

# Électrons en interaction dans un milieu aléatoire

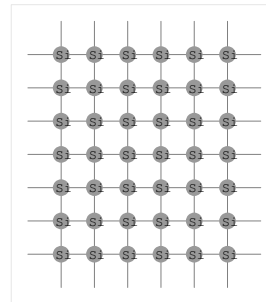
Frédéric Klopp<sup>1</sup>

## 1. Introduction

La physique de la matière condensée est la source de nombreux problèmes mathématiques intéressants et, souvent, difficiles. Tous les domaines mathématiques sont concernés, l'algèbre, la théorie des nombres, l'analyse, les probabilités, etc. Dans ce texte, je vais présenter un modèle simple pour des électrons en interaction dans un milieu aléatoire et comprendre l'état fondamental d'un tel système, c'est-à-dire, son état d'équilibre à température nulle. Les questions que nous évoquerons seront essentiellement du ressort de l'analyse et des probabilités. Avant de décrire le modèle qui va nous intéresser au premier chef, parlons un peu des questions de physique dont il est issu.

Le problème du transport des électrons dans les solides est l'une des questions de physique de la matière condensée les plus anciennes; c'est aussi l'une des plus actuelles. En 1900, l'un des premiers modèles, celui de Drude ([2]) traitait les électrons comme des particules classiques... la mécanique quantique n'était pas encore inventée! Dans ce modèle, les interactions à distance étaient négligées ainsi que celles avec le milieu ambiant.

Avec l'avènement de la mécanique quantique, les électrons devinrent des ondes régies par l'équation de Schrödinger. Le vide fut remplacé par un milieu d'abord supposé périodique, un empilement périodique d'atomes supposés immobiles dans lequel se déplacent les électrons. On commença par étudier les modèles à une particule c'est-à-dire que l'on négligea les interactions entre les électrons. Avec les avancées technologiques et la création



de nouveaux matériaux, en particulier, les semi-conducteurs, les milieux dans lesquels on chercha à comprendre la conduction électrique se firent plus compliqués : on introduisit la notion de milieux aléatoires ou solides désordonnés([1]).

Dans le même temps, on prit en compte les interactions entre les électrons ainsi que d'autres interactions avec le milieu ambiant que le seul potentiel électrostatique (phonons, etc.).

## 2. Les milieux désordonnés et la localisation : un modèle simplifié

Les milieux solides qui nous intéressent sont des solides désordonnés. Ils sont de bons modèles pour de nombreux matériaux réels comme les semi-conducteurs, certains alliages, etc. (voir [9]). L'un des exemples les plus simples de solides

<sup>1</sup> Sorbonne Universités, UPMC Univ. Paris 06, UMR 7586, IMJ-PRG, F-75005, Paris – Univ. Paris Diderot, Sorbonne Paris Cité, UMR 7586, IMJ-PRG, F-75205 Paris – CNRS, UMR 7586, IMJ-PRG, F-75005, Paris, France.

désordonnés est celui des alliages : on considère un substrat cristallin dont l'ordonnement est périodique (voir la figure 1). On substitue alors certains des atomes par des impuretés (voir la figure 2). Macroscopiquement, on ne connaît pas la position exacte des atomes substitués mais seulement leur statistique ; par exemple, on sait qu'un atome sur deux a été échangé. On parle alors de potentiel ou milieu aléatoire au sens où le milieu est une réalisation d'un processus aléatoire.

Le modèle concret qui va nous occuper est d'une nature un peu différente. Le milieu aléatoire est unidimensionnel et constitué d'une suite d'intervalles contigus de longueurs aléatoires que l'on appellera « pièces ». La distribution des points délimitant les pièces est poissonnienne d'intensité 1, i.e., les points délimitant les pièces sont le support d'un processus de Poisson d'intensité 1. Ceci peut se décrire de la façon suivante (voir aussi la

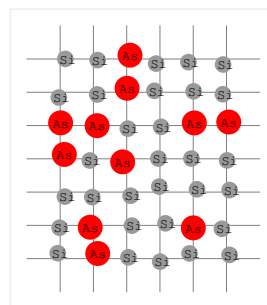


FIG. 2. Un exemple de solide désordonné

- partie 2.1.2) : pour  $L$  grand, avec une excellente probabilité,
- le nombre de pièces dans l'intervalle  $[0, L]$  est égal à  $L$  à une petite erreur relative près,
  - les longueurs des pièces sont distribuées identiquement et suivent une loi exponentielle de paramètre 1 à une petite erreur près,
  - les longueurs des pièces sont stochastiquement indépendantes.

## 2.1. Un modèle très simple de milieu aléatoire

Avant de définir notre modèle très simple de milieu aléatoire, le modèle de Luttinger-Sy, rappelons quelques éléments utiles sur le laplacien de Dirichlet sur un intervalle.

### 2.1.1. Le laplacien de Dirichlet sur un intervalle

Soit  $I = [0, \ell]$  ( $\ell > 0$ ), un intervalle, et considérons le problème aux valeurs propres suivant

$$(2.1) \quad \begin{cases} -\frac{d^2}{dx^2}\varphi(x) = \lambda \varphi(x), & x \in I, \\ \varphi(0) = \varphi(\ell) = 0. \end{cases}$$

La question est donc l'existence de solutions  $(\lambda, \varphi)$  où  $\lambda$  est un nombre complexe et  $\varphi$  une fonction deux fois différentiable à valeurs complexes, non identiquement nulle, solution de (2.1). Le problème (2.1) étant linéaire, à chaque valeur propre  $\lambda$  est associé un espace vectoriel de fonctions propres  $\varphi$ .

Le calcul explicite des solutions de l'équation différentielle  $\varphi'' + \lambda\varphi = 0$  montre

que le problème aux valeurs propres (2.1) a pour solutions les couples  $(\lambda_k, \psi_k)$  tels que

$$(2.2) \quad \lambda_k = \frac{(k\pi)^2}{\ell^2} \quad \text{et} \quad \psi_k \in \text{Vect}(\varphi_k) = \mathbb{C}\varphi_k \quad \text{où} \quad \varphi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{2\ell}} \sin\left(\frac{\pi k x}{\ell}\right)$$

lorsque  $k$  parcourt les entiers naturels non nuls.

La théorie des séries de Fourier (voir [5]) montre que la famille  $(\varphi_k)_{k \geq 1}$  forme une base orthonormée de  $L^2(I)$ , l'espace des fonctions de carré intégrable sur  $I$ .

On peut alors définir le laplacien de Dirichlet sur  $I$ , noté  $\Delta_I^D$ , comme l'opérateur (linéaire) dont la matrice (infinie) dans la base  $(\varphi_k)_{k \geq 1}$  est la matrice diagonale des éléments  $(-\lambda_k)_{k \geq 1}$ . Cet opérateur linéaire est non borné : il n'est pas défini sur tous les vecteurs de  $L^2(I)$ . Pour qu'un vecteur de  $L^2(I)$ , disons  $u$ , soit dans le domaine de  $\Delta_I^D$ , il faut et il suffit que ses coefficients dans la base  $(\varphi_k)_{k \geq 1}$ , disons

$(\hat{u}_k)_{k \geq 1}$ , satisfassent  $\sum_{k \geq 1} |\lambda_k \hat{u}_k|^2 < +\infty$ . On vérifie alors que  $u$  est une fonction

continûment différentiable qui s'annule en 0 et en  $\ell$  et dont la dérivée seconde au sens des distributions est de carré intégrable sur  $[0, \ell]$ .

### 2.1.2. Le modèle de Luttinger-Sy

Dans  $\mathbb{R}$ , on considère un processus ponctuel de Poisson  $d\mu(\omega)$  d'intensité 1. Décrivons cette mesure aléatoire  $d\mu(\omega)$  plus rigoureusement que dans le début de la section 2. C'est une mesure ponctuelle qui affecte la masse unité à chacun des points de son support (i.e. cette mesure est une somme de masses de Dirac) telle que

- pour un intervalle  $I$ , la variable comptant le nombre de points tombés dans  $I$  suit une loi de Poisson de paramètre  $|I|$ , la mesure de Lebesgue de  $I$ ,
- les variables aléatoires comptant les points tombés dans des intervalles disjoints sont stochastiquement indépendantes.

Soit  $(x_k(\omega))_{k \in \mathbb{Z}}$  le support de  $d\mu(\omega)$  (i.e.,  $d\mu(\omega) = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \delta_{x_k(\omega)}$ ), les points

$(x_k(\omega))_{k \in \mathbb{Z}}$  sont ordonnés de façon croissante.

Sur  $L^2(\mathbb{R})$ , on définit le modèle de Luttinger-Sy (ou modèle des pièces, voir [11, 10]) de la façon suivante. Pour  $L > 0$ , on définit l'intervalle  $\Lambda = \Lambda_L = ]0, L[$ . On considère les points de  $\{x_k(\omega); k \in \mathbb{Z}\}$  tombés dans  $\Lambda$  :  $0 < x_{k_-}(\omega) < x_{k_-+1}(\omega) < \dots < x_{k_+-1}(\omega) < x_{k_+}(\omega) < L$  où  $k_- = \min\{k; x_k > 0\}$  et  $k_+ = \max\{k; x_k < L\}$ . Ces nombres sont aléatoires. On pose  $x_{k_- - 1} = 0$  et  $x_{k_+ + 1} = L$ . On définit alors la  $k$ -ième pièce comme  $\Delta_k(\omega) := ]x_k(\omega), x_{k+1}(\omega)[$ . Le modèle des pièces sur l'intervalle  $[0, L]$  est alors donné par la somme directe orthogonale suivante :

$$(2.3) \quad H_\omega(L) = H_\omega(\Lambda) = \bigoplus_{k_- - 1 \leq k \leq k_+} -\Delta_{|\Delta_k(\omega)}^D.$$

Pour simplifier, dans la suite, on appelle  $m(\omega)$  le nombre de pièces dans  $[0, L]$  et on renumérote les pièces de 1 à  $m(\omega)$ . On sait qu'avec une très bonne probabilité, on a  $m(\omega) = L + O(L^{2/3})$ .

Sur la figure 3, on a représenté les pièces en abscisse et les énergies autorisées dans chaque pièces en ordonnée. Dans chaque pièce, les niveaux d'énergies autorisés pour les électrons sont quantifiés : ce sont les valeurs propres du laplacien de Dirichlet sur l'intervalle données par (2.2).

Il est clair que l'on peut définir la limite de  $H_\omega(L)$  quand  $L \rightarrow +\infty$  de la façon suivante :

$$(2.4) \quad H_\omega = \bigoplus_{k \in \mathbb{Z}} -\Delta_{|\Delta_k(\omega)}^D.$$

C'est un opérateur essentiellement auto-adjoint sur  $L^2(\mathbb{R})$ . En utilisant les propriétés ergodiques du processus de Poisson, on vérifie simplement que le spectre de  $H_\omega$  ne dépend presque sûrement pas de  $\omega$ . De plus,  $H_\omega$  n'a pas de spectre continu : son spectre est constitué uniquement de valeurs propres. En effet,  $H_\omega$  s'écrit comme la somme directe d'opérateurs n'ayant que du spectre ponctuel. Enfin, la formule explicite des valeurs propres du laplacien de Dirichlet sur un intervalle (voir (2.2)) et la définition du processus de Poisson (voir la description des longueurs des pièces donnée juste avant la partie 2.1) montre que, presque sûrement, les valeurs propres de  $H_\omega$  sont dans la demi-droite  $[0, +\infty[$ .

D'autre part, presque sûrement, les fonctions propres associées aux valeurs propres de  $H_\omega$  sont toutes à support compact : chaque fonction propre est associée à une pièce et elle est supportée dans cette pièce.

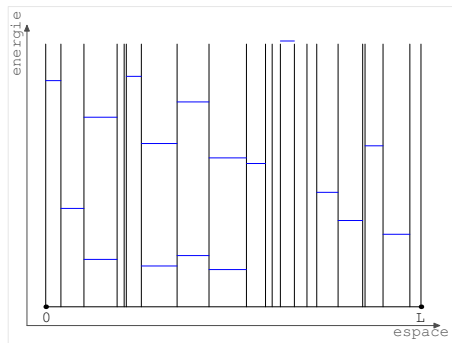


FIG. 3. Le milieu aléatoire et les niveaux d'énergie autorisés

Les propriétés que nous venons de voir pour le modèle de Luttinger-Sy (à savoir, que le spectre de l'opérateur aléatoire est purement ponctuel et que les valeurs propres sont associées à des vecteurs propres qui décroissent exponentiellement à l'infini) sont partagées par de nombreux modèles aléatoires ergodiques. Un modèle aléatoire ergodique est une famille d'opérateurs auto-adjoints munie d'une structure de probabilité et d'une relation permettant de transporter l'action d'une famille de transformations ergodiques sur la structure de probabilité en l'action d'une famille d'opérateurs unitaires. Ces modèles ont fait l'objet d'une étude systématique (voir, par exemple, [6, 4]). Il est démontré de façon très générale que le spectre ainsi que les composantes spectrales (les spectres purement ponctuel, absolument continu et singulier continu) sont les mêmes pour presque tous les éléments de la famille.

Le fait que le spectre soit purement ponctuel dans certaines régions d'énergie est appelé « localisation » : c'est un phénomène très général caractéristique de la propagation des ondes dans les milieux désordonnés qui ne se limite pas aux ondes régies par l'équation de Schrödinger (voir [9]). La localisation a été démontrée mathématiquement pour de nombreux modèles aléatoires (voir [4]).

### 2.1.3. La densité d'états intégrée

La densité d'états intégrée du système est définie de la façon suivante. On fixe une énergie  $E$  et un intervalle de longueur  $L$ . Puis, on compte le nombre de niveaux d'énergie dans le système, i.e., le nombre de valeurs propres de l'opérateur par unité de volume. Enfin, on prend la limite  $L \rightarrow +\infty$ . Ainsi, pour  $E \in \mathbb{R}$ , on pose

$$N(E) = \lim_{L \rightarrow +\infty} \frac{\#\{\text{valeurs propres de } H_\omega(L) \text{ dans } ]-\infty, E]\}}{L}.$$

Pour le modèle de Luttinger-Sy, l'existence de cette limite découle de la loi des grands nombres. En effet, pour ce modèle, quand  $L \rightarrow +\infty$ , à une petite erreur près, on peut considérer les pièces comme des quantités aléatoires indépendantes; en particulier, leurs longueurs sont des variables aléatoires indépendantes suivant une distribution exponentielle de paramètre 1 (voir la description donnée juste avant la partie 2.1). La loi des grands nombres nous dit que, presque sûrement, le nombre de niveaux d'énergie de  $H_\omega(L)$  inférieurs à  $E$  est asymptotique au nombre de pièces multiplié par l'espérance du nombre de niveaux inférieurs à  $E$  contenus dans une pièce. Comme la longueur d'une pièce suit une loi exponentielle de paramètre 1, la description exacte du spectre d'une pièce (2.2) nous dit que la loi du nombre de niveaux sous  $E$  contenus dans une pièce est

$$\begin{aligned} \forall k \in \mathbb{N}, \quad & \mathbb{P} \left( \left\{ \begin{array}{l} \text{une pièce } \Delta \text{ contient exactement} \\ k \text{ niveaux inférieurs à l'énergie } E \end{array} \right\} \right) \\ &= \mathbb{P} \left( \left\{ \frac{(\pi k)^2}{|\Delta|^2} \leq E < \frac{(\pi(k+1))^2}{|\Delta|^2} \right\} \right) \\ &= \mathbb{P} \left( \left\{ \frac{k\pi}{\sqrt{E}} \leq |\Delta| < \frac{(k+1)\pi}{\sqrt{E}} \right\} \right) \\ &= \exp\left(-\frac{k\pi}{\sqrt{E}}\right) - \exp\left(-\frac{(k+1)\pi}{\sqrt{E}}\right). \end{aligned}$$

Ainsi, comme le nombre des pièces est asymptotique à  $L$ , la densité d'états intégrée à l'énergie  $E$  est donnée par

$$\begin{aligned} (2.5) \quad N(E) &= \sum_{k \geq 1} k \left( e^{-\frac{k\pi}{\sqrt{E}}} - e^{-\frac{(k+1)\pi}{\sqrt{E}}} \right) \\ &= \frac{\exp(-\ell_E)}{1 - \exp(-\ell_E)} \mathbf{1}_{E \geq 0} \quad \text{où} \quad \ell_E := \frac{\pi}{\sqrt{E}}. \end{aligned}$$

La longueur  $\ell_E$  est la plus petite longueur telle qu'une pièce de cette longueur a une valeur propre inférieure ou égale à  $E$ .

Remarquons que comme la fonction  $N(E)$  est continue, la convergence dans la limite (2.5) est uniforme par le théorème de Dini : les éléments de la suite sont des fonctions croissantes et leur limite est continue (voir (2.5)).

En utilisant (2.2), on peut aussi facilement calculer la densité d'états pour le laplacien libre, i.e., quand le milieu aléatoire est absent :

$$\begin{aligned} N_{-\Delta}(E) &= \lim_{L \rightarrow +\infty} \frac{\#\{\text{valeurs propres de } (-\Delta)_{|[0,L]} \text{ dans } ]-\infty, E]\}}{L} \\ &= \lim_{L \rightarrow +\infty} \frac{1}{L} \#\left\{k \geq 1; \frac{(\pi k)^2}{L^2} \leq E\right\} \\ &= \lim_{L \rightarrow +\infty} \frac{1}{L} \#\left\{k \geq 1; k \leq \frac{\sqrt{E}}{\pi} L\right\} = \frac{\sqrt{E}}{\pi} \mathbf{1}_{E \geq 0}. \end{aligned}$$

Les deux fonctions  $N$  et  $N_{-\Delta}$  sont, bien sûr, croissantes ; elles sont aussi continues et s'annulent sur  $]-\infty, 0[$ . Il est intéressant de noter que l'annulation en 0 (qui est le bord du spectre presque sûr du modèle (2.4)) des deux densités d'états intégrées est très différente : la densité d'états du modèle aléatoire s'annule exponentiellement vite en 0 alors que celle du laplacien libre ne s'annule que polynomialement.

L'existence de la densité d'états intégrée peut être démontrée pour de nombreux modèles aléatoires ergodiques (voir [6, 4]). La décroissance exponentielle de la densité d'états intégrée au bord du spectre presque sûr porte le nom d'« asymptotique de Lifshitz » ; c'est la première des caractéristiques des systèmes aléatoires localisés ; elle est typique des modèles aléatoires et a été démontrée pour de nombreux modèles (voir [7]). Dans le cas du modèle de Luttinger-Sy traité ci-dessus, on pourrait penser que l'asymptotique de Lifshitz est due à la distribution exponentielle des longueurs des pièces dans ce modèle. En fait, le phénomène sous-jacent est un phénomène de grande déviation qui est typique des processus aléatoires.

### 3. La limite thermodynamique

On s'intéresse maintenant aux propriétés d'un système d'électrons en interaction dans un milieu aléatoire que nous supposons être décrit par le modèle de Luttinger-Sy. On considère un grand échantillon d'un tel milieu, disons, un intervalle  $\Lambda$  de longueur  $|\Lambda|$  dans lequel on place  $n$  électrons. On veut étudier la limite thermodynamique du système, i.e., ce qui se passe quand  $|\Lambda|$  et  $n$  croissent vers l'infini de façon que  $n/|\Lambda|$  tend vers  $\rho > 0$ .

Les électrons sont des fermions c'est-à-dire que ce sont des particules indistinguables qui obéissent au principe d'exclusion de Fermi : un état quantique donné ne peut contenir au plus qu'une particule. Ceci se traduit mathématiquement par le fait que les états du système sont décrits par des fonctions (totalement) antisymétriques : si  $\Psi$  est la fonction d'onde de  $n$  particules dont les coordonnées sont  $(x_1, \dots, x_n)$  et que  $\sigma$  est une permutation de  $\{1, \dots, n\}$  de signature  $\text{sign}(\sigma)$ , alors

$$\Psi(x_{\sigma(1)}, \dots, x_{\sigma(n)}) = \text{sign}(\sigma) \Psi(x_1, \dots, x_n), \quad \forall (x_1, \dots, x_n) \in \Lambda^n.$$

#### 3.1. Le hamiltonien de $n$ particules

On définit l'espace des fonctions antisymétriques de carré intégrable sur  $\Lambda^n$

$$(3.1) \quad \mathfrak{H}^n(\Lambda) = \bigwedge_{j=1}^n L^2(\Lambda).$$

Sur cet espace, on considère l'opérateur

$$(3.2) \quad H_\omega^0(\Lambda, n) = \sum_{i=1}^n \underbrace{\mathbf{1}_{\mathfrak{H}} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_{\mathfrak{H}}}_{i-1 \text{ fois}} \otimes H_\omega(\Lambda) \otimes \underbrace{\mathbf{1}_{\mathfrak{H}} \otimes \dots \otimes \mathbf{1}_{\mathfrak{H}}}_{n-i \text{ fois}},$$

c'est-à-dire, toutes les  $n$  particules se déplacent dans le même paysage aléatoire. Les électrons interagissent. On va supposer que cette interaction se fait par paire : chaque paire d'électrons génère une interaction répulsive (i.e. positive); mais les groupes de trois électrons ou plus ne créent pas d'interactions supplémentaires (voir la forme du potentiel d'interaction total (3.5)). De plus, comme nos particules sont des électrons, on supposera que l'interaction est répulsive. On choisit ainsi une fonction  $U : \mathbb{R} \rightarrow \mathbb{R}^+$  bornée et paire. Il sera également nécessaire de contrôler les interactions à longue distance. On supposera pour cela que

$$(3.3) \quad x^3 \int_x^{+\infty} U(t) dt \xrightarrow{x \rightarrow +\infty} 0.$$

Sur  $\mathfrak{H}^n(\Lambda)$ , on considère l'opérateur

$$(3.4) \quad H_\omega^U(\Lambda, n) = H_\omega^0(\Lambda, n) + W_n$$

où

$$(3.5) \quad W_n(x^1, \dots, x^n) := \sum_{i < j} U(x^i - x^j).$$

On considère maintenant l'état fondamental de ce système ainsi que l'énergie fondamentale. L'énergie fondamentale est définie par

$$(3.6) \quad E_\omega^U(\Lambda, n) := \inf_{\substack{\Psi \in \mathcal{D}_\omega^n(\Lambda) \\ \|\Psi\| \neq 0}} \frac{\langle H_\omega^U(\Lambda, n)\Psi, \Psi \rangle}{\|\Psi\|^2}$$

où

$$(3.7) \quad \mathcal{D}_\omega^n(\Lambda) := \left( \bigoplus_{1 \leq k \leq m(\omega)}^\perp H_0^1(\Delta_k(\omega)) \right)^{\otimes n} \cap \mathfrak{H}^n(\Lambda).$$

En fait, l'infimum dans (3.6) est un minimum qui est atteint sur un sous-espace vectoriel de  $\mathfrak{H}^n(\Lambda)$  de dimension finie. Tous les minimiseurs sont appelés « états fondamentaux » du système.

La question principale est maintenant de calculer  $E_\omega^U(\Lambda, n)$  ainsi que de caractériser les minimiseurs de (3.6) quand  $|\Lambda| \rightarrow +\infty$  et  $n/|\Lambda| \rightarrow \rho$  où  $\rho > 0$  est une constante fixée.

Comme nous allons le voir, quand l'interaction  $U$  est nulle, ce problème est explicitement résoluble. On veut alors comprendre quelles sont les modifications induites par les interactions. On veut en particulier comprendre comment la densité  $\rho$  et les caractéristiques de l'interaction  $U$  (taille, vitesse de décroissance à l'infini, etc.) influent sur les états fondamentaux et l'énergie fondamentale.

### 3.2. Les matrices densité

L'une des difficultés que l'on rencontre lorsque l'on étudie la limite thermodynamique est que, le nombre de particules augmentant, le nombre de variables dont dépendent les fonctions d'ondes du système augmente. Les particules composant le système étant identiques, on peut les décrire en utilisant les matrices densité définies de la façon suivante.

Considérons  $\Psi$  un état normalisé du système, i.e.  $\Psi \in \mathfrak{H}^n(\Lambda)$  et  $\|\Psi\| = 1$ . La *matrice densité à une particule* de  $\Psi$  est l'opérateur sur  $\mathfrak{H}^1(\Lambda) = L^2(\Lambda)$  dont le noyau est donné par

$$(3.8) \quad \gamma_{\Psi}(x, y) = \gamma_{\Psi}^{(1)}(x, y) = n \int_{\Lambda^{n-1}} \Psi(x, \tilde{x}) \overline{\Psi(y, \tilde{x})} d\tilde{x}$$

où  $\tilde{x} = (x^2, \dots, x^n)$  et  $d\tilde{x} = dx^2 \dots dx^n$ .

La *matrice densité à deux particules* de  $\Psi$  est l'opérateur sur  $\mathfrak{H}^2(\Lambda) = \bigwedge_{j=1}^2 L^2(\Lambda)$

dont le noyau est donné par

$$(3.9) \quad \gamma_{\Psi}^{(2)}(x^1, x^2, y^1, y^2) = \frac{n(n-1)}{2} \int_{\Lambda^{n-2}} \Psi(x^1, x^2, \tilde{x}) \overline{\Psi^*(y^1, y^2, \tilde{x})} d\tilde{x}$$

où  $\tilde{x} = (x^3, \dots, x^n)$  et  $d\tilde{x} = dx^3 \dots dx^n$ .

L'opérateur  $\gamma_{\Psi}$  (resp.  $\gamma_{\Psi}^{(2)}$ ) décrit l'ensemble des particules (resp. des paires de particules) dans le système.

Les deux opérateurs  $\gamma_{\Psi}$  et  $\gamma_{\Psi}^{(2)}$  sont positifs et à trace (i.e. leur spectre est discret et leurs valeurs propres sont sommables); si  $\text{Tr}$  désigne la trace d'un opérateur, on calcule

$$(3.10) \quad \text{Tr} \gamma_{\Psi} = n \quad \text{et} \quad \text{Tr} \gamma_{\Psi}^{(2)} = \frac{n(n-1)}{2}.$$

Lorsque  $n$  tend vers l'infini, on peut bien sûr de façon analogue définir des matrices densité à  $k$  particules pour  $k$  arbitraire.

On peut maintenant envisager de définir simplement la limite de  $(\gamma_{\Psi_n}^{(1)})_{n \geq 1}$  ou  $(\gamma_{\Psi_n}^{(2)})_{n \geq 2}$  quand  $n$  tend vers  $+\infty$ .

## 4. $n$ électrons sans interaction dans un milieu aléatoire

On va commencer par construire l'état fondamental sans interaction; on calculera ensuite sa matrice densité à une particule. On obtiendra simultanément l'énergie fondamentale sans interaction.

### 4.1. L'état fondamental sans interaction

La décomposition spectrale du hamiltonien du système sans interaction  $H_{\omega}^0(\Lambda, n)$  (voir (3.2)) se calcule assez facilement à partir de celle du hamiltonien à une particule  $H_{\omega}(\Lambda)$  (voir (2.3)).

Pour ce faire, on appelle  $(E_{j,\omega}^{\Lambda})_{j \geq 1}$  et  $(\varphi_{j,\omega}^{\Lambda})_{j \geq 1}$  respectivement les valeurs et vecteurs propres associés de  $H_{\omega}(\Lambda)$ . On suppose les valeurs propres ordonnées de façon croissante. Les formules explicites (2.2) montrent que, pour le modèle de



Luttinger-Sy, presque sûrement, les valeurs propres sont toutes simples. Fixons maintenant  $\omega$  et  $1 \leq j_1 < j_2 < \dots < j_n$  des entiers et définissons l'état

$$(4.1) \quad \begin{aligned} \Psi_{\vec{j}}(x_1, \dots, x_n) &= \left( \prod_{k=1}^n \varphi_{j_k, \omega}^\Lambda \right) (x_1, \dots, x_n) \\ &= \frac{1}{\sqrt{n!}} \text{Det} \left( \left( \varphi_{j_k, \omega}^\Lambda(x_k) \right)_{1 \leq j, k \leq n} \right) \end{aligned}$$

où  $\vec{j} = (j_1, \dots, j_n)$ . Un état de cette forme est appelé « déterminant de Slater ». La fonction  $\Psi_{\vec{j}}$  est bien sûr totalement antisymétrique : c'est donc un état de  $\mathfrak{H}^n(\Lambda)$ . De plus, un calcul simple montre que

$$\left( H_\omega^0(\Lambda, n) - \sum_{k=1}^n E_{j_k, \omega}^\Lambda \right) \Psi_{\vec{j}} = 0.$$

Enfin, comme  $(\varphi_{j, \omega}^\Lambda)_{j \geq 1}$  forme une base orthonormée de  $L^2(\Lambda)$ , on vérifie que la famille  $(\Psi_{\vec{j}})_{1 \leq j_1 < j_2 < \dots < j_n}$  forme une base orthonormée de  $\mathfrak{H}^n(\Lambda)$ . Ainsi,  $H_\omega^0(\Lambda, n)$  est « diagonal » dans cette base : ses valeurs propres sont les nombres

$$\left( \sum_{k=1}^n E_{j_k, \omega}^\Lambda \right)_{1 \leq j_1 < j_2 < \dots < j_n}$$

associés aux vecteurs propres  $(\Psi_{\vec{j}})_{1 \leq j_1 < j_2 < \dots < j_n}$ .

Comme les valeurs propres sont ordonnées de façon croissante, l'état fondamental de  $H_\omega^0(\Lambda, n)$  est l'état  $\Psi_{(1, 2, \dots, n)}$  et il est associé à l'énergie fondamentale

$$E_\omega^0(\Lambda, n) = \sum_{j=1}^n E_{j, \omega}^\Lambda.$$

Comme les valeurs propres de  $H_\omega(\Lambda)$  sont simples presque sûrement, l'état fondamental est simple, i.e., quand  $U \equiv 0$ , le minimiseur dans (3.6) est un espace vectoriel de dimension 1 presque sûrement.

## 4.2. L'asymptotique de l'énergie fondamentale par particule

Calculons maintenant l'asymptotique de  $E_\omega^0(\Lambda, n)$ . Pour cela, considérons la fonction croissante, constante par morceaux

$$E \mapsto N_{\Lambda, \omega}(E) = \frac{\#\{\text{valeurs propres de } H_\omega(\Lambda) \text{ dans } ] - \infty, E]\}}{L}.$$

Remarquons que, par définition de  $E_{n, \omega}^\Lambda$  (comme les valeurs propres de  $H_\omega(\Lambda)$  sont simples), on a

$$N_{\omega, \Lambda}(E_{n, \omega}^\Lambda) = \frac{n}{L}.$$

Comme, presque sûrement,  $N_{\omega, \Lambda}$  converge vers  $N$  uniformément (voir (2.5)) et que  $n/L$  converge vers  $\rho$  quand  $L \rightarrow +\infty$ , on voit que  $E_{n, \omega}^\Lambda$  converge vers  $E_\rho$ , l'unique

solution de  $N(E) = \rho$ . L'énergie  $E_\rho$  s'appelle l'énergie de Fermi du système. De même, presque sûrement, on calcule

$$\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n E_{j,\omega}^\Lambda = \frac{L}{n} \int_{-\infty}^{E_{n,\omega}^\Lambda} E dN_{\Lambda,\omega}(E) \xrightarrow[\substack{L \rightarrow +\infty \\ n/L \rightarrow \rho}]{} \frac{1}{\rho} \int_0^{E_\rho} E dN(E).$$

On obtient ainsi que, dans la limite thermodynamique, l'énergie fondamentale par particule du système sans interaction converge vers

$$\mathcal{E}^0(\rho) := \frac{1}{\rho} \int_0^{E_\rho} E dN(E).$$

### 4.3. La matrice densité à une particule de l'état fondamental

Pour ce qui concerne l'état fondamental, on calcule sa matrice densité à une particule explicitement pour obtenir

$$\gamma_{\Psi_\omega^0}(\Lambda, n) = \sum_{j=1}^n \gamma_{\varphi_{j,\omega}^\Lambda} = \mathbf{1}_{]-\infty, E_{n,\omega}^\Lambda]}(H_\omega(\Lambda))$$

i.e. la matrice densité à une particule de l'état fondamental est le projecteur spectral de  $H_\omega(\Lambda)$  sur l'intervalle d'énergie  $]-\infty, E_{n,\omega}^\Lambda]$ . Ainsi, l'opérateur  $\gamma_{\Psi_\omega^0}(\Lambda, n)$  converge au sens fort vers le projecteur spectral de  $H_\omega$  sur l'intervalle d'énergie  $]-\infty, E_\rho]$ . On voit donc que dans l'état fondamental, pour le système sans interactions, dans la limite thermodynamique, les particules occupent tous les états disponibles sous l'énergie de Fermi  $E_\rho$  (voir la figure 4).

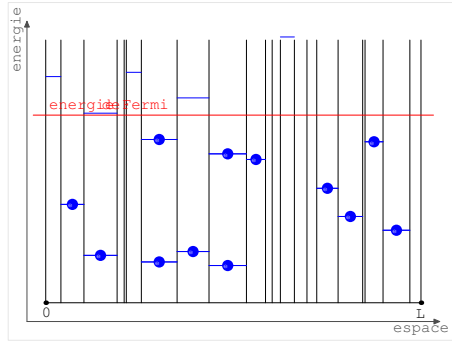


FIG. 4. L'énergie de Fermi

À l'énergie de Fermi, on peut associer la longueur de Fermi : c'est la longueur minimale que doit avoir une pièce afin d'avoir au moins un niveau d'énergie sous l'énergie de Fermi. Celle-ci existe car les niveaux d'énergie d'une pièce sont des fonctions décroissantes de la longueur de cette pièce. Notons la  $\ell_F$ .

On sait alors que dans l'état fondamental du système sans interaction, une pièce de longueur inférieure à  $\ell_F$  ne porte pas d'électron. La loi exacte des niveaux d'énergie d'une pièce entraîne qu'une pièce de longueur

comprise entre  $k\ell_F$  et  $(k+1)\ell_F$ ,  $(k+1)\ell_F$  exclue, porte exactement  $k$  électrons. On peut alors représenter l'état fondamental du système sans interaction de la façon suivante : en abscisse, on place les longueurs possibles pour une pièce et, en ordonnée, le nombre d'électrons contenu dans une telle pièce (dans l'état fondamental du système sans interaction). On obtient la figure 5.

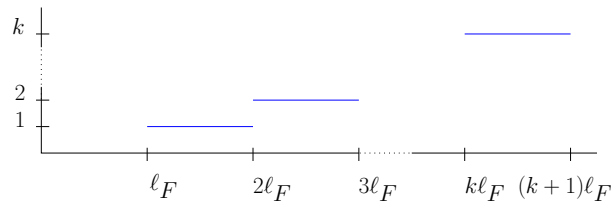


FIG. 5. La répartition des électrons dans l'état fondamental du système sans interaction

### 5. $n$ électrons en interaction dans un milieu aléatoire

On veut maintenant comprendre ce qui se passe lorsque l'on tient compte des interactions entre les électrons. Les électrons étant de même charge, ces interactions sont répulsives c'est-à-dire que l'énergie du système augmente quand on tient compte des interactions. Rappelons que l'on a supposé que les interactions se font par paire. Pour simplifier, nous commencerons par supposer que l'interaction entre deux électrons est nulle si ces deux électrons sont suffisamment éloignés l'un de l'autre, i.e., que  $U$  dans (3.4) est à support compact. Nous discuterons le cas plus général, celui quand seule l'hypothèse (3.3) est satisfaite un peu plus tard.

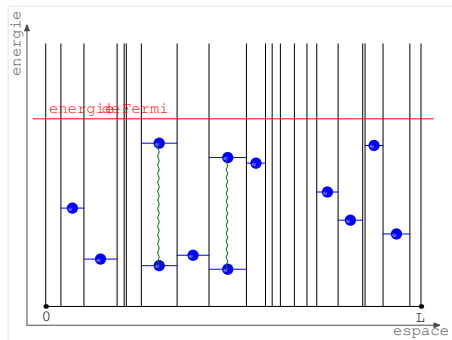


FIG. 6. Interaction entre les électrons

Si on part de l'état fondamental sans interaction et que l'on « allume » les interactions, les électrons interagissent, en particulier ceux vivant dans la même pièce (voir la figure 6). Il peut donc être plus économique énergétiquement d'éloigner les uns des autres certains électrons quitte à créer un état dont l'énergie dans le système sans interaction ne sera plus minimale : pour un système donné, un gain en énergie d'interaction peut compenser une perte en énergie sans interaction (voir la figure 7). Ceci ne concerne bien sûr que les électrons qui interagissent avec d'autres électrons : comme le potentiel d'interaction a un support borné, tous les électrons de l'état fondamental sans interaction disposés dans des pièces suffisamment éloignées de toutes les autres pièces portant un électron ne seront pas affectés par les interactions. L'éloignement minimal dépendra du potentiel d'interaction.

#### 5.1. L'énergie fondamentale par particule

Le premier résultat garantit l'existence d'une limite thermodynamique pour  $n^{-1}E_{\omega}^U(\Lambda, n)$ .

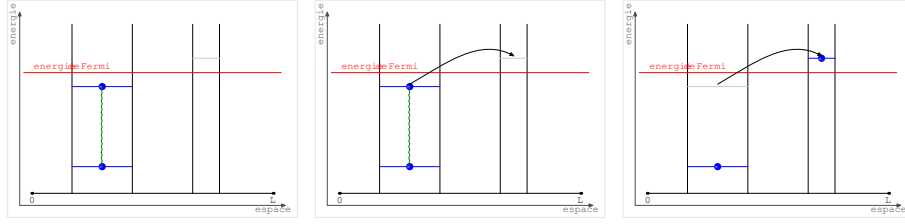


FIG. 7. Dissociation d'une paire d'électrons

**Théorème 5.1** ([8]). *Sous nos hypothèses, la limite existe presque sûrement et dans  $L^1_\omega$*

$$(5.1) \quad \mathcal{E}^U(\rho) := \lim_{\substack{L \rightarrow +\infty \\ n/L \rightarrow \rho}} \frac{E_\omega^U(\Lambda, n)}{n}.$$

*De plus, celle limite est indépendante de  $\omega$ .*

L'existence de la limite thermodynamique pour l'énergie fondamentale par particule peut être démontrée pour des systèmes assez généraux (voir [3, 13, 12]).

Nous avons vu que l'énergie  $\mathcal{E}^0(\rho)$  se calcule explicitement en terme de la densité d'états du modèle des pièces (voir la partie 4.2). Dans le cas des systèmes en interaction, on obtient un développement asymptotique à deux termes quand  $\rho$  est petit, soit,

**Théorème 5.2** ([8]). *Soit  $\rho > 0$ . Sous nos hypothèses, quand  $\rho$  est assez petit, on calcule*

$$(5.2) \quad \mathcal{E}^U(\rho) = \mathcal{E}^0(\rho) + \pi^2 \left(1 - \exp\left(-\frac{\gamma}{8\pi^2}\right)\right) \frac{\rho}{|\log \rho|^3} + o(\rho |\log \rho|^{-3})$$

et

$$(5.3) \quad \mathcal{E}^0(\rho) = E_\rho \left(1 + O\left(\sqrt{E_{\rho,\mu}}\right)\right) = \frac{\pi^2 \mu^2}{|\log \rho|^2} \left(1 + O\left(\frac{1}{|\log \rho|}\right)\right)$$

où  $\gamma$  est une constante positive dépendant seulement de  $U$  définie dans la Proposition 5.3.

**Proposition 5.3** ([8]). *Considérons deux électrons dans  $[0, \ell]$  en interaction à travers le potentiel  $U$  vérifiant nos hypothèses, i.e., sur  $\mathfrak{H}^2([0, \ell]) = L^2([0, \ell]) \wedge L^2([0, \ell])$ , on considère l'opérateur*

$$(5.4) \quad \left(-\Delta_{x_1}^D|_{[0,\ell]}\right) \otimes \mathbf{1}_{\mathfrak{H}} + \mathbf{1}_{\mathfrak{H}} \otimes \left(-\Delta_{x_2}^D|_{[0,\ell]}\right) + U(x_1 - x_2)$$

avec conditions au bord de Dirichlet.

Pour  $\ell$  grand,  $E^U([0, \ell], 2)$ , l'énergie fondamentale de cet opérateur admet le développement asymptotique suivant :

$$(5.5) \quad E^U([0, \ell], 2) = \frac{5\pi^2}{\ell^2} + \frac{\gamma}{\ell^3} + o\left(\frac{1}{\ell^3}\right)$$

où  $\gamma = \gamma(U) > 0$  si  $U$  n'est pas identiquement nul.

Le développement (5.2) montre alors que, pour  $\rho$  petit, le premier terme de correction ne dépend que des interactions entre deux particules vivant dans la même pièce. Ceci sera expliqué par la description de l'état fondamental.

## 5.2. La matrice densité à une particule des états fondamentaux

### 5.2.1. Unicité de l'état fondamental

Par construction, il n'y a pas de principe de prolongement unique pour le modèle des pièces, la réunion des pièces n'étant pas connexe ; ainsi, on ne s'attend pas en toute généralité à l'unicité de l'état fondamental, même si on peut espérer que celui-ci soit unique presque sûrement comme dans le cas du système sans interaction. Quand on tient compte des interactions, on peut démontrer le

**Théorème 5.4** ([8]). *Supposons que le potentiel d'interaction  $U$  est réel analytique. Alors, presque sûrement, pour tout  $L$  et  $n$ , l'état fondamental  $H_\omega^U(L, n)$  est unique.*

### 5.2.2. Description des états fondamentaux

Pour simplifier la description, nous supposerons maintenant que  $U$  a un support compact (auquel cas on ne sait pas si l'état fondamental est unique ou non). La description reste valide lorsque le potentiel d'interaction décroît suffisamment vite à l'infini, par exemple, de façon exponentielle avec un taux de décroissance assez grand.

Pour une pièce  $\Delta_k(\omega)$ , on appelle  $\zeta_{\Delta_k(\omega)}^j$  le  $j$ -ième vecteur propre normalisé de  $-\Delta_{|\Delta_k(\omega) \times \Delta_k(\omega)}^D + U$  agissant sur  $\bigwedge_{j=1}^2 L^2(\Delta_k(\omega))$  (on suppose que les valeurs propres sont ordonnées de façon croissante). Remarquons que, si  $U = 0$ , cet état à deux particules s'écrit aussi  $\zeta_{\Delta_k(\omega)}^{1,U=0} = \varphi_{\Delta_k(\omega)}^1 \wedge \varphi_{\Delta_k(\omega)}^2$  (voir (4.1)). On définit la matrice densité à une particule suivante :

$$\gamma_{\Psi_{\Lambda,n}^{\text{opt}}} = \sum_{\ell_{E_\rho - \rho\gamma_*} \leq |\Delta_k(\omega)| \leq 2\ell_{E_\rho - \log(1-\gamma_*)}} \gamma_{\varphi_{\Delta_k(\omega)}^1} + \sum_{2\ell_{E_\rho - \log(1-\gamma_*)} \leq |\Delta_k(\omega)|} \gamma_{\zeta_{\Delta_k(\omega)}^1}.$$

On démontre

**Théorème 5.5** ([8]). *Il existe  $\rho_0 > 0$  et  $C > 0$  tels que, pour  $\rho \in (0, \rho_0)$ , presque sûrement, on a*

$$\limsup_{\substack{L \rightarrow +\infty \\ n/L \rightarrow \rho}} \frac{1}{n} \left\| \gamma_{\Psi_{\Lambda,n}^U} - \gamma_{\Psi_{\Lambda,n}^{\text{opt}}} \right\|_{tr} \leq C \frac{\rho}{|\log \rho|}.$$

Le Théorème 5.5 donne la distribution dans les différentes pièces (au sens de la figure 5) des électrons constituant l'état fondamental du système en interaction, ceci à une erreur de taille  $O(n\rho/|\log \rho|)$  près, i.e., il y a au plus  $O(n\rho/|\log \rho|)$  particules qu'on ne contrôle pas.

On ne sait donc pas calculer la distribution de façon aussi précise que lorsque les interactions sont nulles mais, si on se restreint aux pièces de longueur inférieure à  $3\ell_F$ , on obtient la figure 8 où

$$\gamma_* = 1 - \exp\left(-\frac{\gamma}{8\pi^2}\right).$$

On montre que le nombre d'électrons contenu dans les pièces de longueur supérieure à  $3\ell_F$  est de taille  $\rho^2 n$ ; donc, quand  $\rho$  est petit, il est petit par rapport à  $n$ , le nombre total d'électrons. La figure 8 décrit donc la plupart des électrons. On y voit que, dans les pièces de longueur comprise entre  $2\ell_F$  et  $2\ell_F - \log(1 - \gamma_*)$ , pièces qui contenaient deux électrons dans l'état fondamental du système sans interaction, on a retiré un électron pour le replacer dans une pièce de longueur comprise entre  $\ell_F - \gamma_*\rho$  et  $\ell_F$ , pièces qui ne contenaient aucun électron dans l'état fondamental du système sans interactions. Cette description permet alors de calculer l'énergie

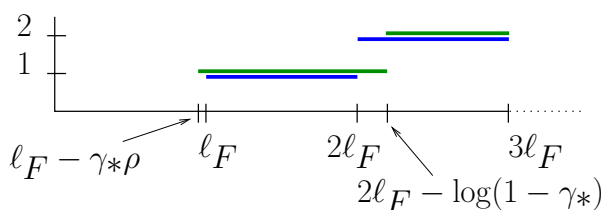


FIG. 8. La distribution des électrons dans l'état fondamental du système en interaction

de l'état fondamental du système en interaction : on obtient l'asymptotique de la correction à apporter à l'énergie de l'état fondamental du système sans interaction, i.e., le Théorème 5.2 quand  $U$  est à support compact.

On peut aussi étudier ce qui se passe quand le support des interactions n'est pas borné sous l'hypothèse (3.3). Quand l'interaction entre deux électrons décroît au moins aussi vite que la puissance quatrième de la distance les séparant, l'état fondamental est encore à peu près décrit par la figure 8 à une modification près : dans les pièces de longueur inférieure à  $\ell_F$ , la distribution des électrons va être modifiée pour optimiser les interactions à grande distance. On peut alors montrer que ce changement n'a pas d'effet sur le terme principal de la correction de l'énergie fondamentale; ceci donne le Théorème 5.2 sous l'hypothèse (3.3).

Lorsque l'hypothèse (3.3) n'est plus vérifiée, le développement en  $\rho$  de  $\mathcal{E}^U(\rho)$  devrait être modifié : la correction principale ne viendra plus de la dissociation des électrons vivant par paires dans de grands pièces mais du repositionnement des électrons vivant seuls dans leur pièce.

## 6. Références

- [1] P. W. Anderson. Absence of Diffusion in Certain Random Lattices. *Physical Review Online Archive (Prola)*, 109(5) :1492–1505, March 1958.
- [2] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin. *Solid state physics*. Holt-Saunders International Editions : Science : Physics. Holt, Rinehart and Winston, 1976.
- [3] X. Blanc and M. Lewin. Existence of the thermodynamic limit for disordered quantum Coulomb systems. *J. Math. Phys.*, 53(9) :095209, 32, 2012.
- [4] M. Disertori, W. Kirsch, A. Klein, F. Klopp, and V. Rivasseau. *Random Schrödinger operators*, volume 25 of *Panoramas et Synthèses [Panoramas and Syntheses]*. Société Mathématique de France, Paris, 2008.
- [5] Y. Katznelson. *An introduction to harmonic analysis*. Dover Publications Inc., New York, corrected edition, 1976.
- [6] W. Kirsch. An invitation to random Schrödinger operators. dans *Random Schrödinger operators*, volume 25 de *Panor. Synthèses*, pages 1–119. Soc. Math. France, Paris, 2008. avec un appendice de Frédéric Klopp.
- [7] W. Kirsch and B. Metzger. The integrated density of states for random Schrödinger operators dans *Spectral theory and mathematical physics : a Festschrift in honor of Barry Simon's 60th birthday*, volume 76 de *Proc. Sympos. Pure Math.*, pages 649–696. Amer. Math. Soc., Providence, RI, 2007.
- [8] F. Klopp, and N. A. Veniaminov. *Interacting electrons in a random medium : a simple one-dimensional model*. ArXiv. <http://fr.arxiv.org/abs/arXiv:1408.5839>, 2014
- [9] A. Lagendijk, B. van Tiggelen, and D. S. Wiersma. Fifty years of Anderson localization. *Physics Today*, 62(8) :24–29, August 2009.
- [10] I. M. Lifshits, S. A. Gredeskul, and L. A. Pastur. *Introduction to the theory of disordered systems*. A Wiley-Interscience Publication. John Wiley & Sons Inc., New York, 1988. Traduit du russe par Eugène Yankovsky [E. M. Yankovskii].
- [11] J. M. Luttinger and H. K. Sy. Low-lying energy spectrum of a one-dimensional disordered system. *Phys. Rev. A*, 7 :701–712, Feb 1973.
- [12] N. A. Veniaminov. *Limite thermodynamique pour un système de particules quantiques en interaction dans un milieu aléatoire*. Thèse de doctorat, Université Paris 13, 2012.
- [13] N. A. Veniaminov. The existence of the thermodynamic limit for the system of interacting quantum particles in random media. *Ann. Henri Poincaré*, 14(1) :63–94, 2013.

Epreuve Gazette  
date : 9/9/2014