model with attraction: The coupling energy of Cooper pairs in small clusters

José Lages,¹ Giuliano Benenti,^{1,2,3} and Dima L. Shepelyansky¹

¹Laboratoire de Physique Quantique, UMR 5626 du CNRS, Université Paul Sabatier, 31062 Toulouse Cedex 4, France

²International Center for the Study of Dynamical Systems, Università degli Studi dell'Insubria, via Valleggio 11, 22100 Como, Italy

³Istituto Nazionale di Fisica della Materia, Unità di Milano, via Celoria 16, 20133 Milano, Italy

(Received 17 January 2001; published 11 May 2001)

We generalize the Cooper problem to the case of many interacting particles in the vicinity of the Fermi level in the presence of disorder. On the basis of this approach we study numerically the variation of the pair coupling energy in small clusters as a function of disorder. We show that the Cooper pair energy is strongly enhanced by disorder, which at the same time leads to the localization of pairs.

DOI: 10.1103/PhysRevB.63.214516

PACS number(s): 74.20.-z, 72.15.Rn, 71.30.+h

I. INTRODUCTION

The superconductor-insulator transition (SIT) in disordered films of metals has attracted widespread interest in recent years.¹ The SIT, driven by adjusting some tuning parameter such as film thickness or magnetic field strength, is particularly interesting in two dimensions (2D), where both superconductivity and metallic behavior are marginal.

In the composite boson model, Cooper pairs are treated as pointlike charge $2e$ bosons. In this picture, the superconducting state displays a quantum phase transition to an insulating state characterized by a quenching of the condensate of composite bosons.² In this scenario, the SIT is caused by the loss of phase coherence between the pairs in different parts of the sample, while the magnitude of the pairing gap remains finite. Numerical studies support this scenario.³

However, a few relevant experimental aspects of the SIT (Ref. 1) seem to be beyond the scope of the composite fermion theory. It is therefore highly desirable to study models where the fermionic nature of charge carriers is not eliminated from the beginning. Quantum Monte Carlo studies of the disordered attractive Hubbard model in two dimensions have supported the possibility of a disorder-driven superconductor to insulator quantum phase transition.⁴ At the same time the mean-field approach within the Bogoliubov-de Gennes framework has shown that also space fluctuations of the pairing amplitude should be taken into account in order to give a full picture of the SIT.⁵

In parallel a growing interest has been devoted to the question of what is the coupling energy of pairs placed in small superconducting grains, with the average level spacing of the same order as the superconducting gap.⁶⁻¹⁰ Also the pair properties in small-size samples may be related to their properties in the localized phase, where the pair motion is bounded inside the localization domain.

In this paper we study numerically the properties of Cooper pairs in small two-dimensional clusters with disorder. We take the Hubbard attractive interaction between fermionic particles with spin $1/2$ which move in a two-dimensional Anderson lattice. Following the approach introduced by Cooper,¹¹ we consider some part of the particles below the Fermi sea as frozen, while the remaining particles, in the direct vicinity of the Fermi level, can move and interact in the presence of disorder. Recently, such a generalized

Cooper problem has been considered¹² for the case of two particles in a disordered potential. Here, we further develop this approach for the case of many interacting Cooper pairs, which allows us to study the case of finite particle density.

Our numerical studies allow us to determine the dependence of the Cooper pair coupling energy on the strength of disorder. They show that this coupling can be strongly increased by disorder, which, however, leads to localization of pairs. In the regime of weak disorder the pairs are delocalized but their coupling energy is significantly reduced compared to the localized phase.

The paper is organized as follows: In Sec. II we introduce the attractive Hubbard model and discuss the numerical method used to study the case of a finite particle density. In Sec. III we determine the Cooper pair coupling energy (pairing gap) and investigate its dependence on the strength of the disorder. In Sec. IV we study the disorder-induced pair localization and compare the results with the case of noninteracting particles. In Sec. V we study the behavior of the superconducting order parameter, obtained from the pairing correlation function. The conclusions are presented in Sec. VI.

II. MODEL AND NUMERICAL METHOD

We study a disordered square lattice with N fermions on L^2 sites. The Hamiltonian is defined by

$$H = -V \sum_{\langle ij \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \epsilon_i n_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1)$$

where $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) creates (destroys) an electron at site i with spin σ , $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ is the corresponding occupation number, the hopping term V between nearest-neighbor lattice sites characterizes the kinetic energy, the site energies ϵ_i are taken from a box distribution over $[-W/2, W/2]$, U measures the strength of the Hubbard attraction ($U < 0$), and periodic boundary conditions are taken in both directions. We restrict our numerical investigations to the subspace with $S_z = 0$ for even N ($N/2$ spins up and $N/2$ spins down) and $S_z = 1/2$ for odd N .

The model (1) at $U = 0$ reduces to the one-body Anderson model, giving localized states in two dimensions at the thermodynamic limit.¹³ At $W = 0$ one gets the clean attractive

Hubbard model, which in 2D and away from half filling shows a finite-temperature Kosterlitz-Thouless transition to a superconducting state with power-law decay of the pairing correlations.^{14,15}

We study numerically the model (1) for a finite density of interacting quasiparticles above the frozen Fermi sea.

(i) Single-particle eigenvalues E_α and eigenstates (orbitals) $\phi_\alpha(\mathbf{i})$ ($\alpha = 1, \dots, L^2$) at $U=0$ are obtained via numerical diagonalization of the Anderson Hamiltonian.

(ii) The Hamiltonian (1) is written in the orbital basis:

$$H = \sum_{\alpha\sigma} E_\alpha d_{\alpha\sigma}^\dagger d_{\alpha\sigma} + U \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} Q_{\alpha\beta}^{\gamma\delta} d_{\alpha\uparrow}^\dagger d_{\beta\downarrow}^\dagger d_{\delta\downarrow} d_{\gamma\uparrow}, \quad (2)$$

with $d_{\alpha\sigma}^\dagger = \sum_{\mathbf{i}} \phi_\alpha(\mathbf{i}) c_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger$ and transition matrix elements

$$Q_{\alpha\beta}^{\gamma\delta} = \sum_{\mathbf{i}} \phi_\alpha(\mathbf{i}) \phi_\beta(\mathbf{i}) \phi_\gamma(\mathbf{i}) \phi_\delta(\mathbf{i}). \quad (3)$$

(iii) The Fermi sea is introduced by restricting the sums in Eq. (2) to orbitals with energies above the Fermi energy E_{m_F} : $\alpha, \beta, \gamma, \delta > m_F$. We consider a filling factor $\nu = m_F/L^2 = 1/4$ (corresponding to $2m_F$ frozen electrons due to spin degeneracy) and a finite density of N interacting quasiparticles above the Fermi level.

(iv) The Slater determinant basis, built from the single-particle orbitals ϕ_α , is energetically cut off by means of the condition $\sum_{i=1}^N (m_i - m_F) \leq M$, with m_i orbital index for the i th quasiparticle ($m_i > m_F$). Such a rule gives an effective phonon frequency $\omega_D \propto M/L^2$.

(v) The ground state of this truncated Hamiltonian is found via the Lanczos algorithm.¹⁶

In our numerical simulations we considered up to $N=8$ interacting quasiparticles in up to $M=20$ orbitals. We checked that results are qualitatively similar under variation of the cut off orbital M . In the following sections we present data for $U = -4V$, averaged over $N_R = 100$ disorder realizations.

III. PAIRING GAP

In order to compute the pairing energy, we first compute the total N -body pairing energy as

$$E_p(N) = E_g(U=0) - E_g(U), \quad (4)$$

with $E_g(U)$ the many-body ground state for an attractive interaction U .

In Fig. 1 we show the N -body pairing energy $E_p(N)$ as a function of the number N of interacting quasiparticles above the Fermi sea, at different disorder strengths. This figure shows a clear even-odd effect, with a much larger increase of the pairing energy when N is even. This fact has a clear meaning: for N even, it is possible to build a new pair, reducing the ground-state energy due to the negative coupling $U < 0$. For N odd, in an ideal BCS superconductor the additional particle cannot be paired and remains a quasiparticle excitation. However, a small ground-state energy reduction is still present in our numerical simulations, since the unpaired particle weakly interacts with the superconducting pairs.

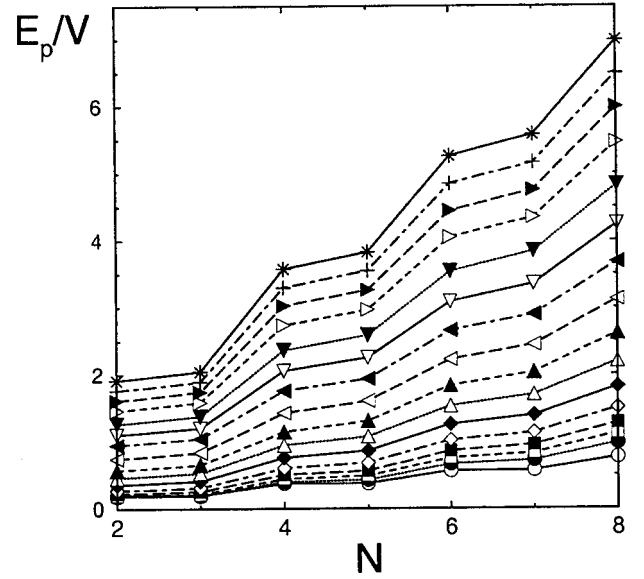


FIG. 1. Dependence of the N -body pairing energy E_p on the number N of electrons, at different disorder strengths W , from $W=0$ (bottom) to $W/V=15$ (top) in steps of $\Delta W/V=1$. The linear system size is $L=10$ and the cut off orbital $M=12$. Here and in the following figures, $U=-4V$ and data are averaged over $N_R=100$ disorder realizations.

The jump in the pairing energy from odd to even number of particles,

$$\Delta(N) = E_p(N) - E_p(N-1), \quad (5)$$

with N even, can therefore be interpreted as the energy necessary to break a superconducting pair; in the ideal BCS case, this would give the superconducting energy gap.¹⁷ We note that the superconducting gap is extracted in a similar way in experiments with single Cooper pair tunneling inside superconducting islands.^{18,19}

In Fig. 2 we show the pairing gap $\Delta(N)$ as a function of the disorder strength W , for $N=2,4,6,8$. We see that, with the exception of the first jump ($N=2$), the other jumps are rather similar. It is clear that Δ grows significantly with the disorder strength W . We attribute this effect to the fact that at strong disorder particles are trapped in the deepest minima of the random potential. Therefore the pair size becomes smaller: this enhances the interaction between coupled particles, hence Δ .

In Fig. 3 we show the dependence of Δ on the system size $6 \leq L \leq 10$. Since the Debye cutoff frequency should be independent of the system size, we keep constant the ratio $M/L^2 \approx 0.2$. The coupling energy Δ becomes independent of the system size at large W , while it is not yet saturated at small W . As the pair size is determined by $1/\Delta$, this means that at small W the size of the pair becomes comparable with the system size.

IV. PAIR LOCALIZATION

In order to study the localization properties of the system, we consider the fraction ξ of the sample occupied by the N -body wave function $|\Psi_g\rangle$:

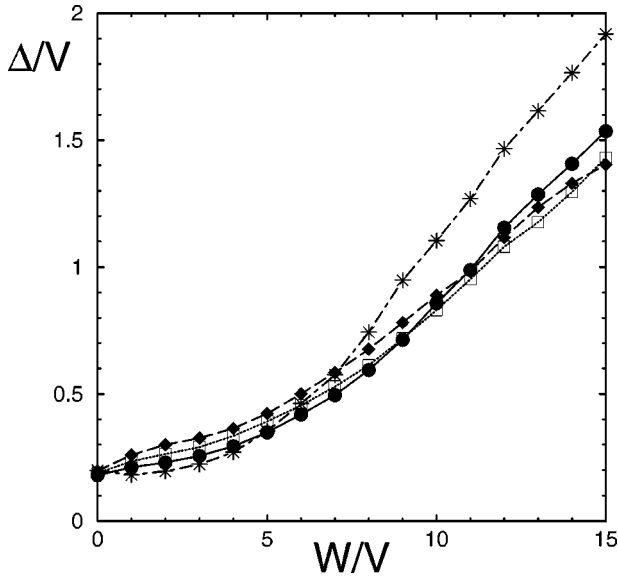


FIG. 2. Pairing gap $\Delta(N)=E_p(N)-E_p(N-1)$ vs disorder strength W , with E_p taken from Fig. 1, $N=2$ (stars), $N=4$ (circles), $N=6$ (squares), and $N=8$ (diamonds).

$$\xi = \frac{N^2}{2L^2 \sum_{i\sigma} \rho_{i\sigma}^2}, \quad (6)$$

where

$$\rho_{i\sigma} = \langle \Psi_g | n_{i\sigma} | \Psi_g \rangle \quad (7)$$

is the charge density of the ground state at the site i . With the definition (6), $N/2L^2 \leq \xi \leq 1$, the lower limit corresponding

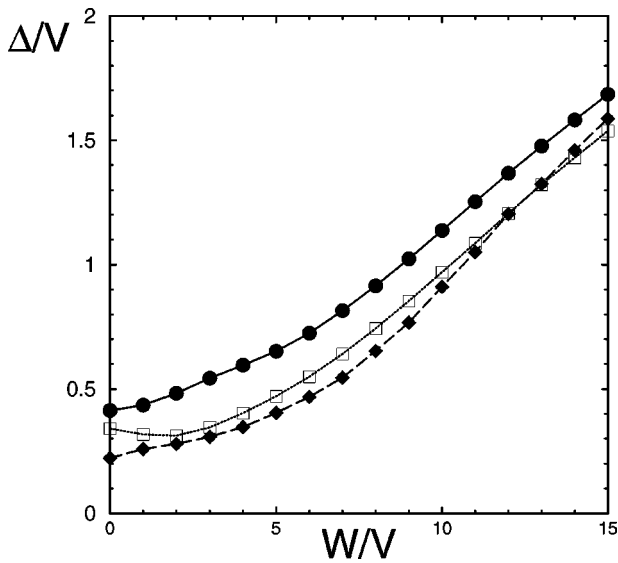


FIG. 3. Dependence of pairing gap Δ [average of $\Delta(N=2)$ and $\Delta(N=4)$] on the disorder strength W , at $L=6$ (circles), $L=8$ (squares), and $L=10$ (diamonds), keeping the ratio $M/L^2 \approx 0.2$.

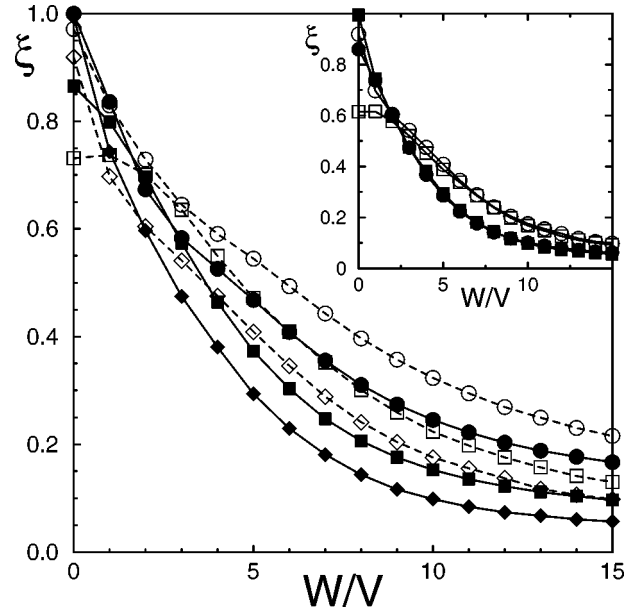


FIG. 4. Fraction of occupied sites ξ as a function of the disorder strength W , for $M/L^2 \approx 0.2$, $U=-4V$ (solid symbols) and $U=0$ (open symbols). Main figure: $N=6$ particles, at $L=6$ (circles), $L=8$ (squares), and $L=10$ (diamonds). Inset: constant particle density of mobile fermions $N/L^2 \approx 0.06$; $N=4$, $L=8$ (circles) and $N=6$, $L=10$ (squares).

to pairs localized in a single site, the upper limit to complete charge delocalization.

In Fig. 4 we show the fraction of occupied sites ξ as a function of disorder, at different system sizes $6 \leq L \leq 10$, for $N=6$ particles and a fixed Debye frequency ($M/L^2 \approx 0.2$). This figure gives a clear indication of the presence of two regimes: at small disorder the wave function fills a large fraction of the sample (superconducting regime), while at large disorder ξ decreases with the system size ($\xi \propto 1/L^2$, localized regime). In the inset of Fig. 4 we show the parameter ξ at different system sizes $L=8, 10$ and for a constant electronic density of mobile fermions, $N/L^2 \approx 0.06$. The two curves are superimposed on top of each other, suggesting the existence of a size-independent function $\xi(W)$ in the thermodynamic limit. The drop of $\xi(W)$ with W demonstrates that disorder gives localization of Cooper pairs.

Finally we examine the question of to what extent the wave function localization is a many-body effect instead of a single-particle Anderson localization phenomenon. Therefore in Fig. 4 we also show the parameter ξ at $U=0$. Comparison between the interacting ($U=-4$) and the noninteracting ($U=0$) case suggests that the interaction makes localization stronger, in agreement with results for two particles in a three-dimensional random potential.¹² This effect can be explained qualitatively with the following argument:¹² an attractive interaction creates pairs of total mass m_p twice the electronic mass. This halves the effective hopping term $V_{\text{eff}} \propto 1/m_p$, thus doubling the ratio W/V_{eff} . We remark that this rough argument fails in the delocalized regime at small disorder, where the tendency seems to be reversed. Actually, due to localization of single-

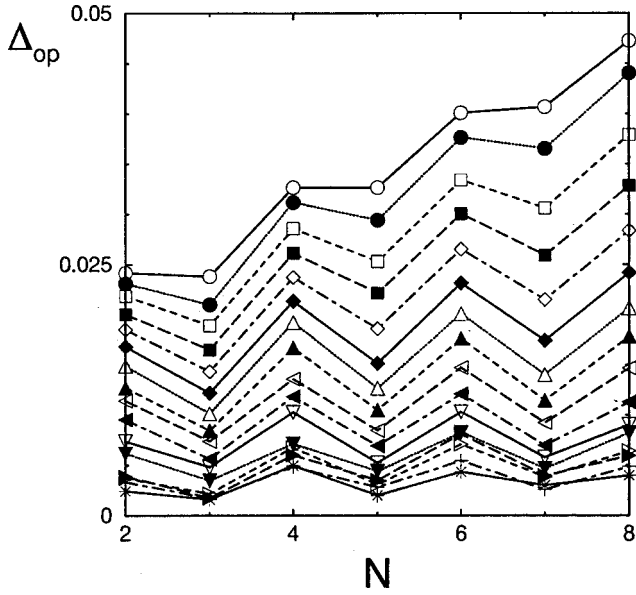


FIG. 5. Dependence of the order parameter Δ_{op} on the number N of particles, at different disorder strengths W , from $W=0$ (top) to $W/V=15$ (bottom) in steps of $\Delta W/V=1$. The linear system size is $L=10$ and the cutoff orbital $M=12$.

particles states in 2D,¹³ for a given number N of particles one should get $\xi(U=0) \rightarrow 0$ when $L \rightarrow \infty$.

V. PAIR CORRELATION

The superconducting state can be characterized by the s-wave pair correlation function

$$P_s(\mathbf{r}) = \langle \Psi_g | \frac{1}{L^2} \sum_{\mathbf{i}} \Delta_{\mathbf{i}+\mathbf{r}} \Delta_{\mathbf{i}}^\dagger | \Psi_g \rangle, \quad (8)$$

where

$$\Delta_{\mathbf{i}}^\dagger = c_{\mathbf{i}\uparrow}^\dagger c_{\mathbf{i}\downarrow}^\dagger \quad (9)$$

creates a pair at site $\mathbf{i}$. For an s-wave superconducting state,

$$\Delta_{\text{op}} = \sqrt{P_s[\mathbf{r}=(L/2, L/2)]} \quad (10)$$

is the order parameter of the superconductor-insulator transition.⁴

In Fig. 5 we show the dependence of the order parameter Δ_{op} on the number of interacting quasiparticles above the Fermi sea. The order parameter is strongly suppressed by disorder (see also Ref. 4), an effect which becomes more evident with the addition of particles. We remark that Δ_{op} shows an approximate linear increase with the number of pairs. This is quite natural if the many-body ground-state wave function is in the BCS form,²⁰ built from single-particle eigenfunctions including disorder:²¹

$$|\Psi_g\rangle \propto \prod_{\gamma} (1 + g_{\gamma} b_{\gamma}^\dagger) |0\rangle, \quad (11)$$

with $b_{\gamma}^\dagger = d_{\gamma\uparrow}^\dagger d_{\gamma\downarrow}^\dagger$ and g_{γ} variational parameters. Using the relation $c_{i\sigma}^\dagger = \sum_{\alpha} \phi_{\alpha}(\mathbf{i}) d_{\alpha\sigma}^\dagger$, after lattice and disorder averaging, the dominant contributions in $P_s(\mathbf{r})$ is proportional to

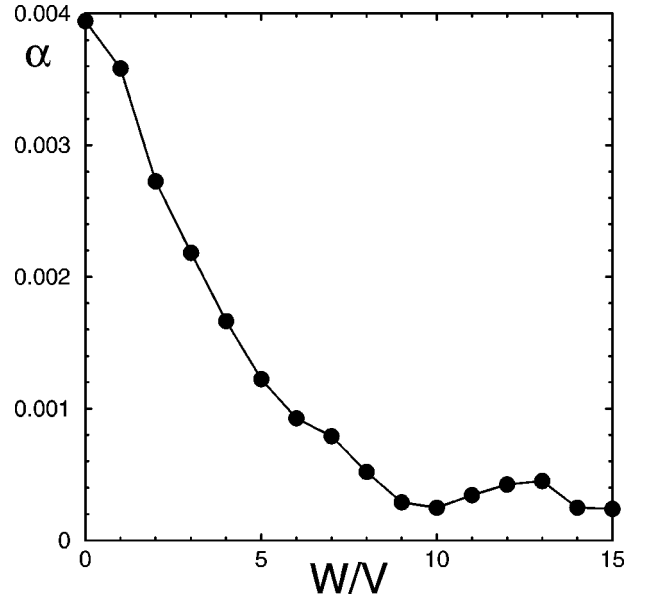


FIG. 6. Dependence of the slope α of the order parameter Δ_{op} on the disorder strength W ; α is extracted from a linear fit of $\Delta_{\text{op}}(N)$ vs N , with data taken from Fig. 5.

the number of pairs, $\Delta_{\text{op}}(N) \propto \alpha N/2$ (here we have taken into account that g_{γ} in BCS theory changes smoothly with α around the Fermi level²⁰ and here we considered $N \ll 2n_F$). Here α is a parameter which determines the slope of Δ_{op} variation with N . The order parameter decreases when an unpaired particle is added. In our opinion, this is due to the fact that this extra electron weakly interacts with the paired particles, reducing the pair correlation function.

In Fig. 6 we show the slope α of the linear fit of the order parameter Δ_{op} as a function of the number N of quasiparticles. In the superconducting regime, $\alpha \neq 0$ since each new pair added to the system coherently contributes to the order parameter. The suppression of this quantity with disorder is evident, indicating a rather sharp crossover from a superconducting to an insulating behavior in our finite-size lattice.

VI. CONCLUSIONS

In this paper we have investigated the localization of Cooper pairs for small clusters in a two-dimensional disordered substrate. We have shown that the Cooper pair coupling energy displays an even-odd asymmetry: this parity effect survives also in the presence of disorder. The pairing gap is strongly enhanced by disorder, which at the same time leads to localization of Cooper pairs (gapped insulator). Therefore, in the insulating regime, the breaking of Cooper pairs should enhance transport. This is consistent with the resistivity drop observed in experiments with an applied magnetic field,^{22,23} which might signal the crossover from a Cooper pair insulator to an electronic insulator.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank the IDRIS in Orsay and the CalMiP in Toulouse for access to their supercomputers. This research was supported by the EU contract “Quantum transport on atomic scale.”

- ¹For a review see, e.g., A.M. Goldman and N. Marković, Phys. Today **51**(11), 39 (1998).
- ²M.P.A. Fisher, G. Grinstein, and S.M. Girvin, Phys. Rev. Lett. **64**, 587 (1990).
- ³M. Wallin, E.S. Sørensen, S.M. Girvin, and A.P. Young, Phys. Rev. B **49**, 12 115 (1994).
- ⁴R.T. Scalettar, N. Trivedi, and C. Huscroft, Phys. Rev. B **59**, 4364 (1999).
- ⁵A. Ghosal, M. Randeria, and N. Trivedi, Phys. Rev. Lett. **81**, 3940 (1998).
- ⁶C.T. Black, D.C. Ralph, and M. Tinkham, Phys. Rev. Lett. **76**, 688 (1996).
- ⁷J. von Delft, A.D. Zaikin, D.S. Golubev, and W. Tichy, Phys. Rev. Lett. **77**, 3189 (1996).
- ⁸R.A. Smith and V. Ambegaokar, Phys. Rev. Lett. **77**, 4962 (1996).
- ⁹K.A. Matveev and A.I. Larkin, Phys. Rev. Lett. **78**, 3749 (1997).
- ¹⁰J. von Delft and D.C. Ralph, Phys. Rep. (to be published).
- ¹¹L.N. Cooper, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).
- ¹²J. Lages and D.L. Shepelyansky, Phys. Rev. B **62**, 8665 (2000).
- ¹³E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, and T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42**, 673 (1979).
- ¹⁴R.T. Scalettar, E.Y. Loh, J.E. Gubernatis, A. Moreo, S.R. White, D.J. Scalapino, R.L. Sugar, and E. Dagotto, Phys. Rev. Lett. **62**, 1407 (1989).
- ¹⁵At half filling, the transition temperature is zero, and at $T=0$ the system is in a state with both charge-density wave and superconducting order (Ref. 14).
- ¹⁶D.C. Sorensen, SIAM (Soc. Ind. Appl. Math.) J. Math. Anal. **13**, 357 (1992).
- ¹⁷We have checked that an alternative definition of the pairing energy (Refs. 9 and 10) $\Delta_p(N) = -E_g(N, U) + 2E_g(N-1, U) - E_g(N-2, U)$, with N even, gives essentially the same results. Indeed, if one can neglect the variation of the Fermi energy when two extra particles are added, $\Delta_p(N) \approx E_p(N) - 2E_p(N-1) + E_p(N-2) = \Delta(N) - \Delta(N-1) \approx \Delta(N)$, since the jump Δ in the pairing energy is weak at odd N .
- ¹⁸M.T. Tuominen, J.M. Hergenrother, T.S. Tighe, and M. Tinkham, Phys. Rev. Lett. **69**, 1997 (1992).
- ¹⁹M.H. Devoret, D. Esteve, and C. Urbina, in *Mesoscopic Quantum Physics*, Les Houches Session LXI, edited by E. Akkermans, G. Montambaux, J.-L. Pichard, and J. Zinn-Justin (Elsevier, Amsterdam, 1995).
- ²⁰J.R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity* (Perseus Books, Reading, MA, 1983).
- ²¹P.W. Anderson, J. Phys. Chem. Solids **11**, 26 (1959).
- ²²M.A. Paalanen, A.F. Hebard, and R.R. Ruel, Phys. Rev. Lett. **69**, 1604 (1992).
- ²³V.F. Gantmakher, M.V. Golubkov, V.T. Dolgoplov, A.A. Shashkin, and G.E. Tsydynzhapov, JETP Lett. **71**, 473 (2000).

The European Physical Journal B 21 (2001), 129

Delocalization of two-particle ring near the Fermi level of 2d Anderson model

J. Lages et D. L. Shepelyansky

Delocalization of two-particle ring near the Fermi level of 2d Anderson model

J. Lages and D.L. Shepelyansky^aLaboratoire de Physique Quantique^b, Université Paul Sabatier, 31062 Toulouse Cedex 4, France

Received 29 September 2000 and Received in final form 15 January 2001

Abstract. We study analytically and numerically the problem of two particles with a long range attractive interaction on a two-dimensional (2d) lattice with disorder. It is shown that below some critical disorder the interaction creates delocalized coupled states near the Fermi level. These states appear inside well localized noninteracting phase and have a form of two-particle ring which diffusively propagates over the lattice.

PACS. 72.15.Rn Localization effects (Anderson or weak localization) – 71.30.+h Metal-insulator transitions and other electronic transitions – 74.20.-z Theories and models of superconducting state – 05.45.Mt Semiclassical chaos (“quantum chaos”)

Recently a great deal of attention has been attracted to the problem of interaction effects in disordered systems with Anderson localization [1,2]. From the theoretical point of view the problem is rather nontrivial. Indeed, even if a great progress has been reached in the theoretical investigation of the properties of localized eigenstates [3] still the analytical expressions for interaction matrix elements between localized states are lacking. In spite of these theoretical difficulties it has been shown recently that a repulsive or attractive interaction between particles can destroy localization and lead to a propagation of pairs in the noninteracting localized phase. This two interacting particles (TIP) effect has been studied recently by different groups [4–11] and it has been understood that the delocalization of TIP pairs is related to the enhancement of interaction in systems with complex, chaotic eigenstates. Such an enhancement had been already known for parity violation induced by the weak interaction in heavy nuclei [12] where the interaction is typically increased by a factor of thousand. However, since there the two-body interaction is really weak the final result still remains small. On the contrary, for TIP pairs in the localized phase the enhancement of interaction qualitatively changes the dynamics leading to a coherent propagation of TIP on a distance l_c being much larger than the pair size and one-particle localization length l_1 . The enhancement factor κ is determined by the density of two-particle states ρ_2 , coupled by interaction, and the interaction induced transition rate Γ_2 between noninteracting eigenstates, so that $\kappa = \Gamma_2 \rho_2$. At $\kappa \sim 1$ the interaction matrix element

becomes comparable with two-particle level spacing and the Anderson localization starts to be destroyed by interaction. For excited states the TIP density ρ_2 is significantly larger than the one-particle density ρ and the delocalization can be reached for relatively weak interaction if l_1 is large. However, when the excitation energy ϵ above the Fermi level decreases then ρ_2 becomes smaller and it approaches the one-particle density ρ at low energy: $\rho_2 \approx \epsilon \rho^2$ [5]. As a result the value of κ also drops with ϵ so that the delocalization of TIP pairs practically disappears near the Fermi energy. This result has been found in [5,13] in the approximation of the frozen Fermi sea created by fermions. Recent numerical studies of TIP pairs with short range interaction near the Fermi level [14] confirmed these theoretical expectations.

In this paper we discuss another type of situation in which TIP delocalization takes place mainly due to geometrical reasons and not due to the relation $\rho_2 \gg \rho$. As a result the TIP pair can be delocalized in a close vicinity to the Fermi level that opens new interesting possibilities for interaction induced delocalization in the localized noninteracting phase. To study this new situation we investigate a model with a long range attractive interaction between particles in the 2d Anderson model. In this case the particles can rotate around their center of mass, being far from each other and keeping the same energy, while the center can move randomly in two dimensions. As a result the system has effectively three degrees of freedom that makes it rather similar to the case of one particle in the 3d Anderson model where delocalization takes place at sufficiently weak disorder. A somewhat similar situation has been studied recently for particles with Coulomb interaction but only excited states were considered there and the delocalization was attributed to the large ratio

^a e-mail: dima@irsacm2.ups-tlse.fr
<http://w3-phystheo.ups-tlse.fr/~dima>

^b UMR 5626 CNRS

ρ_2/ρ [15]. Here we show that in fact the conditions for delocalization are much less restrictive.

To illustrate the above ideas let us first discuss the case of only two particles with attractive interaction $U(r) < 0$ in the 2d Anderson model described by the Schrödinger equation

$$(E_{\mathbf{n}_1} + E_{\mathbf{n}_2} + U(\mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_2))\psi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2} + V(\psi_{\mathbf{n}_1+1, \mathbf{n}_2} + \psi_{\mathbf{n}_1-1, \mathbf{n}_2} + \psi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2+1} + \psi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2-1}) = E\psi_{\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2}. \quad (1)$$

Here $\mathbf{n}_{1,2}$ are the indices of the two particles on the 2d lattice with L^2 sites and periodic boundary conditions, V is the hopping between nearby sites and the random on-site one-particle energies $E_{\mathbf{n}_{1,2}}$ are homogeneously distributed in the interval $[-W/2, W/2]$. The long range attractive interaction depends only on the distance between particles $r = \|\mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_2\|$ and is equal to a constant $U < 0$ if $|r - R| \leq \Delta R$ and zero otherwise. The value of r is determined as the minimal inter-particle distance on the periodic lattice. Thus the interaction takes place only inside a ring of radius R and width ΔR , and we assume that $R \gg \Delta R \geq 1$. For $U = 0$ the eigenstates are given by the product of two one-particle (noninteracting) eigenstates which are always localized in 2d in a presence of disorder [16].

In the limit of very strong attractive interaction $|U| \gg V, W$ the TIP coupled states form the energy band of width $\simeq 16V$ around $E \simeq -|U|$ (we consider only the states symmetric in respect to particle interchange). For states in this band the particles are located always inside the ring which center can move over the 2d lattice. Since $|U| \gg V$ these states are decoupled from all other states with particles outside the ring. In the ring the Schrödinger equation is in fact rather similar to the case of 3d Anderson model of one particle. In this analogy the number of sites inside the ring $M_R \approx 2\pi R \Delta R$ determines the effective number of 2d planes placed one over another in the third z -dimension (length size $L_z = M_R$). In this 3d model the effective strength of disorder is approximately $2W$ since the diagonal term is now the sum of two $E_{\mathbf{n}}$ values. Also one site is coupled with $Z = 8$ neighbours contrary to $Z = 6$ for 3d case (assuming $\Delta R \gg 1$). Since in 3d the Anderson transition at the band center takes place at $W_c = 2.75ZV = 16.5V$ [17], we expect that TIP states inside the ring will be delocalized in the middle of the band when $2W/ZV = 2.75$ that gives the transition at $W_{c2} \approx 11V$. The above relation corresponds to the border according to which the mixing of levels takes place when the coupling becomes comparable to the spacing between directly coupled states [13] which in our case is proportional to W/Z with the numerical factor taken from [17]. This estimate is in agreement with preliminary numerical simulations of the model (1) [18]. Of course, since in the slab the thickness in the third direction is finite the eigenstates will be eventually localized. But their localization length l_c will make a sharp jump from $l_c \sim 1$ at $W > W_{c2}$ to $l_c \sim \exp(g) \gg 1$ at $W < W_{c2}$ that follows from the standard scaling theory in 2d [3,16,15]. Here g is the conductance of the quasi-two-dimensional layer of width $L_z = M_R$. As usual $g = E_c/\Delta_1$ where

$E_c = D/L^2$ is the Thouless energy, $\Delta_1 \sim V/(L^2 L_z)$ is the level spacing [3] and the diffusion rate in the lattice model is $D \sim V(V/W)^2$. As a result for $W < W_{c2}$ the TIP delocalization length jumps to exponentially large value $l_c \sim \exp(2\pi R \Delta R (W_{c2}/W)^2)$. In these estimates we assumed that $l_1 > \Delta R > 1$ since if $\Delta R \gg l_1$ the majority of states inside the ring are noninteracting and can be presented as the product of one-particle eigenstates. We also note that for $W < W_{c2}$ there is an energy interval around the band center with delocalized states where the TIP ring diffuses with the rate $D_2 \sim V(W_{c2}/V)^2$. When W decreases the mobility edge approaches the bottom of the band as it happens in 3d Anderson model.

The above arguments presented for the case $|U| \gg V$ indicate that it is possible to have a similar TIP delocalization at moderate value of $U \sim V$ near the Fermi level. To investigate this case we rewrite the equation (1) in the basis of the noninteracting eigenstates that gives

$$(E_{m_1} + E_{m_2})\chi_{m_1, m_2} + U \sum_{m'_1, m'_2} Q_{m_1, m_2, m'_1, m'_2} \chi_{m'_1, m'_2} = E\chi_{m_1, m_2}. \quad (2)$$

Here χ_{m_1, m_2} are eigenfunctions of the TIP problem written in the basis of one-particle eigenstates ϕ_m with eigenenergies E_m . The matrix $UQ_{m_1, m_2, m'_1, m'_2}$ represents the two-body matrix elements of interaction $U(\mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_2)$ between noninteracting eigenstates $|\phi_{m_1} \phi_{m_2}\rangle$ and $|\phi_{m'_1} \phi_{m'_2}\rangle$. The Fermi sea is determined by the restriction of the summation in (2) to $m_{1,2}^{(\prime)} > 0$ with energies $E_{m_{1,2}^{(\prime)}} > E_F$, where E_F is the Fermi energy related to the filling factor μ . We choose the case with half filling $\mu = 1/2$ for which $E_F \approx 0$. In this way our model corresponds to the approximation of frozen Fermi sea successfully used for the Cooper problem [19]. As it was done by Cooper we also introduce the high energy cut-off defined by the condition $1 \leq m'_1 + m'_2 \leq M$. This rule determines an effective phonon frequency $\omega_D \propto M/L^2$. We fix $\alpha = L^2/M \approx 15$ since ω_D should be independent of the system size L [20]. We checked that the results are not affected by a variation of α in few times. The first studies of the TIP model with frozen Fermi sea was done by Imry [5] with the aim to take into account the effect of finite fermionic density and then was also analyzed in [13]. The one-dimensional case was also studied in [7]. Recently a similar model was investigated for the case of Hubbard attraction in 3d [14]. Of course, the Cooper approach does not take into account many-body effects. However, it is known that without disorder it captures an important part of physics. Therefore we think that the generalization of this approach to systems with disorder will allow to reach a better understanding of rather complicated many-body problem.

To study the eigenstate properties of our model we diagonalize numerically the Hamiltonian (2) and rewrite the eigenfunctions in the original lattice basis. In this way we determine the two-particle probability distribution $F(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$ from which we extract the one particle

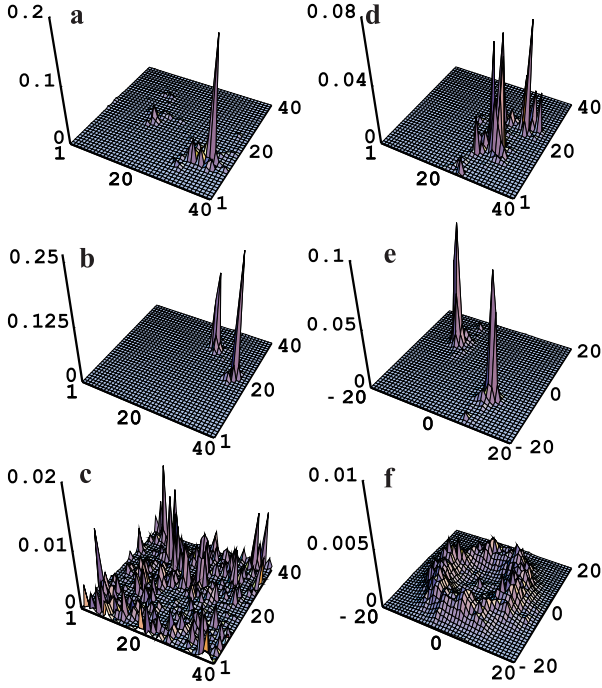


Fig. 1. Probability distributions f and f_d for TIP in 2d disordered lattice of size $L = 40$, and interaction of radius $R = 12$ and width $\Delta R = 1$. Left column, one-particle probability f for $W = 8V$: (a) ground state at $U = 0$; (b) ground state with binding energy $\Delta E = -1.05V$ at $U = -2V$; (c) coupled state with $\Delta E = -0.19V$ at $U = -2V$. Right column: (d) f for coupled state, compare to case (c), at $W = 12V$ and $U = -2V$ with $\Delta E \approx -0.19V$; (e) inter-particle distance probability f_d related to case (b); (f) f_d related to case (c).

probability $f(\mathbf{n}_1) = \sum_{\mathbf{n}_2} F(\mathbf{n}_1, \mathbf{n}_2)$ and the probability

of inter-particle distance $f_d(\mathbf{r}) = \sum_{\mathbf{n}_2} F(\mathbf{r} + \mathbf{n}_2, \mathbf{n}_2)$ with

$\mathbf{r} = \mathbf{n}_1 - \mathbf{n}_2$. The binding energy of an eigenstate in (2) is $\Delta E = E - 2E_F \approx E$ since $E_F \approx 0$. For the ground state with energy E_g the coupling energy is $\Delta = 2E_F - E_g$. The typical examples of probability distributions are shown in Figure 1. They clearly show that the ground state in the presence of interaction remains localized (b) and the particles stay on distance R from each other (e). However, there are states with negative binding energy ($\Delta E < 0$) which are delocalized by interaction (c) and for which the particles move around the ring (f) in agreement with discussion of model (1) at $|U| \gg V$. We stress that this delocalization of coupled states ($\Delta E < 0$) takes place in the well localized one-particle phase. However, at very strong disorder this delocalization disappears (see top right case in Fig. 1d).

To analyze the delocalization of states with negative binding energy ΔE in a more quantitative way we determine the inverse participating ratio (IPR) ξ for one-particle probability $1/\xi = \left\langle \sum_{\mathbf{n}} f^2(\mathbf{n}) \right\rangle$, where

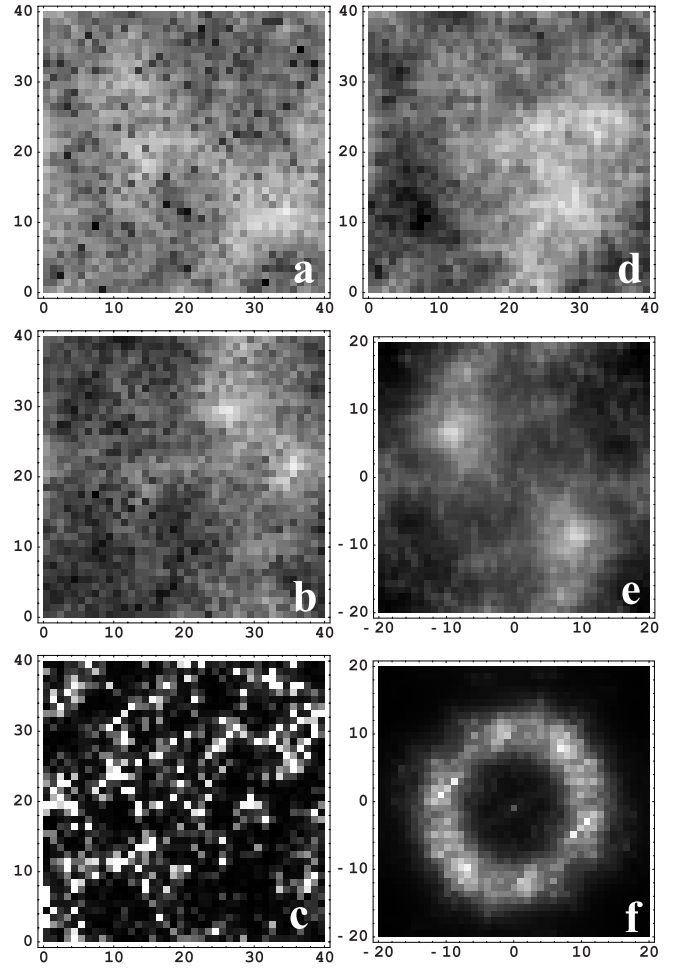


Fig. 2. 2d density plots for the data of Figure 1 with the same ordering of figures (color figures are available at <http://xxx.lanl.gov/abs/cond-mat/0002296>). Black corresponds to the minimum of the probability distribution and light-grey to the maximum. Figures (a, b, d, e) are drawn in logarithmic scale while Figures (c, f) are in linear scale. Black/light-grey color corresponds to: (a) $f = 1.3 \times 10^{-10}/f = 0.2$, (b) $f = 1.1 \times 10^{-9}/f = 0.26$, (c) $f = 1.5 \times 10^{-6}/f = 0.014$, (d) $f = 1.14 \times 10^{-11}/f = 0.073$, (e) $f_d = 3.8 \times 10^{-7}/f_d = 0.1$, (f) $f_d = 1.5 \times 10^{-5}/f_d = 0.0032$.

brackets mark the averaging over 100 disorder realizations. In this way ξ gives the number of lattice sites occupied by one particle in an eigenstate. The dependence of ξ on ΔE and W is shown in Figure 3 for different lattice sizes L in the presence of interaction. This figure shows that near the ground state the interaction creates states which are even more localized than in the absence of interaction (ξ is significantly smaller than at $U = 0$, see insert Fig. 3). In fact for $-\Delta < \Delta E < \Delta E_c < 0$ the IPR value even slightly drops with the increase of L . However for the states with binding energy $\Delta E_c < \Delta E < 0$ the situation becomes different and ξ grows significantly with L while the change of IPR at $U = 0$ with L is rather weak (see shaded band in Fig. 3). The critical value of the binding energy ΔE_c can be defined as such an energy at which ξ remains independent of L . In this way ΔE_c determines

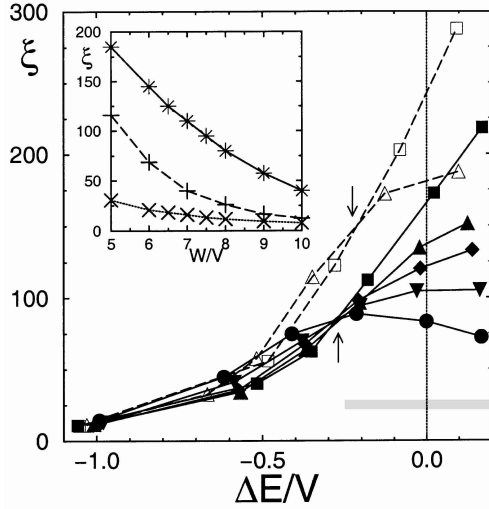


Fig. 3. Dependence of IPR ξ on the binding energy $\Delta E/V$ for $U = -2V$, $W = 8V$ and $\Delta R = 1$: $L = 20$ ($\circ$), $L = 22$ (triangle down), $L = 26$ (diamond), $L = 30$ (triangle up), $L = 40$ (square); full/empty symbols are for $R = 8/R = 12$; the shaded band shows the variation of ξ at E_F and $U = 0$ for $20 \leq L \leq 40$. The delocalization transition at ΔE_c is marked by arrows. Insert shows dependence of ξ on disorder W/V at $R = 8$ for the ground state at $U = -2V$, $L = 30$ ($\times$) and at $U = 0$, $L = 30$ ($+$); for the states with binding energy ΔE_c at $U = -2V$ the ξ value is shown by ($*$).

the mobility edge for coupled states so that at given U and W the TIP eigenstates are localized for $-\Delta < \Delta E < \Delta E_c$ while for $\Delta E_c < \Delta E < 0$ the states become delocalized (see an example in Fig. 1). In agreement with this picture ξ varies up to 30 times when ΔE changes from $-\Delta$ up to 0. This variation grows with L and the interaction radius R since the system becomes more close to the effective 3d Anderson model as it was discussed above. The qualitative change of the structure of the eigenstates leads also to a change in the level spacing statistics $P(s)$ (Fig. 4). Near the ground state the statistics is close to the Poisson distribution $P_P(s) = \exp(-s)$ typical for the localized Anderson phase [21] while for $\Delta E_c < \Delta E < 0$ it approaches to the Wigner surmise $P_W(s) = \pi s \exp(-\pi s^2/4)/2$ corresponding to the delocalized phase [21].

The variation of the delocalization border ΔE_c for TIP coupled states with disorder strength and interaction is shown in Figure 5. While the coupling energy Δ grows with U and W , the mobility edge $\Delta E_c < 0$, on the contrary, disappears at strong W . According to the data of Figure 5 all states with binding energy $\Delta E < 0$ become localized for $W > W_{c2} \approx 9.5V$ ($U = -2V$) and $W > W_{c2} \approx 8V$ ($U = -V$). This shows that at weaker interaction a weaker disorder is required to have delocalized coupled states. We note that the values of W_{c2} obtained for $U = -V, -2V$ are rather close to the value $W_{c2} \approx 11$ corresponding to the limit $|U| \gg V, W$. This shows that the physics of delocalization at $U \sim V$ remains rather similar to the limiting case of very strong interaction. As it follows from Figure 5, at small disorder W the delocalization border ΔE_c becomes closer and closer to the ground

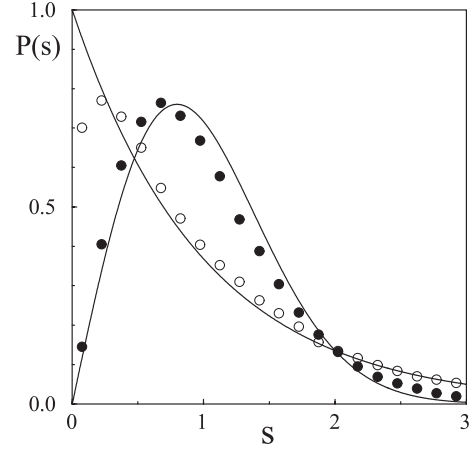


Fig. 4. Level spacing statistics $P(s)$ for TIP coupled states at $L = 30$, $U = -2V$, $W = 8V$, $R = 8$, $\Delta R = 1$ in the localized phase near the ground state inside the energy interval $-\Delta < \Delta E < -3\Delta/4$ ($\circ$) and in the delocalized phase for energies inside $-\Delta/4 < \Delta E < 0$ ($\bullet$); here $\Delta E_c \approx -0.3\Delta$ and the statistics is done over 3000 disorder realizations with the total number of spacings being 3×10^4 ($\circ$)/ 7.5×10^4 ($\bullet$). Full lines show the Poisson distribution and the Wigner surmise.

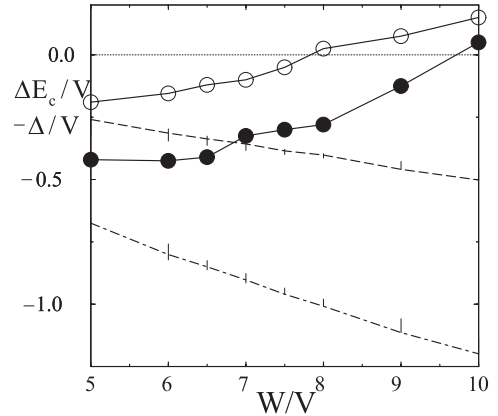


Fig. 5. Dependence of the delocalization border ΔE_c and the binding energy of the ground state $-\Delta$ on disorder W/V . The values of ΔE_c are shown by ($\circ$)/($\bullet$) for $U = -V/-2V$; the values of $-\Delta$ are shown by upper/lower dashed line for $U = -V/-2V$ and $L = 30$ (vertical intervals give variation for $20 \leq L \leq 30$).

state. This means that at weak disorder the delocalization will take place for excited states with low energy. For $W \ll W_{c2}$ and $U \sim -V$ the diffusion rate of delocalized TIP ring can be estimated as $D_2 \sim V(W_{c2}/W)^2$ [22]. Further studies are required to determine the dependence of W_{c2} on W at $|U| \ll V$.

In conclusion, our results show that long range attractive interaction between two particles in 2d leads to the appearance of delocalized diffusive states near the Fermi level inside the well localized noninteracting phase. It would be interesting to understand what will be the consequences of this delocalization for real many-body fermionic problem with attractive interaction. It is possible that obtained results will be also relevant for electrons with Coulomb repulsion. Indeed, in this case at very

weak disorder each electron oscillates near an equilibrium position and the two-body interaction can be considered as an effective harmonic attraction [23]. Another physical situation which can be related to the investigated model corresponds to the case of long range attractive Coulomb interaction between electron-hole excitation in a semiconductor (*e.g.* spin-exciton). In a strong magnetic field electron/hole rotates on a cyclotron circle which drifts slowly along another large circle formed by an equipotential line of Coulomb interaction. Thus without disorder such a system corresponds very closely to the ring model we analyzed above with the ring width proportional to the cyclotron radius. In the presence of disorder the displacements of the ring can be localized by quantum effects or become delocalized below some critical disorder strength. While this physical situation still should be studied in more detail it is clear that its physical properties are closely related to the ring model analyzed in the paper.

We thank O.P. Sushkov for stimulating discussions, and the IDRIS in Orsay and the CICT in Toulouse for access to their supercomputers.

References

1. *Correlated fermions and transport in mesoscopic systems*, edited by T. Martin, G. Montambaux, J. Trân Thanh Vân (Editions Frontières, Gif-sur-Yvette, 1996).
2. *Disorder and Interaction in Transport Phenomena*, edited by M. Schreiber, Ann. Phys. (Leipzig) **8**, 539–798 (1999).
3. A. Mirlin, Phys. Rep. **328**, 259 (2000).
4. D.L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **73**, 2607 (1994); p. 201 in [1].
5. Y. Imry, Europhys. Lett. **30**, 405 (1995); p. 211 in [1].
6. D. Weinmann, A. Müller-Groeling, J.-L. Pichard, K. Frahm, Phys. Rev. Lett. **75**, 1598 (1995); p. 221 in [1].
7. F. von Oppen, T. Wettig, J. Müller, Phys. Rev. Lett. **76**, 491 (1996); p. 235 in [1].
8. P.H. Song, D. Kim, Phys. Rev. B **56**, 12217 (1997).
9. K.M. Frahm, Eur. Phys. J. B **10**, 371 (1998).
10. M. Ortuño, E. Cuevas, Europhys. Lett. **46**, 224 (1999); E. Cuevas, Phys. Rev. Lett. **83** (1999) 140.
11. R.A. Römer, M. Leadbeater, M. Schreiber, p. 675 in [2].
12. O.P. Sushkov, V.V. Flambaum, Usp. Fiz. Nauk. **136**, 3 (1982) [Sov. Phys. Usp. **25**, 1 (1982)].
13. Ph. Jacquod, D.L. Shepelyansky, Phys. Rev. Lett. **78**, 4986 (1997).
14. J. Lages, D.L. Shepelyansky, Phys. Rev. B **62**, 8665 (2000).
15. D.L. Shepelyansky, Phys. Rev. B **61**, 4588 (2000).
16. E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello, T.V. Ramakrishnan, Phys. Rev. Lett. **42** 673 (1979).
17. T. Ohtsuki, K. Slevin, T. Kawarabayashi, p. 655 in [2].
18. G. Caldara, D.L. Shepelyansky (unpublished).
19. L.N. Cooper, Phys. Rev. **104**, 1189 (1956).
20. In this case we found that $\omega_D/V \approx 0.055W/V + 0.20$.
21. B.I. Shklovskii, B. Shapiro, B.R. Sears, P. Lambrianides, H.B. Shore, Phys. Rev. B **47**, 11487 (1993).
22. We expect that D_2 will drop with ΔE growth from ΔE_c to 0; indeed, for $\Delta E > 0$ the particles are in average more separated from each other and their interaction becomes effectively smaller.
23. V.V. Flambaum, I.V. Ponomarev, O.P. Sushkov, Phys. Rev. B **59**, 4163 (1999).

Bibliographie

- [1] ABRAHAMAS, E., ANDERSON, P. W., LICCIARDELLO, D. C., AND RAMAKRISHNAN, T. V. Scaling theory of localization : Absence of quantum diffusion in two dimensions. *Phys. Rev. Lett.* **42** (1979), 673.
- [2] ALTSHULER, B. L., AND SHKLOVSKII, B. I. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **91** (1986), 220. [Sov. Phys. JETP **64**, 127].
- [3] ANDERSON, P. W. Absence of diffusion in certain random lattices. *Phys. Rev.* **109** (1958), 1492.
- [4] ANDERSON, P. W. *J. Phys. Chem. Solids* **11** (1959), 26.
- [5] ANDO, Y., BOEBINGER, G. S., PASSNER, A., KIMURA, T., AND KISHIO, K. Logarithmic divergence of both in-plane and out-of-plane normal-state resistivities of superconducting $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ in the zero-temperature limit. *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995), 4662.
- [6] ARAÚJO, M. A. N., DZIERZAWA, M., AEBISCHER, C., AND BAERISWYL, D. Cooper pair delocalization in disordered media. *Physica B* **244** (1998), 9.
- [7] BARDEEN, J., COOPER, L. N., AND SCHRIEFFER, J. R. Theory of superconductivity. *Phys. Rev.* **108** (1957), 1175.
- [8] BEENAKKER, C. W. J. Random-matrix theory of quantum transport. *Rev. Mod. Phys.* **69** (1997), 731.
- [9] BLACK, C. T., RALPH, D. C., AND TINKHAM, M. Spectroscopy of the superconducting gap in individual nanometer-scale aluminum particles. *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996), 688.
- [10] BOEBINGER, G. S., ANDO, Y., AND PASSNER, A. Insulator-to-metal crossover in the normal state of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ near optimum doping. *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996), 5417.
- [11] BOGOLUBOV, N. N. *Nuovo Cimento* **7** (1958), 794.
- [12] BOGOLUBOV, N. N. *Usp. Fiz. Nauk.* **67** (1959), 549.
- [13] BOHIGAS, O., GIANNONI, M. J., AND SCHMIT, C. Characterization of chaotic quantum spectra and universality of level fluctuation laws. *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984), 1.
- [14] CHIRIKOV, B. V., IZRAILEV, F. M., AND SHEPELYANSKY, D. L. Dynamical stochasticity in classical and quantum mechanics. *Sov. Scient. Rev. C* **2** (1981), 209.
- [15] CHIRIKOV, B. V., IZRAILEV, F. M., AND SHEPELYANSKY, D. L. Quantum chaos : localization vs. ergodicity. *Physica D* **33** (1988), 77.

- [16] COOPER, L. N. Bound electron pairs in a degenerate Fermi gas. *Phys. Rev.* **104** (1956), 1189.
- [17] DE GENNES, P. G. *Superconductivity of metals and alloys*. W.A. Benjamin, Inc., 1966, ch. 4.
- [18] DEVORET, M. H., ESTEVE, D., AND URBINA, C. Single electron phenomena in metallic nanostructure. In *Mesoscopic Quantum Physics* (1994), E. Akkermans, G. Montambaux, J.-L. Pichard, and J. Zinn-Justin, Eds., vol. Les Houches Session LXI, Elsevier, Amsterdam, 1995, p. 605.
- [19] DOROKHOV, O. N. Localization of two bound particles in a one-dimensional random potential. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **98** (1990), 646. [Sov. Phys. JETP **71**, 360 (1990)].
- [20] DYSON, F. J. *J. Math. Phys.* **3** (1962), 157.
- [21] EFETOV, K. B. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **83** (1982), 833. [Sov. Phys. JETP **56**, 467].
- [22] EFETOV, K. B. Supersymmetry and theory of disordered metals. *Adv. Phys.* **32** (1983), 53.
- [23] EFETOV, K. B. *Supersymmetry in Disorder and Chaos*. Cambridge University Press, Cambridge, 1996.
- [24] FISHER, M. P. A. Quantum phase transition in disordered two-dimensional superconductors. *Phys. Rev. Lett.* **65** (1990), 923.
- [25] FISHER, M. P. A., GRINSTEIN, G., AND GIRVIN, S. Presence of quantum diffusion in two dimensions : Universal resistance at the superconductor-insulator transition. *Phys. Rev. Lett.* **64** (1990), 587.
- [26] FLAMBAUM, V. V., PONOMAREV, I. V., AND SUSHKOV, O. P. Spin-spin interaction and magnetic state of a two-dimensional Wigner crystal. *Phys. Rev. B* **59** (1999), 1999.
- [27] FOURNIER, P., MOHANTY, P., MAISER, E., DARZENS, S., VENKATESAN, T., LOBB, C. J., CZJZEK, G., WEBB, R. A., AND GREENE, R. L. Insulator-metal crossover near optimal doping in $\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$: Anomalous normal-state low temperature resistivity. *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998), 4720.
- [28] FRAHM, K. Interaction induced delocalization of two particles : large system size calculations and dependence on interaction strength. *Eur. Phys. J. B* **10** (1999), 371.
- [29] FRAHM, K., AND MÜLLER-GROELING, A. Analytical results for random band matrices with preferential basis. *Europhys. Lett.* **32** (1995), 385.
- [30] FRAHM, K., MÜLLER-GROELING, A., AND PICHARD, J.-L. In *Correlated Fermions and Transport in Mesoscopic Systems* (1996), T. Martin, G. Montambaux, and J. T. T. V&acaron, Eds., Proceedings of the XXXI Rencontres de Moriond, Editions Frontiêres, p. 221.
- [31] FRAHM, K., MÜLLER-GROELING, A., AND PICHARD, J.-L. Effective σ model formulation for two interacting electrons in a disordered metal. *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996), 1509.

- [32] FRAHM, K., MÜLLER-GROELING, A., AND PICHARD, J.-L. Two interacting particles in a random potential : mapping onto one parameter localization theories without interaction. *Z. Phys. B* **102** (1997), 261.
- [33] FRAHM, K., MÜLLER-GROELING, A., PICHARD, J.-L., AND WEINMANN, D. Scaling in interaction-assisted coherent transport. *Europhys. Lett.* **31** (1995), 169.
- [34] FRANZ, M., KALLIN, C., BERLINSKY, A. J., AND SALKOLA, M. I. Critical temperature and superfluid density suppression in disordered high-Tc cuprate superconductors. *Phys. Rev. B* **56** (1997), 7882.
- [35] FYODOROV, Y., AND MIRLIN, A. Scaling properties of localization in random band matrices : A sigma-model approach. *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991), 2405.
- [36] FYODOROV, Y., AND MIRLIN, A. Analytical derivation of the scaling law for the inverse participation ratio in quasi-one-dimensional disordered systems. *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992), 1093.
- [37] FYODOROV, Y., AND MIRLIN, A. Level-to-level fluctuations of the inverse participation ratio in finite quasi 1d disordered systems. *Phys. Rev. Lett.* **71** (1993), 412.
- [38] FYODOROV, Y., AND MIRLIN, A. Statistical properties of random banded matrices with strongly fluctuating diagonal elements. *Phys. Rev. B* **52** (1995), R11580.
- [39] GANTMAKHER, V. F., GOLUBKOV, M. V., DOLGOPOLOV, V. T., SHASHKIN, A. A., , AND TSYDYNZHAPOV, G. E. Observation of the parallel-magnetic-field-induced superconductor-insulator transition in thin amorphous InO films. *JETP Lett.* **71** (2000), 473.
- [40] GANTMAKHER, V. F., GOLUBKOV, M. V., DOLGOPOLOV, V. T., TSYDYNZHAPOV, G. E., AND SHASHKIN, A. A. Destruction of localized electron pairs above the magnetic-field-driven superconductor-insulator transition in amorphous In-O films. *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **68** (1998), 337. [*JETP Lett.* **68**, 363 (1998)].
- [41] GANTMAKHER, V. F., PUSHIN, D. A., SHOVKUN, D. V., TSYDYNZHAPOV, G. E., KOZEEVA, L. P., AND LAVROV, A. N. Low-temperature resistivity of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6+x}$ single crystals in the normal state. *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **65** (1997), 834. [*JETP Lett.* **65**, 870 (1997)].
- [42] GHOSAL, A., RANDERIA, M., AND TRIVEDI, N. Inhomogeneous pairing in highly disordered s-wave superconductors. **cond-mat/0012304**.
- [43] GHOSAL, A., RANDERIA, M., AND TRIVEDI, N. Role of spatial amplitude fluctuations in highly disordered s-wave superconductors. *Phys. Rev. Lett.* **81** (1998), 3940.
- [44] GHOSAL, A., RANDERIA, M., AND TRIVEDI, N. Spatial inhomogeneities in disordered d-wave superconductors. *Phys. Rev. B* **63** (2000), 030505(R).
- [45] GIAMARCHI, T., AND SCHULZ, H. J. *Europhys. Lett.* **3** (1987), 1287.
- [46] GIAMARCHI, T., AND SCHULZ, H. J. Anderson localization and interactions in one-dimensional metals. *Phys. Rev. B* **37** (1988), 325.

- [47] GOLDMAN, A. M., AND MARKOVIĆ, N. Superconductor-insulator transition in the two-dimensional limit. *Physics Today* **51** (1998), 39.
- [48] GOR'KOV, L. P., AND ELIASHBERG, G. M. *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **48** (1965), 1407. [JETP Lett. **30**, 228].
- [49] HAVILAND, D. B., LIU, Y., AND GOLDMAN, A. M. Onset of superconductivity in the two-dimensional limit. *Phys. rev. Lett.* **62** (1989), 2180.
- [50] IMRY, Y. Coherent propagation of two interacting particles in a random potential. *Europhys. Lett.* **30** (1995), 405.
- [51] IMRY, Y. In *Correlated Fermions and Transport in Mesoscopic Systems* (1996), T. Martin, G. Montambaux, and J. T. T. V&acaron;, Eds., Proceedings of the XXXI Rencontres de Moriond, Editions Frontiêres, p. 211.
- [52] JACQUOD, P., AND SHEPELYANSKY, D. L. Hidden Breit-Wigner distribution and other properties of random matrices with preferential basis. *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995), 3501.
- [53] JACQUOD, P., AND SHEPELYANSKY, D. L. Two interacting quasiparticles above the Fermi sea. *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997), 4986.
- [54] JACQUOD, P., SHEPELYANSKY, D. L., AND SUSHKOV, O. P. Breit-Wigner width for two interacting particles in a one-dimensional random potential. *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997), 923.
- [55] JALABERT, R. A., PICHARD, J.-L., AND BEENAKKER, C. W. J. Long-range energy-level interaction in small metallic particles. *Europhys. Lett.* **24** (1993), 1.
- [56] KRAMER, B., MAC KINNON, A., AND SCHREIBER, M. *Physica A* **167** (1990), 163.
- [57] KRAVCHENKO, S. V., KRAVCHENKO, G. V., FURNEAUX, J. E., PUDALOV, V. M., AND D'IORIO, M. Possible metal-insulator transition at $B=0$ in two dimensions. *Phys. rev. B* **50** (1994), 8038.
- [58] LAGES, J. Excited states of the Cooper problem in a three-dimensional disordered system. In *Electronic Correlations : from meso- to nano-physics* (2001), Rencontres de Moriond 2001. À paraître.
- [59] LAGES, J., BENENTI, G., AND SHEPELYANSKY, D. L. Disordered Hubbard model with attraction : The coupling energy of Cooper pairs in small clusters. *Phys. Rev. B* **63** (2001), 214516.
- [60] LAGES, J., AND SHEPELYANSKY, D. Cooper problem in the vicinity of the Anderson transition. *Phys. Rev. B* **62** (2000), 8665.
- [61] LAGES, J., AND SHEPELYANSKY, D. L. Delocalization of two-particle ring near the Fermi level of 2d Anderson model. *Eur. Phys. J. B* **21** (2001), 129.
- [62] LAGES, J., AND SHEPELYANSKY, D. L. Phase of biparticle localized states for the Cooper problem in two-dimensional disordered systems. *Phys. Rev. B* **64** (2001), 094502.
- [63] LEADBEATER, M., RÖMER, R. A., AND SCHREIBER, M. Interaction-dependent enhancement of the localisation length for two interacting particles in a one-dimensional random potential. *Eur. Phys. J. B* **8** (1999), 643.

- [64] LEE, P. A., AND RAMAKRISHNAN, T. V. Disordered electronic systems. *Rev. Mod. Phys.* **57** (1985), 287.
- [65] LEE, S. J., AND KETTERSON, J. B. Critical sheet resistance for the suppression of superconductivity in thin Mo-C films. *Phys. Rev. Lett.* **64** (1990), 3078.
- [66] LIU, Y., MC GREER, K. A., NEASE, B., HAVILAND, D. B., MARTINEZ, G., HALLEY, J. W., AND GOLDMAN, A. M. Scaling of the insulator-to-superconductor transition in ultrathin amorphous Bi films. *Phys. Rev. Lett.* **67** (1991), 2068.
- [67] MAC KINNON, A., AND KRAMER, B. One-parameter scaling of localization length and conductance in disordered systems. *Phys. Rev. Lett.* **47** (1981), 1546.
- [68] MAC KINNON, A., AND KRAMER, B. *Z. Phys. B* **53** (1983), 1.
- [69] MATVEEV, K. A., AND LARKIN, A. I. Parity effect in ground state energies of ultrasmall superconducting grains. *Phys. Rev. Lett.* **78** (1997), 3749.
- [70] MAXWELL, E. Isotope effect in the superconductivity of mercury. *Phys. Rev.* **78** (1950), 477.
- [71] METHA, M. L. *Random Matrices*. Academic, New York, 1991.
- [72] MIRLIN, A. Statistics of energy levels and eigenfunctions in disordered systems. *Phys. Rep.* **326** (2000).
- [73] MIRLIN, A., AND FYODOROV, Y. *J. Phys. A : Math. Gen.* **26** (1993), L551.
- [74] MONTAMBAUX, G. Spectral fluctuations in disordered metals. In *Quantum Fluctuations* (1995), E. Giacobino, S. Reynaud, and J. Zinn-Justin, Eds., vol. Les Houches Session LXIII, Elsevier, Amsterdam.
- [75] MONTAMBAUX, G., POILBLANC, D., BELLISSARD, J., AND SIRE, C. Quantum chaos in spin-fermion models. *Phys. Rev. Lett.* **70** (1993), 497.
- [76] MOTT, N. F., AND TWOSE, W. D. *Adv. Phys.* **10** (1961), 107.
- [77] OHTSUKI, T., SLEVIN, K., AND KAWARABAYASHI, T. Review of recent progress on numerical studies of the Anderson transition. *Ann. Physik (Leipzig)* **8** (1999), 655.
- [78] ONO, S., ANDO, Y., MURAYAMA, T., BALAKIREV, F. F., BETTS, J. B., AND BOEBINGER, G. S. Metal-to-insulator crossover in the low-temperature normal state of $\text{Bi}_2\text{Sr}_{2-x}\text{La}_x\text{CuO}_{6+\delta}$. *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000), 638.
- [79] PAALANEN, M. A., HEBARD, A. F., AND RUEL, R. R. Low-temperature insulating phases of uniformly disordered two-dimensional superconductors. *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992), 1604.
- [80] PASCAUD, M., AND MONTAMBAUX, G. Many-body spectral statistics of interacting fermions. *Ann. Physik (Leipzig)* **7** (1998), 406.
- [81] PORTER, C. E. *Statistical Theories of Spectra : Fluctuations*. Academic, New York, 1965.
- [82] REYNOLDS, C. A., SERIN, B., WRIGHT, W. H., AND NESBITT, L. B. Superconductivity of isotopes of mercury. *Phys. Rev.* **78** (1950), 487.

- [83] SCALETTAR, R. T., TRIVEDI, N., AND HUSCROFT, C. Quantum Monte Carlo study of the disordered attractive Hubbard model. *Phys. Rev. B* **59** (1999), 4364.
- [84] SCHRIEFFER, J. R. *Theory of superconductivity*. Frontier in Physics. W.A. Benjamin, Inc., 1964, ch. 2.
- [85] SEGAWA, K., AND ANDO, Y. Unusual charge localization in Zn-doped and heavily underdoped $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$ at low temperatures. *J. Low Temp. Phys.* **117** (1999), 1175.
- [86] SHEPELYANSKY, D. L. Localization of diffusive excitation in multi-level systems. *Physica D* **28** (1987), 103.
- [87] SHEPELYANSKY, D. L. Coherent propagation of two interacting particles in a random potential. *Phys. Rev. Lett.* **73** (1994), 2607.
- [88] SHEPELYANSKY, D. L. In *Correlated Fermions and Transport in Mesoscopic Systems* (1996), T. Martin, G. Montambaux, and J. T. T. V  n, Eds., Proceedings of the XXXI Rencontres de Moriond, Editions Fronti  res, p. 201.
- [89] SHEPELYANSKY, D. L. Three-dimensional Anderson transition for two electrons in two dimensions. *Phys. Rev. B* **61** (2000), 4588.
- [90] SHKLOVSKII, B. I., SHAPIRO, B., LAMBRIANIDES, B. R. S. P., AND SHORE, H. B. Statistics of spectra of disordered systems near the metal-insulator transition. *Phys. Rev. B* **47** (1993), 11487.
- [91] SMITH, R. A., AND AMBEGAOKAR, V. Effect of level statistics on superconductivity in ultrasmall metallic grains. *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996), 4962.
- [92] SONG, P. H., AND KIM, D. Localization of two interacting particles in a one-dimensional random potential. *Phys. Rev. B* **56** (1997), 12217.
- [93] SONG, P. H., AND VON OPPEN, F. General localization lengths for two interacting particles in a disordered chain. *Phys. Rev. B* **59** (1999), 46.
- [94] SORENSEN, D. C. *SIAM (Soc. Ind. Appl. Math.) J. Math. Anal.* **13** (1992), 357.
- [95] SRINIVASAN, B., AND SHEPELYANSKY, D. L. Disorder and superconductivity : a new phase of bi-particle localized states. **cond-mat/0102055**.
- [96] THOULESS, D. J. Maximum metallic resistance in thin wires. *Phys. Rev. Lett.* **39** (1977), 1167.
- [97] TUOMINEN, M. T., HERGENROTHER, J. M., TIGHE, T. S., AND TINKHAM, M. Experimental evidence for parity-based $2e$ periodicity in a superconducting single-electron tunneling transistor. *Phys. Rev. Lett.* **69** (1992), 1997.
- [98] VALATIN, J. G. *Nuovo Cimento* **7** (1958), 843.
- [99] VON DELFT, J., AND RALPH, D. C. Spectroscopy of discrete energy levels in ultrasmall metallic grains. *Phys. Rep.* **345** (2001), 61.
- [100] VON DELFT, J., ZAIKIN, A. D., GOLUBEV, D. S., , AND TICHY, W. Parity-affected superconductivity in ultrasmall metallic grains. *Phys. Rev. Lett.* **77** (1996), 3189.
- [101] VON OPPEN, F., AND WETTIG, T. Interaction induced delocalization of quasi-particles pairs in the Anderson insulator. *Europhys. Lett.* **32** (1995), 741.

- [102] VON OPPEN, F., AND WETTIG, T. In *Correlated Fermions and Transport in Mesoscopic Systems* (1996), T. Martin, G. Montambaux, and J. T. T. Vän, Eds., Proceedings of the XXXI Rencontres de Moriond, Editions Frontières, p. 235.
- [103] VON OPPEN, F., WETTIG, T., AND MÜLLER, J. Interaction induced delocalization of two particles in a random potential : scaling properties. *Phys. Rev. Lett.* **76** (1996), 491.
- [104] WAIN TAL, X., AND PICHARD, J.-L. Two interacting particles in a disordered chain I : Multifractality of the interaction matrix elements. *Eur. Phys. J. B* **6** (1998), 117.
- [105] WAIN TAL, X., WEINMANN, D., AND PICHARD, J.-L. Two interacting particles in a disordered chain II : Critical statistics and maximum mixing of the one body states. *Eur. Phys. J. B* **7** (1999), 451.
- [106] WAIN TAL, X., WEINMANN, D., AND PICHARD, J.-L. Two interacting particles in a disordered chain III : Dynamical aspects of the interplay disorder-interaction. *Eur. Phys. J. B* **10** (1999), 149.
- [107] WALLIN, M., SöRENSEN, E. S., GIRVIN, S. M., AND YOUNG, A. P. Superconductor-insulator transition in two-dimensional dirty boson systems. *Phys. Rev. B* **49** (1994), 12115.
- [108] WANG, T., BEAUCHAMP, K. M., BERKLEY, D. B., LIU, B. R. J. J. X., ZHANG, J., AND GOLDMAN, A. M. Onset of high-temperature superconductivity in the two-dimensional limit. *Phys. Rev. B* **43** (1991), 8623.
- [109] WEINMANN, D., MÜLLER-GROELING, A., PICHARD, J.-L., AND FRAHM, K. $\hbar/2e$ oscillations for correlated electron pairs in disordered mesoscopic rings. *Phys. Rev. Lett.* **75** (1995), 1598.
- [110] WIGNER, E. P. *SIAM Rev.* **9** (1967), 1.