

## ETUDE DE LA NATURE DES ÉTATS ÉLECTRONIQUES DANS LES SYSTEMES 2D AVEC DÉSORDRE CORRÉLÉ

Aicha DJERABA<sup>1</sup>, Nouredine ZEKRI<sup>2</sup>, Khaled SENOUCI<sup>3</sup>

*Nous étudions numériquement l'effet du désordre corrélé sur la nature des états électroniques des systèmes 2D. Nous considérons un réseau carré avec un désordre diagonal corrélé des sites d'énergie. Les états électroniques sont obtenus en diagonalisant l'hamiltonien d'Anderson. Pour caractériser la nature des états, on examine la densité d'état (DOS), l'inverse du rapport de participation (IRP) et la longueur de localisation pour différentes valeurs du désordre et tailles du système à l'énergie  $E=0$ . Nous n'avons trouvé que des états délocalisés dans la plage d'énergie et de désordre suggérée.*

*We numerically study the effect of correlated disorder on the nature of the electronic states in 2D systems. We consider a square lattice with a correlated diagonal disorder on energy sites. The electronic states are obtained by exact diagonalization of Anderson Hamiltonian. To characterize the nature of states, we examine the density of states (DOS), the inverse of the participation ratio (IRP) and the localization length for different values of the disorder and the system sizes at energy  $E = 0$ . We only found delocalized states within the suggested energy and disorder range.*

**Mots clés:** Modèle d'Anderson, transition localisation-délocalisation, désordre corrélé, densité d'état, inverse du rapport de participation et longueur de localisation.

### 1. Introduction

En 1958, Anderson [1] avait suggéré que le désordre induit une transition métal isolant (TMI) qui demeure d'un grand intérêt dans l'étude du problème de localisation. Pour les systèmes sans interaction entre les électrons, une approche fortement réussie, établie en 1979 par Abrahams et al [2] qu'est la théorie d'échelle de localisation, suggérant qu'une TMI existe pour ces systèmes à 3D en absence de champ magnétique et de couplage spin orbite. Beaucoup de travaux

<sup>1</sup> MCB, Département de Physique Energétique, Faculté de Physique, Université des Sciences et Technologie d'Oran M.Boudiaf, BP 1505 El M'Naouer, 31000 Oran, Algérie, e-mail: djeraba.a1@gmail.com

<sup>2</sup> Prof, LEPM, Département de Physique Energétique, Faculté de Physique, Université des Sciences et Technologie d'Oran M.Boudiaf, BP 1505 El M'Naouer, 31000 Oran, Algérie.

<sup>3</sup> Prof, Département de Physique, Faculté des Sciences Exactes et Informatique, Université de Mostaganem Abdelhamid Ibn Badis, BP 27000 Mostaganem, Algérie.

analytiques et numériques ont supporté cette théorie [3,4]. Cette même théorie prouve qu'il n'y a pas d'états étendus à 1D et 2D. Comme 2 est la dimension critique inférieure du problème de localisation, le cas 2D est en un sens proche du cas 3D ; les états sont seulement marginalement localisés pour un faible désordre et un faible champ magnétique ou couplage spin orbite peut mener à l'existence d'états étendus et ainsi d'une TMI. Par conséquent les longueurs de localisation d'un système 2D avec désordre du potentiel peuvent être tout à fait grandes [5,6] de sorte que des approches numériques peuvent trouvées une localisation délocalisation quand on diminue la taille du système en fixant le désordre ou en diminuant le désordre pour une taille fixée [7]. Les expériences pionnières de Kravchenko et al [8] en 1996 ont montré l'existence d'une TMI dans certains gaz d'électrons 2D en interaction à faible densité et très récemment Yang et al [9] ont trouvé par des mesures spectroscopiques l'existence d'une forte corrélation électronique dans un matériau 2D de type graphène tri-couche ABC (TLG/hBN), il a déjà été montré que ce matériau présenté une TMI à un supraconducteur, ce qui ouvre un défi à la compréhension courante du problème 2D. D'autre part, il a été montré théoriquement l'existence de la phase métallique dans les systèmes 1D et 2D avec désordre corrélé [10-15]. La plupart des approches numériques au problème de localisation utilisent l'hamiltonien des liaisons fortes d'Anderson avec un désordre du potentiel. Afin de caractériser les états électroniques, des calculs du rapport de participation ou de l'inverse du rapport de participation IRP [16,17] sont obtenus par une diagonalisation exacte, les propriétés multi-fractales, les statistiques des niveaux d'énergie..... Particulièrement fructueuse est la méthode de la matrice de transfert (TMM) [18-20] qui permet un calcul direct de la longueur de localisation et valide les hypothèses de la théorie d'échelle par une preuve numérique d'une fonction d'échelle. Dans notre travail, nous présentons des résultats numériques obtenus par diagonalisation exacte en considérant le modèle d'Anderson à 2D dans lequel on tient compte de l'interaction entre les plus proches voisins avec une corrélation du désordre. Ceci afin de calculer la DOS et de voir son comportement en centre de bande E=0, ensuite on étudie le IRP en fonction du désordre et enfin on fait une analyse d'échelle de IRP ce qui nous a permis préalablement de définir la nature de l'état puis de le vérifier en calculant la longueur de localisation en fonction du désordre pour différentes tailles du système.

## 2. Modèle de localisation d'Anderson

Le modèle 2D d'Anderson [4] est un modèle standard pour la description des systèmes désordonnés avec un hamiltonien donné par:

$$H = \sum_i^N \varepsilon_i |i\rangle\langle i| + \sum_{i \neq j}^N t_{ij} |i\rangle\langle j| \quad (1)$$

Les sites  $i=(x,y)$  forment un réseau carré de taille  $N=L\times L$ .

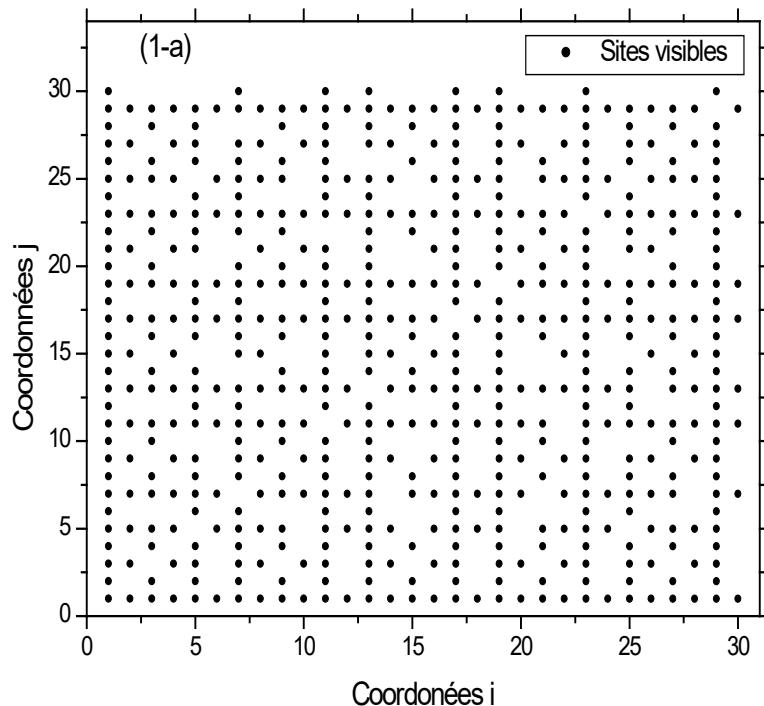
$\varepsilon_i$ : énergie du site  $i$ , de valeurs aléatoires  $\in [-w/2, +w/2]$  avec  $w=vw$  ou  $nw$  le degré du désordre.

$t_{ij}$ : terme d'interaction entre les plus proches voisins, de valeur  $t_{ij}=1$  pour un désordre diagonal  $vw$  ou  $nw$ .

### 3. Modèle du désordre corrélé

Le désordre corrélé est décrit dans notre étude par des sites nommés visibles  $vw$  ou non visibles  $nw$ . Ces sites sont obtenus par un simple algorithme mathématique qui génère des nombres premiers ou non entre eux, voir la répartition des sites visibles figure1.

On remarque que ce type de corrélation du désordre peut créer des canaux, permettant le transport électronique. L'électron peut diffuser à travers ces canaux, créant ainsi des états étendus ou bien délocalisés.



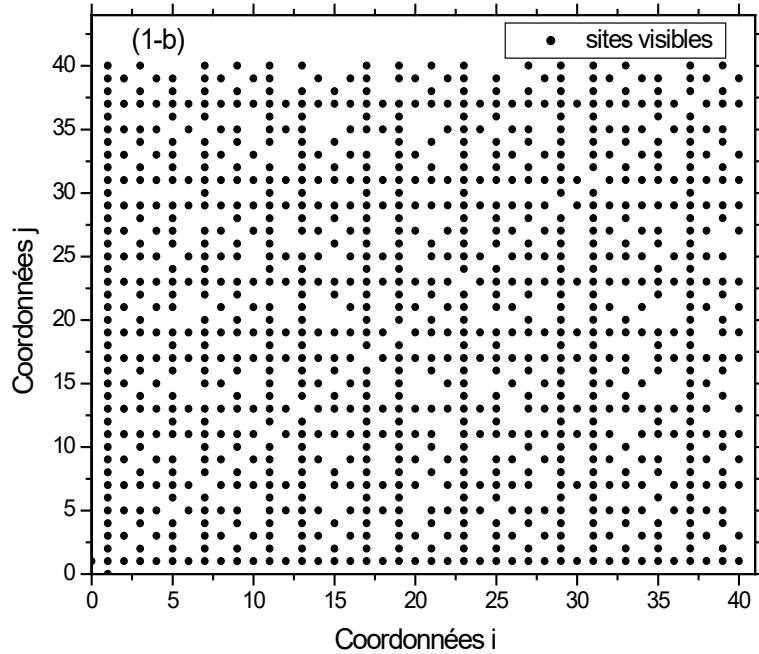


Fig. 1. Répartition du désordre corrélé pour un réseau carré de taille :  
(1-a)  $N=30 \times 30$  et (1-b)  $N=40 \times 40$ .

#### 4. Calcul de la densité d'état

La densité d'état est calculée numériquement à partir du spectre de l'hamiltonien des liaisons fortes en utilisant la technique DE4CSB [22] pour diagonaliser les matrices carrées creuses. La figure 2 montre le comportement de la DOS pour différentes valeurs de désordre sur les sites visibles et non visibles, la taille du système est  $N=40 \times 40$ . Nous constatons d'après les figures 2-a, 2-b et 2-c l'existence d'une singularité en centre de bande à  $E=0$ , le pic est plus prononcé avec un désordre sur les sites non visibles  $n_w=2,4,5$  avec  $v_w=0$ . Le pic est moins prononcé quand le désordre est totalement diagonal c'est-à-dire sur les visibles et non visibles au même temps, la singularité tend à disparaître quand le désordre devient plus grand  $n_w=v_w=5$ . Il apparaît donc qu'en centre de bande  $E=0$  où il y'a une différence entre la corrélation non visible et visible. Donc on peut déduire déjà qu'un faible désordre non visible peut délocaliser les états à  $E=0$ .

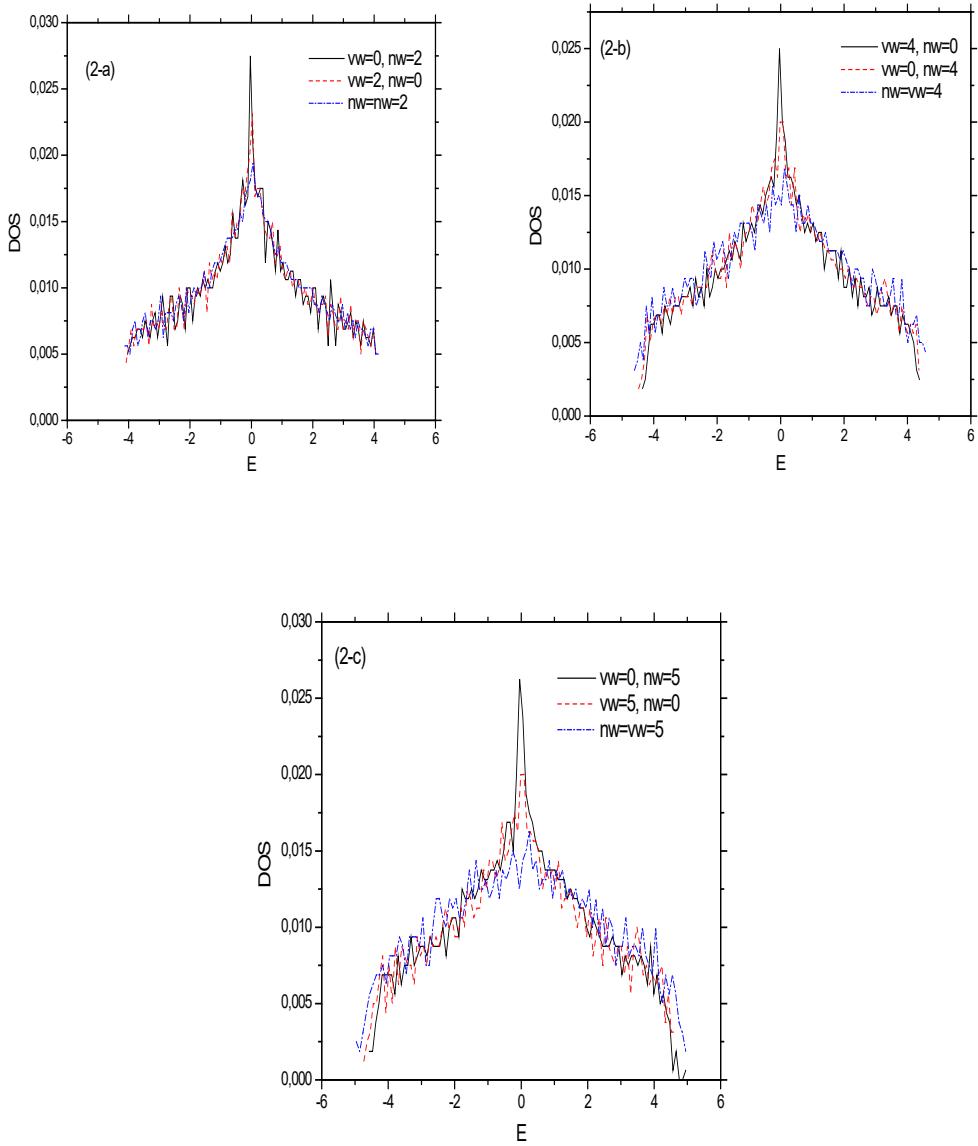


Fig. 2. Densité d'état pour différentes valeurs du désordre diagonal sur les sites visibles et non visibles pour  $N=40 \times 40$ .

## 5. Calcul de l'IRP

Le rapport de participation  $P_N$  est une mesure pratique de la localisation d'une fonction d'onde dans un système de taille finie, en évaluant le nombre de

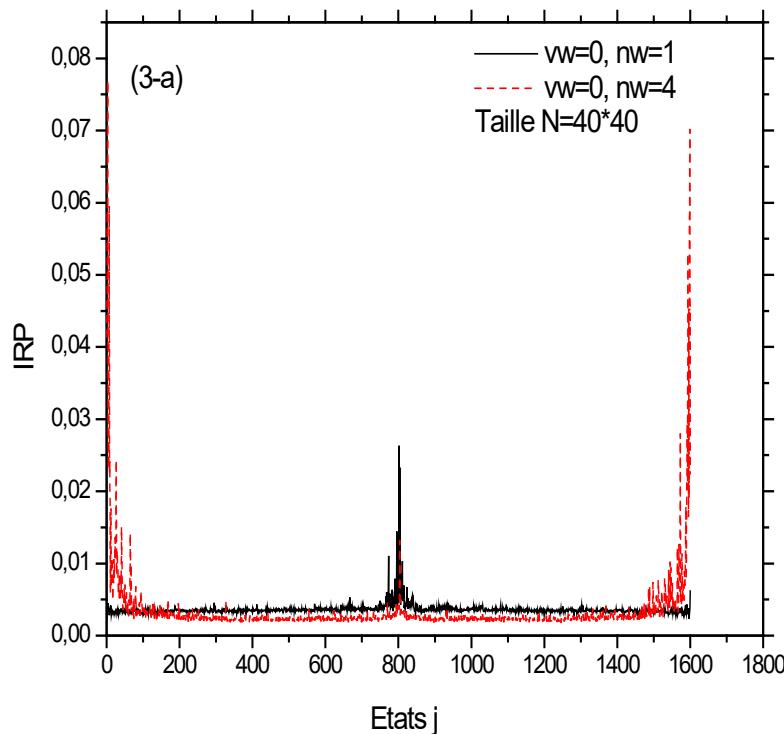
sites qui contribuent à l'amplitude de la fonction d'onde  $\psi_i$  de l'état propre  $j$  sur le site  $i=(n,m)$ , son inverse est défini par :

$$IRP = P_N^{-1} = \frac{1}{N} \frac{\sum_i |\psi_i|^4}{(\sum_i |\psi_i|^2)^2} \quad (2)$$

Il se comporte :  $IRP \approx L^{-\nu}$  (3)

- Si  $\nu=d$  état délocalisé ou étendu ( $d$  la dimension du système)
- Si  $\nu=0$  état localisé

La figure 3 montre le comportement de l'IRP en fonction des états  $j$  pour la taille du système  $N=40 \times 40$ . On voit sur la figure 3-a et 3-b que pour toutes les valeurs du désordre considérées le comportement est pratiquement le même présence de maximum en milieu et en bords des états  $j$ , ce qui nous amène à dire que le pic présenté par la DOS à  $E=0$  peut être un état faiblement localisé ou délocalisé, étant donné que le nombre de sites contribuant à l'amplitude de la fonction d'onde n'est pas nulle.



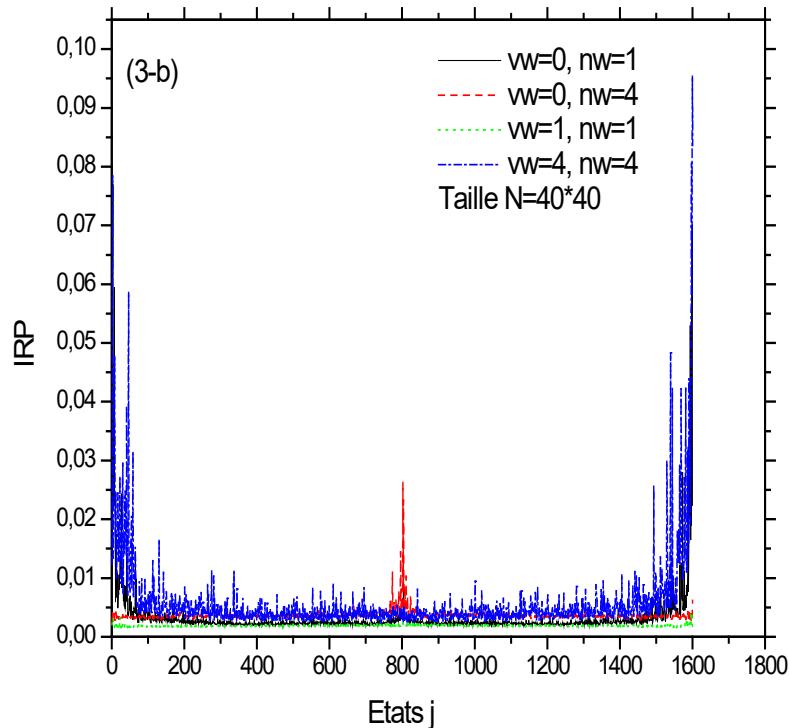


Fig. 3. Inverse du rapport de participation en fonction des états  $j$ , pour différentes valeurs du désordre diagonal sur les sites visibles et non visibles pour  $N=40\times 40$ .

## 6. Etude de l'IRP en fonction de l'énergie

Les valeurs du rapport de participation inverse ne reflètent pas directement l'existence d'une transition localisation-délocalisation, c'est pour cela qu'il est nécessaire de voir le comportement de l'IRP en fonction de la taille  $N$  du système. Sur la figure 4, nous montrons la dépendance de IRP en fonction de  $N$  pour un degré de désordre diagonal moyen  $nw=4$  à  $E=0$ , pour des tailles du système allant de  $N=10\times 10$  jusqu'à  $N=90\times 90$ , avec un écart énergétique  $\Delta E=0,01$ . Un fit linéaire avec une échelle log-log donne une droite de pente égale à  $v=1,86\approx 2$  qui est la dimension du système. Ceci montre que l'état est délocalisé en centre de bande pour  $nw=4$ . Vu que nous sommes limités par la taille selon nos moyens de calculs, nous avons pris un désordre  $nw=4$  afin de voir son effet sur l'IRP, ce choix du désordre est à la base du comportement de la DOS en fonction de l'énergie pour  $nw=4$  du fait de l'existence d'une singularité à  $E=0$ . Comme le montre la figure 4

jusqu'à une certaine taille  $N=70 \times 70$ , on remarque qu'il y'a une signature de localisation marquée par des fluctuations au delà de cette taille.

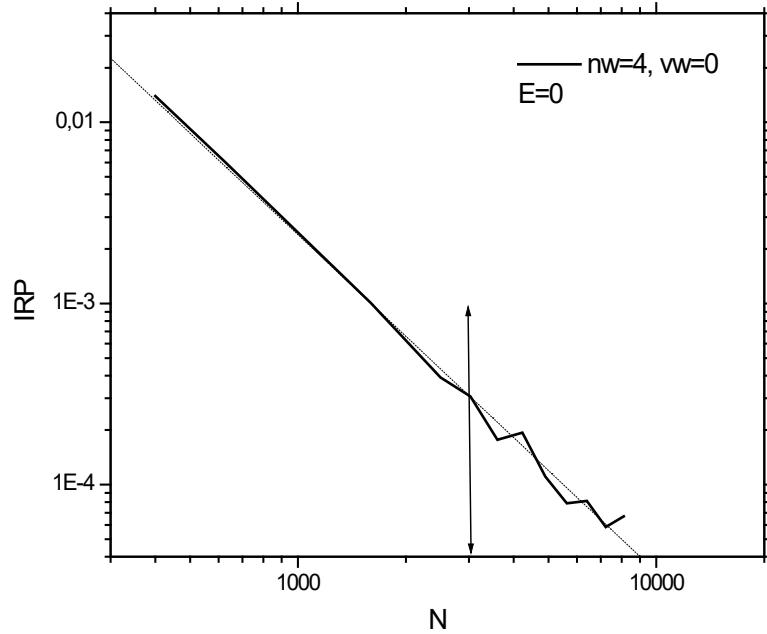


Fig. 4. Inverse du rapport de participation en fonction de la taille N du système.

## 7. Etude de la longueur de localisation en fonction du désordre

La longueur de localisation est calculée numériquement par la méthode de la matrice de transfert (TMM) [19,20], elle est utilisée pour étudier les propriétés de localisation des états dans les systèmes désordonnés afin de calculer la longueur de décroissance de la fonction d'onde dans les systèmes quasi 1D de largeur M et de longueur  $L \gg M$ . L'hamiltonien du système équation (1) est donné sous forme matricielle ci-dessous:

$$\begin{pmatrix} \psi_{n+1} \\ \psi_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \left[ t_{n+1}^{\parallel\parallel} \right]^{-1} (E - \varepsilon_n - H_{\perp}) & -\left[ t_{n+1}^{\parallel\parallel} \right]^{-1} t_n^{\parallel\parallel} \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} = T_n \begin{pmatrix} \psi_n \\ \psi_{n-1} \end{pmatrix} \quad (4)$$

$\psi_n$  est la fonction d'onde sur chaque site,  $E$  est l'énergie,  $H_{\perp}$  est l'hamiltonien, 1 et 0 sont la matrice unité et la matrice zero,  $t_n^{\parallel\parallel}$  est une matrice diagonale represantant l'interaction entre les plus proches voisins,  $T_n$  est la matrice de transfert.

Les valeurs propres  $\exp(\pm\gamma_i(M))$  de  $\ln(\prod_{i=1}^{N \rightarrow \infty} T_i^\dagger T_i)/2N$  existent et le plus petit exposant de Lyapunov  $\gamma_{\min}$  détermine la longueur de localisation par :

$$\lambda = \frac{1}{\gamma_{\min}} \quad (5)$$

Afin d'étudier la dépendance de la longueur de localisation  $\lambda$  en fonction du désordre nw et vw, la longueur de localisation est définie comme l'inverse du plus petit exposant de Lyapunov qui est calculé numériquement en utilisant la méthode standard de réorthonormalisation de Gram-Schmidt. L'exposant de Lyapunov est calculé après dix étapes de multiplication des matrices de transferts moyennés sur 10000 échantillons avec une précision de 1%. Pour une énergie et un degré de désordre donné, les propriétés de localisation peuvent être analysées en taille ou en désordre si la longueur de localisation augmente ou reste constante avec la taille, les états sont délocalisés ou étendus. Pour les états localisés, la longueur de localisation décroît en augmentant la taille. Dans la figure 5, on trace la dépendance de  $\lambda$  avec le désordre nw et vw pour les états à  $E=0$  à différentes tailles du système de largeur  $M$ . On voit sur la figure (5-a) et (5-b) que la longueur de localisation diminue avec l'augmentation du désordre avec l'existence d'une première phase où les états sont délocalisés pour un désordre de [0-1] avec une longueur de localisation supérieure à la taille du système  $\lambda > M$ , puis une deuxième phase où les états sont faiblement délocalisés pour un désordre de [1-4] avec une longueur de localisation presque égale à la taille du système  $\lambda \approx M$  et une troisième phase où les états sont localisés pour un désordre de [4-10] avec une longueur de localisation très faible devant la taille du système  $\lambda \ll M$ . On remarque aussi que la décroissance de la longueur de localisation est plus rapide en présence du désordre vw avec un effet de taille pour  $M$  supérieure à 100 contrairement au désordre nw ou la longueur de localisation est supérieure à la taille du système quelque soit  $M$  pour un désordre de [0-1]. Ce résultat est en accord avec ceux de Eilmes et al pour un désordre non diagonal [17,18] et plus récemment ceux de Cadez et al [21].

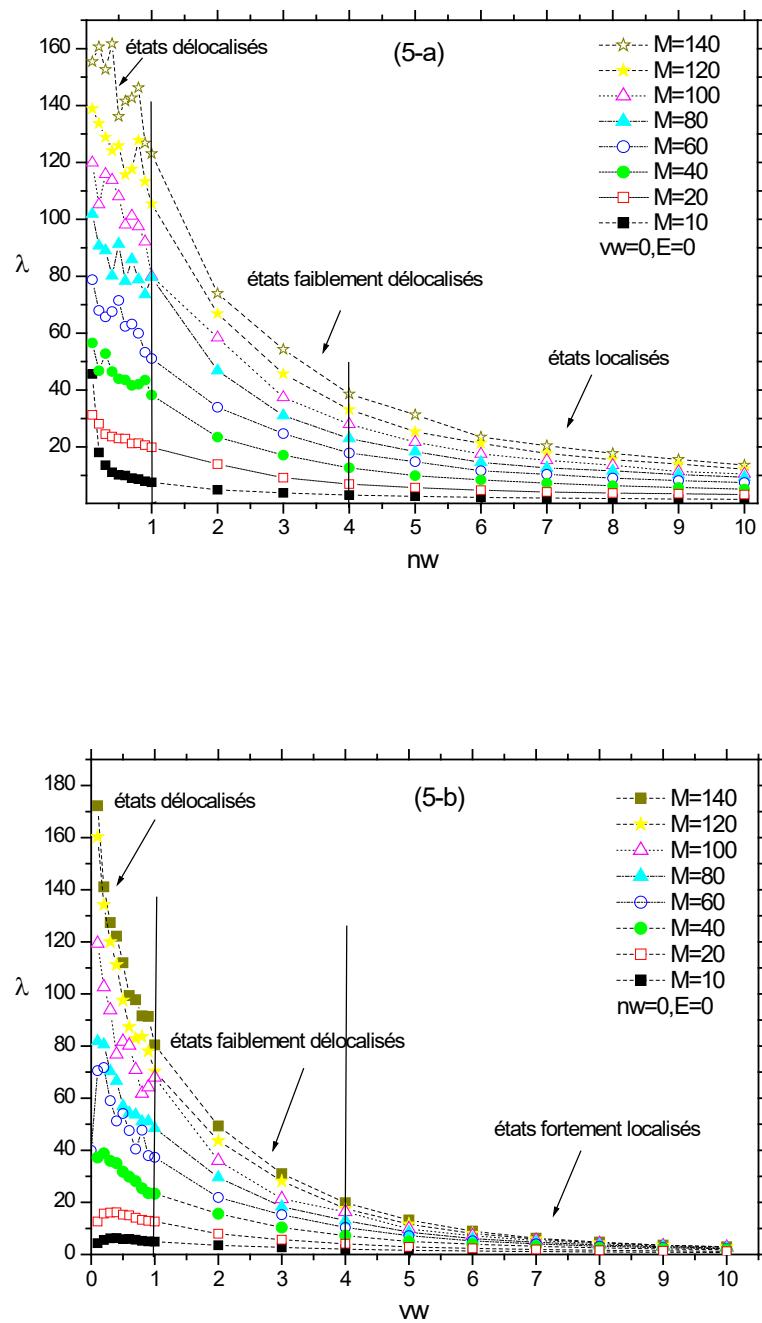


Fig. 5. Longueur de localisation en fonction du désordre  
(5-a) non visible  $nw$  et (5-b) visible  $vw$ .

## 8. Conclusions

Nous avons étudié l'hamiltonien d'Anderson 2D avec un désordre diagonal corrélé sur les énergies des sites aléatoires. Notre but était de voir l'effet des corrélations visibles et non visibles sur la nature des états à l'énergie E=0. La densité d'états montre une singularité à l'énergie E=0 qui est supprimée si le système est complètement désordonné avec un fort degré de désordre. Particulièrement l'étude de l'inverse du rapport de participation en fonction de la taille du système montre l'existence d'une délocalisation des états en centre de bande E=0 pour un degré de désordre non visible faible à la limite moyen jusqu'à une taille de  $70 \times 70$  au-delà de laquelle on a une signature de localisation. Cette délocalisation est incohérente avec la théorie d'échelle pour les systèmes 2D. Du comportement de la longueur de localisation en fonction du désordre pour différentes tailles du système en E=0, on trouve que les états sont délocalisés pour un désordre faible avec l'existence d'une transition du type délocalisation-localisation pour un désordre égale à 4 caractéristique du comportement de l'inverse du rapport de participation en fonction de la taille du système. Le système 2D décrit dans ce travail peut être réalisé expérimentalement en cultivant des points quantiques sur un substrat dans les positions non visibles. Comme l'origine de la localisation est la nature ondulatoire des électrons, des systèmes classiques équivalents peuvent également être réalisés sur des murs pour l'acoustique et l'optique.

## R E F E R E N C E S

- [1]. *P.W.Anderson*, Phys Rev, vol 109, n°5, Mars 1958, pp 1492-1505.
- [2]. *E.Abrahams et al*, Phys Rev lett, vol 42, n°10, Mars 1979, pp 673-676.
- [3]. *B.Kramer et A. Makinnon*, Rep Prog Phys, vol 56, n°12, Décembre 1993, pp 1469-1564.
- [4]. *P.A.Lee et al*, Rev Mod Phys, vol 57, n°2, Avril 1985, pp 285-337.
- [5]. *J.L.Pichard et G.Sarma*, J Phys C: Solid State Phys, vol 14, n°6, Février 1981, pp 127-132.
- [6]. *A.MacKinnon et B.Kramer*, Z Phys B: Condensed Matter, vol 53, n°1, Mars 1983, pp 1-13.
- [7]. *K.Muller et al*, Phys Rev Lett, vol 78, n°2, Janvier 1997, pp 215-218.
- [8]. *S.V.Kravchenko et al*, Phys Rev, vol 77, n°24, Décembre 1996, pp 4938-4941.
- [9]. *J.Yang et al*, Science, vol 375, n° 6586, Mars 2022, pp 1295-1299.
- [10]. *C.M.Soukoulis et al*, Phys Rev B, vol 50, n°8, Aout 1993, pp 5110-5118.
- [11]. *Z.Okbani, R.Ouasti et N.Zekri*, Physica A, vol 234, n°1, Décembre 1996, pp 38-52.
- [12]. *Gregory M. Petersen*, Anderson Localization in Low Dimensional Systems with Long Range Correlated Disorder, Doctor of Philosophy, College of Arts and Sciences of Ohio University, Mai 2014.
- [13]. *Niaz A.Khan*, Correlated Disorder in One-dimensional Electronic Systems, PhD Thesis, Sciences Faculty of Porto University Portugal, Mai 2019.
- [14]. *Brianna S. Dillon Thomas*, Localization and delocalization in two-dimensional quantum percolation, Doctor of Philosophy, Purdue University Indiana, Août 2016.
- [15]. *Ling Z.Tang et al*, arXiv: 2005.13205v2 [cond-mat.mes-hall], 10 Juin 2020, pp 1-7.

- [16]. *M.Schreiber*, Phys Rev B, vol 31, n°9, Mai 1985, pp 6146-6149.
- [17]. *A.Eilmes, R.A.Romer et M.Schreiber*, Eur Phys J B, vol 1, n°1, Janvier 1998, pp 29-38.
- [18]. *A.Eilmes et al*, Physica Status Solidi (b), vol 241, n° 9, Juillet 2004, pp 2079-2088.
- [19]. *A.MacKinnon et B.Kramer*, Z Phys B, vol 53, n°1, Mars 1983, pp 1-13.
- [20]. *A.MacKinnon*, Transfer Matrices and Disordered Systems. Lecture Notes in Physics, vol 630, Springer, Berlin, Heidelberg, 2004.
- [21]. *T.Cadez et al*, phys Rev B140, n°18, Novembre 2021, pp 11-15.
- [22]. *W.H Press et al*, Numerical Recipes in Fortran 77: The Art of Scientific Computing 2<sup>nd</sup> Edition, Cambridge University Press, Etats Unis, 1992.