

**THESE**  
présentée par

**Eric AKKERMANS**

pour obtenir le titre de

**DOCTEUR**  
de  
**L'UNIVERSITE SCIENTIFIQUE  
ET MEDICALE DE GRENOBLE**

**SUJET**

**PROPAGATION D'ONDES  
DANS LES MILIEUX DESORDONNES .**

---

Soutenu le 27 Juin 1986 devant la Commission d'Examen

Président	P. NOZIERES
Examineurs	P. AVERBUCH
	R. MAYNARD
	B. SOUILLARD
	J. LAJZEROWICZ



A la mémoire de mon père,

A ma mère.



## REMERCIEMENTS

Le travail exposé dans cette thèse a été effectué au Centre de Recherches sur les Très Basses Températures (C.R.T.B.T.) du C.N.R.S. de Grenoble. Je remercie Monsieur D. Thoulouze de m'avoir accueilli dans ce laboratoire que dirige actuellement Monsieur J. Flouquet.

Je suis conscient de l'honneur que me fait Monsieur le Professeur Ph. Nozières en acceptant de présider le jury de cette thèse. Je le remercie vivement pour cela.

Je me permets également d'exprimer toute ma reconnaissance à Messieurs P. Averbuch et B. Souillard pour leur participation au jury et pour avoir accepté de juger ce travail.

Je ne saurais jamais exprimer dans ces quelques lignes tout ce que je dois à Monsieur le Professeur Roger Maynard qui a dirigé cette thèse. Sa compétence et sa disponibilité exceptionnelles alliées à sa patience et à sa gentillesse ont été les éléments indispensables à l'élaboration de ce travail. Je profite de cette occasion pour lui exprimer toute ma reconnaissance et mon amitié.

Une partie du travail exposé dans cette thèse a été effectuée aux Etats-Unis lors d'un séjour à l'Université de Harvard, sous la direction du Professeur M. Stephen. Je voudrais le remercier ici pour ses encouragements.

Monsieur P.E. Wolf a participé activement à une importante partie de ce travail. Je voudrais lui exprimer ici toute ma reconnaissance pour n'avoir

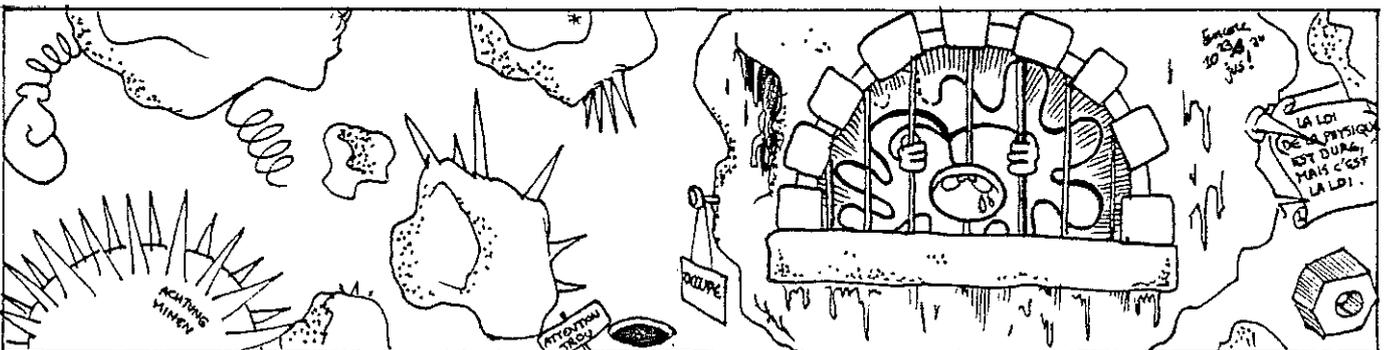
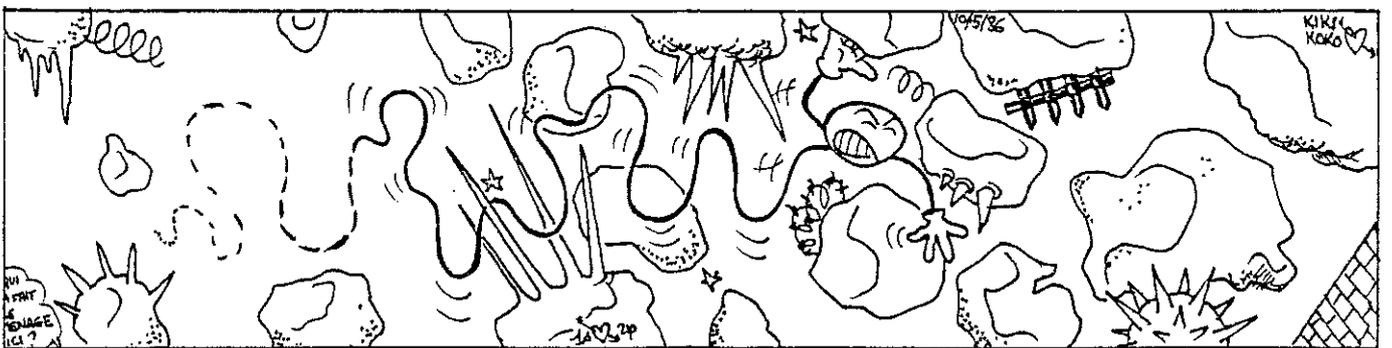
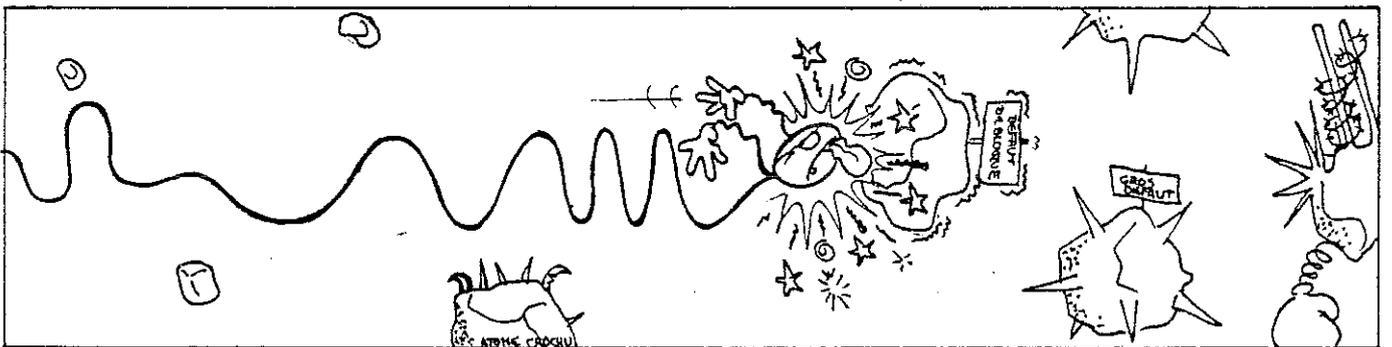
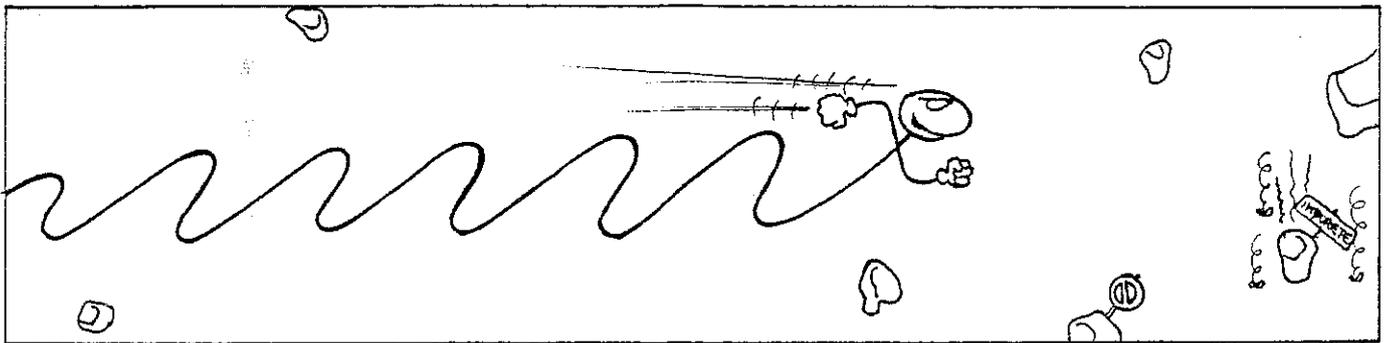
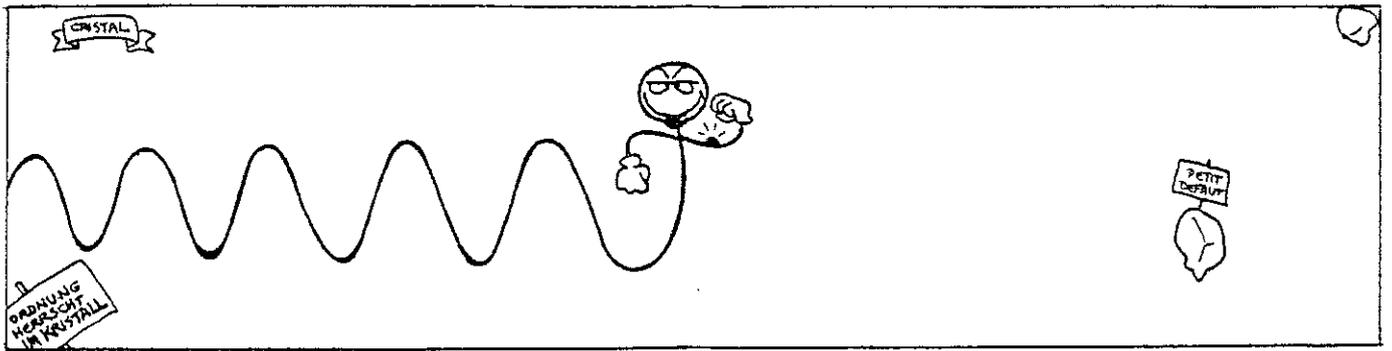
*jamais ménagé ses efforts afin de m'expliquer les choses inlassablement, avec compétence et amitié.*

*Je tiens également à remercier l'ensemble des gens du laboratoire pour l'ambiance, la sympathie et la bonne humeur qu'ils y font régner.*

*F. Mahieux et D. Devillers ont assuré avec une efficacité et une gentillesse rares la mise en forme de ce manuscrit. Ce fût une tâche ingrate, et je leur suis très reconnaissant pour la qualité de leur travail.*

*Je remercie enfin Madame J. Trevisson qui a effectué le tirage de cette thèse, ainsi que Monsieur B. Pichand qui en a assuré la reliure.*

# LE DRAME DE LA LOCALISATION (DRAME EN 5 PERIPETIES)





## TABLE DES MATIERES

	<u>Pages</u>
<u>INTRODUCTION</u>	1
I - <u>UN BREF HISTORIQUE DE LA LOCALISATION</u>	7
II - <u>MECANIQUE STATISTIQUE DES MILIEUX DESORDONNES 1D :</u> <u>CHAINES D'IMPEDANCES ALEATOIRES</u>	27
II.1. Introduction	29
II.2. Définition du modèle - coefficient de transmission pour une chaîne de taille finie	31
II.3. Applications	35
II.4. Extension au cas de distributions singulières du désordre	39
II.5. Conclusion	41
III - <u>FORMULE DE LANDAUER POUR LA CONDUCTANCE THERMIQUE D'UNE</u> <u>CHAINE ATOMIQUE DESORDONNEE ET HARMONIQUE - FLUCTUATIONS</u> <u>GEANTES</u>	45
III.1. Introduction	47
III.2. Formule de Landauer pour la conductance thermique d'une chaîne de taille finie	49
III.3. Expression du coefficient de transmission : modèle d'Azbel	57
III.4. Les deux régimes de conductance thermique	59
III.5. Conclusion	63
Appendice III.1.	65
IV - <u>MODES DE CONDUCTION DANS LES SYSTEMES ELECTRONIQUES</u> <u>UNIDIMENSIONNELS ET DESORDONNES - CALCUL EXPLICITE POUR UN</u> <u>MODELE EXACTEMENT SOLUBLE</u>	73
IV.1. Fluctuations géantes pour la conductance électrique	75
IV.2. Fluctuations de $G(T)$ et $G(\mu)$ - fonctions de corrélations	79

IV.3.	Conduction par activation thermique - Résonances de Lee	83
V	- <u>LOCALISATION FAIBLE DES PHONONS HARMONIQUES EN DIMENSIONS DEUX ET TROIS</u>	87
	V.1. Introduction	89
	V.2. Définition d'un critère de localisation - effets d'interférence et comportement à longue portée	91
	V.3. Régime de diffusion pour la fonction de corrélation densité-densité	93
	V.4. Correction au coefficient de diffusion - Localisation du "deuxième son"	97
	V.5. Interprétation physique de la correction au coefficient de diffusion	101
	V.6. Conclusion	103
VI	- <u>LOCALISATION FAIBLE ET INTERACTIONS ANHARMONIQUES DES PHONONS :</u> <u>Application aux propriétés des verres à basse température</u>	107
	VI.1. Rappel sur les propriétés du gaz de fermions désordonné en interaction	109
	VI.2. Influence des corrections de localisation faible	117
	VI.3. Discussion du cas des phonons	119
VII	- <u>EFFETS COHERENTS DANS LA DIFFUSION MULTIPLE DES ONDES</u>	123
	VII.1. Introduction	125
	VII.2. Propagation d'ondes en milieux désordonnés	127
	VII.3. Diffusion multiple cohérente et incohérente : cône de rétrodiffusion cohérente et facteur 2	131
VIII	- <u>EFFET COHERENT DANS LA DIFFUSION MULTIPLE DE LA LUMIERE DANS UN MILIEU SEMI-INFINI</u>	133
	VIII.1. Introduction	135
	VIII.2. Expression phénoménologique de l'albedo	136
	VIII.2.A. Albedo dépendant du temps	138
	VIII.2.B. Albedo stationnaire	140
	VIII.2.C. Effet de la fréquence ou de l'absorption	142
	VIII.3. Démonstration microscopique de l'expression de l'albedo	145

VIII.4. Développement de l'albedo en fonction de l'ordre n de diffusion-contribution des différents chemins de diffusion	155
VIII.5. Expression de l'albedo stationnaire pour une lumière se propageant dans un milieu fractal	157
VIII.6. Effet de la polarisation	161
VIII.7. Conclusion	165

CONCLUSION

169



I N T R O D U C T I O N



L'objet de cette thèse est de présenter et de discuter quelques problèmes reliés à la propagation des ondes dans les milieux désordonnés. Les deux mots-clés sont ici déjà prononcés, il s'agit d'onde et de milieu désordonné. Par le terme d'onde, nous voudrions recouvrir un concept assez large pouvant décrire la nature quantique des particules, les électrons par exemple, mais aussi des ondes "classiques" : électromagnétiques, hydrodynamiques, phonons, ... Par milieu désordonné, nous entendons un milieu comportant des impuretés ou des inhomogénéités qui en brisant la symétrie de translation provoquent des collisions de l'onde qui se propage. Un des objectifs principaux de ce travail est d'étudier les effets associés à la diffusion multiple de l'onde, i.e. d'évaluer la contribution aux propriétés de transport macroscopiques de tous les ordres de diffusions (c'est-à-dire au-delà de l'approximation de Born !).

Bien entendu, ce travail se place logiquement dans le cadre du problème de la localisation, domaine immense dont les traits caractéristiques sont esquissés dans le chapitre I, afin d'expliquer la problématique de notre démarche. Nos motivations ne se sont pas réduites à étoffer un peu plus la gamme des problèmes relevant de la localisation en y introduisant l'effet des ondes plus "classiques", mais ont plutôt consisté à étendre la généralité de ce problème en essayant de montrer qu'il devient pertinent dès que l'on essaie de décrire le problème de la propagation d'une excitation quelconque, possédant une phase, dans un milieu susceptible de la diffuser un grand nombre de fois. Ce problème devient dès lors indépendant de la nature des excitations et des caractéristiques du désordre.

Cette thèse est divisée en deux parties bien distinctes. La première partie traite de la propagation dans des milieux désordonnés unidimensionnels. Ceux-ci longtemps considérés comme des modèles théoriques quelque peu académiques, ont néanmoins permis de montrer comment le comportement ohmique usuel devait être remis en question lorsque l'on prenait soigneusement en compte les effets de phase des électrons qui se propageaient. Dans cette perspective, nous étudierons dans le chapitre II, un modèle simple de chaînes d'impédances aléatoires

permettant de décrire les caractéristiques les plus générales d'une onde se propageant dans un milieu désordonné de taille finie. On montre alors que l'onde incidente de fréquence  $\omega$  a son comportement entièrement caractérisé par son coefficient de transmission  $\mathcal{C}(\omega, N)$  où  $N$  est la taille de la chaîne. La bonne variable aléatoire extensive du problème, i.e. admettant une loi limite centrale pour  $N$  grand, est  $\ln \mathcal{C}(\omega, N)$ . Le comportement de la valeur moyenne,  $\langle \ln \mathcal{C} \rangle = -\frac{N}{\xi(\omega)}$ , permet alors d'introduire la longueur caractéristique  $\xi(\omega)$  décrivant les phénomènes présents dans la chaîne (localisation, dissipation, superposition des deux). Les exposants,  $\xi(\omega) \propto \omega^{-\nu}$ , associés à ces phénomènes sont universels et ne dépendent donc pas de la distribution du désordre sauf dans la limite de désordre fort pour laquelle les moments de cette distribution peuvent diverger.

La forme du coefficient de transmission nous permettra alors dans le chapitre III de calculer la conductance thermique  $G(L, T)$  d'un milieu de taille finie  $L$ , à la température  $T$  en évaluant attentivement la contribution des deux types de modes pouvant exister dans un tel système : des modes ballistiques de basse énergie et des modes résonants à plus haute énergie, localisés aléatoirement le long de la fibre. Nous montrons alors que si  $G(L, T)$  a un régime universel à basse température indépendant des caractéristiques du système, il apparaît par contre à haute température des fluctuations qui rendent compte de l'extrême sensibilité du coefficient du transport macroscopique  $G$ , à la structure du désordre à l'échelle microscopique. Ces fluctuations relatives de  $G$  ne s'éteignent pas d'une manière standard ( $L^{-1/2}$ ) mais beaucoup plus lentement. Par ailleurs, ce mode de transport du "type Landauer" n'est pas le seul pouvant exister dans ces systèmes. En particulier des mécanismes du type "Mott hopping" peuvent apparaître à plus haute température. Nous étudierons donc dans le chapitre IV ces deux régimes ainsi que l'interpolation entre eux. Finalement, dans ce même chapitre, nous nous attacherons à déterminer la forme exacte des modes résonants localisés ainsi qu'une expression analytique du coefficient de transmission qui leur est associé au moyen d'un modèle exactement soluble. Nous comparerons enfin ces résultats aux travaux numériques.

La seconde partie de cette thèse est dévolue au problème de la propagation dans des milieux désordonnés de dimensionnalité 2 ou 3. Nous avons voulu avec le chapitre V étendre dans un premier temps le problème de la localisation faible, i.e. du régime intermédiaire entre la localisation forte et un comportement du type Boltzmann, au cas des phonons se propageant dans un milieu désordonné. Nous montrons que l'effet de la localisation faible sur le coefficient de diffusion peut s'obtenir d'une façon générale au moyen du rapport de deux temps caractéristiques, indépendant de la nature du désordre, de la statistique du système et de la dispersion des excitations.

Le chapitre VI montre comment les idées précédentes peuvent expliquer les anomalies de transport dans les verres. On sait en effet que ceux-ci présentent au voisinage d'une température caractéristique  $T^* \approx 10$  K un plateau pour la conductivité thermique ainsi qu'un fort excès de chaleur spécifique. Ces effets peuvent être interprétés comme étant dus à une forte réduction du libre parcours moyen de transport jusqu'à des valeurs de quelques dizaines d'Angströms seulement. Nous montrons alors que les effets de localisation faible couplés à l'anharmonicité entraînent une réduction importante du libre parcours moyen ainsi qu'un fort excès de densité d'états pour une même température caractéristique  $T^*$ .

Finalement, les chapitres VII et VIII reprennent d'une façon générale le problème de la localisation faible pour une onde quelconque, et le décrivent comme le dernier effet cohérent pouvant survivre lors de la diffusion multiple des ondes. Cet effet cohérent résulte d'interférences qui ont lieu entre les chemins de diffusion de l'onde et leurs homologues renversés dans le temps correspondants à une même séquence d'événements de collision. On peut alors caractériser entièrement cet effet cohérent dans l'approximation de diffusion et ainsi rendre compte de la correction en  $\lambda/\ell$  à la constante de diffusion dans le milieu ( $\lambda$  étant la longueur d'onde et  $\ell$  le libre parcours moyen élastique). Cette correction est la première étape d'un processus de renormalisation du libre parcours moyen de transport associé à la diffusion multiple, qui est obtenu par un développement en  $\varepsilon$  autour de la dimension critique inférieure  $d_c = 2$ . Celui-ci permet

de mettre en évidence un seuil de localisation pour les ondes à  $d > 2$ , analogue à la transition d'Anderson et d'étudier le comportement critique autour de ce seuil. Nous montrons finalement dans ce chapitre VII comment ces effets d'interférence se manifestent de façon macroscopique par une valeur deux fois plus grande de l'intensité rétrodiffusée dans un cône d'ouverture  $\lambda/\lambda$  autour de la direction d'incidence de l'onde sur un milieu semi-infini. Le chapitre VIII est alors dévolu à l'analyse des résultats expérimentaux obtenus qui démontrent l'existence du cône de rétrodiffusion cohérente et à l'étude de l'influence sur ce cône des effets d'interface, d'absorption de la lumière et de fréquence (modulation de la lumière incidente). L'extension de ces considérations au cas de la propagation dans des structures fractales sera aussi discutée dans ce dernier chapitre.

C H A P I T R E I

UN BREF HISTORIQUE DE LA LOCALISATION



La nature du transport et particulièrement de la conduction électrique dans les milieux ordonnés (milieux cristallins) est une chose bien comprise dont l'origine se fonde avec les débuts de la mécanique quantique. Dans un système qui admet une symétrie de translation, les états propres d'un électron sont des ondes de Bloch étendues et cohérentes sur l'ensemble du cristal. En fait, dans un tel cristal parfait et infini (cf. Fig. I.1) il n'y a pas de diffusion (au sens de la mécanique quantique) du moins à  $T = 0$ , ce qui a pour conséquence que la conductivité continue est infinie. Autrement dit, si on définit  $\tau$  comme le temps caractéristique moyen entre 2 collisions élastiques d'un électron sur des impuretés, alors le cas du cristal parfait correspond à  $\tau \rightarrow \infty$ , ou de la même façon à un libre parcours moyen élastique  $\ell = v_F \tau$  infini ( $v_F$  étant la vitesse des  $e^-$  au niveau de Fermi). La divergence de  $\ell$  ou de  $\tau$  est équivalente au fait que l'onde de Bloch pour l'électron est cohérente de phase sur l'ensemble du cristal.

Cependant, le cristal parfait est un modèle théorique qui ne représente la réalité physique que de façon approximative. En fait, dans les systèmes usuels, le désordre est toujours présent, même s'il peut être traité à des degrés et avec des approximations différentes. Considérons tout d'abord le cas faiblement désordonné où le milieu étudié peut être décrit comme un cristal parfait avec "quelques" impuretés en densité  $n$  (cf. Fig. I.2) qui peuvent être traitées comme autant de centres diffuseurs. On sait alors encore calculer la conductivité électronique dans un tel modèle et définir un temps de collision élastique fini  $\tau$  correspondant à la perte de cohérence d'une onde de Bloch. La conductivité continue devient finie et est donnée par :  $\sigma(0) = \frac{ne^2\tau}{m^*}$  où  $e$  est la charge de l'électron  $m^*$  sa masse effective rendant compte de la structure de bande du système.  $\sigma_0$  est souvent appelée conductivité de Boltzmann, car elle peut directement être déduite de l'équation de transport de Boltzmann. A température non nulle ( $T \neq 0$ ), l'électron peut de plus être diffusée de façon inélastique par les phonons par exemple, de telle sorte que non seulement sa phase mais aussi son énergie relaxent. Toujours dans l'approximation classique de Boltzmann, on peut calculer la



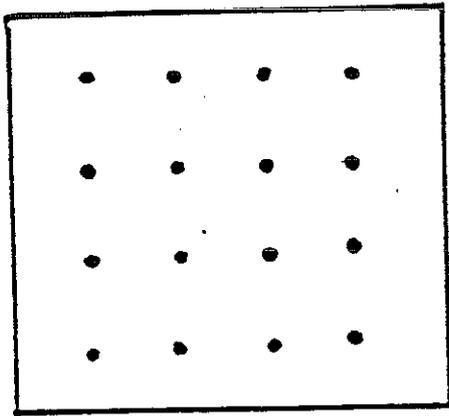


Fig. I.1 : Cristal parfait.  
Invariance par translation.

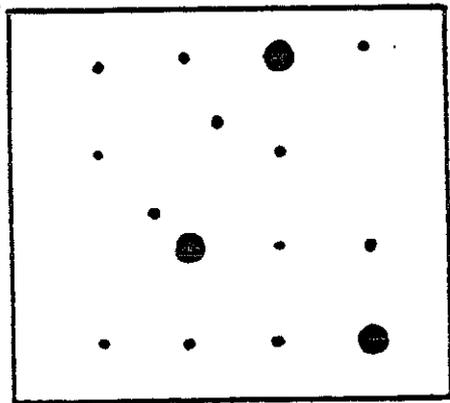


Fig. I.2 : Milieu faiblement  
désordonné (brisure de l'in-  
variance par translation).

conductivité totale à basse température qui peut se mettre sous la forme (règle de Mathiessen) :

$$\sigma(T) = \sigma_0 - AT^p \quad (I.1)$$

Dans cette approximation de "scattering faible", si on augmente la température, la conductivité doit diminuer et donc  $A > 0$ . On sait d'autre part évaluer l'exposant  $p$  suivant la nature des processus inélastiques et en général on a  $p \geq 2$  (par exemple  $p = 2$  pour l'interaction  $e^-e^-$  dans le cadre d'une théorie de Landau des liquides de Fermi pour les métaux <sup>(1)</sup>). Dans la limite de fort désordre, le traitement de l'intégrale de collision dans l'équation de Boltzmann n'est plus valable et l'approche généralement employée pour évaluer les coefficients de transports consiste à redéfinir une périodicité moyenne du milieu de façon à appliquer les concepts précédents ; c'est l'esprit de l'approximation du potentiel cohérent (CPA) <sup>(2)</sup>.

Bien que ces approches aient réussi avec succès à expliquer nombre de résultats expérimentaux, de très nettes déviations ont été expérimentalement mises en évidence durant ces quinze dernières années. Alors que la variation  $d\sigma/dT$  est toujours négative dans l'approximation de "scattering faible" donnée par (I.1), Mooij (1973) a mis en évidence <sup>(3)</sup> dans un grand nombre de conducteurs métalliques une variation  $d\sigma/dT > 0$  dans un régime où  $\sigma$  devient inférieure à des valeurs de l'ordre de  $100 (\mu\Omega\text{cm})^{-1}$ . D'autre part, l'essor récent dans le développement de microstructures et de milieux de faible dimensionnalité, typiquement  $d = 1$  et  $d = 2$ , a permis de mettre en évidence une variation  $d\sigma/dT > 0$  toujours en contradiction avec l'approximation de "scattering faible" <sup>(4)</sup>. Mais, surtout ces systèmes semblent être des isolants à température nulle <sup>(5)</sup>. Enfin, la dépendance de  $\sigma(T)$  est, à basse température, beaucoup plus faible que celle prédite par (I.1), c'est-à-dire avec des exposants  $p$  plus petits (typiquement  $p = 1/2$  pour des milieux tridimensionnels <sup>(4)</sup>).

Ce faisceau de résultats expérimentaux convergeait en un point précis : la théorie de Boltzmann ou ses

succédanés étaient inadéquats et il fallait introduire de nouveaux concepts pour traiter plus complètement le problème du transport dans un milieu désordonné. En marge de ces résultats, plusieurs approches ont été tentées pour expliquer le comportement isolant à température nulle. Tous les mécanismes proposés invoquaient des interactions anormales pour expliquer la tendance à devenir isolant électrique : interactions électrons-électrons. <sup>(6)</sup> (Hubbard, 1964), structure de bande anormale <sup>(7)</sup> (Mott, 1974), création d'excitons <sup>(8)</sup> (Kohn, 1967), piégeage des électrons par les phonons <sup>(9)</sup> (Toyozawa, 1961), etc. En fait, même si ces mécanismes existent, ils ne donnent pas une explication universelle aux anomalies observées expérimentalement.

Finalement, ce sont deux travaux fondamentaux, qui ont permis de repenser complètement le problème du transport en milieu désordonné. Le premier de P.W. Anderson <sup>(10)</sup> (1958) introduisait le concept de localisation et indiquait les conditions d'absence de diffusion des électrons en milieu désordonné. Le second de R. Landauer <sup>(11)</sup> (1970), quelque peu iconoclaste, mettait en cause la validité de la loi d'Ohm pour l'association en série de barrières quantiques distribuées aléatoirement le long d'une chaîne. Les idées développées dans ces deux travaux étaient audacieuses et il faut bien comprendre que parmi les nombreuses approches déjà existantes utilisées pour traiter des propriétés des milieux désordonnés, elles ont constitué une vision révolutionnaire du problème en ce sens qu'elles mettaient en lumière la nécessité de traiter ces questions d'un point de vue statistique et non pas en se contentant de valeurs moyennes souvent inefficaces. Elles restèrent donc dans l'ombre jusque vers la fin des années 1970, date à laquelle les travaux de D.J. Thouless <sup>(12)</sup> (association de blocs) et de E. Abrahams, P.W. Anderson, D. Licciardello et T.V. Ramakrishnan <sup>(13)</sup> (groupe de renormalisation) ont achevé de nous donner une nouvelle vision du transport en milieu aléatoire.

Mais avant de poursuivre sur un aspect plus "moderne" du problème, revenons aux deux idées initiales afin de montrer leur complémentarité. Tout d'abord celle d'Anderson :

Le but était d'aboutir à la localisation à partir d'un modèle contenant un minimum d'ingrédients, à savoir, un électron sans interaction lâché dans un paysage désordonné. Une telle situation peut être décrite par l'hamiltonien de liaisons fortes :

$$H = \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_{ij} V_{ij} c_i^\dagger c_j \quad (I.2)$$

où les termes de transfert  $V_{ij}$  peuvent être supposés constant ( $V$ ) sur l'ensemble du système tandis que les énergies  $\epsilon_i$  en chaque site sont distribuées aléatoirement selon une loi de distribution de largeur  $W$  du type de celle représentée sur la figure (I.3). Les opérateurs  $c_i$  ne sont pas restreints à des électrons mais peuvent tout aussi bien décrire des spins ou des phonons par exemple. L'équation du mouvement obtenue à partir de l'hamiltonien (I.2) est :

$$-i \hbar \frac{dc_i}{dt} = \epsilon_i c_i + \sum_j V_{ij} c_j \quad (I.3)$$

Si  $W = 0$ , i.e. dans le cas où les énergies ne sont pas aléatoires, l'équation précédente donne une bande d'états de Bloch de largeur  $ZV$  ( $Z$  étant la coordination du réseau). Dans la limite de faible désordre,  $W \ll V$ , la théorie de Boltzmann s'applique et permet d'introduire le temps moyen élastique  $\tau$  et donc la relation (I.1), par une théorie de perturbation sur les états étendus de Bloch. On peut de plus montrer dans cette situation, que la densité d'états en chaque site est un continuum, correspondant donc à des états étendus. Dans la limite opposée de fort désordre,  $W \gg V$ , le modèle d'Anderson montre explicitement que l'on a un spectre énergétique discret correspondant à des modes localisés. Ce résultat peut être obtenu toujours par un développement de perturbation, mais d'une nature différente du précédent. En effet au lieu d'être effectué sur des propagateurs du type

$$G(\vec{r}, \vec{r}') = \sum_i \psi_i^*(\vec{r}) \frac{1}{E - \epsilon_i} \psi_i(\vec{r}')$$

qui donnent, dans l'espace réciproque, une quantité locale,  $G_{kk}$ , le développement est effectué sur les fonctions  $G_{ii}$ , locales dans l'espace réel ( $i$  étant l'indice du site). Une telle approche est justifiée dans

la mesure où une description à l'ordre zéro donne dans la limite de fort désordre, des orbitales localisées comme états propres du système. Le développement de perturbation permet alors d'obtenir une "self-énergie"  $\Sigma_i(E + i\varepsilon)$  définie à partir de la forme :

$$G_{ii}(E + i\varepsilon) = \frac{1}{E + i\varepsilon - E_i - \Sigma_i(E + i\varepsilon)} \quad \text{pour } \varepsilon \rightarrow 0.$$

Cette "self-énergie" est une variable aléatoire dont le développement de perturbation est :

$$\Sigma_i = \sum_{i \neq j} \frac{V_{ij}^2}{E - E_j} + \sum_{j, k \neq i} \frac{V_{ij} V_{jk} V_{ki}}{(E - E_j)(E - E_k)} + \dots \quad (I.4)$$

Sans entrer plus avant dans le détail du calcul, on peut néanmoins dégager les remarques cruciales suivantes :

i) Le densité d'états du système s'obtient à partir de  $\text{Im}\Sigma_i$  qui est aussi une variable aléatoire. Le point essentiel noté par Anderson est que la densité d'états réelle du système ne peut être obtenue qu'à partir de la densité de probabilité totale de  $\text{Im}\Sigma_i$  et non pas à partir de sa valeur moyenne seulement. Cette remarque met du même coup en défaut toutes les théories du type CPA dont la finalité est justement d'approcher un milieu désordonné par un milieu moyen.

ii) Par contre, la fonction de distribution de  $\Sigma_i$  qui peut être calculée au premier ordre du développement donné par (I.4) permet de montrer que la densité d'états proportionnelle à  $\text{Im}G_{ii}$  est constituée d'une somme infinie discrète de fonctions  $\delta$  pondérées par des coefficients en série convergente afin d'assurer la normalisation de la fonction d'onde. Une telle forme de  $\text{Im}G_{ii}$  pour un système infini correspond effectivement à l'existence d'états localisés dans le système. Ces états sont localisés en ce sens que leur enveloppe décroît exponentiellement avec une longueur caractéristique  $\xi$ , dite longueur de localisation, telle que :

$$|\psi(\vec{r})| \propto \exp(-|\vec{r} - \vec{r}_i| / \xi) \quad (I.5)$$

Enfin, il faut noter que la notion de seuil de mobilité ou ce que l'on appelle maintenant transition de "Mott-Anderson" peut être obtenue dans

les limites du modèle précédent. En effet, nous venons de voir que les deux régimes de faible désordre ( $W \ll V$ ) et de fort désordre ( $W \gg V$ ) correspondent à des spectres en énergie de natures différentes. Il est d'autre part physiquement inconcevable que ces deux spectres se recouvrent car il n'est pas possible de trouver un état isolant dans une bande d'états conducteurs. Les deux spectres sont donc disjoints et leur frontière constitue un seuil de mobilité en énergie ou de transition du type métal-isolant. Cette singularité correspond à une énergie pour laquelle aucun des deux développements de perturbation précédemment évoqués n'est valable.

Si riche fut-il, le modèle d'Anderson ne remettait pas directement en cause un des dogmes de la théorie du transport dans les milieux désordonnés : la loi d'Ohm. Ce fut le mérite de l'approche complémentaire de Landauer. Il serait cependant injuste de la dissocier des travaux de Borland<sup>(14)</sup>, et de Mott et Twose<sup>(15)</sup>, qui prouvaient rigoureusement que dans les milieux unidimensionnels, tous les modes propres sont localisés avec la forme suggérée dans (I.5) et cela quelque soit la force du désordre. L'apport fondamental du modèle de Landauer est de mettre clairement en évidence les effets de phase dans le problème de localisation. Plus précisément, considérons d'abord le problème du transport d'une onde à travers une barrière de potentiel caractérisée par une amplitude de réflexion  $r$  et de transmission  $t$  comme cela est schématisé sur la figure (I.4). Pour une densité  $n$  d'électrons incidents sur la barrière, on peut calculer la constante de diffusion  $D$  comme le quotient du courant de diffusion par le gradient de densité des électrons conformément à la loi de Fick. Le courant est mesuré par  $Tv_F$  (où  $v_F$  est la vitesse de Fermi des électrons) tandis que le gradient de densité est

$$\frac{\Delta n}{L} = \frac{1 + R - T}{L} = \frac{2R}{L}$$

On obtient ainsi :

$$D = \frac{Lv_F}{2} \frac{T}{R} \tag{I.6}$$

On peut d'autre part relier la conductance  $G$  de la barrière à  $D$  au moyen de la relation d'Einstein :

$$G.L = e^2 Dn(E_F) \quad (I.7)$$

où  $n(E_F)$  est la densité d'états au niveau de Fermi. La combinaison de (I.6) et (I.7) fournit alors :

$$G = \frac{e^2}{h} \frac{T}{R} \quad (I.8)$$

Cette relation, aussi appelée formule de Landauer, fait apparaître une unité fondamentale de conductance  $e^2/h \approx (4k\Omega)^{-1}$ . Elle montre que la conductance  $G$  en unité de  $e^2/h$  de la barrière est simplement reliée à ses propriétés de "scattering". Que se passe-t-il maintenant lors de l'addition en série de deux barrières de caractéristiques différentes comme cela est représenté sur la figure (I.5) ? En écrivant les amplitudes de chaque côté de chacune des barrières et en moyennant sur la différence de phase entre elles, on obtient :

$$\langle g^{-1} \rangle = \frac{R_1 + R_2}{(1 - R_1)(1 - R_2)} \quad (I.9)$$

où  $g$  est la conductance en unité  $e^2/h$  et  $R_1, R_2$  les coefficients de réflexion respectifs des barrières. La conclusion que l'on tire de (I.9) est qu'elle viole la loi d'Ohm qui imposerait  $\langle g^{-1} \rangle = \frac{R_1}{T_1} + \frac{R_2}{T_2}$  d'après (I.8), et que celle-ci ne peut être retrouvée que dans la limite d'une très bonne transmission ( $T_1 \approx T_2 \approx 1$ ) pour laquelle les effets de phase deviennent négligeables. Si on réitère la procédure  $N$  fois, alors on peut montrer que la conductance décroît exponentiellement avec une longueur caractéristique  $\xi$  qui dépend des propriétés de diffusion du système

$$g \propto e^{-N/\xi} \quad (I.10)$$

Ce résultat, s'il donne le comportement attendu pour  $g$ , n'est pas cependant complètement satisfaisant. En effet, comme on l'a vu pour le modèle d'Anderson, ce qui importe pour un système désordonné, c'est la loi de distribution de  $g$ , ou mieux encore, de la bonne variable extensive qui suivra une loi limite centrale. Ce fut un des mérites supplémentaires d'Anderson<sup>(16)</sup> (1980) de montrer que pour un système unidimensionnel, cette bonne variable est  $\ln T$ , c'est-à-dire que l'on a :



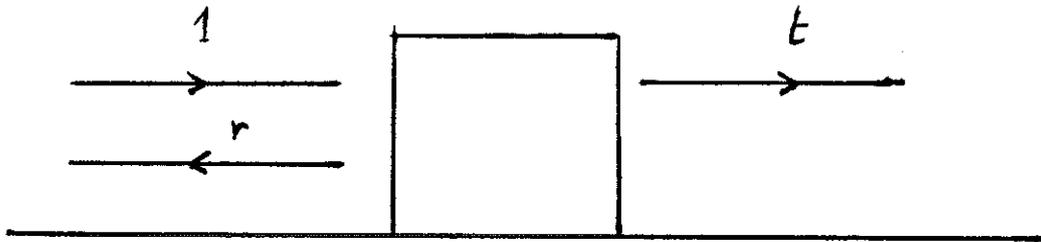


Fig. 1.4 : Transport d'une onde à travers une barrière de potentiel.

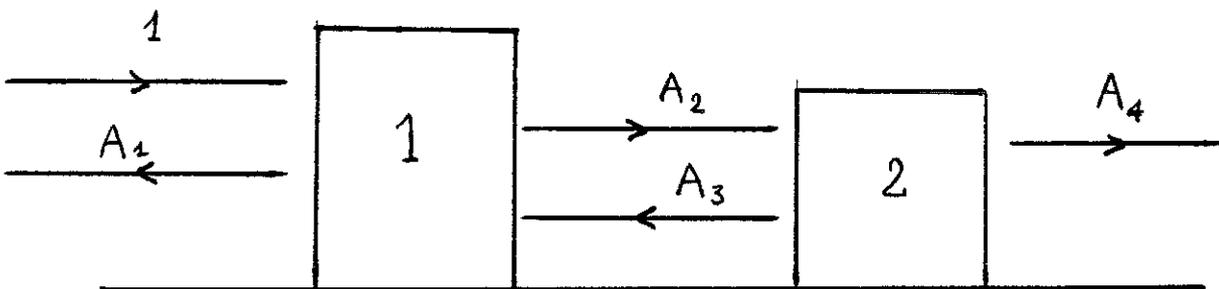


Fig. 1.5 : Addition en série de 2 barrières



$$\langle \ln(1 + g^{-1}) \rangle = N/\xi \quad (\text{I.11})$$

Je voudrais enchaîner maintenant sur des approches plus récentes et peut-être plus parlantes du problème de la localisation apparues dans la fin des années 70, qui ont permis de donner une vision plus "claire" du problème. La première de D.J. Thouless<sup>(12)</sup> consista à formuler le problème de localisation en termes d'invariance d'échelle. L'idée est la suivante : supposons que dans un espace de dimension  $d$  (généralement  $d \leq 3$ ) on dispose de cubes d'un matériau donné d'arête  $L$ . Si on connaît la nature des états propres et du transport électrique pour un cube élémentaire, de volume  $L^d$ , la question est de savoir si les caractéristiques de transport pour un cube de volume  $(2L)^d$  peuvent encore être obtenues à partir d'un petit nombre de paramètres. Un premier élément de réponse sera fourni par la nature des modes dans le cube d'arête  $2L$ . Si ceux-ci restent étendus, le système sera métallique, alors que s'ils deviennent localisés, le milieu sera isolant. Comment décrire la nature des modes ? Définissons tout d'abord les deux énergies caractéristiques qui apparaissent naturellement dans le problème. La première est l'espacement moyen  $\Delta E$  des niveaux dans un cube élémentaire d'arête  $L$ . On a  $\Delta E = (N(E)L^d)^{-1}$  où  $N(E)$  est la densité d'états. La seconde échelle d'énergie  $\delta E$  mesure la distance entre niveaux d'énergie de blocs voisins. Autrement dit,  $\delta E$  mesure l'énergie associée au transfert d'un électron d'un cube élémentaire à son voisin. Si  $\tau$  est le temps associé à cette transition, alors  $\delta E = \frac{\pi\hbar}{\tau}$ . Pour évaluer  $\delta E$ , Thouless suppose que  $\tau$  est le temps caractéristique pour qu'un électron diffuse d'un bout à l'autre d'un cube élémentaire, soit  $\tau = L^2/D(L)$  où  $D(L)$  est le coefficient de diffusion de cette marche aléatoire à l'échelle  $L$ . On a ainsi :

$$\delta E = \frac{\pi\hbar D}{L^2} \quad (\text{I.12})$$

Supposons maintenant que l'on construise une chaîne périodique par juxtaposition de cubes élémentaires. Les états élémentaires vont alors s'élargir pour former une bande dont la largeur est justement mesurée par l'énergie  $\delta E$  de recouvrement. D'autre part, la largeur de cette bande mesure aussi la sensibilité des états propres à une modification des conditions aux limites (pour la chaîne). Si ces états

propres sont localisés, alors  $\delta E (\ll \Delta E)$  est exponentiellement petit et ne va pas dépendre des conditions aux limites. Si au contraire  $\delta E \gg \Delta E$  alors les états vont être étendus dans tout le système et le système aura un comportement métallique. Le rapport  $\delta E/\Delta E$  apparaît donc comme le paramètre pertinent pouvant décrire la nature du transport dans le système. On a :

$$\frac{\delta E}{\Delta E} = \frac{\pi \hbar D}{L} N(E) L^d$$

et puisque  $\sigma = e^2 N(E) D$  et que la conductance  $G = \sigma L^{d-2}$ , alors :

$$\frac{\delta E}{\Delta E} = \frac{\pi \hbar}{e} G \quad (I.13)$$

Ainsi, le paramètre de Thouless  $\delta E/\Delta E$  apparaît comme la conductance a-dimensionnée  $g(L)$ , c'est-à-dire exprimée en unité de  $e^2/\hbar$ , d'un cube élémentaire. Donc si  $g \ll 1$ , le milieu est isolant et si  $g \gg 1$  il est conducteur à l'échelle  $L$  :  $g$  apparaît comme le seul paramètre nécessaire à une description complète du système au cours du changement d'échelle.

#### THEORIE D'ECHELLE DE LA LOCALISATION

Une synthèse de toutes les idées précédentes est donnée dans le schéma de renormalisation proposée <sup>(13)</sup> en 1979 par E. Abrahams, P.W. Anderson, D.C. Licciardello et T.V. Ramakrishnan (bande des quatre). Cette approche prédit complètement le comportement à température nulle de la conductivité d'un système électronique désordonné en dimensions 1, 2 et 3. Les principales conclusions de ce travail sont qu'à  $d \leq 2$  il ne peut pas y avoir de vrai régime métallique, tandis que pour  $d = 3$ , un seuil de mobilité marque une transition entre un régime métallique et un régime isolant. La procédure de renormalisation développée repose entièrement sur les idées de Thouless.

On a vu en effet que le degré de localisation des fonctions d'onde dans un cube donné, d'arête  $L$ , est entièrement décrit par le paramètre de Thouless  $g(L)$  qui n'est autre que la conductance en unité

de  $e^2/\hbar$  de ce cube. L'hypothèse fondamentale de la bande des quatre consiste alors à dire que lors d'une dilatation d'échelle du type  $L \rightarrow bL$ , la seule quantité pertinente pour décrire la conductance  $g(bL)$  du cube dilaté est  $g(L)$ . C'est-à-dire que l'on a :

$$g(bL) = f [b, g(L)]$$

ce qui sous forme différentielle peut s'écrire :

$$\frac{d \ln g}{d \ln L} = \beta(g) \tag{I.14}$$

Quels sont les comportements asymptotiques de  $\beta(g)$  ?

i) Dans la limite de  $g$  grand, on sait d'après Thouless que l'on a des états étendus et donc un comportement ohmique de la conductance pour le système macroscopique (i.e. pour  $L \rightarrow \infty$ ) :  $g = \frac{\hbar}{2} \sigma L^{d-2}$  avec une conductivité  $\sigma$  indépendante de  $L$ . D'où  $\lim_{g \rightarrow \infty} \beta(g) = \frac{e}{2} d - 2$ .

ii) La limite de  $g$  petit correspond à l'existence de modes exponentiellement localisés dans le milieu et donc d'après les arguments initiaux de Anderson à un comportement exponentiel de  $g$  du type :  $g(L) = g_0 e^{-L/\xi}$  où la longueur de localisation  $\xi$  est celle introduite dans (I.5). D'où  $\beta(g) = \ln(g/g_0)$ .

La seconde hypothèse fondamentale de la bande des quatre fut alors de supposer que la variation de  $\beta$  entre ces deux limites asymptotiques était monotone et continue en fonction de  $g$  au cours de la procédure de renormalisation. On obtient ainsi pour les différentes dimensionalités  $d$  le comportement reproduit sur la figure (I.6). Deux conclusions importantes sont à retenir.

i) Pour  $d = 2$ , la fonction  $\beta(g)$  est toujours strictement négative.

Donc il n'y a pas de seuil de mobilité en dimension deux, ni de régime de conduction du type métallique à  $T = 0$ . En effet, lors de la renormalisation ( $L \rightarrow \infty$ ) la conductance  $g$  tend exponentiellement vers 0.

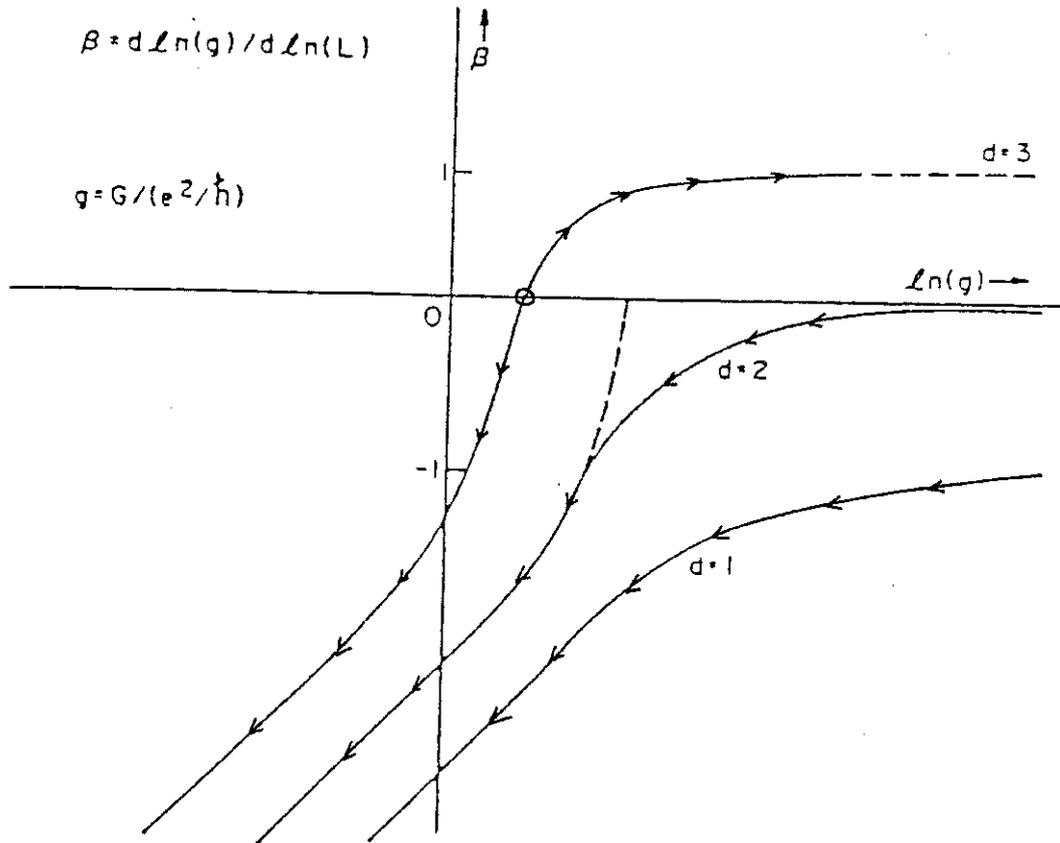


Fig. 1.6 : Trajectoire de renormalisation de la bande des quatre.

ii) Pour  $d > 2$  (donc en particulier pour  $d = 3$ ),  $\beta(g)$  s'annule pour une valeur  $g_c$  de l'ordre de l'unité. Ce point fixe, instable, correspond à une transition entre un régime métallique ( $\beta > 0$ ) et un régime isolant ( $\beta < 0$ ). Le comportement critique peut être obtenu en linéarisant  $\beta(g)$  autour de  $g_c$  et en intégrant  $\beta$  à partir d'une échelle microscopique  $L_0$  correspondant à un certain  $g_0$ . Du côté conducteur on obtient :

$$\sigma = \sigma_m \varepsilon^{(d-2)\nu} \quad (\text{I.15})$$

où  $\varepsilon = \frac{g_0 - g_c}{g_c}$ ,  $\sigma_m \approx \frac{e^2}{h} L_0^{d-2}$  et  $\frac{1}{\nu}$  est la pente en  $g_c$  de  $\beta(g)$ . Du côté isolant, on a de même :

$$g \sim e^{-|\varepsilon|^{\nu} L/L_0} \quad (\text{I.16})$$

et donc  $\nu$  représente l'exposant avec lequel la longueur de localisation  $\xi = L_0 |\varepsilon|^{-\nu}$  diverge à la transition. Il est important de noter ici que la forme de  $\beta(g)$  du seuil de mobilité  $g_c$  où  $\sigma$  s'annule continûment est en contradiction avec l'hypothèse initialement avancée par Mott<sup>(17)</sup> de l'existence d'un saut de conductivité au seuil de mobilité qui rendrait la transition métal-isolant du premier ordre. Finalement, suivant la valeur  $g_0$  à l'échelle microscopique, la courbe universelle  $\beta(g)$  conduit dans la limite  $L \rightarrow \infty$  à un comportement isolant ou métallique suivant que  $g_0 < g_c$  ou  $g_0 > g_c$ .

### LOCALISATION FAIBLE

Ce terme mal choisi mais d'appellation contrôlée décrit la portion de la figure (I.6) correspondant à une faible déviation du régime ohmique pour lequel  $\sigma$  est une constante indépendante de la taille. Le régime de localisation faible correspond donc aux systèmes faiblement désordonnés pour lesquels on a<sup>(18)</sup>  $k_F \ell \gg 1$ ,  $k_F$  étant le vecteur d'onde au niveau de Fermi. En effet, on a

$$g_0 = \sigma L_0^{d-2} = \frac{ne^2 \tau}{m} L_0^{d-2}$$

or, à l'échelle microscopique, nous prendrons  $L_0 = \ell$  d'où

$$g_0 = \frac{ne^2\tau}{m} \ell^{d-2}, \text{ soit } g_0 \propto (k_F \ell)^{d-1}$$

Cette limite correspond physiquement à un régime où l'onde plane de longueur d'onde  $\lambda_F$  qui décrit l'électron subit des collisions décorréllées sur les impuretés du système. Le comportement de  $g$  peut dans ce régime être obtenu par un développement de perturbation en  $g^{-1}$  (limite de faible désordre) à partir de :

$$\beta(g) \simeq d - 2 - a/g + \dots \quad (\text{I.17})$$

Ce résultat peut aussi être obtenu d'une manière plus systématique en calculant dans la limite  $k_F \ell \gg 1$ , les corrections à la conductivité de Boltzmann au moyen d'un développement diagrammatique. Ce développement a été effectué pour la première fois par Langer et Neal<sup>(19)</sup>. Ils ont montré en évaluant la somme des diagrammes de Feynman pertinents l'existence en dimension deux d'une singularité logarithmique. Cette singularité disparaît en dimension trois pour laisser place<sup>(20)</sup> à une correction à la conductivité  $\sigma$  (ou de façon équivalente au coefficient de diffusion  $D$ ) de la forme :

$$\begin{aligned} \sigma_{3d}(L) &= \sigma_0 - \frac{e^2}{\pi^3 \hbar} \left( \frac{1}{\ell} - \frac{1}{L} \right) \\ \sigma_{2d}(L) &= \sigma_0 - \frac{e^2}{\pi^2 \hbar} \ln \left( \frac{L}{\ell} \right) \end{aligned} \quad (\text{I.18})$$

totalemment en accord avec la relation (I.17). Nous n'insisterons pas plus dans ce chapitre sur le développement de perturbation d'une part à cause de son caractère technique et d'autre part, parce que ces calculs seront repris en détail dans le chapitre V de cette thèse. Une interprétation physique très belle et très féconde a été donnée par Larkin et Khmel'nitzskii<sup>(21)</sup> pour cette première correction au régime ohmique usuel. Nous avons vu que l'existence d'impuretés (en concentration suffisamment faible) pouvant diffuser les électrons se traduit par l'existence d'un temps de collision élastique moyen  $\tau$ , mesurant la relaxation de la phase de la fonction d'onde. Dans la limite asymptotique des temps longs, ou d'un nombre de collisions importants, le mouvement de l'électron obéit à une loi de diffusion caractérisée par la constante

$$D_0 = \frac{v_F^2 \tau}{d} .$$

Toute cette description est entièrement classique, en ce sens qu'elle néglige l'aspect ondulatoire requis pour une description quantique de l'électron. Supposons maintenant que l'on désire évaluer la contribution de cet électron au transport entre deux points A et B, en tenant compte des effets quantiques. A chaque chemin  $i$  possible reliant A et B, (cf. figure (I.7)), on peut associer une amplitude de probabilité  $A_i$ . Soit  $P$  la probabilité totale pour aller de A en B, on a :

$$P = \left| \sum_i A_i \right|^2$$

Soit

$$W = \sum_i |A_i|^2 + \sum_{i \neq j} A_i A_j^* \quad (I.19)$$

Le premier terme de (I.19) représente la contribution "classique" de chaque chemin, i.e. celle obtenue en négligeant tout effet d'interférence ; c'est là l'esprit de la théorie de Boltzmann, qui est bien justifié pour le cas représenté sur la figure (I.7) par exemple. Mais prenons maintenant une configuration du type de celle représentée sur la figure (I.8) pour laquelle les points A et B coïncident. Il apparaît alors une dégénérescence d'ordre deux associée à la possibilité pour l'électron de parcourir la séquence de collisions de A en B de deux façons différentes, renversées dans le temps l'une de l'autre. Les amplitudes  $A_1$  et  $A_2$  associées sont alors égales ( $A_1 = A_2 = A$ ) donnant lieu ainsi à une interférence constructive entre ces chemins. Si on veut maintenant évaluer la probabilité  $P$  de retour au point de départ (puisque  $A = B$ ), on obtient :

$$P = 2 |A|^2 + 2AA^* = 4 |A|^2$$

Ainsi du fait de ces interférences, la probabilité de retour à l'origine est deux fois plus grande que la valeur obtenue classiquement. On conçoit alors aisément, que cette diffusion de nature "quantique", sera plus faible que son homologue classique, puisqu'elle augmente la probabilité de retourner sur ses pas. En d'autres termes, cela signifie que dans un milieu désordonné, les "particules quantiques" sont moins mobiles que les particules classiques. C'est là tout le secret de l'abaissement de conductivité obtenu dans les relations



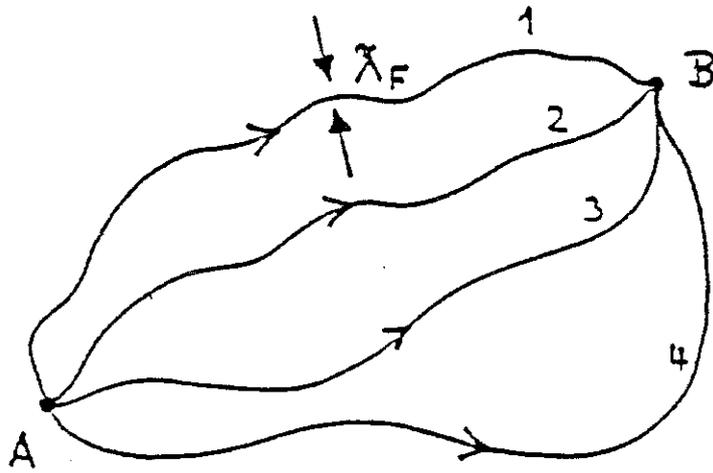


Fig. I.7 : Différents chemins associés au transport entre A et B.

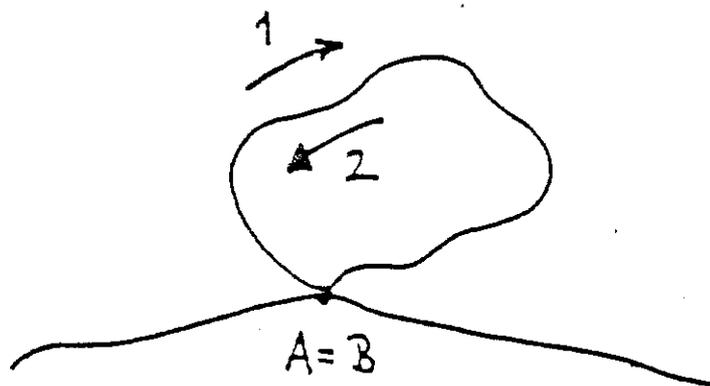


Fig. I.8 : Dégénérescence associée à  $A = B$ .

(I.18). La pertinence de cette interprétation a d'ailleurs été démontrée expérimentalement de façon spectaculaire.<sup>(22)</sup> Cette idée sera généralisée dans les chapitres V et VII. Pour conclure cette partie dévolue à la renormalisation dans le problème du transport électronique à  $T = 0$ , je voudrais tenter une remarque d'ordre plus général.

L'emploi du groupe de renormalisation par la bande des quatre représente plus qu'une application supplémentaire d'une méthode dont la réputation n'est plus à faire. Le problème ici est de donner une solution du problème de transport macroscopique en partant d'un point de vue microscopique, qui a permis de définir exactement les bons paramètres du problème. Cette solution va au-delà des méthodes utilisées habituellement en physique du solide (liquide de Fermi par exemple) et les extrapole. A part, peut-être le traitement de l'effet Kondo dont les conclusions les plus fécondes relevaient d'une approche similaire, le problème de la localisation comme modèle permettant de suivre la renormalisation de la fonction de distribution d'un hamiltonien aléatoire afin d'en obtenir les points fixes représente une approche complètement nouvelle dans le domaine des milieux macroscopiques désordonnés. Finalement, il faut aussi ajouter, qu'outre cette renormalisation directement effectuée sur l'hamiltonien, le problème de localisation a été relié avec succès à des problèmes de théorie des champs, en particulier le modèle  $\sigma$  non linéaire, renormalisable<sup>(23)</sup>.

#### NATURE DES INTERACTIONS DANS UN SYSTEME LOCALISE

Une solution complète, même esquissée, du problème du transport électronique dans un système désordonné doit nécessairement inclure l'effet de l'interaction coulombienne. Il a longtemps paru évident, que l'effet d'un potentiel d'impureté sur les propriétés d'un gaz d'électrons en interaction était négligeable<sup>(27)</sup>. En effet, toutes les propriétés d'un tel gaz sont très bien décrites dans le cadre d'une théorie de Landau des liquides de Fermi, par l'introduction d'un nombre fini de paramètres phénoménologiques décrivant bien la renormalisation des quantités physiques. Aussi, Altschuler, Aronov et Lee<sup>(25)</sup>

produisirent un certain effet, en montrant que les fluctuations de densité électronique dues au désordre introduisent à deux dimensions des corrections logarithmiques à la conductivité, à la densité d'états et à la chaleur spécifique. Ces déviations à la théorie des liquides de Fermi sont importantes. Elles indiquent que le rôle du désordre en réduisant la diffusion des électrons, accentue les interactions entre eux. On conçoit alors qu'à trois dimensions, ces effets vont devenir prépondérants au voisinage de la transition métal-isolant<sup>(26)</sup>. Ce problème est encore ouvert malgré deux récentes avancées obtenues l'une au moyen d'un modèle de théorie des champs<sup>(27)</sup>, l'autre par un développement de perturbation<sup>(28)</sup> prenant soigneusement en compte tous les diagrammes présents. Une des conclusions principales de ces travaux est la possibilité pour les interactions coulombiennes d'induire dans un système désordonné une transition métal-isolant en dimension  $d > 2$ . Une telle conclusion est bien entendu préoccupante, si on veut tester expérimentalement dans un système électronique la validité des hypothèses de la bande des quatre, i.e. l'existence d'une transition métal-isolant<sup>(29)</sup> du système sans interaction.



REFERENCES

1. P. NOZIERES et D. PINES, Theory of quantum liquids (Benjamin, New York), 1966.
2. Voir par exemple : R.J. ELLIOT, J.A. KRUMANSL et P.L. LIEB, Rev. Mod. Phys. 46 (1974), 465.
3. J.H. MOOIJ, Phys. Stat. Sol. A17 (1973), 521.
4. H. WIESMANN, M. GURVITCH, H. LUTZ, A. GOSH, B. SCHWARTZ, P.B. ALLEN et M. STRONGIN, Phys. Rev. Lett. 38 (1977), 782.
5. G.J. DOLAN and D.D. OSHEROFF, Phys. Rev. Lett. 43 (1979), 721.  
N. GIORDANO, W. GILSON and D.E. PROBER, Phys. Rev. Lett. 43 (1979) 725.  
D.J. BISHOP, D.C. TSUEI and R.C. DYNES, Phys. Rev. Lett. 44 (1980), 1153.
6. J. HUBBARD, Proc. Roy. Soc. A277 (1964), 237.
7. N.F. MOTT, "Metal Insulator Transitions", Taylor and Francis, London (1974).
8. W. KOHN, Phys. Rev. Lett. 19 (1967), 439.
9. Y. TOYOZAWA, Prog. Theor. Phys. 26 (1961), 29.
10. P.W. ANDERSON, Phys. Rev. 109 (1958), 1492.
11. R. LANDAUER, Phil. Mag. 21 (1970), 247.
12. D.J. THOULESS, Phys. Rev. Lett. 39 (1977), 1167.
13. E. ABRAHAMS, P.W. ANDERSON, D.C. LICCIARDELLO and T.V. RAMAKRISHNAN, Phys. Rev. Lett. 42 (1979), 673.
14. R.E. BORLAND, Proc. Roy. Soc. A274 (1963), 529.
15. N.F. MOTT et W.D. TWOSE, Adv. Phys. 10 (1961), 137.
16. P.W. ANDERSON, D.J. THOULESS, E. ABRAHAMS and D.S. FISHER, Phys. Rev. B 22 (1980), 3519.
17. N.F. MOTT in "Electronics and Structural properties of amorphous semi-conductors", ed. by P.G. le Comber and J. Mort Academic, London 1 (1973).
18. Cette limite correspond au critère bien connu de Yoffe et Regel, Prog. Semicond. 4 (1960), 237.
19. J.S. LANGER and T. NEAL, Phys. Rev. Lett. 16 (1966), 984.
20. L.P. GORKOV, A.I. LARKIN and D.E. KHMELNISTZSKII, 1979, Zh. Eksp. Teor. Fiz. Pisma. Red. 30, 248 (JETP Lett. 30, 248 (1979)).

21. A.I. LARKIN and D.E. KHMELNISTSKII, Sov. Phys. Usp. 25 (1980), 185.
22. Yu. D. SHARVIN and Yu. V. SHARVIN, JETP Lett. 34 (1981), 272.
23. L. SCHÄFER and F.J. WEGNER, Z. Phys. B28 (1980), 113.
24. O. BETBEDER-MATIBET and P. NOZIERES, Ann. Phys. (Paris), 37 (1966), 17.
25. B.L. ALTSCHULER, A.G. ARONOV and P.A. LEE, Phys. Rev. Lett. 44 (1980), 1288.
26. W.L. MAC MILLAN, Phys. Rev. B24 (1981), 2739.
27. A.M. FINKELSHTEIN, Sov. Phys. JETP 57 (1983), 97.
28. C.C. CASTELLANI, P.A. DI CASTRO, P.A. LEE and M. MA, Phys. Rev. B30 (1984), 527.
29. M.A. PAALANEN, T.F. ROSENBAUM, G.A. THOMAS and R.N. BHATT, Phys. Rev. Lett. 51 (1983), 1896.

C H A P I T R E   I I

MECANIQUE STATISTIQUE DES MILIEUX DESORDONNES 1D :  
CHAINES D'IMPEDANCES ALEATOIRES



## I - INTRODUCTION

Le problème de la propagation dans les milieux désordonnés unidimensionnels est en fait beaucoup plus vieux que le concept de localisation. Les premières études sur la nature des modes propres et sur la propagation dans les milieux désordonnés ont été effectuées en 1953 par F.J. Dyson<sup>(1)</sup>. Celui-ci s'intéressait alors au problème des modes de vibration pouvant exister dans un réseau de particules de masse  $M$  connectées par des ressorts à leurs premières voisines. Ce modèle avait pour ambition d'expliquer les propriétés des verres à basse température. En fait, Dyson se limita à l'étude du cas unidimensionnel pour lequel il obtint analytiquement la densité d'états pour une distribution particulière des constantes de rappel (Loi de Poisson) et dans la limite asymptotique d'une chaîne infiniment longue. Malheureusement, ce travail n'apportait pas de résultat décisif sur la nature des modes propres, et il fallut attendre les années 60 pour que Mott et Twose<sup>(2)</sup> d'une part et Borland<sup>(3)</sup> d'autre part déterminent la nature des états électroniques dans un système désordonné unidimensionnel, tandis que Hori<sup>(4)</sup> et collaborateurs effectuaient le même travail pour le problème de la chaîne harmonique. Tous arrivaient à la même conclusion que les états propres d'un tel système sont localisés en ce sens qu'en moyenne, leur enveloppe décroît exponentiellement de chaque côté du maximum. La largeur de ces modes, i.e. la longueur de localisation, a pu être calculée pour certains modèles : modèle de Lloyd<sup>(5)</sup> pour une équation de Schrödinger avec un potentiel de Kronig-Penney distribué suivant une loi lorentzienne (nous reviendrons plus en détail sur ce modèle dans le chapitre V), modèle de Dyson décrit précédemment. Dans ce dernier cas, la longueur de localisation varie comme  $\xi(\omega) \propto \omega^{-2}$  dans la limite  $\omega \rightarrow 0$  pour le mode d'énergie  $\omega$ . Il restait néanmoins plusieurs questions non résolues pour ce problème, à savoir la stabilité de cet exposant 2 vis-à-vis du type de désordre, la modification éventuelle de cette loi dans le cas d'un système de taille finie, la définition de la bonne variable pertinente pour décrire les propriétés de ces milieux et la coexistence avec la dissipation. En fait, un travail considérable a apporté ces dernières années des éléments de réponse, parfois décisifs à certaines des interrogations posées ci-dessus. Nous ne citerons que

les étapes principales. L'enjeu consiste à donner une base plus solide aux résultats de Landauer à partir de la nature du spectre des états localisés. Ce fut le mérite d'Anderson, Thouless, Abrahams et Fisher<sup>(6)</sup> que de dériver complètement une théorie d'échelle du milieu unidimensionnel basée sur les propriétés de "scattering" d'une barrière telles que les avaient définies Landauer. Cette théorie conformément aux idées initiales d'Anderson consiste à trouver la "bonne variable aléatoire" qui ait la propriété de moyenne additive et pour laquelle le processus de renormalisation conduit à une loi limite centrale. Cette bonne variable est  $\ln \mathcal{C}$  où  $\mathcal{C}$  est le coefficient de transmission du milieu. Cette conclusion repose sur le théorème de Furstenberg<sup>(7)</sup> qui assure la convergence en loi de  $\ln \mathcal{C}$  vers une loi gaussienne. Plus récemment, Azbel<sup>(8)</sup> a retrouvé numériquement ces résultats tant pour le problème des électrons que pour celui des phonons. Notre ambition dans ce chapitre et dans la publication qui le suit est alors d'étudier le cas d'un milieu désordonné de *taille finie*, comportant à la fois des effets de *localisation* et de *dissipation* que nous voulons traiter dans le cadre d'un formalisme général de la propagation dans un milieu désordonné unidimensionnel. Nous pourrons alors répondre aux questions sur l'universalité des différents exposants qui apparaissent.

II - DEFINITION DU MODELE - COEFFICIENT DE TRANSMISSION POUR UNE CHAÎNE DE TAILLE FINIE

Un milieu désordonné linéaire unidimensionnel de taille finie peut être décrit au moyen d'une chaîne d'impédances (ou réseau en échelle<sup>(10)</sup>) représentée sur la figure (II.1). On suppose que le désordre est introduit dans le milieu via les impédances  $Z_1, \dots, Z_N$ , tandis que les capacités  $C$  reliées à la masse sont toutes égales. Le rôle de "vide" extérieur, support des ondes incidentes, réfléchies et transmises, est assuré par deux milieux semi-infinis constitués de deux réseaux en échelle LC, pour lesquels les ondes planes ont une dispersion  $k = \omega \sqrt{LC}$ .

Dans le cas particulier où toutes les impédances aléatoires  $Z_i$  sont de nature réactive, typiquement des inductances, le réseau en échelle décrit un modèle analogue à la chaîne harmonique désordonnée ou à l'équation de Schrödinger avec un potentiel aléatoire. Dans le cas où ces mêmes impédances sont dissipatives (typiquement des résistances), le réseau en échelle décrit une marche aléatoire.

Ecrivons maintenant l'équation du mouvement pour la chaîne donnée par la loi des noeuds en un point  $n$  quelconque :

$$\frac{V_{n-1} - V_n}{Z_n} - \frac{V_n - V_{n+1}}{Z_{n+1}} = i\omega C V_n \quad (\text{II.1})$$

où  $V_n$  est la tension au noeud  $n$ . Cette relation peut être décrite de manière équivalente au moyen du courant  $I_n$  à travers l'impédance  $Z_n$  :

$$I_{n-1} - 2I_n + I_{n+1} = i\omega C Z_n I_n \quad (\text{II.2})$$

Cette transformation quoique naturelle est une opération importante. En effet, dans la représentation en courant donnée dans la relation (II.2), le désordre est dit diagonal car il n'intervient que sur le



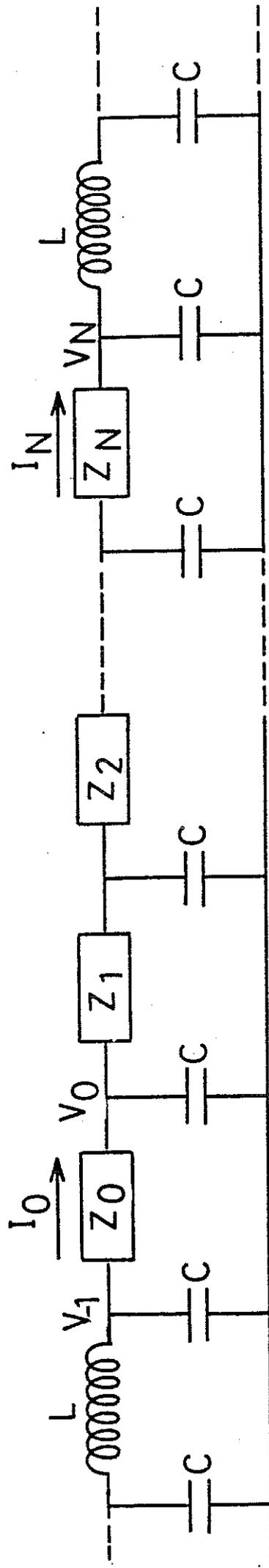


Fig. II.1 : Chaîne d'impédances aléatoires

terme  $I_n$  central. C'est l'équivalent dans le problème de la chaîne harmonique par exemple d'un désordre sur les masses. Dans la représentation en tension donnée par (II.1), le désordre est dit hors-diagonal en ce sens qu'il affecte également des sites différents. C'est exactement l'équivalent de la chaîne harmonique désordonnée avec une distribution aléatoire de constantes de rappel ou de spins<sup>(11)</sup> sur une chaîne avec interaction aléatoire entre premiers voisins. Cette dualité entre les représentations tension et courant démontre l'équivalence entre les modèles du type diagonal et hors-diagonal. Nous nous cantonnerons donc ici à l'étude de l'équation (II.2).

On peut définir un milieu moyen pour la chaîne, à partir des solutions de l'équation caractéristique :

$$X^2 - 2X\left(1 + \frac{i\omega C\bar{Z}}{2}\right) + 1 = 0$$

(où  $\bar{Z}$  est la valeur moyenne des impédances  $Z_n$ ), qui admet des solutions du type :

$$I_n = A_n e^{in\phi} + B_n e^{-in\phi} \quad (\text{II.3})$$

où  $\cos \phi \equiv 1 + \frac{i\omega C\bar{Z}}{2}$  et où les amplitudes complexes  $A_n$  et  $B_n$  obéissent à l'équation de continuité :

$$A_n e^{in\phi} + B_n e^{-in\phi} = A_{n-1} e^{in\phi} + B_{n-1} e^{-in\phi} \quad (\text{II.4})$$

On peut alors définir une matrice de transfert unitaire  $\theta_n$  reliant les amplitudes  $A_n$  et  $B_n$  du courant dans la liaison  $n$  à celles  $A_{n-1}$  et  $B_{n-1}$  dans la liaison  $n-1$  :

$$\begin{pmatrix} A_n \\ B_n \end{pmatrix} = \theta_n \begin{pmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{pmatrix}$$

où

$$\theta_n = \begin{bmatrix} 1 + \xi_n & \xi_n e^{-2in\phi} \\ -\xi_n e^{2in\phi} & 1 - \xi_n \end{bmatrix} \quad (\text{II.5})$$

avec  $\xi_n = \frac{\omega C \bar{Z}}{2 \sin \phi} g_n$  et où  $g_n = \frac{Z_n}{\bar{Z}} - 1$  décrit les fluctuations autour de leur valeur moyenne  $\bar{Z}$  des impédances  $Z_n$ . Donc, les amplitudes  $A_N$  et  $B_N$  dans la liaison  $N$  à l'extrémité de la chaîne sont reliées à leurs homologues  $A_0$  et  $B_0$  du début de la chaîne par :

$$\begin{pmatrix} A_N \\ B_N \end{pmatrix} = \prod_{n=1}^N \theta_n \begin{pmatrix} A_0 \\ B_0 \end{pmatrix} \quad (\text{II.6})$$

Afin d'évaluer  $A_N$  et  $B_N$ , on doit calculer le produit de matrices apparaissant dans (II.6). Pour ce faire, nous allons effectuer un développement de perturbation au premier ordre dans le terme de fluctuation  $g_n$  qui est l'équivalent d'un développement de Born dans l'approximation d'une théorie de diffusion. On obtient alors :

$$\begin{cases} A_N = A_0 \left( 1 + \sum_{n=1}^N \xi_n \right) + B_0 \sum_{n=1}^N \xi_n e^{-2in\phi} \\ B_N = -A_0 \sum_{n=1}^N \xi_n e^{2in\phi} + B_0 \left( 1 - \sum_{n=1}^N \xi_n \right) \end{cases} \quad (\text{II.7})$$

Le coefficient de transmission est obtenu à partir de conditions aux limites de la forme :

$$I_n = \begin{cases} e^{ikn} + r e^{-ikn} & n < 0 \\ A_n e^{in\phi} + B_n e^{-in\phi} & 0 \leq n \leq N \\ t e^{ikn} & n > N \end{cases} \quad (\text{II.8})$$

qui décrivent bien le problème que nous nous sommes posé, à savoir celui d'une onde plane d'amplitude unité incidente à gauche sur le milieu désordonné comportant une partie réfléchie avec une amplitude de réflexion  $r$  et une partie transmise avec l'amplitude  $t$ . Le coefficient de transmission  $\mathcal{C}$  de la chaîne est la variable aléatoire définie par  $\mathcal{C} = |t|^2$  et s'obtient en résolvant le système linéaire d'équations obtenu en écrivant le raccordement des solutions données par (II.8) à chaque extrémité de la chaîne (cf. Eq. (14) et Appendice de la publication reproduite à la fin du chapitre).

Pour obtenir une expression des longueurs caractéristiques associées aux phénomènes présents dans la chaîne, il faut alors considérer, conformément au calcul d'Anderson<sup>(6)</sup>, la bonne variable de moyenne extensive, soit  $\ln \mathcal{E}$ . Dans notre modèle, le caractère multiplicatif du coefficient de transmission associé au produit des matrices de transfert sous-tend la nature extensive de  $\ln \mathcal{E}$ . On peut alors calculer  $\overline{\ln \mathcal{E}}$  où  $\overline{\dots}$  représente la moyenne sur la distribution des impédances pour obtenir finalement (cf. Appendice de l'article reproduit en fin de chapitre) :

$$\overline{\ln \mathcal{E}} \approx \ln \left| \frac{4\phi k}{(\phi + k)^2} \right|^2 - 2N \operatorname{Im} \phi - \frac{N\sigma^2(\omega) |\phi|^2}{4} \quad (\text{II.9})$$

où  $\phi$  dans la limite  $\omega \rightarrow 0$  des basses énergies est donné par :

$$\phi \approx -(\omega C \frac{\bar{Z}}{i})^{1/2}$$

et où  $\sigma(\omega)$  est la variance de  $g_n$ .

Examinons maintenant les différents termes de (II.9) :

i) Le premier terme,  $\ln \left| \frac{4\phi k}{(\phi + k)^2} \right|^2$  est indépendant de  $N$ . C'est un terme de "surface" qui rend compte du désaccord d'impédance entre le milieu désordonné et les milieux semi-infinis. Ce terme s'annule exactement si les caractéristiques du milieu moyen définies par (II.3) coïncident avec celles des milieux extérieurs.

ii) Le second terme,  $-2N \operatorname{Im} \phi$ , est extensif et proportionnel à la partie imaginaire de  $\phi$ . Il décrit les phénomènes de dissipation dans le milieu ( $\operatorname{Re} \bar{Z} \neq 0$ ).

iii) Enfin, le dernier terme,  $\frac{N\sigma^2(\omega) |\phi|^2}{4}$ , obtenu de façon perturbative, dépend de la variance du désordre  $\sigma^2(\omega)$ . Insistons sur le fait que la nature extensive (i.e. proportionnelle à  $N$ ) de ce dernier terme n'est pas limitée à notre développement de perturbation mais est une conséquence générale du théorème de Furstenberg<sup>(7)</sup> selon lequel  $\overline{\ln \mathcal{E}} \underset{N \rightarrow \infty}{\sim} -Nf(\omega)$ . Nous n'avons fait qu'obtenir une expression de  $f(\omega)$  à basse fréquence.

### III - APPLICATIONS

#### A. Chaîne purement réactive

Ce cas correspond à une distribution des impédances  $Z_n$  de la forme  $Z_n = i\omega L_n$ , où les  $L_n$  sont maintenant des inductances aléatoires. Cette situation décrit, comme nous l'avons mentionné plus haut, le cas d'une chaîne harmonique où la masse des atomes serait aléatoire, mais aussi le modèle d'un électron dans un potentiel de Kronig-Penney aléatoire. Si on choisit maintenant  $\bar{L}$  pour que le milieu moyen coïncide avec les milieux semi-infinis, les termes de surface disparaissent et (II.9) se réduit alors à :

$$\overline{\ln \xi} = - \frac{N\omega^2 \bar{L} \sigma_L^2}{4} \quad (\text{II.10})$$

puisqu'il n'y a pas de terme dissipatif. On définit alors la longueur de localisation  $\xi(\omega)$  à partir de  $\overline{\ln \xi} = - \frac{N}{\xi(\omega)}$ , ce qui conduit à basse fréquence au résultat :  $\xi(\omega) = \frac{4}{\omega^2 \bar{L} \sigma_L^2}$ . On retrouve ainsi un résultat connu, mais obtenu ici sur un système de taille finie sans aucune hypothèse sur la nature du désordre, si ce n'est que l'on impose une distribution régulière pour laquelle tous les moments soient bien définis. L'intérêt de la formulation en taille finie réside dans la façon équivalente suivante de présenter le système : une telle chaîne d'impédances peut en effet aussi être considérée comme un filtre passe-bas pour lequel le coefficient de transmission s'annulerait (en fait tombe à des valeurs non mesurables) au-dessus d'une certaine fréquence caractéristique  $\omega_c$ . On sait en effet que le coefficient de transmission pour un milieu unidimensionnel désordonné doit s'annuler dans la limite d'un système infini. Ici pour  $N$  fini, on a une dépendance  $\omega_c(N)$ , où  $\omega_c$  délimite une zone passante basse fréquence par opposition aux plus hautes fréquences où ne subsistent que des modes localisés. Une façon simple d'évaluer la dépendance en  $N$  de  $\omega_c$  est d'écrire que :  $N \lesssim \xi(\omega_c)$  pour que le système soit passant soit :  $\omega_c(N) \propto N^{-1/2}$ .

### B. Chaîne purement dissipative

On considère maintenant le cas où toutes les impédances sont de nature dissipatives, typiquement des résistances :  $Z_n = R_n$ . Les modes propres du milieu moyen sont alors des ondes exponentiellement atténuées et la relation (II.9) se réduit à :

$$\overline{\ln \mathcal{E}} \approx - N(2\omega \bar{R} C)^{1/2} - N \frac{\omega \bar{R} C \sigma_R^2}{4} \quad (\text{II.11})$$

Ainsi, à basse fréquence, le premier terme associé à la dissipation pure domine la contribution provenant du désordre (proportionnelle à  $\sigma_R^2$ ). D'autre part le modèle dissipatif à 1 D correspond au problème de la marche aléatoire d'une particule classique et il n'est donc pas surprenant d'obtenir la longueur de diffusion  $\xi_D(\omega)$  à partir de :

$$\overline{\ln \mathcal{E}} = - \frac{N}{\xi_D(\omega)} \quad (\text{II.12})$$

où  $\xi_D(\omega) \approx (2 \bar{R} C \omega)^{1/2}$  avec le comportement en fréquence usuel. Ici encore, le milieu peut être décrit comme un filtre passe-bas mais avec une nouvelle fréquence caractéristique  $\omega_c(N) \propto N^{-2}$ . Comparée au cas purement réactif, on voit donc que la largeur de la bande est fortement réduite, ce qui nous amène à nous poser la question de la "cohabitation" entre les deux phénomènes de dissipation et de localisation.

### C. Cas mixte : superposition localisation et dissipation

On a vu dans le paragraphe précédent que le comportement dissipatif associé à une distribution  $Z_n = R_n$  est dominé par le terme dû au milieu moyen. Aussi pour étudier le cas mixte nous nous restreindrons par souci de simplicité à une distribution du type  $Z_n = R + i\omega L_n$  où seules les inductances sont distribuées aléatoirement. Il est à noter que nous nous trouvons ici dans une situation où justement la variance  $\sigma^2(\omega)$  de la distribution dépend effectivement de la fréquence :

$$\sigma^2(\omega) = \omega^2 \sigma_L^2 \left(\frac{\bar{L}}{R}\right)^2$$

Dans ce cas la relation (II.9) s'écrit :

$$\frac{1}{\xi} \approx -N(2\omega RC)^{1/2} - \frac{N\omega^3}{4} \frac{\bar{L}^2}{R} \sigma_L^2 \quad (\text{II.13})$$

Le premier terme de cette expression est le terme de milieu moyen présent dans (II.11). Le second, plus intéressant, est responsable des effets de localisation. Une première remarque est qu'à basse fréquence, domaine de validité de (II.13), il est toujours négligeable devant la contribution associée à la dissipation. En terme de longueurs caractéristiques, cela se traduit par le fait que la longueur de diffusion associée à la présence de dissipation,  $\xi_D(\omega) \propto \omega^{-1/2}$  est beaucoup plus courte que la longueur de localisation  $\xi(\omega) \propto \omega^{-3}$ . Cette conclusion, d'ailleurs physiquement prévisible, a son importance. Elle montre en effet, que dans un milieu désordonné unidimensionnel, linéaire, le phénomène de localisation ne peut pas être observé à basse fréquence en présence de dissipation dans le milieu ; nous pensons que c'est là une des causes essentielles pour laquelle il est difficilement observable dans la version unidimensionnelle de l'expérience de propagation d'une onde de gravité en eau peu profonde<sup>(12)</sup>.



IV - EXTENSION AU CAS DE DISTRIBUTIONS SINGULIERES DU DESORDRE

Les résultats précédents nécessitaient l'hypothèse d'une fonction de distribution dont tous les moments étaient parfaitement définis afin de donner un sens au développement (II.7). Une telle restriction est nécessaire si l'on veut sauvegarder l'universalité des exposants  $\nu$  associés aux longueurs caractéristiques  $\xi(\omega) \propto \omega^{-\nu}$ . Il est néanmoins intéressant, même si ce problème reste quelque peu académique, d'étudier le cas où on relâche cette contrainte. En effet, nous voudrions tout d'abord savoir comment est cassée le comportement universel des exposants  $\nu$ , mais aussi s'il est possible en considérant certaines classes de distribution, de modifier l'extrême sensibilité de la localisation relativement à la dissipation. Considérons pour cela le cas purement réactif étudié en III.A. mais avec pour fonction de distribution des inductances :

$$p(L) = (1 - \alpha) L_0^{1-\alpha} L^{-(2-\alpha)} \quad (\text{II.14})$$

où  $L \in [L_0, +\infty[$  et  $\alpha \in ]0,1[$ . Cette fonction est normée, mais tous ses moments divergent et donc on ne peut plus définir de milieu moyen. Le calcul développé précédemment n'est donc plus valable à partir de l'expression (II.14) de  $p(L)$ . Pour pouvoir l'appliquer à nouveau, nous allons tronquer  $p(L)$  jusqu'à une valeur  $\underline{L}$  définie comme étant la valeur la plus probable de la plus grande fluctuation d'inductance. Soit  $\eta(\underline{L})$  la probabilité que l'inductance  $L$  soit plus petite que  $\underline{L}$ . On a :

$$\eta(\underline{L}) = \int_{L_0}^{\underline{L}} p(L) dL = 1 - \left(\frac{L_0}{\underline{L}}\right)^{1-\alpha} \quad (\text{II.15})$$

La probabilité de trouver une chaîne de  $N$  inductances aléatoires avec une et une seule fluctuation supérieure à  $\underline{L}$  est  $\eta^{N-1}(1-\eta)$ . Et donc la valeur la plus probable  $L$  de la fluctuation la plus large est obtenue en maximisant la probabilité  $\eta^{N-1}(1-\eta)$ , soit dans la limite  $N$  grand :

$$\tilde{L} = L_0 N^{\frac{1}{1-\alpha}} \quad (\text{II.16})$$

On définit alors la distribution tronquée  $p'(L_n)$  par :

$$p'(L) = \begin{cases} p(L) & \text{si } L \leq \tilde{L} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (\text{II.17})$$

Tous les moments de cette distribution sont maintenant bien définis mais dépendent de manière non triviale de la taille  $N$  de la chaîne. On peut dès lors appliquer les résultats précédents et dans le cas purement réactif on obtient alors :

$$\overline{\ln \xi} \approx - \frac{\alpha}{4(1+\alpha)} \omega^2 L_0 C N^{\frac{2-\alpha}{1-\alpha}} \quad (\text{II.18})$$

Cette expression définit alors une nouvelle longueur de localisation :  $\xi(\omega) \approx \omega^{-2} \cdot (1-\alpha/2-\alpha)$  dont le comportement n'est plus universel mais dépend fortement des caractéristiques de la distribution. D'autre part, on a  $\alpha \in ]0,1[$ , donc l'exposant  $\nu = 2 \cdot \frac{1-\alpha}{2-\alpha}$  est réduit par rapport à sa valeur  $\nu = 2$  obtenue précédemment. Cela s'explique très bien par l'accentuation des effets du désordre qui autorise maintenant l'occurrence d'événements consistant à couper la chaîne.

Une question consiste alors à se demander si cette forte diminution de  $\xi(\omega)$  ne peut pas produire un régime pour lequel les effets de localisation deviendraient prépondérants par rapport à la dissipation. Afin d'y répondre, considérons toujours des impédances du type  $Z_n = R + i\omega L_n$  où les inductances  $L_n$  sont distribuées suivant (II.14). On se ramène alors comme précédemment à la distribution tronquée  $p'(L)$  donnée par (II.17) pour obtenir en définitive

$$\overline{\ln \xi} \approx - N(2\omega RC)^{1/2} - \frac{L_0^2 C}{4R} \cdot \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \omega^3 N^{\frac{2}{1-\alpha}} \quad (\text{II.19})$$

On constate alors que si  $2/3 < \alpha < 1$ , la longueur de localisation devient plus petite que la longueur de diffusion associée à la dissipation. C'est à notre avis la seule situation où les effets de localisation pourraient être observés en dépit de la présence de phénomènes dissipatifs dans la chaîne.

## V - CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons essayé de dégager les caractéristiques essentielles du problème de la propagation des ondes dans les milieux désordonnés unidimensionnels linéaires de taille finie. La propagation d'une onde de fréquence  $\omega$  est complètement déterminée par son coefficient de transmission  $\mathcal{C}(\omega, N)$ . Les longueurs caractéristiques des phénomènes présents dans la chaîne (localisation-dissipation,...) peuvent alors s'obtenir à partir de la valeur moyenne de la variable aléatoire pertinente du système (i.e. celle qui converge en loi vers une gaussienne)  $\ln \mathcal{C}$  par la relation  $\overline{\ln \mathcal{C}} = -\frac{N}{\xi(\omega)}$ . Nous avons calculé  $\xi(\omega)$  à basse fréquence au moyen d'un développement de perturbation au premier ordre en fonction de la fluctuation.

Nous avons de plus montré qu'en présence de dissipation dans le système, on ne pouvait pas mettre en évidence les effets de localisation dus au désordre, sauf pour des situations extrêmes de désordre où les moments de la distribution divergent.

Enfin, nous avons montré que le système est équivalent à un filtre passe-bas caractérisé par une fréquence  $\omega_c(N)$  dépendant de la taille.  $\omega_c(N)$  sépare une région de basses fréquences où les modes sont passants et relativement insensibles au désordre d'une région de plus haute fréquence, où le coefficient de transmission est nul (exponentiellement petit) excepté pour un ensemble de mesure nulle de modes résonants correspondant à l'ensemble des solutions propres de l'équation du mouvement (II.2). Ces modes ont été mis en évidence numériquement par Azbel<sup>(8)</sup> et sont les modes localisés dont nous avons parlé au début de ce chapitre. Nous reviendrons en détail sur leur forme dans le chapitre IV. L'existence, pour un système de taille finie, de ces deux types de modes, et donc de  $\omega_c(N)$  a une conséquence fondamentale sur la nature du transport dans ces systèmes qui est l'objet du chapitre III.



REFERENCES

1. F.J. DYSON, Phys. Rev. 92 (1953), 1331.
2. N.F. MOTT et W.D. TWOSE, Adv. Phys. 10 (1961), 137.
3. R.E. BORLAND, Proc. Roy. Soc. A 274 (1963), 529.
4. J. HORI, Spectral properties of disordered chains and lattices (Pergamon Press, Oxford, 1968).
5. P. LLOYD, J. Phys. G2 (1969), 1717.
6. P.W. ANDERSON, D.J. THOULESS, E. ABRAHAMS and D.S. FISHER, Phys. Rev. B22 (1980), 3519.
7. H. FURSTENBERG, Trans. Am. Math. Soc. 108 (1963), 377.
8. M. AZBEL, Phys. Rev. B28 (1983), 4106.
9. S. ALEXANDER, J. BERNASCONI, W.R. SCHNEIDER and R. ORBACH, Rev. Mod. Phys. 53 (1981), 175.
10. R.P. FEYNMAN, Cours d'Electromagnétisme, tome 2, Interéditions Paris, 1979.
11. T.A.L. ZIMAN, Phys. Rev. Lett. 49 (1982), 337.
12. E. GUAZZELLI, E. GUYON et B. SOUILLARD, J. Phys. Lett. 44 (1983), L837.



Classification  
 Physics Abstracts  
 42.20 — 47.35 — 71.55J

## Chains of random impedances

E. Akkermans and R. Maynard

Centre de Recherches sur les Très Basses Températures, C.N.R.S., B.P. 166 X, 38042 Grenoble Cedex, France

(Reçu le 20 février 1984, révisé le 16 avril, accepté le 22 mai 1984)

**Résumé.** — On calcule le coefficient de transmission d'une onde électrique de fréquence  $\omega$  à travers un réseau linéaire de dipôles électriques d'impédances aléatoires en fonction de  $\omega$  et de  $N$ , la taille du réseau. Deux types de désordre sont étudiés : le désordre faible où tous les moments des impédances aléatoires sont définis et le désordre fort où aucun de ces moments n'est défini. Les longueurs caractéristiques associées aux phénomènes présents simultanément, de localisation et de diffusion sont obtenues à partir du coefficient de transmission, ainsi que la fréquence de coupure du filtre passe-bas équivalent. Pour la plupart des situations, la dissipation impose sa longueur caractéristique et sa fréquence au coefficient de transmission. Toutefois une situation particulière est envisagée où le phénomène de localisation pourrait être observé en dépit des effets de dissipation ou de diffusion.

**Abstract.** — The transmission of an electrical wave of frequency  $\omega$  through a random ladder network is calculated at low frequency in terms of the scaling variables  $\omega$  and  $N$  (the size of the chain). Two classes of disorder are considered : weak disorder where all the moments exist, and strong disorder where no moment can be defined. The characteristic lengths — localization or diffusion — are obtained from the transmission coefficient and the cut-off frequency for the band low-pass filter. For most situations dissipation imposes its characteristic length and frequency dependence on the transmission coefficient. A special situation is found where the localization phenomenon could be observed above the dissipation or diffusion effects.

The problem of propagation of a wave in a one dimensional random medium has now been studied extensively and is well understood. It is established that all the modes are exponentially localized while the threshold of localization is the zero frequency. The critical exponent  $\nu_0$  for the localization length  $\xi_0 \cong \omega^{-\nu_0}$  has been found [1, 7] to be 2 for a weakly disordered medium. However the question of the universality of this value with the various kind of disorder usually considered has not been answered so far and constitutes part of the motivation for this study. Alternatively, the diffusion of a particle in a random one-dimensional medium has been also studied extensively by various authors [8, 10]. The space-time scaling relation  $\xi_D \approx t^{\nu_D}$  or  $\omega^{-\nu_D}$  for asymptotically long time or low frequency has been obtained for various classes of disorder :  $\nu_D = 1/2$  for weak disorder and  $\nu_D \leq 1/2$  for strong disorder. The analysis of both effects — localization and diffusion — has not been attempted and this represents the second part of our study. This mixed situation is present in many linear mechanical systems where dissipation or viscous forces act simultaneously with the reactive or harmonic forces. A unified description of the most

general linear systems deals with an electrical network built up with resistances, capacitances and inductances. When only inductances and capacitances are present the ladder network corresponds to a harmonic chain [11-12] while the resistances and capacitances describe the diffusion process [8].

This article is organized in 5 sections. In section 1, a general expression for the transmission coefficient  $T$  of a propagating wave of low frequency  $\omega$  through a chain of random impedances is obtained from the lowest order term of a series expansion in the fluctuations around the average impedances (in the appendix the detailed calculation of this coefficient is reported). The correct averaging is then performed and produces the  $\langle \ln T \rangle$  expression. The case of weak disorder is studied in section 2 and the new frequency dependence of a mixed network — reactive and dissipative impedances — is then obtained. For this mixed network the dissipation plays the dominant rôle at low frequency. In section 3 the class of strong disorder is considered for the random impedances. A new expression for the localization length is deduced. A special type of random chain is also studied for which the effects of localization could dominate

those of dissipation at low frequency. Space correlations of phases are given in section 4 in terms of a characteristic length while conclusions are drawn in section 5.

**1. The low frequency transmission coefficient of a chain of length  $N$ .**

We consider a sequence of  $N + 1$  random impedances  $Z_n$  ( $n = 0, 1, 2, \dots, N$ ) linked with two semi-infinite ladder networks of self-inductances  $L$  alternating with equal capacities  $C$  (see Fig. 1). Let  $V_n$  be the voltage at terminal  $n$ ; the current equation at node  $n$  for frequency  $\omega$  is :

$$\frac{V_{n-1} - V_n}{Z_n} - \left( \frac{V_n - V_{n+1}}{Z_{n+1}} \right) = i\omega C V_n. \quad (1)$$

By using the current intensity  $I_n$  through the impedance  $Z_n$  in the section  $n$ ,  $I_n = (V_{n-1} - V_n)/Z_n$ , the current equation (1) can be changed into :

$$I_{n-1} - 2 I_n + I_{n+1} = i\omega C Z_n I_n \quad (2)$$

where the disorder, *via* the impedances  $Z_n$ , now becomes diagonal. For weak disorder, there is an average value for  $Z_n$  :  $\bar{Z}_n = Z$  and we start by solving the equation (2) for the average chain :

$$I_{n-1} - 2 I_n + I_{n+1} = i\omega C \bar{Z} I_n. \quad (3)$$

The solutions are given by the associated characteristic equation

$$X^2 - 2 X \left( 1 + \frac{i\omega C \bar{Z}}{2} \right) + 1 = 0. \quad (4)$$

By defining :

$$\cos \phi = 1 + \frac{i\omega C \bar{Z}}{2}. \quad (5)$$

The solutions have the canonical form  $X = e^{\pm i\phi}$  where  $\phi$  can be a complex number. This step is useful to define a basis for the disordered chain for which the solutions of (2) are sought in the following form :

$$I_n = A_n e^{in\phi} + B_n e^{-in\phi} \quad (6)$$

where  $A_n$  and  $B_n$  can be complex numbers obeying the continuity equation :

$$A_n e^{in\phi} + B_n e^{-in\phi} = A_{n-1} e^{in\phi} + B_{n-1} e^{-in\phi}. \quad (7)$$

The coefficients of adjacent intensities are connected by the transfer matrix :

$$\begin{bmatrix} A_n \\ B_n \end{bmatrix} = \theta_n \begin{bmatrix} A_{n-1} \\ B_{n-1} \end{bmatrix} \quad (8a)$$

$$\theta_n = \begin{bmatrix} 1 + \xi_n & \xi_n e^{-2in\phi} \\ -\xi_n e^{2in\phi} & 1 - \xi_n \end{bmatrix} \quad (8b)$$

where

$$\xi_n = \frac{\omega C g_n \bar{Z}}{2 \sin \phi} \quad (8c)$$

$$g_n = \frac{Z_n}{\bar{Z}} - 1. \quad (8d)$$

Here  $\xi_n$  or  $g_n$  describe the fluctuations of the random impedances around the average value  $\bar{Z}$ . For the random ladder network of figure 1, the coefficients  $A_N$  and  $B_N$  of the current at the section  $N$  are obtained from  $A_0$  and  $B_0$  by the product of the  $N$  transfer matrices  $\theta_n$  :

$$\begin{bmatrix} A_N \\ B_N \end{bmatrix} = \left[ \prod_{n=1}^N \theta_n \right] \begin{bmatrix} A_0 \\ B_0 \end{bmatrix}. \quad (9)$$

With the aim of determining the frequency dependence of the characteristic length of this problem we now expand the product to first order in the fluctuations  $\xi_n$  (equivalent to the Born approximation in scattering theory) :

$$\prod_{n=1}^N \theta_n \cong \begin{bmatrix} 1 + \sum_{n=1}^N \xi_n & \sum_{n=1}^N \xi_n e^{-2in\phi} \\ -\sum_{n=1}^N \xi_n e^{2in\phi} & 1 - \sum_{n=1}^N \xi_n \end{bmatrix} \quad (10)$$

which gives the relations :

$$\begin{cases} A_N = A_0 \left( 1 + \sum_{n=1}^N \xi_n \right) + B_0 \sum_{n=1}^N \xi_n e^{-2in\phi} \\ B_N = -A_0 \sum_{n=1}^N \xi_n e^{2in\phi} + B_0 \left( 1 - \sum_{n=1}^N \xi_n \right). \end{cases} \quad (11)$$

Both regular chains at the ends of the random network support incident, reflected and transmitted waves of

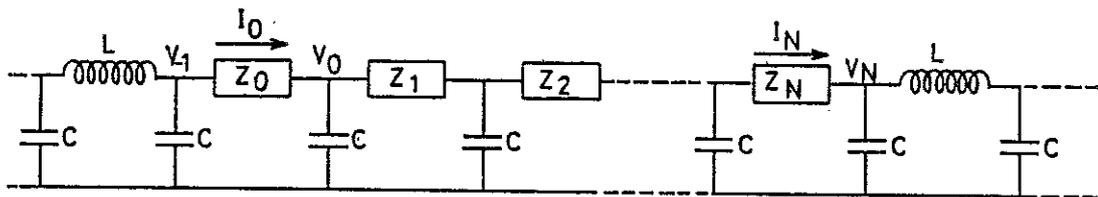


Fig. 1. — Chain of random impedances. The random  $Z_n C$  chain is connected with two regular semi-infinite  $LC$  networks.

dispersion relation

$$k = \omega \sqrt{LC} \quad (12)$$

where  $k$  is the wave vector. This dispersion relation is a special case of relation (5) where  $\bar{Z} = i\omega L$  and  $\phi = k \ll 1$  in the approximation of long wave length. The transmission coefficient through the random network is obtained by imposing the following expressions for the intensities :

$$I_n = \begin{cases} e^{ikn} + r e^{-ikn} & n < 0 \\ A_n e^{in\phi} + B_n e^{-in\phi} & 0 \leq n \leq N \\ t e^{ikn} & n > N. \end{cases} \quad (13)$$

Matching of these solutions at both ends  $n = 0$  and  $n = N$  provides the four relations :

$$\begin{cases} I_{-2} - 2 I_{-1} + I_0 = -\omega^2 L C I_{-1} \\ I_{-1} - 2 I_0 + I_1 = i\omega C Z_0 I_0 \\ I_{N+1} - 2 I_N + I_{N-1} = i\omega C Z_N I_N \\ I_{N+2} - 2 I_{N+1} + I_N = -\omega^2 L C I_{N+1}. \end{cases} \quad (14)$$

By using (12) and (13) in (14) a linear system of four unknown variables  $r, t, A_0$  et  $B_0$  is obtained, a system which can be solved directly. The energy flow through the network is defined [11] by the local relation :

$$J_n = \text{Re} \{ I_n^* V_n \}. \quad (15)$$

The transmission coefficient  $T$ , ratio of the transmitted energy flow to the incident energy flow, is equal to  $|t|^2$ .

In the appendix, the expression  $\ln T = \ln |t|^2$  is derived up to lowest order in  $\xi_n$  or  $g_n$  (Born approximation for  $|t|^2$ ). Taking into account the randomness of the impedances  $Z_n$ , we define the average  $\langle \ln T \rangle$  over the distribution function of  $Z_n$ . It has been shown by various authors [1, 13] that the correct proceeding is to average the transmission coefficient over a disordered chain since it is only  $\langle \ln T \rangle$  which obeys the central limit theorem for large  $N$ . This property is due to the multiplicative character of the transmission coefficient through different media which becomes extensive in the  $\ln T$  formulation. This averaging procedure provides a great simplification when successive random impedances are assumed uncorrelated. We finally obtain the following expression :

$$\langle \ln T \rangle \cong \ln \left| \frac{4 \phi k}{(\phi + k)^2} \right|^2 - 2 N \text{Im} \phi - \frac{N \sigma^2(\omega) |\phi|^2}{4} \quad (16)$$

where  $\phi$  is given by the low frequency approximation of (5) :

$$\phi \cong i^{3/2} (\omega C \bar{Z})^{1/2}. \quad (17)$$

The first two terms are not related to the disorder.

Furthermore the first term does not depend on the size  $N$  of the chain, it originates [11] from the mismatch of the impedances at the junctions between the semi-infinite  $LC$  network and the chain of average impedance  $\bar{Z}$ . For large and disordered chains it is negligible. The second term is proportional to the imaginary part of  $\phi$  therefore to the dissipation in the circuit. The last term makes use of  $\sigma^2(\omega)$ , the variance of the  $|g_n|$ . It is this term which is perturbative and derived to lowest order in  $|g_n|^2$ . However we know from the Furstenberg's [14] convergence theorem that at any order in  $g_n$  a variation in  $N$  of  $\langle \ln T \rangle$  is expected but with more complicated frequency dependence than in the non perturbative regime. Only at low frequency a very simple power law dependence is obtained for  $\langle \ln T \rangle$ .

## 2. Weak disorder.

In this section we consider disorder situations where the various related moments of the distribution function of  $Z_n$  are well-defined.

2.1 PURE REACTIVE RANDOM NETWORK. — The random impedances  $Z_n$  are of self-inductance nature  $L_n$  :

$$Z_n = i\omega L_n. \quad (18)$$

A section of the ladder network is made up of capacitance  $C$  and inductance  $L_n$ . This configuration can be mapped onto the harmonic chain of atoms where  $L_n$  and  $C$  stand for the masses and the inverse harmonic restoring force respectively.

It can also be put in correspondance with the Schrödinger equation of the random Kronig-Penney model [1]. By tuning the  $\bar{L}$  (the average inductance) to  $L$  in order to eliminate the reflexions at the junctions, one finds from (17) that  $\phi = +k$ ,  $\text{Im} \phi = 0$  and  $\sigma_L^2 = \langle (L_n - \bar{L})^2 / \bar{L}^2 \rangle$  are independent of the frequency. Then,

$$\langle \ln T \rangle = - \frac{N k^2 \sigma_L^2}{4}. \quad (19)$$

This result has previously been derived for the disordered harmonic chain [2, 3, 5, 15]. With the dispersion relation (12),  $\langle \ln T \rangle$  becomes proportional to  $-N\omega^2$ . This result can be understood in a simple way : The  $\omega = 0$  mode is extended owing to global translation invariance. It is the mobility edge of localization at 1 dimension. For small but non-zero frequencies, the modes become localized. The localization length  $\xi_0(\omega)$  is usually defined by the standard relation (in units of the length of one section) :

$$\langle \ln T(\omega) \rangle = - \frac{N}{\xi_0(\omega)}. \quad (20)$$

Here we obtain

$$\xi_0(\omega) = \frac{4}{\omega^2 L C \sigma^2}. \quad (21)$$

The linear dependence of  $\langle \ln T \rangle$  in  $N$  comes from the uncorrelated distribution of random impedances to lowest order in the fluctuation expansion or, at any order, from the Furstenberg's theorem. The  $\omega^2$  variation of  $\xi_0^{-1}(\omega)$  is simply due to the weight of a local impedance fluctuation in  $\omega^2$  as in the harmonic disordered chain where any mass fluctuations contribute as  $\omega^2$  to the force equations. Another way to present the result [19] is to consider the network as a low-pass filter for which the transmission coefficient vanishes above some critical frequency  $\omega_c$ . We know from the general theorem of localization in one dimension that at any finite frequency, the coefficient of transmission vanishes for the infinite network. For a finite network of size  $N$ , a low-pass band filter subsists up to a critical frequency  $\omega_c(N)$ . This cut-off frequency is simply evaluated by writing :

$$\xi_0(\omega_c) \gtrsim N \quad (22)$$

which produces here :

$$\omega_c \sim N^{-1/2}. \quad (23)$$

This scaling relation is characteristic of the low frequency regime of standard localization.

**2.2 PURE DISSIPATIVE RANDOM NETWORK.** — All the random impedances are resistances  $Z_n = R_n$ . From (17),

$$\phi \cong i^{3/2}(\omega \bar{R}C)^{1/2} \quad (24)$$

which produces damped waves, as expected, in the average medium.

Since

$$\text{Im } \phi \cong \left( \frac{\omega \bar{R}C}{2} \right)^{1/2} \quad (25)$$

the dissipative term contributes to  $\ln T$  by an attenuation in  $-2N(\omega \bar{R}C/2)^{1/2}$ . The fluctuations in  $R_n$  contribute through  $|\phi|^2$  by a term proportional to  $\omega$  while  $\sigma^2(\omega) = \left\langle \left( \frac{R_n}{\bar{R}} - 1 \right)^2 \right\rangle$  is independent of frequency. Finally, by adding the two terms we find :

$$\langle \ln T \rangle \cong -N(2\omega \bar{R}C)^{1/2} - N \frac{\omega \bar{R}C \sigma^2}{4}. \quad (26)$$

For low frequency the dominant term is the first one coming from the average dissipative medium (weak disorder does not affect strongly the scaling relation of the latter). It is well known that this purely dissipative case corresponds to the problem of diffusion of a particle in a random medium. The diffusion length  $\xi_D(\omega)$  is obtained from (25) by rewriting :

$$\langle \ln T \rangle \cong -\frac{N}{\xi_D(\omega)} \quad (27)$$

which gives :

$$\xi_D(\omega) \cong (2\bar{R}C\omega)^{-1/2}. \quad (28)$$

This is the standard space-time relation for diffusion where  $\xi$  is proportional to  $t^{1/2}$ . The cut-off frequency corresponding to this case is now  $\omega_c \sim N^{-2}$  ; the pass band width is strongly reduced compared to the localization situation (A).

**2.3 THE MIXED REACTIVE-DISSIPATIVE NETWORK.** — Since weak disorder does not affect the scaling relation of the dissipative case, we consider for simplicity only the fluctuations in the impedances :

$$Z_n = R + i\omega L_n. \quad (29)$$

The dominant term for  $\omega \rightarrow 0$  is indeed the resistivity part of  $\phi$  so that the dissipative term is unchanged from (26). In contrast the term of disorder is changed by the frequency dependence of the variance  $\sigma^2(\omega)$  :

$$\sigma^2(\omega) = \langle |g_n(\omega)|^2 \rangle = \omega^2 \left( \frac{\bar{L}}{\bar{R}} \right)^2 \sigma_L^2 \quad (30)$$

where  $\sigma_L^2$  is the variance of the random inductances. With  $\phi$  given by (24) we see :

$$\langle \ln T \rangle \cong -N(2\omega RC)^{1/2} - \frac{N\omega^3 \bar{L}^2 C}{4\bar{R}} \sigma_L^2. \quad (31)$$

The main conclusion of this general case is that the disordered term is not the dominant one for the transmission coefficient. In the presence of dissipation in the one dimensional network, the localization effect, responsible for the term in  $N\omega^3$ , is negligible compared with dissipation at low frequency. In terms of characteristic lengths, the diffusion length  $\xi_D \sim \omega^{-1/2}$  is much shorter than the localization length  $\xi_0 \sim \omega^{-3}$ . This situation must be enhanced even further in higher dimensions since the localization length is even longer (for example  $\xi_0 \sim e^{1/\omega^2}$  in two dimensions [16]).

### 3. Strong disorder.

One-dimensional systems are very sensitive to the occurrence of a cut, even when the probability of this event is vanishingly small. This situation has been considered in detail by Alexander *et al.* [8] for the case of diffusion in a random medium corresponding to the purely dissipative network. In this section we are going to generalize this result to the case of localization (reactive network) and mixed chains.

Let us consider first the purely reactive network with large fluctuations of  $L_n$  described by the probability density function  $p(L_n)$  :

$$p(L_n) = (1 - \alpha) L_0^{1-\alpha} L_n^{-(2-\alpha)} \quad (32)$$

for  $L_n \in [L_0, +\infty[$  and  $\alpha \in ]0, 1[$  ( $L_0$  : minimum value of  $L_n$ ). All the moments of this distribution diverge and no effective medium can be defined for this case of strong disorder. Therefore the previous method cannot be used and some modifications must enter in the previous expression for the transmission coefficient (16). The basic idea is to truncate the distribution

function (32) up to a special value  $\bar{L}_n$  defined as the most probable value of the largest fluctuation of  $L_n$  on a chain of size  $N$ . Let us call  $\eta(\bar{L}_n)$  the probability that the inductance  $L_n$  is less than  $\bar{L}_n$ :

$$\eta(\bar{L}_n) = 1 - \left(\frac{L_0}{\bar{L}_n}\right)^{1-\alpha} \quad (33)$$

The probability of finding a chain of  $N$  random inductances with only one fluctuation larger than  $\bar{L}_n$  is equal to  $\eta^N(1 - \eta)$ . The most probable value of the large fluctuation  $\bar{L}_n$  is obtained by maximizing  $\eta^N(1 - \eta)$  which gives  $N = \eta(\bar{L}_n) [1 - \eta(\bar{L}_n)]^{-1}$ . For large size one finds :

$$\bar{L}_n = L_0 N^{\frac{1}{1-\alpha}} \quad (34)$$

The truncated distribution for finite size is then :

$$p'(L_n) \cong \begin{cases} (1 - \alpha) L_0^{1-\alpha} L_n^{-(2-\alpha)} & L_n \leq \bar{L}_n \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (35)$$

This is for the same conditions as in (32). The moments are now well-defined.

$$\begin{aligned} \bar{L} &\cong \frac{1-\alpha}{\alpha} L_0 N^{\frac{\alpha}{1-\alpha}} \\ \sigma_L^2 &= \frac{\langle (L_n - \bar{L})^2 \rangle}{\bar{L}^2} = \frac{\alpha^2}{1-\alpha^2} N \end{aligned} \quad (36)$$

The expression (19) must be changed both for  $k$  and  $\sigma_L$  since

$$k^2 = \omega^2 \bar{L} C \cong \frac{1-\alpha}{\alpha} \omega^2 L_0 C N^{\frac{\alpha}{1-\alpha}} \quad (37)$$

which gives

$$\langle \ln T \rangle \cong - \frac{\alpha}{4(1+\alpha)} \omega^2 L_0 C N^{\frac{2-\alpha}{1-\alpha}} \quad (38)$$

The expression (38) defines a new scaling relation through the factor  $N^{((2-\alpha)/(1-\alpha))} \omega^2$  which provides a new localization length  $\xi_0$  as well as cut-off frequency for the pass band :

$$\begin{aligned} \xi_0 &\approx \omega^{-2(\frac{1-\alpha}{2-\alpha})} \\ \omega_c &\approx N^{-\frac{1}{2} \cdot \frac{2-\alpha}{1-\alpha}} \end{aligned} \quad (39)$$

As  $\alpha$  is defined in ]0, 1[, the exponent  $\nu$  of  $\omega^{-\nu}$  is also reduced to the interval ]0, 1[ instead of 2 for a weak disorder. This leads to an important shortening of the localization length. This is expected since strong disorder enhances considerably localization phenomena.

Consider now the mixed network with constant resistance but random impedances. Suppose that these impedances have the probability distribution given

by (32). The second term of the expression (31) of  $\langle \ln T \rangle$  must be changed by taking into account the  $N$ -dependence of  $\bar{L}$  and  $\sigma_L$  (36) :

$$\begin{aligned} \langle \ln T \rangle &\cong - N(2\omega RC)^{1/2} - \\ &- \frac{L_0^2 C}{4R} \frac{1-\alpha}{1+\alpha} \omega^3 N^{\frac{2}{1-\alpha}} \end{aligned} \quad (40)$$

The scaling between  $N$  and  $\omega$  is different in the two terms. While the dissipative term gives the  $N\omega^{1/2}$  dependence, the localization one now exhibits a new dependence  $\omega^3 N^{(2/1-\alpha)}$ . The limit of very low frequency now shows two regimes. Let us call  $\omega_{CD}$  the cut-off frequency for the dissipative term ( $\omega_{CD} \sim N^{-2}$ ) and  $\omega_{CO}$  the same cut-off for the second term. One finds :

$$\omega_{CO} \cong N^{-\frac{2}{3(1-\alpha)}} \quad (41)$$

which becomes less than or equal to  $\omega_{CD}$  for  $2/3 < \alpha < 1$ . For these values of  $\alpha$  and for  $\omega \gtrsim \omega_{CO}$  the transmission coefficient is controlled by the localization phenomena instead of the dissipation. It is, to our knowledge, the only situation where localization can be observed at low frequency in the presence of dissipation.

Finally, for completeness, let us deduce the diffusion length for the case of random resistances where the resistances follow a law of distribution analogous to (32). By a similar method one can obtain the moments of the truncated distribution :

$$\begin{aligned} \langle R \rangle &= \frac{1-\alpha}{\alpha} R_0 N^{\frac{\alpha}{1-\alpha}} \\ \sigma_R^2 &= \frac{\alpha^2}{1-\alpha^2} N \end{aligned} \quad (42)$$

Expression (26) now becomes

$$\begin{aligned} \langle \ln T \rangle &\cong - \left( \frac{2CR_0(1-\alpha)}{\alpha} \right)^{1/2} \omega^{1/2} N^{\frac{2-\alpha}{2(1-\alpha)}} - \\ &- \frac{C\alpha R_0}{4(1+\alpha)} \omega N^{\frac{2-\alpha}{1-\alpha}} \end{aligned} \quad (43)$$

The scaling variable is now  $\omega^{1/2} N^{((2-\alpha)/2(1-\alpha))}$  for both terms, which produce the « diffusion » length :

$$\xi_D(\omega) \sim \omega^{-\frac{1-\alpha}{2-\alpha}} \quad (44)$$

and the cut-off frequency  $\omega_c \sim N^{-\frac{2-\alpha}{1-\alpha}}$  in agreement with reference [8].

#### 4. Phase correlation function.

We would now like to consider the effect of disorder on the phases of  $A_n$  and  $B_n$ . In the case of the random impedances network we can generalize previous approaches to this problem [17, 18] due to the fact that the disorder introduces only one single characteristic length describing both amplitude and phase-correlation decay.

We define the phase-correlation function  $q(p)$  as the ratio of the phase at some point  $p$  to the initial phase  $\phi_0$  so that

$$q(p) \equiv \frac{\phi_p}{\phi_0} \quad (45)$$

where we defined the phases  $\phi_n$  by :

$$\begin{cases} A_n = |A_n| e^{-i\phi_n} \\ B_n = |B_n| e^{-i\phi_n} \end{cases} \quad (46)$$

We can easily show that phase-correlation functions have the same scaling form for both cases :

$$q(p) = \frac{\phi_p}{\phi_0} \quad \text{and} \quad q'(p) = \frac{\phi'_p}{\phi'_0}$$

corresponding to  $A_p$  and  $B_p$  respectively. Following Azbel, we consider the only relevant extensive quantity which obeys a central limit theorem for  $N \rightarrow \infty$ , to describe phase correlations,  $\langle \ln q \rangle$ .

Starting from (11) and using the notation introduced in the appendix, we get the following form :

$$\frac{\phi_p}{\phi_0} \cong 1 + \sum_{n=1}^p \text{Im}(\xi_n), \quad (47)$$

with a first order expansion of  $\text{tg}(\phi_L - \phi_0)$ . Then we have

$$\left\langle \ln \frac{\phi_p}{\phi_0} \right\rangle \cong -\frac{1}{2} \sum_{n=1}^p \langle [\text{Im}(\xi_n)]^2 \rangle, \quad (48)$$

where the linear terms in  $\xi_n$  of zero mean-value are eliminated.

This expression for  $\langle \ln q(p) \rangle$  allows us to obtain the scaling form of the phase-correlation function in the three previous cases :

i) *purely reactive network* :  $\text{Im}(\xi_n) = \frac{\omega \sqrt{LC}}{2} g_n$

$$\langle \ln q(p) \rangle \cong -\frac{LC\omega^2 N \sigma_L^2}{8},$$

ii) *purely dissipative random network* :

$$\text{Im}(\xi_n) = \left(\frac{\omega RC}{2}\right)^{1/2} g_n$$

$$\langle \ln q(p) \rangle \cong -\frac{RC \sigma_R^2 N \omega}{4},$$

iii) *mixed reactive-dissipative network* :

$$\text{Im}(\xi_n) = L \left(\frac{C}{2R}\right)^{1/2} \omega^{3/2} g_n$$

$$\langle \ln q(p) \rangle \cong -\frac{L^2 C}{4R} \sigma_L^2 N \omega^3.$$

Then the influence of disorder on the phase correlation of the amplitudes  $A_n$  and  $B_n$  has the same scaling form as  $\langle \ln T \rangle$ . This was expected since in 1D, the disorder can be described by a single characteristic length.

### 5. Conclusions.

Let us summarize the main results of this article. The electrical one-dimensional network is made up of a finite number  $N$  of random reactive and dissipative impedances. The propagation of an electrical wave is studied by means of the transmission coefficient  $T$  through the network. Simple results for the scaling variables  $\omega$  and  $N$  can be obtained only at low frequency. In this regime an effective medium is built up by average impedances while the fluctuations around the mean-values are treated by a perturbation expansion to lowest order in the fluctuations  $g_n$ . The correct averaging on  $\langle \ln T \rangle$  is performed and produces the scaling dependence as well as the characteristic lengths (localization and diffusion) and the cut-off frequency of the low-pass band filter. For weak disorder (all the moments of the distribution function exist) we find for the general chain a strong dominance of the dissipation over localization, reflected by the fact that the shortest characteristic length is that of diffusion. Strong disorder is considered in terms of distribution laws for which no moments exist. The extreme sensitivity of the one-dimensional systems to this type of disorder leads to a marked, change in the scaling relations, in particular a new frequency dependence of the localization length is derived. A special situation is envisaged where there is no randomness in the dissipation while the reactive impedances are strongly fluctuating. For this situation only, there is a domain of frequency where the localization becomes dominant over the dissipation.

The domain of validity of the low frequency expansion is limited by values of  $\langle \ln T \rangle \gtrsim -1$  or, equivalently, by the cut-off frequency  $\omega_c$  of the low-pass band filter. At higher frequency we have estimated the following terms in the expansion which show a similar scaling dependence. This indicates a range of validity probably broader than might be expected from the lowest term of the perturbation expansion. However, at higher frequencies, we know from Azbel's recent numerical work [1] that « passing modes » emerge from a background of very small transmission coefficients for discrete values of  $\omega$  in the case of a random, purely reactive chain. We believe that any dissipation term will affect these « passing » modes and smooth considerably the frequency dependence of the transmission coefficient. This smoothing conjugated with strong damping of the dissipation would probably prevent the observation of the localization phenomena through the transmission peaks even at high frequency, except for the special situations described in section 3.

Many physical systems can be put into correspondence with the electrical network described here.

Vibrations of random masses corresponds to the purely reactive case while the electrical resistance could describe the viscosity of phonons coming from the anharmonic *normal* collisions or, more generally, inelastic scattering. Mechanics or linearized hydrodynamics have electrical network analogues. The recent proposal [19] to observe localization of shallow

water waves by a random bottom belongs to the class of random impedance problem in one or two dimensional networks. Since the frequency dependence of the localization length is even more divergent,  $\xi \sim \exp(1/\omega^2)$ , [16] in two dimensions the viscous length will be shorter, preventing the observation of the localization phenomena at low frequency.

**Appendix.**

DERIVATION OF  $\langle \ln T \rangle$ . — Starting from (14) we obtain two different systems coupling respectively  $(A_0, B_0, r)$  and  $(A_0, B_0, t)$ :

$$\begin{cases} A_0 + B_0 = 1 + r \\ A_0 e^{-i\phi} + B_0 e^{i\phi} - r(e^{ik} - i\omega C\bar{Z}g_1) = e^{-ik} - i\omega C\bar{Z}g_1 \end{cases} \quad (A.1)$$

and

$$\begin{cases} t e^{ik(N+1)} + aA_0 - bB_0 = 0 \\ t e^{ikN} + cA_0 - dB_0 = 0 \end{cases} \quad (A.2)$$

where  $a, b, c, d$  are defined by :

$$\begin{aligned} a &\equiv e^{-i(N+1)\phi} S_1 - e^{i(N+1)\phi}(1 + S_2) \\ b &\equiv e^{i(N+1)\phi} S_3 + e^{-i(N+1)\phi}(1 - S_2) \\ c &\equiv e^{-iN\phi} S_1 - e^{iN\phi}(1 + S_2) \\ d &\equiv e^{iN\phi} S_3 + e^{-iN\phi}(1 - S_2) \end{aligned}$$

and

$$S_1 \equiv \sum_{p=1}^N \xi_p e^{2ip\phi} \quad S_2 \equiv \sum_{p=1}^N \xi_p \quad S_3 \equiv \sum_{p=1}^N \xi_p e^{-2ip\phi}.$$

Eliminating  $r$  and  $t$  in (A.1) and (A.2) one obtains :

$$\begin{cases} A_0(e^{-i\phi} - e^{ik} + iC\omega\bar{Z}g_1) + B_0(e^{i\phi} - e^{ik} + iC\omega\bar{Z}g_1) = e^{-ik} - e^{ik} \\ A_0(a - c e^{ik}) + B_0(d e^{ik} - b) = 0. \end{cases} \quad (A.3)$$

Let  $D$  be the determinant of this system, then the resolution of (A.3) gives

$$A_0 = \frac{2 i \sin k}{D} (b - d e^{ik}) \quad \text{and} \quad B_0 = \frac{2 i \sin k}{D} (a - c e^{ik})$$

and we find the following expression for  $t$  :

$$t e^{ikN} = \frac{4 \sin k \cdot \sin \phi}{D} (1 - S_2^2 + S_1 S_3). \quad (A.4)$$

This result gives the expression of the transfer matrix to the lowest order in  $\xi$ , and, the quadratic terms,  $S_2^2$  and  $S_1 S_3$  in (A.4) are of the second order in the fluctuation  $\xi$ . Actually, we should have to take into account in the expansion (10) of the transfer matrix, the terms  $\xi_n \xi_p$  ( $n \neq p$ ). But for a complete disorder without site correlation where  $\xi_n$  and  $\xi_p$  are independent random variables, the contribution of these terms vanishes after averaging. This is a well-known result for the incoherent scattering in a random medium with the Born approximation where the two sites scattering is destroyed by the averaging of the interference effects and yields finally a cross-section proportional to the impurity concentration.

Substituting the expression of  $D$  into (A.4) one obtains :

$$t e^{ikN} = \frac{4 k \cdot \phi (1 - S_2^2 + S_1 S_3)}{e^{-iN\phi}[(\phi + k)^2(1 - S_2)] + (k^2 - \phi^2)(S_1 e^{-iN\phi} + S_3 e^{iN\phi})} \quad (A.5)$$

where we have done an expansion in  $e^{\pm i\phi}$  and  $e^{\pm ik}$  and the following non restrictive hypothesis :

$$\text{Im } \phi \geq 0.$$

Taking first the squared modulus of (A.5) and afterwards its logarithm :

$$\ln T = \ln \left| \frac{4 \phi k}{(\phi + k)^2} \right|^2 - 2 N \text{Im } \phi + \ln |1 - S_2^2 + S_1 S_3|^2 - \ln \left| 1 - S_2 + \frac{k^2 - \phi^2}{(k + \phi)^2} (S_1 + e^{2iN\phi} S_3) \right|^2 \quad (\text{A.6})$$

the term  $\ln |1 - S_2^2 + S_1 S_3|^2$  gives :

$$- 2 \text{Re}(S_2^2) + 2 \text{Re}(S_1 S_3)$$

which is zero when averaged. The last term in (A.6) gives the contribution :

$$- |S_2|^2 + 2 \text{Re} \left[ \lambda^* \left( \sum_{n=1}^N |\xi_n|^2 e^{-2in\phi^*} + e^{-2iN\phi^*} \sum_{n=1}^N |\xi_n|^2 e^{2in\phi^*} \right) \right]$$

where we have defined  $\lambda \equiv \frac{k^2 - \phi^2}{(k + \phi)^2}$  and we have eliminated the linear terms in  $\xi_n$ , which have zero mean-values and, we have taken into account the fact that the  $\xi_n$  are non-correlated variables.

In the presence of dissipative terms, one can make the assumption  $|\phi| \gg |k|$  in the zero-frequency limit and  $\langle \ln T \rangle$  reduces to :

$$\langle \ln T \rangle = \ln \left| \frac{4 \phi k}{(\phi + k)^2} \right|^2 - 2 N \text{Im } \phi - \langle |S_2|^2 \rangle \quad (\text{A.7})$$

where

$$\begin{aligned} \langle |S_2|^2 \rangle &= \left\langle \sum_{n=1}^N |\xi_n|^2 \right\rangle \\ \langle |S_2|^2 \rangle &= \frac{|\phi|^2}{4} \sum_{n=1}^N \langle |g_n|^2 \rangle \\ \langle |S_2|^2 \rangle &= \frac{|\phi|^2}{4} N \sigma^2(\omega) \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

where the notation  $\sigma^2(\omega)$  was introduced to reflect the fact that  $g_n$  could be  $\omega$ -dependent.

Substituting (A8) in the original formula (A7) leads to :

$$\langle \ln T \rangle = \ln \left| \frac{4 \phi k}{(\phi + k)^2} \right|^2 - 2 L \text{Im } \phi - \frac{N |\phi|^2}{4} \sigma^2(\omega) \quad (\text{A.9})$$

as was given in the text.

If there is no dissipation (purely reactive network), then  $\phi = k$  and the original formula (A5) becomes :

$$t = \frac{1 - S_2^2 + S_1 S_3}{1 - S_2}$$

and

$$\langle \ln T \rangle = - \langle |S_2|^2 \rangle$$

because of the cancellation of  $\langle - 2 \text{Re}(S_2^2) + 2 \text{Re}(S_1 S_3) \rangle$  and then

$$\langle \ln T \rangle = - \frac{N k^2 \sigma^2}{4} \quad (\text{A.10})$$

which is a result given directly by (A9) with  $\phi = k$ .

## References

- [1] AZBEL, M., *Phys. Rev. B* **28** (1983) 4106.  
 [2] DOROKHOV, O. N., *Solid State Commun.* **41** (1982) 431.  
 [3] DOROKHOV, O. N., *Sov. Phys. JETP* **56** (1982) 128.  
 [4] ERDÖS, P. and HERNDON, R. C., *Adv. Phys.* **31** (1982) 65.  
 [5] ISHII, K., *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **53** (1973) 77.  
 [6] O'CONNOR, A. J., *Commun. Math. Phys.* **45** (1975) 63.  
 [7] ZIMAN, T. A. L., *Phys. Rev. Lett.* **49** (1982) 337.  
 [8] ALEXANDER, S., BERNASCONI, J., SCHNEIDER, W. R. and ORBACH, R., *Rev. Mod. Phys.* **53** (1981) 175.  
 [9] AZBEL, M., *Solid State Commun.* **43** (1982) 515.  
 [10] SINAÏ, I. G., *Theor. Verojatn. iee Prim.* **27** (1982) 247; Proceedings of the Berlin Conference on *Mathematical problems in theoretical physics*, Lecture Notes in Physics, eds Schrader, R. Seiler, R. Uhlenbrock, D. A. (Springer Verlag, Berlin) 1982.  
 [11] BRILLOUIN, L., *Wave propagation in periodic structures* (Dover, public. Inc) 1953.  
 [12] DYSON, F. J., *Phys. Rev.* **92** (1953) 1331.  
 [13] ANDERSON, P. W., THOULESS, D. J., ABRAHAMS, E. and FISHER, D. S., *Phys. Rev. B* **22** (1980) 3519.  
 [14] FURSTENBERG, H., *Trans. Am. Math. Soc.* **108** (1963) 377.  
 [15] AZBEL, M., *Phys. Rev. B* **27** (1983) 3901.  
 [16] JOHN, S. and STEPHEN, M. J., *Phys. Rev. B* **28** (1983) 6358.  
 [17] AZBEL, M., *Phys. Rev. Lett.* **51** (1983) 836.  
 [18] LAMBERT, C. J. and THORPE, M. F., *Phys. Rev. B* **26** (1982) 4742 and *B* **27** (1983) 836.  
 [19] GUAZZELLI, E., GUYON, E. and SOUILLARD, B., *J. Physique Lett.* **44** (1983) L-837.
-



C H A P I T R E   I I I

FORMULE DE LANDAUER POUR LA CONDUCTANCE THERMIQUE D'UNE  
CHAINE ATOMIQUE DESORDONNEE ET HARMONIQUE - FLUCTUATIONS GEANTES



## I - INTRODUCTION

Dans le chapitre II précédent, nous avons décrit un système désordonné unidimensionnel de taille finie en terme de filtre passe-bas. Il existe, en effet, une fréquence caractéristique  $\omega_c(L)$  dépendant de la taille  $L$  du milieu qui sépare des modes de vibration de basse fréquence (définis par les conditions aux limites (II.8)), c'est-à-dire de grande longueur d'onde (relativement insensibles au désordre) de modes localisés le long de la chaîne. La bande passante ( $\omega < \omega_c$ ) du milieu est donc constituée des modes ballistiques, qui sont les ondes planes usuelles du milieu moyen défini dans le chapitre II. Pour ces modes, le coefficient de transmission est de l'ordre de l'unité et décroît exponentiellement pour  $\omega > \omega_c(L)$ . Au-dessus de  $\omega_c(L)$ , la structure des modes est plus complexe. Ce sont les solutions propres de l'équation du mouvement de la chaîne. Ces modes sont localisés<sup>(1)</sup>, c'est-à-dire que leur enveloppe décroît exponentiellement avec une longueur caractéristique  $\xi$  qui est la longueur de localisation. Le spectre de ces modes est discret ; par conséquent aux fréquences supérieures à  $\omega_c(L)$ , le coefficient de transmission est exponentiellement petit, excepté pour les fréquences correspondant aux modes propres pour lesquelles il devient de l'ordre de l'unité. Quelle est alors la nature des coefficients de transport pour un tel système ? Un élément de réponse est fourni par la formule de Landauer<sup>(2)</sup> (cf. chapitre I) qui relie directement la conductance électrique au coefficient de transmission. Notre ambition dans ce chapitre est de calculer directement la conductance thermique  $G(L,T)$  d'une chaîne atomique désordonnée de taille  $L$  à partir de la formule de Kubo et de la comparer au résultat de Landauer. Nous étudierons ensuite la forme de  $G(L,T)$  suivant la température en évaluant la contribution des deux types de modes : ballistiques et localisés.



II - FORMULE DE LANDAUER POUR LA CONDUCTANCE THERMIQUE D'UNE CHAÎNE DE TAILLE FINIE

Contrairement à la formulation originale de Landauer exposée dans le chapitre I, nous allons établir une relation pour la conductance thermique  $G(L,T)$  à partir de la formule de Kubo. On considère pour cela l'hamiltonien suivant pour la chaîne atomique :

$$H = \sum_j \frac{P_j^2}{2m_j} + \frac{1}{2} \sum_{j,k} D_{j,k} u_j u_k \quad (\text{III.1})$$

où l'indice  $j$  repère la position d'un atome,  $P_j$  sa quantité de mouvement,  $u_j$  l'amplitude de son déplacement et  $m_j$  sa masse considérée comme une variable aléatoire. On suppose un couplage entre premiers voisins avec une constante de rappel  $W$  uniforme, de telle sorte que :

$$D_{j,k} = -W(\delta_{j,k-1} - 2\delta_{j,k} + \delta_{j,k+1}) \quad (\text{III.2})$$

L'hamiltonien (III.1) peut alors être écrit sous la forme usuelle :

$$H = \frac{L}{2\pi} \sum_k \hbar\omega(k) [a^+(k)a(k) + \frac{1}{2}] \quad (\text{III.3})$$

où  $L$  s'exprime ici et dans ce qui suit en unité de pas du réseau  $a$  et où les opérateurs  $a(k)$  et  $a^+(k)$  sont obtenus à partir de la transformation :

$$u_j = \frac{L}{2\pi} \int dk \left( \frac{\hbar}{m_j 2\omega(k)} \right)^{1/2} [u_j(k)a(k) + u_j^*(k)a^+(k)] \quad (\text{III.4})$$

et

$$P_j = -i \frac{L}{2\pi} \int dk \left( \frac{\hbar\omega(k)m_j}{2} \right)^{1/2} [u_j(k)a(k) - u_j^*(k)a^+(k)] \quad (\text{III.5})$$

De plus, les composantes de Fourier  $u_j(k)$  satisfont l'équation du mouvement usuel des phonons :

$$W [u_{j+1}(k) - 2u_j(k) + u_{j-1}(k)] = -m_j \omega^2(k) u_j(k) \quad (\text{III.6})$$

Soit  $J$  le flux d'énergie total à travers la chaîne de taille  $L$ . Il est donné par la somme (cf. Appendice III.1) :

$$J = \frac{W}{2L} \sum_{n=0}^{L-1} (u_{n-1} - u_{n+1}) \cdot \frac{p_n}{m_n} \quad (\text{III.7})$$

où  $u_n$  et  $p_n$  sont les quantités définies par les relations (III.4) et (III.5). On peut donc écrire :

$$J = -i \frac{\hbar v^2}{4L} \sum_{n=0}^{L-1} \int dk dk' \left( \frac{\omega(k')}{\omega(k)} \right)^{1/2} [ (u_{j-1}(k) - u_{j+1}(k)) a(k) + (u_{j-1}^*(k) - u_{j+1}^*(k)) a^\dagger(k) ] [ u_j(k') a(k') - u_j^*(k') a^\dagger(k') ] \quad (\text{III.8})$$

D'autre part une extension de la formule de Kubo de la conductivité à la conductance  $G(L,T)$  donne :

$$G(L,T) = \frac{1}{T} \int_0^\infty dt \int_0^\beta d\lambda \langle J(0) J(t + i\hbar\lambda) \rangle \quad (\text{III.9})$$

où  $\beta = \frac{1}{kT}$  et  $\langle \dots \rangle$  représente la moyenne thermique, i.e. :

$$\langle J(0) J(t + i\hbar\lambda) \rangle = \frac{\text{Tr} \{ J(0) J(t + i\hbar\lambda) e^{-\beta H} \}}{\text{Tr} (e^{-\beta H})}$$

et  $J(t + i\hbar\lambda) = e^{iHt/\hbar} e^{-\lambda H} J(0) e^{\lambda H} e^{-iHt/\hbar}$

Soit  $|n\rangle$  un ensemble de vecteurs propres associés à  $H$ . On peut alors écrire (III.9) sous la forme :

$$G(L,T) = \frac{\pi}{k_B T^2} \sum_{\ell, n} \delta(\omega_\ell - \omega_n) \langle \ell | J | n \rangle \langle n | J | \ell \rangle \rho_\ell \quad (\text{III.10})$$

où  $\rho_\ell = \frac{e^{-\beta \hbar \omega_\ell}}{\sum_\ell e^{-\beta \hbar \omega_\ell}}$  et  $J = J(0)$

Pour obtenir (III.10), nous avons de plus utilisé la relation

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{it(\omega_n - \omega_\ell)} = 2\pi \delta(\omega_n - \omega_\ell).$$

Les éléments de matrice apparaissant dans (III.10) sont obtenus à partir de (III.8) :

$$\langle \ell | J | n \rangle = \frac{-i\hbar v^2}{4L} \int dk dk' \langle \ell | a^+(k) a(k') | n \rangle \cdot \left[ \sum_{n=0}^{L-1} (u_{j-1}^*(k) - u_{j+1}^*(k)) \cdot u_j(k') - (u_{j-1}(k') - u_{j+1}(k')) u_j^*(k) \right] \quad (\text{III.11})$$

Si  $A(k, k')$  représente le terme entre crochets dans l'expression précédente, alors  $G(T, L)$  s'écrit :

$$G(T, L) = - \frac{\pi \hbar^2 v^4}{16L^2 k_B^2 T^2} \iint dk_1 dk_2 \delta(\omega(k_1) - \omega(k_2)) \iint dk dk' A(k, k') A(k_1, k_2) \cdot \sum_{\ell, n} \langle \ell | a^+(k) a(k') | n \rangle \langle n | a^+(k_1) a(k_2) | \ell \rangle \rho_\ell \quad (\text{III.12})$$

On fait de plus l'hypothèse de phonons de dispersion linéaire  $\omega(k) = v |k|$  de telle sorte que :

$$\delta(\omega(k_1) - \omega(k_2)) = \frac{1}{v} [\delta(k_1 - k_2) + \delta(k_1 + k_2)]$$

On peut alors effectuer dans (III.12) la somme sur  $k_2$  pour obtenir :

$$G(L, T) = - \frac{\pi \hbar^2 v^3}{16L^2 k_B^2 T^2} \int dk_1 \iint dk dk' [A(k, k') A(k_1, k_1) \sum_{\ell} \langle \ell | a^+(k) a(k') | \ell \rangle + n_\ell(k_1) \rho_\ell + A(k, k') A(k_1, -k_1) \sum_{\ell, n} \langle \ell | a^+(k) a(k') | n \rangle \langle n | a^+(k_1) a(-k_1) | \ell \rangle \rho_\ell] \quad (\text{III.13})$$

où  $n_\ell(k_1)$  représente le nombre moyen de phonons de vecteur d'onde  $k_1$  dans l'état d'énergie  $\omega_\ell$ . D'autre part :

$$\sum_{\ell} \langle \ell | a^+(k) a(k') | \ell \rangle = n_\ell(k_1) \rho_\ell = \delta(k - k') \left[ \frac{1}{(e^{\beta \hbar \omega(k)} - 1)(e^{\beta \hbar \omega(k_1)} - 1)} + \delta(k - k_1) \frac{e^{\beta \hbar \omega(k)}}{(e^{\beta \hbar \omega(k)} - 1)^2} \right]$$

$$\text{et } \sum_{\ell, n} \langle \ell | a^\dagger(k) a(k') | n \rangle \langle n | a^\dagger(k_1) a(-k_1) | \ell \rangle \rho_\ell =$$

$$= \delta(k+k_1) \delta(k'-k_1) \frac{e^{\beta \hbar \omega(k)}}{(e^{\beta \hbar \omega(k)} - 1)^2}$$

Si on pose  $x = \beta \hbar \omega(k)$  alors (III.13) devient :

$$G(L, T) = \frac{-\hbar^2 \pi v^3}{16L^2 k_B T^2} \left[ \iint dk dk_1 \frac{1}{(e^{x(k)} - 1)(e^{x(k_1)} - 1)} A(k, k) A(k_1, k_1) + \right. \\ \left. + \int dk \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} [A^2(k, k) + A(k, -k) A(-k, k)] \right]$$

Nous allons montrer ci-après que  $A(k, k)$  est une fonction impaire de  $k$  et donc :

$$G(T, L) = \frac{-\pi \hbar v^3}{16L^2 k_B T^2} \int dk \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} [A^2(k, k) + A(k, -k) A(-k, k)] \quad (\text{III.14})$$

Calcul de  $A(k, k)$  :

$A(k, k)$  est définie d'après (III.11) par :

$$A(k, k) = \sum_{j=0}^{L-1} [(u_{j-1}^*(k) - u_{j+1}^*(k)) u_j(k) - (u_{j-1}(k) - u_{j+1}(k)) u_j^*(k)]$$

Le terme entre crochets, ou plutôt sa partie imaginaire, est l'expression du courant local d'énergie pour le mode  $k$ . D'autre part, la conservation de ce courant impose que la quantité entre crochets ne dépende pas du site  $j$  où le courant est évalué. On peut par conséquent prendre pour les  $u_j$  des valeurs obtenues à l'extérieur, dans la région ordonnée, où l'on a :

$$u_j(k) = t(L, k) e^{ik \cdot j}$$

et où  $t(L, k)$  représente l'amplitude de transmission pour une chaîne de taille  $L$  associée au mode  $k$  comme elle a été définie dans la relation (II.8) du chapitre II. On obtient donc :

$$A(k,k) = L [ (t^* e^{-ik(j-1)} - t^* e^{-ik(j+1)}) t e^{ijk} - (t e^{ik(j-1)} - t e^{ik(j+1)}) t^* e^{-ikj} ]$$

Soit finalement :

$$A(k,k) = 4i L \sin k |t(L,\omega)|^2 \quad (\text{III.15})$$

D'autre part, on remarque sur cette expression que  $A(k,k)$  est bien une fonction impaire de  $k$ .

Calcul de  $A(k,-k)$  :

Il faut prendre garde au fait que lorsque l'on considère une valeur  $u_j(k)$  à l'extérieur de la chaîne désordonnée de taille  $L$ , i.e. dans les deux supports semi-infinis ordonnés qui connectent le milieu aux réservoirs de phonons à l'équilibre thermique, les conditions aux limites ne sont pas les mêmes. C'est-à-dire que l'on doit prendre:

$$u_j(-k) = e^{-ijk} + r^* e^{ijk}$$

où  $r$  est ici l'amplitude de réflexion. On peut alors évaluer  $A(k,-k)$  :

$$\begin{aligned} A(k,-k) &= [ t^* e^{-ik(j-1)} - t^* e^{-ik(j+1)} ] \cdot (e^{-ikj} + r^* e^{ikj}) - \\ &- [ e^{-ik(j-1)} - e^{-ik(j+1)} + r^* (e^{ik(j-1)} - e^{ik(j+1)}) ] t^* e^{-ikj} \end{aligned}$$

Soit

$$A(k,-k) = 4i L r^* t^* \sin k \quad (\text{III.16})$$

De façon évidente, on a :  $A(-k,k) = -A^*(k,-k)$ .

En combinant (III.14), (III.15) et (III.16), on obtient finalement pour  $G(L,T)$  :

$$G(L,T) = \frac{\pi \hbar^2 v^3}{k_B T^2} \int dk \frac{e^x}{(e^x - 1)^2} (\mathcal{T}^2 + \mathcal{R}) \sin^2 k$$

où  $\mathcal{T} = |t|^2$  est le coefficient de transmission, et  $\mathcal{R} = |r|^2$  celui

de réflexion, tels que  $\mathcal{R} + \mathcal{C} = 1$ . On obtient :

$$G(L, T) = \frac{\pi k_B^2 T}{\hbar} \int dx \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} \mathcal{C}(\omega, L)$$

soit

$$G(L, T) = \pi k_B \int_0^\infty d\omega E\left(\frac{\hbar\omega}{k_B T}\right) \mathcal{C}(\omega, L) \quad (\text{III.17})$$

où

$$E(x) = \frac{x^2 e^x}{(e^x - 1)^2} .$$

(III.17) est l'équivalent pour la conductance thermique des phonons de la formule de Landauer pour les électrons telle qu'elle a été obtenue par exemple par Azbel<sup>(3)</sup>.

Pour finir ce paragraphe sur l'expression de  $G(L, T)$ , je voudrais donner une démonstration un peu plus simple de la relation (III.17), en formulant le problème du transfert de chaleur à travers la chaîne de taille  $L$  d'une manière similaire à celle utilisée pour calculer le courant à travers une jonction tunnel. Pour cela, on considère comme précédemment que le système est en contact à chacune de ses extrémités avec des sources de phonons qui sont des corps noirs respectivement aux températures  $T$  et  $T + dT$ . La contribution au courant total à travers la chaîne des phonons d'énergie  $\omega$  allant de gauche à droite est donnée par :

$$\underline{I} = \frac{1}{2} \hbar\omega v g_1(\omega) n(\omega, T + dT) \mathcal{C}(\omega, L) \quad (\text{III.18})$$

où  $g_1(\omega) = \frac{1}{\pi v}$  est la densité d'états des phonons et  $v$  leur vitesse. Si on fait le bilan des courants en soustrayant à  $\underline{I}$  la partie  $\underline{I}$  se propageant de droite à gauche, on obtient alors directement la relation (III.17) pour la conductance  $G(T, L)$ .

Comparons maintenant la relation (III.17) et la formule initiale de Landauer donnée par exemple, par la relation (I.8) du chapitre I. Cette dernière donne une valeur de  $G$  proportionnelle à  $\frac{\mathcal{C}}{R}$  au lieu de  $\mathcal{C}$  comme dans (III.17). La forme en  $\frac{\mathcal{C}}{R}$  est plus réconfortante puisque dans la limite  $\mathcal{C} = 1$  d'une barrière parfaitement transparente, la conductance  $G$  devient infinie. Mais d'autre part, il nous faut

insister à nouveau sur les hypothèses qui sous-tendent notre calcul de l'expression (III.17). Nous avons supposé que le milieu désordonné était en contact à chacune de ses extrémités avec un bain de phonons à l'équilibre thermique. De fait, nous avons aussi supposé que tous les processus inélastiques de thermalisation des phonons et donc toute l'énergie Joule est dissipée dans les réservoirs et non dans le milieu lui-même. La seule contribution de la barrière est d'introduire via ses propriétés de réflexion et de transmission une dissymétrie dans les courants de phonons. Par conséquent, la conductance  $G$  donnée par (III.17) prend en compte non seulement la contribution de la barrière seule (qui est le terme  $\frac{C_0}{R}$  de Landauer), mais aussi la contribution des termes de contact entre le système et les réservoirs qui produisent une résistance finie et cela même si la barrière devient totalement transparente pour les phonons s'y propageant, ce qui élimine la divergence de  $G$ .

On peut comprendre la différence entre ces deux expressions de la résistance par le petit calcul suivant illustré par la figure (III.1). Sur cette figure, les deux milieux 1 et 2 représentent les bains de phonons aux températures  $T + \Delta T$  et  $T$  et l'interface décrit l'existence de la barrière qu'est le milieu désordonné caractérisé par  $\mathcal{C}$  et  $\mathcal{R}$ . Enfin, la résistance thermique dans chacun des milieux est représentée par une droite de pente  $\kappa$  (conductivité thermique). La résistance de la barrière seule est  $R_B$  tandis que les contacts, c'est-à-dire les conditions aux limites associées à la présence de l'interface séparant deux milieux à l'équilibre thermique introduisent une résistance supplémentaire  $R_2$ . Celle-ci provient de l'impossibilité de thermaliser les phonons au voisinage de l'interface à l'intérieur d'une tranche d'épaisseur le libre parcours moyen élastique  $\lambda$  des phonons. La résistance totale du système est  $R_T$  donnée par (III.17), soit  $R_T = \frac{1}{cv\mathcal{C}}$  ( $c$  = chaleur spécifique,  $v$  = vitesse du son). La résistance  $R_2 = \lambda/\kappa = 1/cv$  et donc, puisque  $R_T = R_B + R_2$  (association en série), la résistance  $R_B$  de la barrière seule est donnée par :

$$R_B = R_T - R_2 = \frac{1}{cv} \frac{\mathcal{R}}{\mathcal{C}}$$

qui devient effectivement nulle pour une barrière parfaitement transparente.

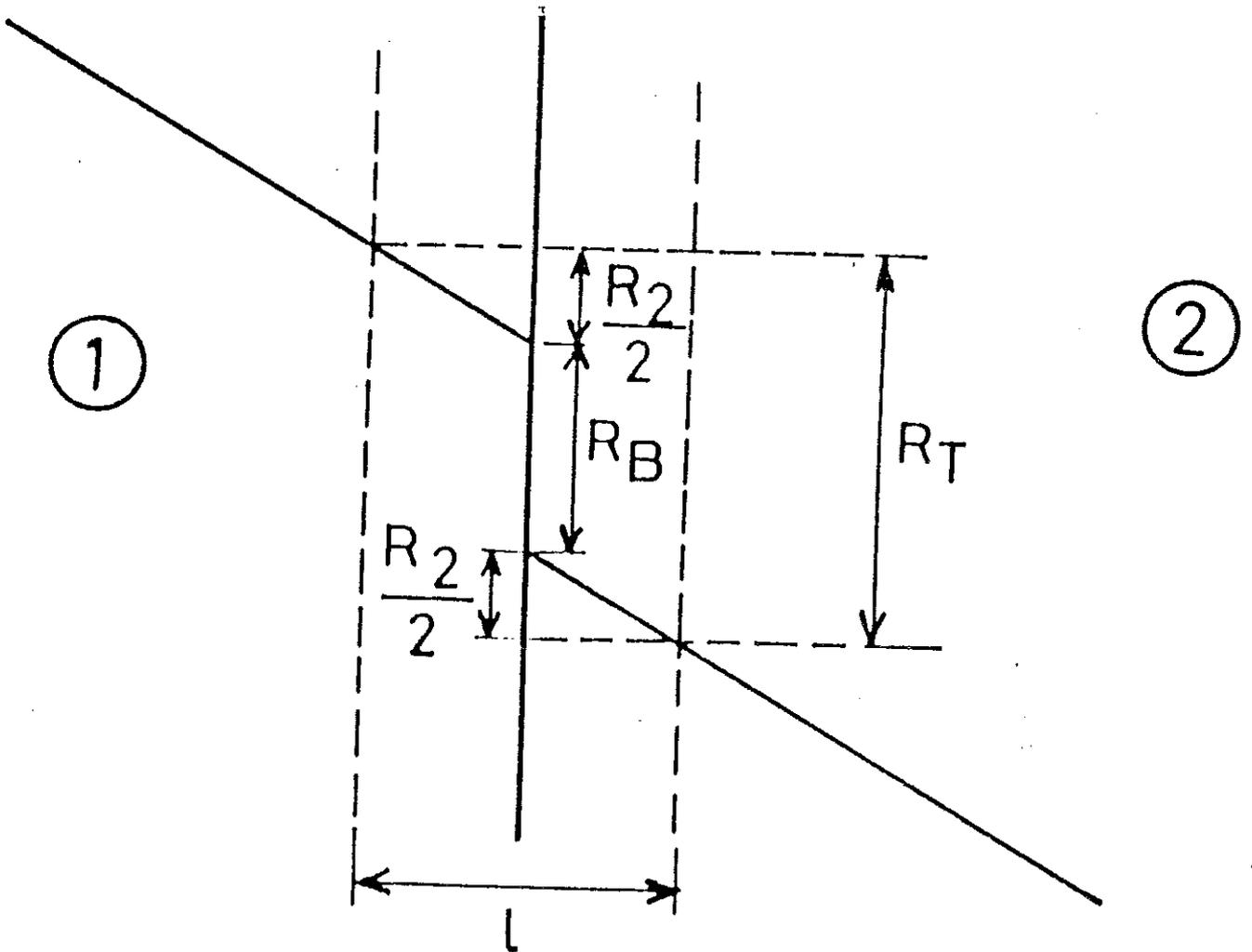


Fig. III.1 : Géométrie utilisée pour la formule de Landauer

La relation obtenue par la formule de Kubo prend donc en compte la résistance totale du système et non pas de la barrière seulement comme le fait la formule de Landauer. Expérimentalement, c'est plus satisfaisant puisque la résistance mesurée est la résistance totale.

Notons que ce raisonnement s'applique tout aussi bien au cas d'un système électronique. Enfin, une expression de la conductance proportionnelle à  $\mathcal{G}$ , i.e. donnant une limite finie pour le cas d'une barrière parfaitement transparente, nous permet d'attendre la limite de Casimir. Celle-ci correspond à un libre parcours moyen infini, c'est-à-dire à l'échange de phonons ballistiques entre les deux réservoirs maintenus aux températures  $T + \Delta T$  et  $T$ . Le flux de phonons est alors fini, mais dans une limite évidemment non ohmique.



### III - EXPRESSION DU COEFFICIENT DE TRANSMISSION : MODELE D'AZBEL

Dans le chapitre II précédent, nous avons obtenu par un développement de perturbation une expression du coefficient de transmission dont le domaine de validité était limité à la bande passante  $[0, \omega_c]$  du système désordonné. C'est-à-dire que dans ce calcul le coefficient de transmission obtenu est limité aux modes ballistiques. A plus haute fréquence ( $\omega > \omega_c$ ), il n'existe pas d'expression analytique du coefficient de transmission. Ce n'est qu'au moyen de simulations numériques qu'Azbel<sup>(1)</sup> a observé des résonances très localisées dans le coefficient de transmission (cf. fig. III.2) émergeant d'un fond continu quasi nul. Les fréquences  $\omega_v$  discrètes de ces résonances correspondent aux modes propres localisés de la chaîne. De plus, on remarque sur ces simulations que la largeur des résonances du coefficient de transmission varie exponentiellement avec la taille du système. Ceci a conduit Azbel à proposer une expression du produit du coefficient de transmission  $\mathcal{T}_v$  par la largeur  $\delta\varepsilon_v$  de la forme :

$$\mathcal{T}_v \delta\varepsilon_v \approx \exp \left\{ - \frac{L+2\Lambda_v}{\xi_0} \right\} \quad (\text{III.19})$$

où  $\Lambda_v$  est une variable aléatoire qui mesure le long de la chaîne la distance entre le maximum du mode localisé et le centre de l'échantillon.  $\xi_0$  est la longueur de localisation, constante dans le cas des électrons. Le sens de la relation (III.19) est clair. Le coefficient de transmission associé à un mode résonnant sera d'autant plus grand que celui-ci sera localisé au centre de la chaîne de façon à maximiser la probabilité de la traverser par effet tunnel. D'autre part les modes sont supposés distribués uniformément, ce qui se traduit par une loi de probabilité uniforme pour la variable aléatoire  $\Lambda_v$ . En fait, nous montrerons au chapitre IV que ces résultats qualitatifs peuvent être obtenus de manière rigoureuse non pas pour un milieu désordonné, mais pour un milieu supportant un potentiel incommensurable avec le pas du réseau et dont les modes propres, obtenus exactement, sont localisés avec une longueur de localisation identique au modèle de Lloyd (cf. chapitre II) du système désordonné<sup>(2)</sup>.

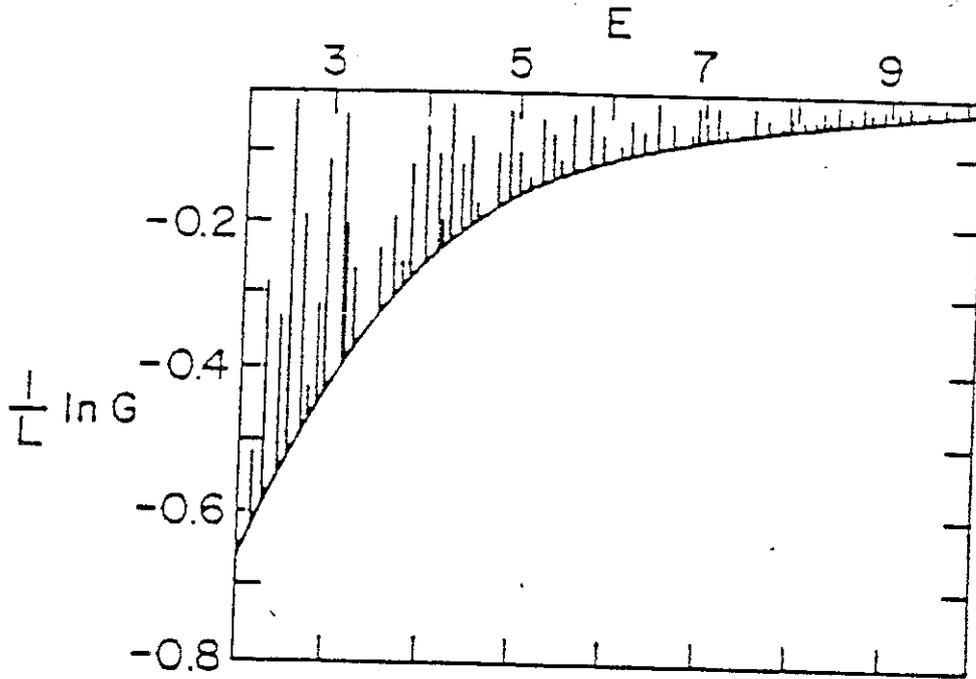


Figure III.2 : Résonance du coefficient de transmission d'après M.Ya Azbel et D.P. Di Vincenzo, Phys. Rev. B 30 (1984) 6877).

Nous nous proposons donc ici d'adapter la relation (III.19) au cas des phonons en prenant pour coefficient de transmission :

$$\mathcal{G}(L, \omega_V) = \exp \left\{ - \frac{L + 2A_V}{\xi(\omega_V)} \right\} \quad (\text{III.20})$$

La longueur de localisation  $\xi(\omega_V)$  qui maintenant dépend de la fréquence, est obtenue à partir de la relation (II.10) :

$$\xi(\omega) = \frac{8\omega_D^2}{\pi^2 \sigma_M^2 \omega^2} \quad (\text{III.21})$$

Dans cette expression,  $\xi$  est mesurée en unité  $a$  du pas du réseau,  $\omega_D$  est la fréquence de Debye et  $\sigma_M$  la variance de la distribution des masses. On peut en déduire la fréquence caractéristique  $\omega_c(L)$  de la bande passante du système définie par  $\xi(\omega_c) \simeq L$ , soit :

$$\omega_c(L) = \frac{2\sqrt{2}\omega_D}{\pi\sigma_M\sqrt{L}} \quad (\text{III.22})$$

Donc pour calculer  $G(L, T)$  d'après la relation (III.17), nous allons devoir distinguer deux régimes en température suivant que  $T$  sera supérieure ou inférieure à

$$T^*(L) = \frac{\hbar\omega_c(L)}{k_B}$$

IV - LES DEUX REGIMES DE CONDUCTANCE THERMIQUE

A. Universalité de G(T,L) à basse température pour T < T<sup>\*</sup>.

Pour des températures inférieures à T<sup>\*</sup>, les modes qui participent à la conduction thermique sont ballistiques. Supposons donc, tout d'abord, que le coefficient de transmission est un pour  $\omega < \omega_c$  et qu'il est nul au-dessus. On obtient donc :

$$G(T,L) \approx k_B \int_0^{\omega^*} \frac{d\omega}{2\pi} E \left( \frac{\hbar\omega}{k_B T} \right) \quad (\text{III.23})$$

qui fournit les deux régimes asymptotiques suivants :

$$G(T,L) \begin{cases} \frac{\pi}{3} \frac{k_B^2 T}{\hbar} & \text{si } T < T^* \\ \frac{k_B^2 T^*}{2\pi\hbar} & \text{si } T > T^* \end{cases} \quad (\text{III.24})$$

D'emblée un point remarquable apparaît sur la forme de G telle que la donne (III.24) (cf. figure (III.3)). A basse température, G est une fonction universelle de la température en ce sens que la pente de G ne dépend d'aucune des caractéristiques du système (forme du désordre, constante de rappel,...). C'est-à-dire que  $k_B^2/\hbar \approx 1,81 \cdot 10^{-12} \text{ W/K}^2$  définit une échelle naturelle et universelle pour mesurer la conductance thermique. Ce comportement est à rapprocher du régime universel mis en évidence pour la conductance électrique qui fournit l'échelle naturelle  $e^2/\hbar$  (cf. chapitre I). La forme universelle de G(T,L) se comprend aisément à partir d'arguments simples. En effet, la formule cinétique pour la conductivité thermique s'écrit  $\kappa = \frac{1}{3} C v \ell$ , où C est la chaleur spécifique, v la vitesse du son et  $\ell$  le libre parcours moyen de transport des phonons. A une dimension, la conductance thermique s'écrit  $\sigma = \frac{\kappa}{L} = \frac{C v \ell}{3L}$ . Or à basse température, les phonons sont ballistiques, i.e.  $\ell \approx L$  et à une dimension  $C \propto v^{-1}$ , par conséquent, G devient une fonction universelle de T indépendante des caractéristiques du milieu.

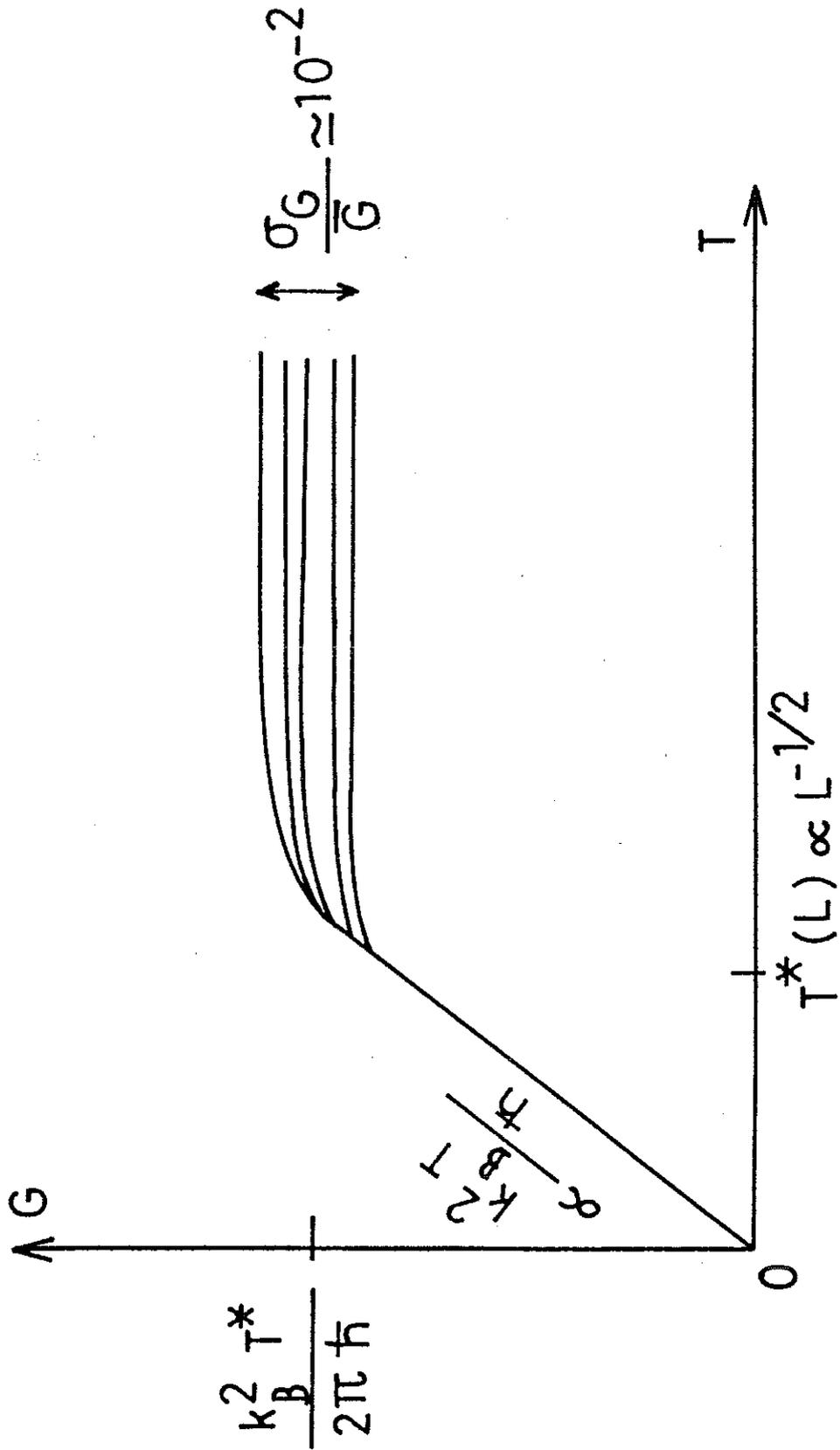


Fig. III.3 : Conductance thermique  $G$  en fonction de la température

Allons maintenant au-delà de la relation (III.23), en évaluant exactement  $G(T,L)$  à partir de la forme (III.20) du coefficient de transmission. En transformant l'intégrale de (III.17) en une somme discrète sur tous les états, on obtient :

$$G(T,L) = \frac{k_B}{2\pi} \sum_{\nu} \frac{1}{L g(\omega_{\nu})} E \left( \frac{\hbar\omega_{\nu}}{k_B T} \right) \exp \left\{ - \frac{L+2\Lambda_{\nu}}{\xi(\omega_{\nu})} \right\} \quad (\text{III.25})$$

$G$  donnée par (III.25) est maintenant une somme de variables aléatoires ayant chacune une distribution distincte. D'autre part, la fonction d'Einstein n'a de valeur notable que pour  $\hbar\omega/k_B T < 1$ . Les modes étant supposés distribués uniformément avec une séparation moyenne  $2\omega_D/L = 2\pi \nu/L$ , le nombre de modes qui contribue à la somme (III.25) est  $LT/2\theta_D$  où  $\theta_D$  est la température de Debye. Donc dans la limite  $T \gg 2\theta_D/L$ , il y a suffisamment de termes dans la somme (III.25) pour appliquer le théorème de la limite centrale à  $G$  ou plus précisément son extension à des sommes de variables aléatoires ayant des lois de distribution distinctes. Cette extension, qui constitue le théorème de Lindenberg<sup>(3)</sup>, permet de montrer que  $G(T,L)$  obéit encore à une loi normale donc entièrement caractérisée par sa valeur moyenne  $\bar{G}$  et sa variance  $\sigma_G^2$  donnée par la somme des variances de chaque terme. Les expressions de  $\bar{G}$  et  $\sigma_G^2$  sont dans la publication reproduite à la fin de ce chapitre. Pour  $\bar{G}$ , on obtient les deux régimes décrits par (III.24) à part une modification du préfacteur pour l'expression obtenue à haute température ( $T > T^*$ ),  $\frac{\sqrt{\pi}}{3} \cdot (\sqrt{2} - 1)$  au lieu de 1. Donc à basse température ( $T < T^*$ ) le régime universel de conductance en  $k_B^2 T/\hbar$  discuté précédemment reste vrai en moyenne. Plus surprenant est le comportement des fluctuations relatives de conductance, mesurées par  $\sigma_G/\bar{G}$ . En effet, à haute température ( $T > T^*$ ), on a  $\sigma_G/\bar{G} \propto (\theta_D/T^*)^{1/2} L^{1/2}$ . Or  $T^* \propto L^{-1/2}$ , donc  $\sigma_G/\bar{G} \propto L^{-1/4}$ . Les fluctuations relatives s'éteignent donc beaucoup plus lentement avec la taille  $L$  du système que pour la loi limite centrale ( $\sigma_G/\bar{G} \propto L^{-1/2}$ ) usuelle. L'origine de ces "fluctuations géantes" se trouve dans le comportement exponentiel de la variable aléatoire  $\mathcal{E}(\omega_{\nu})$  donné par (III.20). On obtient en effet une variance  $\sigma_G \approx \theta_D^{1/2} (\bar{G}/L)^{1/2}$ , ou de façon équivalente  $\sigma_G/\bar{G} \propto 1/\sqrt{L\bar{G}}$ . Pour  $T < T^*$ ,  $\bar{G}$  est indépendante de  $L$ , et on obtient le régime standard usuel, alors que pour  $T > T^*$  la dépendance de  $\bar{G}$  avec la taille fournit le comportement anormal.

Notons pour finir, que dans le calcul de  $\bar{G}$ , ce sont bien sûr les modes ballistiques, autrement dit ceux de la bande passante qui fournissent la contribution principale à la conductance, ce qui justifie d'ailleurs l'emploi de l'expression (III.21) pour longueur de localisation. Par contre, ce sont les modes localisés qui sont à l'origine des "fluctuations géantes" observées sur le plateau.



## V - CONCLUSION

Pour clore ce chapitre, j'aimerais discuter des conditions d'éventuelles observations de cette amplification des fluctuations. Il nous faut donc définir des critères raisonnables concernant l'unidimensionnalité du système. Tout d'abord, les seuls modes de phonons excités doivent être de vecteurs d'onde longitudinaux. Si  $d$  est le diamètre de la fibre, on s'attend alors à être dans ce régime pour des températures inférieures à  $\theta_D/d$ , et donc pour voir le plateau il faudrait des fibres de diamètre  $d \leq \theta_D/T^*$  (où  $T^*$  qui varie avec la taille du système est donnée par (III.23)), soit  $d$  de l'ordre de quelques  $10^2$  distances interatomiques. Une seconde condition est que la longueur de localisation  $\xi(\omega)$  soit supérieure au diamètre de la fibre afin de ne pas créer de modes localisés transverses. Celle-ci est remplie puisque nous avons remarqué que la contribution dominante provient des modes ballistiques pour lesquels  $\xi(\omega) \sim L \gg d$ . Enfin, il faut que les phonons de basse fréquence soient ballistiques, i.e. que leur réflexion sur les parois soit spéculaire et non diffuse. Cette condition sera réalisée si la longueur d'onde des phonons est supérieure aux rugosités de la surface ce qui est le cas à des températures de l'ordre de 1 K où la longueur d'onde des phonons mis en jeu est de l'ordre du micron. Moyennant ces conditions, on peut évaluer numériquement les grandeurs pertinentes de notre modèle. Si l'on prend une fibre de longueur  $L = 1$  cm, avec  $\theta_D = 300$  K et  $\sigma_M^2 = 10^{-2}$ , on trouve  $T^* \approx 5$  K, et cela pour des conductances thermiques  $G \approx 10^{-12}$  WK<sup>-1</sup> petites mais mesurables.



APPENDICE III.1



Calcul du flux d'énergie total pour la chaîne de longueur L :

Partons d'un modèle continu pour la propagation de l'énergie le long d'une chaîne désordonnée. Macroscopiquement, on peut écrire une équation locale pour la conservation de l'énergie :

$$\frac{\partial e(x)}{\partial t} + \text{div } j(x) = 0 \quad (1)$$

où  $e(x)$  représente la densité d'énergie en  $x$  et  $j(x)$  le flux d'énergie local en  $x$ . Si on veut maintenant avoir une expression quantique de  $j$  et  $e$ , on définit les opérateurs  $\tilde{e}$  et  $\tilde{j}$  tels que l'opérateur  $\tilde{e}$  soit donné par l'équation du mouvement :

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{e}}{\partial t} = [\tilde{e}, H] \quad (2)$$

où  $H$  est l'hamiltonien du système. En combinant (1) et (2) on obtient alors

$$\text{div } \tilde{j}(x) = \frac{i}{\hbar} [\tilde{e}(x), H] \quad (3)$$

Soit,

$$\frac{\partial}{\partial x} \tilde{j}(x) = \frac{i}{\hbar} [\tilde{e}(x), H] \quad (d = 1) \quad (4)$$

Je veux maintenant exprimer  $\tilde{j}(x)$  en fonction des coordonnées de positions et d'impulsions du réseau d'atomes. Partons de l'hamiltonien :

$$H = \sum_i \frac{p_i^2}{2m_i} + V_i \quad (5)$$

où l'énergie potentielle

$$V_i = \frac{1}{2} \sum_{j,k} D_{j,k} u_j u_k \quad \text{et } D_{j,k} \text{ donné par (III.2).}$$

Opérateur  $\tilde{e}(x)$  :

Dans un modèle continu sous-tendant (1),  $\tilde{e}(x)$  est une fonction continue de  $x$ . Pour le relier à l'hamiltonien  $H$  et aux variables sur chaque site  $i$ , on va prendre  $\tilde{e}(x)$  sous la forme :

$$\tilde{e}(x) = \frac{1}{2} \sum_i \{ \Delta(x - q_i) \left( \frac{p_i^2}{2m_i} + v_i \right) + H.c \} \quad (6)$$

où  $\Delta(x - q_i)$  est une fonction qui rend compte du fait que l'on calcule  $\tilde{e}(x)$  en faisant une moyenne sur un petit segment du milieu de taille  $\Lambda$ . Donc  $\Delta(x - q_i)$  est telle que  $\Delta(x - q_i) \ll 1$  si  $|x - q_i| > \Lambda$  (où  $q_i = ia + u_i$  est la variable position pour l'oscillateur en  $i$ ,  $a$  le pas du réseau, et  $u_i$  la valeur à l'équilibre). Enfin, pour que  $\tilde{e}(x)$  représente une densité d'énergie il faut que  $\int_L dx \Delta(x - q_i) = 1$ .

Calcul de  $\frac{i}{\hbar} [ \tilde{e}(x), H ]$  :

((5) + (6)) impliquent que :

$$\begin{aligned} \frac{i}{\hbar} [ \tilde{e}(x), H ] = & - \frac{1}{2} \sum_{ij} \left\{ \left( \frac{1}{i\hbar} [ \Delta(x - q_i), p_j ] \cdot \frac{p_j}{2m_j} + \frac{p_j}{2m_j} \frac{1}{i\hbar} [ \Delta(x - q_i), p_j ] \right) \right. \\ & \left. \left( \frac{p_i^2}{2m_i} + v_i \right) + (\Delta(x - q_i) - \Delta(x - q_j)) \frac{1}{i\hbar} \left[ \frac{p_i^2}{2m_i}, v_j \right] + H.c \right\} \quad (7) \end{aligned}$$

Commutateur  $[ \Delta(x - q_i), p_j ]$  :

En représentation position :  $p_j = \frac{\hbar}{i} \frac{\partial}{\partial q_j}$ . On a

$$\frac{\partial}{\partial x} (f(x)\psi) = \frac{\partial}{\partial x} (f\psi) = \left( \frac{\partial f}{\partial x} \right) \psi + f \frac{\partial \psi}{\partial x} = \left( \frac{\partial f}{\partial x} + f \frac{\partial}{\partial x} \right) \psi \quad \forall \psi$$

Or  $[ f(x), \frac{\partial}{\partial x} ] = - \frac{\partial f}{\partial x}$

donc  $\frac{i}{\hbar} [ \Delta(x - q_i), p_j ] = - \delta_{ij} \frac{\partial \Delta(x - q_i)}{\partial x}$

De plus :

$$\Delta(x-q_i) - \Delta(x-q_j) \approx (q_j - q_i) \frac{\partial \Delta(x-q_i)}{\partial x} + \dots \quad (\text{Taylor})$$

$$\begin{aligned} \text{Soit,} \quad \frac{i}{\hbar} [ \tilde{e}(x), H ] &= \frac{1}{2} \sum_{ij} [ \delta_{ij} \left( \frac{\partial}{\partial x} \Delta(x-q_i) \right) \frac{p_j}{2m_j} + \frac{p_j}{2m_j} \delta_{ij} \left( \frac{\partial}{\partial x} \Delta(x-q_i) \right) ] \cdot \\ &\cdot \left( \frac{p_i^2}{2m_i} + v_i \right) + \sum_{ij} (q_j - q_i) \frac{\partial \Delta(x-q_i)}{\partial x} \frac{1}{i\hbar} \left[ \frac{p_i^2}{2m_i}, v_j \right] + \text{H.C} \quad (8) \end{aligned}$$

En comparant avec (4), on obtient :

$$\begin{aligned} \tilde{J}(x) &= \frac{1}{2} \sum_i \left[ \Delta(x-q_i) \frac{p_i}{2m_i} + \frac{p_i}{2m_i} \Delta(x-q_i) \right] \left( \frac{p_i^2}{2m_i} + v_i \right) + \sum_{ij} (q_j - q_i) \Delta(x-q_i) \frac{1}{i\hbar} \cdot \\ &\cdot \left[ \frac{p_i^2}{2m_i}, v_j \right] + \text{H.C} \end{aligned}$$

Pour avoir l'opérateur flux d'énergie total le long de la chaîne, il faut intégrer sur x :

$$\tilde{J} = \frac{1}{L} \int_L dx \tilde{J}(x)$$

ce qui, compte tenu de la normalisation des fonctions  $\Delta$  nous donne :

$$\tilde{J} = \frac{1}{2L} \left\{ \sum_{i=1}^L \frac{p_i}{m_i} \left( \frac{p_i^2}{2m_i} + v_i \right) + \sum_{ij} (q_j - q_i) \frac{1}{i\hbar} \left[ \frac{p_i^2}{2m_i}, v_j \right] + \text{H.C} \right\} \quad (9)$$

On prend maintenant pour  $v_i$  les formules (III.1) et (III.2) :

$$\begin{aligned} \tilde{J} &= \frac{1}{2L} \left\{ \sum_{i=1}^L \frac{p_i}{m_i} \left[ \frac{p_i^2}{2m_i} + \frac{1}{2} \sum_{j,k} D_{j,k} u_j u_k \right] - \sum_j W u_j \frac{p_i}{m_i} \left[ (j-i)a + (u_j - u_i) \right] \cdot \right. \\ &\left. \cdot (\delta_{j,k-1} - 2\delta_{j,k} + \delta_{j,k+1}) \right\} + \text{H.C} \quad (10) \end{aligned}$$

Dans (10),  $\tilde{J}$  contient deux types de termes :

- i) des termes d'ordre 3 en  $p_i$  ou en  $u_i$
- ii) un terme d'ordre 2.

Si on se place à température suffisamment basse, les amplitudes d'oscillation étant faibles, on va négliger les termes d'ordre 3 pour ne garder que le terme d'ordre 2 :

$$\tilde{J} = - \frac{W}{2L} \sum_{i,j} u_j \frac{p_i}{m_i} [(j-i)a] (\delta_{j,i-1} - 2\delta_{j,i} + \delta_{j,i+1})$$

et donc

$$\tilde{J} = \frac{W}{2L} \sum_{i=0}^{L-1} \frac{p_i}{m_i} (u_{i-1} - u_{i+1})$$

(exprimé en unité  $a$  de la maille du réseau).

REFERENCES

1. M. Ya AZBEL, Phys. Rev. B27, 3901 (1983).
  2. P. LLOYD, J. Phys. C2, 1717 (1969).
  3. W. FELLER, An introduction to probability theory and its applications, 2nd Ed., Wiley series in Probability and Mathematical Statistics (Wiley, New York, 1971), p. 262.
- (\*) Ce calcul est le résultat d'une discussion très enrichissante avec P.E. Wolf.



## Thermal conductance and giant fluctuations in one-dimensional disordered systems

R. Maynard and E. Akkermans

*Centre de Recherches sur les Très Basses Températures et Université Scientifique  
et Médicale de Grenoble, Centre National de la Recherche Scientifique,  
Boîte Postale 166X, 38042 Grenoble Cedex, France*

(Received 14 June 1985)

The thermal conductance for the energy transport through a disordered harmonic chain is calculated by a tunneling expression of the energy current. The dominant contribution comes from quasiballistic phonons for which the localization length is comparable to the size of the chain. A universal regime of conductance in  $k_B T/\hbar$  is obtained at low temperature, while giant fluctuations are predicted at higher temperature. Analogies with electrical conductance are established and conditions for measurements are discussed.

It is well known that one-dimensional disordered systems can support only localized states. This has been established both for electrons and phonons, but the transport property of these disordered chains is a much more intricate problem. The difficulties arise from interference effects of the scattered waves which prevent the use of a quasiclassical approximation of the Boltzmann type. For electrons, an important theoretical effort<sup>1-3</sup> has led to a new formulation of the electrical conductance in terms of the transmission coefficient first proposed by Landauer.<sup>1</sup> In this way, a new temperature dependence of the electrical conductance has been recently proposed by Azbel.<sup>4</sup> The present paper is devoted to the calculation of the temperature  $T$  and size  $L$  dependence of the thermal conductance  $G(L, T)$  of a disordered chain. It constitutes a counterpart of the phonon problem of the electrical conductance. The main difference between electrons and phonons is the existence of the threshold of localization at zero frequency. As a consequence, the localization length diverges strongly at low frequency,<sup>5-9</sup> as  $\omega^{-2}$  for a weakly disordered medium. The main results are the following: There is a characteristic frequency  $\omega^*$  (and corresponding temperature  $T^*$ ) related to the disorder and the finite size of the chain which separates the phonon into two classes: ballistic and resonant. At low temperature the thermal conductance varies linearly in temperature in a universal non-Ohmic regime independent of disorder, sound velocity, and size. Above  $T^*$ , thermal conductance becomes independent of temperature on average, but for a given sample it has a nonmonotonic variation. The distribution of random conductances obeys a central limit theorem but with giant fluctuations decaying in size as  $L^{-1/4}$ . These results have been established in the elastic scattering approximation. Effects of anharmonicity<sup>10</sup> are expected at higher temperature and will be neglected.

Consider a chain of length  $L$  where the masses of the atoms are independent random variables with average  $\bar{M}$  and variance  $\sigma_M^2$ . At both ends of this disordered chain an elastic continuum is matched which supports elastic waves of the same acoustic impedances as the average chain. A wave of frequency  $\omega$  incident from the left is partially transmitted through the random isotopic chain. The transmission coefficient  $\mathcal{T}(\omega, L)$  is defined as the ratio of the transmitted energy flow to the incident energy flow. O'Connor<sup>11</sup> has established that the random function  $\ln \mathcal{T}(\omega, L)$  obeys the central limit theorem with mean value  $-2L/\xi_0(\omega)$  and variance proportional to  $L$ . At low fre-

quency the localization length  $\xi_0(\omega)$  has been found<sup>5-9</sup> equal to

$$\xi(\omega) = \frac{8\omega_D^2}{\sigma_M^2 \pi^2 \omega^2}, \quad (1)$$

where  $\omega_D$  is the Debye frequency.

This result is obtained by a perturbation expansion to lowest order in the fluctuation of masses and is of the order of the elastic mean free path. The relation  $\xi(\omega^*) = L$  defines a cutoff frequency  $\omega^*$  for a low-pass band filter by  $\omega^* = (2\sqrt{2}\omega_D)/(\pi\sigma_M\sqrt{L})$ .

For low-frequency phonons  $\omega \leq \omega^*$  the transparency is nearly perfect. They propagate ballistically through the chain as through a periodic chain. At higher frequency no analytical expression of  $\mathcal{T}(\omega, L)$  is available. By numerical simulations of this model, Azbel<sup>12</sup> has observed resonance tunneling modes at discrete values of frequency  $\omega_\nu$  emerging from a background of exponentially damped transmission coefficients. Moreover, these resonant eigenstates are not perfectly sharp, but their widths are exponentially small. For electrons, Azbel<sup>13</sup> has quantified these numerical results by a very simple expression of the product of the resonant transmission coefficient  $\mathcal{T}_\nu$  by the width

$$\mathcal{T}_\nu \delta\epsilon_\nu \approx \exp[-(L + 2\Lambda_\nu)/\xi_0],$$

where  $\Lambda_\nu$  is the distance between the maximum of this localized mode  $\nu$  and the center of the sample.  $\Lambda_\nu$  are assumed independent random variables uniformly distributed between 0 and  $L/2$ , an hypothesis supported by the recent work of Gor'kov *et al.*<sup>14</sup> This gives rise to very large fluctuations of the transmission coefficient which will provide sharp structure of thermal conductance. Such fluctuations cannot be smoothed by thermal broadening. We propose to use Azbel's approximation for the transmission coefficient  $\mathcal{T}_\nu$  and to assume, in addition, a uniform separation of the modes:  $\delta\omega_\nu = 2\pi\nu/L$ , where  $\nu$  is the sound velocity:

$$\mathcal{T}_\nu \delta\omega_\nu = \frac{2\pi\nu}{L} \exp\left[-\frac{L + 2\Lambda_\nu}{\xi_0(\omega_\nu)}\right]. \quad (2)$$

Since the contribution of the high frequencies is exponentially small—an exact result first established by O'Connor<sup>11</sup>—we will use the expression (1) of  $\xi_0(\omega_\nu)$  in (2). The random character of this transmission coefficient is now contained in the uniformly distributed random vari-

able  $\Lambda_\nu$ . This does not violate the central limit theorem,<sup>11</sup> since the probability of occurrence of these resonant tunneling modes is vanishingly small for  $L$  large. Moreover, at low frequency the extrapolated  $\mathcal{T}_\nu$  from (2) has the correct functional dependence on  $L$  and  $\omega$ .

The problem of heat transfer can be simply formulated in terms of the transmission coefficient in a way similar to that for conduction through a tunnel junction.

Let us consider the left-hand side of the random chain a blackbody source of phonons at temperature  $T + dT$ , while the right-hand side of the chain is in contact with a blackbody source at temperature  $T$ . The contribution to the thermal current for the phonons  $\omega$  carrying energy from the left to the right is given by

$$I = \frac{1}{2} \hbar \omega v g_1(\omega) n(\omega, T + dT) \mathcal{T}(\omega, L),$$

where  $g_1(\omega) = (\pi v)^{-1}$  is the one-dimensional density of states per unit length, and  $n(\omega, T)$  the Planck distribution. By subtracting the thermal current from the right, one obtains the expression for thermal conductance:

$$G(T, L) = \frac{k_B}{2\pi} \int_0^\infty d\omega E \left[ \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right] \mathcal{T}(\omega, L), \quad (3)$$

where  $E(x) = x^2 e^x (e^x - 1)^{-2}$  is the Einstein specific-heat function. The expression (3) can be analyzed at two levels of approximation. At the simplest level we suppose that only the ballistic phonons ( $\omega < \omega^*$ ) can carry heat ( $\mathcal{T} = 1$ ) and neglect the other contributions ( $\mathcal{T} = 0$ ). Then,

$$G^{(0)}(T, L) = k_B \int_0^{\omega^*} \frac{d\omega}{2\pi} E \left[ \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right], \quad (4)$$

which provides two asymptotic regimes:

$$G^{(0)}(T, L) = \begin{cases} \frac{\pi^2 k_B^2 T}{3 \hbar}, & T < T^* \\ \alpha \frac{k_B^2 T^*}{2\pi \hbar}, & T > T^* \end{cases} \quad (5)$$

where  $T^* = \hbar \omega^* / k_B$ ,  $\alpha = 1$ .

It is remarkable that the low-temperature contribution (5) is a universal function of  $T$  which depends neither on disorder nor on the elastic constant of the chain. This can also be understood from the classical kinetic formula. At one dimension  $G = K/L$ , where  $K$  is the thermal conductivity given by  $K \approx C_1 v l$ , where  $C_1$  is the specific heat per unit length and  $l$  the elastic mean free path. Since  $C_1 \approx v^{-1}$  and  $l \approx L$  for ballistic phonons, the thermal conductance becomes a universal function of  $T$ . It is also surprising that at low temperature  $G$  is size independent, while at the plateau it depends on  $L^{-1/2}$  through  $T^*$ . In neither regime does it obey Ohm's law.

Beyond this crude approximation of ballistic phonons, one can retain, following Azbel,<sup>13</sup> the contribution of the resonant tunneling modes to the thermal conductance. The discrete version of (3) can be written as

$$G(T, L) = \frac{k_B}{2\pi} \sum_\nu \frac{1}{L g_1(\omega_\nu)} E \left[ \frac{\hbar \omega_\nu}{k_B T} \right] \exp \left[ - \frac{L + 2\Lambda_\nu}{\xi(\omega_\nu)} \right], \quad (6)$$

where the random transmission coefficient  $\mathcal{T}_\nu$  from (2) has been used. Now  $G$  is a random function defined by a sum

of random variables independent but nonidentically distributed. The number of terms in the sum (6) is limited by the temperature through the Einstein function. More quantitatively, since the average separation of the modes is  $2\pi v/L = \pi \omega_M/L$ , this number is  $LT/2\Theta_D$ . Therefore, for  $T \gg \Theta_D/L$  we are justified in applying the central limit theorem for the thermal conductance. This is a fundamental property for the conductance at finite temperature. By direct application of the Lindeberg version<sup>15</sup> of the central limit theorem, we established that  $\bar{G}$  obeys a normal law centered at the average conductance  $\bar{G}$  and with a variance  $\sigma_G^2$  given by the sum of the variances of each term. The average conductance is straightforwardly obtained from (6):

$$\bar{G}(T, L) = \frac{k_B}{2\pi} \int_0^{\omega_D} d\omega E \left[ \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right] \frac{\xi(\omega)}{L} e^{-L/\xi(\omega)} \times (1 - e^{-L/\xi(\omega)}), \quad (7)$$

which produces again the two regimes of conductance of the ballistic approximation with a minor correction for the numerical prefactor:  $\alpha = (\sqrt{\pi}/3)(\sqrt{2} - 1)$ . The variance of the transmission coefficient for the resonant mode  $\nu$  is

$$\sigma_\nu^2 = \frac{\xi(\omega_\nu)}{2L} \exp \left[ - \frac{2L}{\xi(\omega_\nu)} \right] \left[ 1 - \exp \left[ - \frac{2L}{\xi(\omega_\nu)} \right] \right] \times \left[ 1 - \frac{\tanh[L/2\xi(\omega_\nu)]}{L/2\xi(\omega_\nu)} \right], \quad (8)$$

and the variance of the thermal conductance  $\sigma_G^2$  is obtained by an integral over the continuous variable  $\omega$ ; one obtains

$$\sigma_G^2 = \left[ \frac{k_B}{2\pi} \right]^2 \int d\omega [L g_1(\omega)]^{-1} E^2 \left[ \frac{\hbar \omega}{k_B T} \right] \sigma^2(\omega). \quad (9)$$

From (8),  $\sigma_\nu^2$  has a maximum around  $\omega^*$ : Below  $\omega^*$  it increases as  $(\omega/\omega^*)^4$ , but above  $\omega^*$  it decreases as  $\omega^{-2} \exp[-2(\omega/\omega^*)^2]$ . The Einstein function determines the relevant range of variation of the frequencies up to  $k_B T/\hbar$  in (9). Then  $\sigma_G^2$  is given by the integrated variance  $\sigma_\nu^2$  from 0 to  $k_B T/\hbar$ . At low temperature  $T < T^*$ , it is easy to obtain the relative fluctuations of the thermal conductance  $\sigma_G/\bar{G}$ , proportional to  $\Theta_D^{1/2} T^{3/2} L^{-1/2} (T^*)^{-2}$  ( $\Theta_D$  is the Debye temperature). When  $T$  increases to be of the order of or greater than  $T^*$ , the relative fluctuations become temperature-independent and proportional to  $(\Theta_D/T^*)^{1/2} \times L^{-1/2}$ . Since  $T^* = \Theta_D \sigma_M^{-1} L^{-1/2}$ , the relative fluctuations of the thermal conductance are proportional to  $\sigma^{1/2} L^{-1/4}$ . These are *giant fluctuations*, because they decay as  $L^{-1/4}$  rather than as  $L^{-1/2}$  for standard fluctuations. The origin of this unusual result must be sought in the exponentiation of the uniformly distributed variables  $\Lambda_\nu$ . This provides  $\sigma_G \approx \Theta_D^{1/2} (\bar{G}/L)^{1/2}$ , and  $\bar{G}$  varies as  $L^{-1/2}$  in this plateau regime. It must be noticed that it is the quasiballistic modes,  $\omega \leq \omega^*$ , which give the dominant contribution to  $\bar{G}$  or  $\sigma_G^2$ . This justifies the approximation of the low-frequency localization length in Eq. (1) in the general expressions given by Eqs. (6) and (9).

The previous analysis applies to the electrical conductance problem with only a few modifications. Following Azbel and Di Vincenzo,<sup>16</sup> the energies of the resonant tunneling states  $\epsilon_\nu$  replace  $\omega_\nu$ , the derivative of the Fermi function  $(-\partial f/\partial \epsilon)_{\epsilon = \epsilon_\nu}$  replaces the Einstein function, while the lo-

calization length  $\xi_0$  is assumed to be energy independent and shorter than  $L$ . Instead of Eq. (6), the electrical conductance  $G_e(T, L)$  can be written

$$G_e(T, L) = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_{\nu} [L\rho_1(\epsilon_{\nu})]^{-1} \left[ -\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right]_{\epsilon=\epsilon_{\nu}} \exp\left[ -\frac{L+2\Lambda_{\nu}}{\xi_0} \right], \quad (10)$$

where  $\rho_1(\epsilon)$  is the density of states per unit length. As for the phonons, if  $T$  is sufficiently high ( $T \gg T_F/L$ , where  $T_F$  is the Fermi temperature), the random electrical conductance  $G_e$  obeys the central limit theorem with mean value  $\bar{G}_e$  and variance  $\sigma_{G_e}^2$ .

The mean value  $\bar{G}_e$  is obtained directly from (10) by averaging the transmission coefficient, which gives, for  $\xi_0 \ll L$ ,

$$\bar{G}_e = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \frac{\xi_0}{L} e^{-L/\xi_0}$$

It must be emphasized that the  $T$  independence of  $\bar{G}_e$  comes both from the double averaging procedure (sampling and thermal) and the non-energy dependence of the localization length while the non-sampling averaged  $G_e$  is found to be temperature dependent in Refs. (13) and (16). The variance  $\sigma_{G_e}^2$  is simply obtained from the same variance  $\sigma_t^2$  of the transmission coefficient as given by (8), but with  $\sigma_t^2$  independent of  $\nu$ :

$$\sigma_{G_e}^2 = \left( \frac{e^2}{2\pi\hbar} \right)^2 \sigma_t^2 \int d\epsilon [L\rho_1(\epsilon)]^{-1} \left[ -\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right]^2. \quad (11)$$

Since the integral over  $\epsilon$  in (11) gives a term proportional to  $T_F/(TL)$  and  $\sigma_t^2 = (\xi_0/2L) \exp(-2L/\xi_0)$ , we obtain finally for the relative fluctuations of the electrical conductance  $\sigma_{G_e}/\bar{G}_e = (T_F/T\xi_0)^{1/2}$ .

These giant fluctuations do not depend on the size  $L$ , while for standard fluctuations one would expect an  $L^{-1/2}$  attenuation. The main difference with phonons is that no states of electrons are ballistic: They are assumed to be restricted to the vicinity of the Fermi energy. These fluctua-

tions established for sample averaging can be measured by varying the chemical potential  $\mu$  of the electron gas. Simply, changing  $\mu$  shifts the derivative of the Fermi distribution ( $-\partial f/\partial E$ ) along the spectrum of the resonant tunneling modes. We can then calculate the reduced correlation function of the conductance:

$$C(\Delta\mu) = \frac{\langle \delta G(\mu + \Delta\mu) \delta G(\mu) \rangle_{av}}{\langle \delta G^2(\mu) \rangle_{av}} = \frac{3}{\sinh^2 x} (x \coth x - 1) \quad (12)$$

where  $x = \Delta\mu/2T$ .  $C(\Delta\mu)$  decreases for high  $\Delta\mu$  as  $(\Delta\mu/T) \exp(-\Delta\mu/T)$ , and then  $T$  appears as the correlation energy for these fluctuations when  $\Delta\mu$  varies. We advance this as a possible explanation of the nonmonotonicity in electrical conductance with changing the chemical potential as observed recently in inversion layers.<sup>17,18</sup>

There are several conditions for experimental observation that must be discussed. First, for realistic values of  $L = 1$  cm,  $\Theta_D = 300$  K and  $\sigma_M = 10^{-2}$  one finds  $T^* = 5$  K. Moreover, the value of the mean thermal conductance  $G$  at the plateau is equal to  $10^{-12}$  WK<sup>-1</sup>. This value is small but measurable: It is equivalent to a thermal conductivity  $K = 10^{-2}$  W m<sup>-1</sup> K<sup>-1</sup> of a thin wire of cross section  $1 \mu\text{m}^2$  and of 1 cm length.

The condition of one dimensionality for a thin fiber must be formulated in the following way. First, the reflection of phonons on boundaries must be specular and not diffuse. This is usually the case at low temperatures  $T \leq 1$  K, where the wavelength of the dominant phonons (typically  $1 \mu\text{m}$ ) is longer than the scale of the roughness of the surface. Secondly, for a section of diameter  $d$  of a fiber one expects dimensional crossover of the density of states over a range of temperature of  $\Theta_D/d$ . For observing the universal regime this implies very thin fibers  $d \leq \Theta_D/T^*$ , which, for the typical material considered previously, limits  $d$  to  $10^2$  atomic distances. Another aspect of the one-dimensional nature is the localization length  $\xi(\omega)$  longer than  $d$ . Actually, this condition is fulfilled since the quasiballistic phonons which provide all the present features have a localization length comparable to  $L$ .

<sup>1</sup>R. Landauer, *Philos. Mag.* **21**, 863 (1970).

<sup>2</sup>P. W. Anderson, D. J. Thouless, E. Abrahams, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **22**, 3519 (1980).

<sup>3</sup>P. W. Anderson, *Phys. Rev. B* **23**, 4828 (1981).

<sup>4</sup>M. Ya. Azbel, A. Hartstein, D. P. Di Vincenzo, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 1641 (1984).

<sup>5</sup>M. Ya. Azbel, *Phys. Rev. B* **28**, 4106 (1983).

<sup>6</sup>O. N. Dorokhov, *Solid State Commun.* **41**, 431 (1982).

<sup>7</sup>O. N. Dorokhov, *Zh. Eksp. Teor. Phys.* **83**, 234 (1982) [*Sov. Phys. JETP* **56**, 128 (1982)].

<sup>8</sup>K. Ishii, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **53**, 77 (1973).

<sup>9</sup>E. Akkermans and R. Maynard, *J. Phys.* **45**, 1549 (1984).

<sup>10</sup>J. Jackle, *Solid State Commun.* **39**, 1261 (1981).

<sup>11</sup>A. J. O'Connor, *Commun. Math. Phys.* **45**, 63 (1975).

<sup>12</sup>M. Ya. Azbel, *Phys. Rev. B* **27**, 3901 (1983).

<sup>13</sup>M. Ya. Azbel, *Solid State Commun.* **45**, 527 (1983).

<sup>14</sup>L. P. Gor'kov, O. N. Dorokhov, and F. V. Prigara, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **84**, 1440 (1983) [*Sov. Phys. JETP* **57**, 838 (1983)].

<sup>15</sup>W. Feller, *An Introduction to Probability Theory and its Applications*, 2nd ed., Wiley Series in Probability and Mathematical Statistics (Wiley, New York, 1971), p. 262.

<sup>16</sup>M. Ya. Azbel and D. P. Di Vincenzo, *Solid State Commun.* **49**, 949 (1984).

<sup>17</sup>R. K. Kwasnick, M. A. Kastner, J. Melngailis, and P. A. Lee, *Phys. Rev. Lett.* **52**, 224 (1984).

<sup>18</sup>N. R. Couch and M. Pepper, *J. Phys. C* **17**, L985 (1984).



C H A P I T R E   I V

MODES DE CONDUCTION DANS LES SYSTEMES ELECTRONIQUES  
UNIDIMENSIONNELS ET DESORDONNES - CALCUL EXPLICITE  
POUR UN MODELE EXACTEMENT SOLUBLE



I - FLUCTUATIONS GEANTES POUR LA CONDUCTANCE ELECTRIQUE

Nous avons vu dans le chapitre précédent comment le comportement exponentiel du coefficient de transmission à travers une chaîne de taille finie L pouvait affecter la conductance et surtout ses fluctuations relatives qui s'écartent notablement du comportement standard  $\sigma_G/\bar{G} \propto L^{-1/2}$ .

Nous allons voir que dans le cas d'un système électronique, ces fluctuations relatives se trouvent encore amplifiées et peuvent expliquer le comportement non monotone de la conductance observé (1) dans des couches d'inversion (MOSFET). Pour cela, considérons un modèle unidimensionnel identique à celui du chapitre III, où les électrons sont soumis à une interaction avec des centres diffuseurs répartis aléatoirement. Les modes propres électroniques sont alors localisés avec une longueur de localisation caractéristique  $\xi_0$  que nous supposons indépendante de l'énergie. Dans l'expression de la conductance électrique, la fonction d'Einstein présente dans le cas des phonons est ici remplacée par la dérivée de la fonction de Fermi de telle sorte que la conductance électrique s'écrit :

$$G_e(T,L) = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \sum_V [L\rho(\epsilon_V)]^{-1} \left( -\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right)_{\epsilon=\epsilon_V} \exp\left\{ -\frac{L+2\Lambda_V}{\xi_0} \right\} \quad (IV.1)$$

où  $\rho(\epsilon)$  est la densité d'états par unité de longueur et  $\Lambda_V$  une variable aléatoire distribuée uniformément entre 0 et L/2. De même que dans le cas des phonons, s'il y a suffisamment de termes dans la somme (IV.1), i.e. dans la limite où la température  $T \gg T_F/L$ , on peut appliquer le théorème limite central à  $G_e$  et donc caractériser la distribution de conductances par sa valeur moyenne  $\bar{G}_e$  et par sa variance  $\sigma_{G_e}^2$ .  $\bar{G}_e$  est obtenue directement à partir de (IV.1) et s'écrit pour  $\xi_0 \ll L$  :

$$\bar{G}_e \approx \frac{e^2}{2\pi\hbar} \frac{\xi_0}{L} \cdot e^{-L/\xi_0} \quad (IV.2)$$

Cette valeur moyenne est indépendante de la température. Cela est dû à

la moyenne prise à la fois sur la distribution des électrons et sur le désordre. Pour n'avoir pas considéré la seconde, Azbel et Di Vincenzo<sup>(2)</sup> conservent une dépendance en température de  $\overline{G}_e$ .

La variance  $\sigma_G^2$  est ici aussi calculée comme la somme des variances  $\sigma_v^2$  de telle sorte que :

$$\sigma_{G_e}^2 = \left(\frac{e^2}{2\pi h}\right)^2 \sigma_v^2 \int d\varepsilon [L\rho(\varepsilon)]^{-1} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right)^2 \quad (\text{IV.3})$$

Nous pouvons alors calculer les fluctuations relatives :

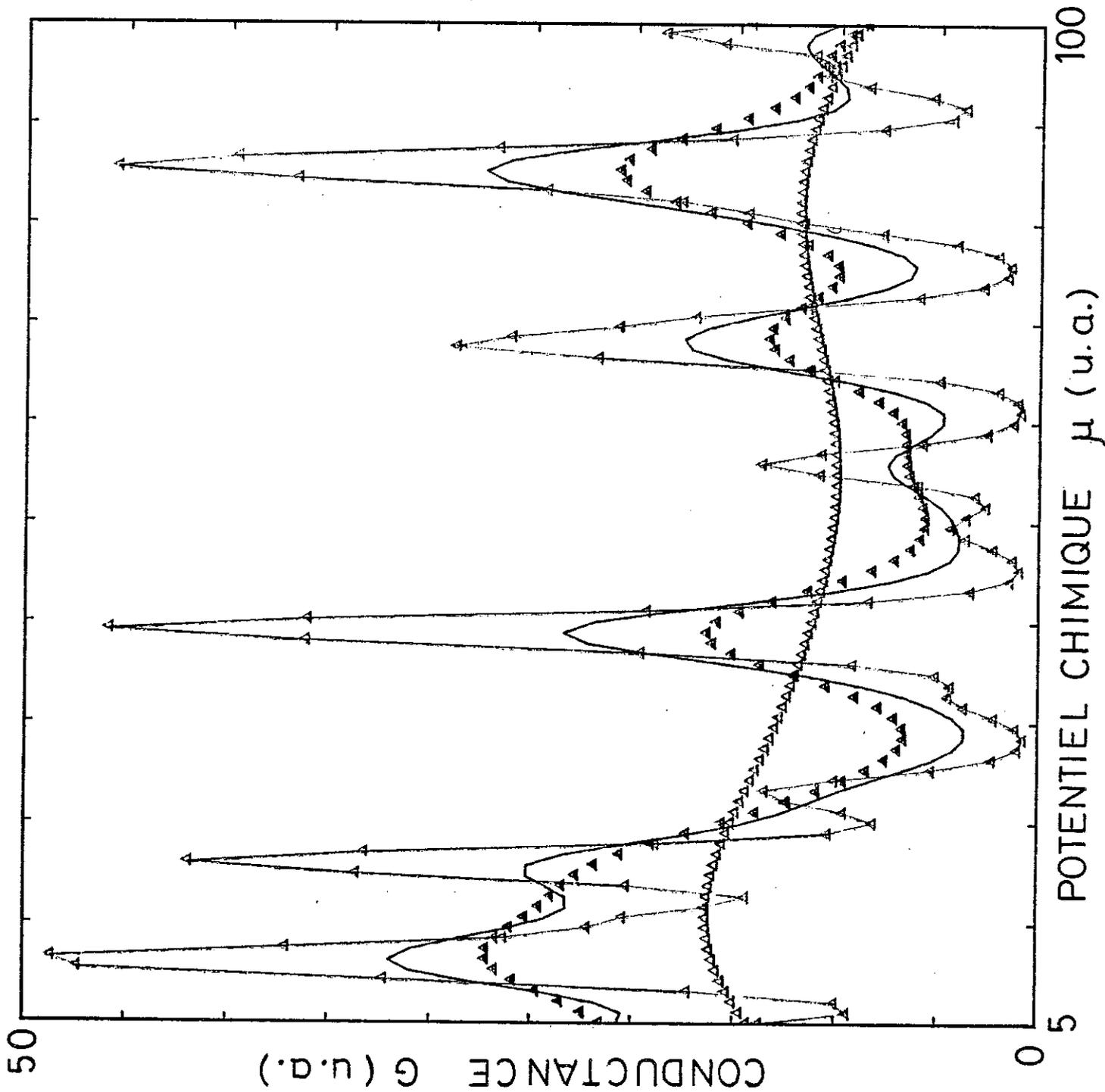
$$\frac{\sigma_{G_e}}{\overline{G}_e} \approx \left(\frac{T_F}{T\xi_0}\right)^{1/2} \quad (\text{IV.4})$$

où  $T_F$  est la température de Fermi. Dans le cas des électrons, ces fluctuations se trouvent donc amplifiées par rapport au cas des phonons de telle sorte qu'elles sont maintenant indépendantes de la taille, i.e. qu'elles ne s'éteignent pas dans la limite d'un système macroscopique où  $L \rightarrow \infty$ . La différence essentielle si on compare avec les phonons est qu'il n'y a pas ici d'équivalent des phonons ballistiques de basse fréquence pour donner la contribution majeure à  $\overline{G}_e$ . Ici, tous les électrons pris en compte dans la conduction ont leur énergie au voisinage de la surface de Fermi.

Le comportement singulier des fluctuations relatives (indépendantes de la taille) pose le problème suivant : dans un phénomène aléatoire, nous devons trouver la bonne variable à partir de laquelle une moyenne d'ensemble garde un caractère prédictif sous peine d'être frustré par l'imprédictibilité du modèle. Or ici, dans notre problème, les fluctuations relatives de conductance étant indépendantes de la taille, on s'attend à ce que la valeur moyenne d'un échantillon n'ait aucune valeur prédictive même dans la limite thermodynamique d'un système infiniment grand ( $L \rightarrow \infty$ ). Notons cependant que ces considérations sont à reprendre en présence d'effets inélastiques introduisant une nouvelle longueur caractéristique  $\lambda_i$ . Par quel mécanisme retrouver une moyenne d'ensemble ? L'énergie caractéristique du système est le potentiel chimique  $\mu$ . D'autre part le comportement du coefficient de transmission en fonction de l'énergie  $\varepsilon_v$  du mode propre est très

erratique et varie entre 0 et 1 suivant les résonances pour une réalisation donnée du désordre. Si on se place à très basse température, typiquement pour des valeurs inférieures à la distance en énergie entre deux modes localisés, alors la fonction  $(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon})$  est très piquée autour du mode  $\epsilon_v = \mu$ . On conçoit donc dans ce cas qu'en faisant varier  $\mu$ , on sélectionne des modes résonants ou non de telle sorte que la conductance électrique associée, donnée par la relation (IV.1), mette en évidence d'importantes fluctuations. Celles-ci, obtenues par simulation numérique, sont reproduites sur la figure (IV.1) à très basse température. Nous avançons ce modèle afin d'expliquer les variations non monotones observées dans la caractéristique de MOSFET obtenue en faisant varier la tension grille  $V_G$ . Cette tension  $V_G$  est directement proportionnelle à la concentration d'électrons dans le système, c'est-à-dire au potentiel chimique  $\mu$ . Les variations observées expérimentalement peuvent donc être directement reliées à ce que l'on observe numériquement. Que se passe-t-il maintenant si on augmente la température ? La dérivée de la fonction de Fermi  $(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon})$  s'élargit tout en diminuant d'amplitude et prend donc en compte un plus grand nombre de modes (on suppose dans tous les calculs de ce chapitre une répartition régulière des niveaux au voisinage du niveau de Fermi avec une séparation entre niveaux  $\Delta \epsilon = \frac{2\pi}{L} \frac{\hbar^2 k_F}{m}$  constante). Donc en variant la température, on doit aussi, à potentiel chimique fixé, observer des fluctuations mesurables sur un même échantillon qui doivent s'éteindre comme l'inverse de la racine carrée du nombre d'états contribuant à la conductance  $G$ , soit  $\sqrt{\frac{\Delta \epsilon}{2T}}$ . Ce sont ces fluctuations de  $G(T)$ , obtenues numériquement, qui sont représentées sur la figure (IV.2). Maintenant, pour savoir si on peut retrouver une moyenne d'ensemble en variant  $\mu$  ou  $T$ , il faut évaluer les fluctuations de conductance.

Fig. IV.2 : Variation de la conductance  $G$  en fonction du potentiel chimique  $\mu$ . Les courbes sont tracées à des températures différentes ( $T = 1$  K à  $T = 10$  K).



II - FLUCTUATIONS DE G(T) et G(μ) - FONCTIONS DE CORRELATIONS

Pour évaluer les fluctuations de conductance et observer leur comportement, nous allons calculer tout d'abord la fonction de corrélation :

$$C(\Delta\mu) = \frac{\langle \delta G(\mu + \Delta\mu) \delta G(\mu) \rangle}{\langle \delta G^2(\mu) \rangle} \quad (\text{IV.5})$$

où  $\langle \dots \rangle$  est la moyenne sur le désordre tandis que  $\delta G = \frac{\hbar}{2} (G - \bar{G})$ .  
D'après (IV.1), on peut s'écrire :

$$\langle \delta G(\mu) \delta G(\mu + \Delta\mu) \rangle = \sum_{\nu, \nu'} (L\rho)^{-2} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right)_{\varepsilon=\varepsilon_{\nu}} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right)_{\varepsilon=\varepsilon_{\nu'}} \langle \delta T_{\nu} \delta T_{\nu'} \rangle \quad (\text{IV.6})$$

où  $T_{\nu} = e^{-L/\xi_0(1+\alpha_{\nu})}$  est le coefficient de transmission associé au mode d'énergie  $\varepsilon_{\nu}$  et où  $\alpha_{\nu}$  est une variable aléatoire distribuée uniformément entre 0 et 1. On définit alors  $\delta T_{\nu} = T_{\nu} - \langle T_{\nu} \rangle$ , où  $\langle T_{\nu} \rangle = \xi_0/L \cdot e^{-L/\xi_0}$ . La relation (IV.6) s'écrit alors :

$$\langle \delta G(\mu) \delta G(\mu + \Delta\mu) \rangle = \sum_{\nu} (L\rho)^{-2} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right)_{\mu} \left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right)_{\mu+\Delta\mu} \langle \delta T_{\nu}^2 \rangle$$

soit :

$$\langle \delta G(\mu) \delta G(\mu + \Delta\mu) \rangle = \frac{1}{2} \frac{\xi_0}{L} e^{-2L/\xi_0} \frac{1}{L\rho T^2} \int_{-\infty}^{+\infty} d\varepsilon \frac{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}}{(1+e^{\beta(\varepsilon-\mu)})^2} \cdot \frac{e^{\beta(\varepsilon-\mu-\Delta\mu)}}{(1+e^{\beta(\varepsilon-\mu-\Delta\mu)})^2}$$

Posons  $\alpha = e^{-\beta\Delta\mu}$  qui est la variable naturelle, on obtient alors après un peu d'algèbre :

$$C(\Delta\mu) = \frac{6\alpha}{(1-\alpha)^2} \left[ \frac{1+\alpha}{1-\alpha} \ln \frac{1}{\alpha} - 2 \right]$$

$$\text{soit } C(\Delta\mu) = \frac{3}{\text{sh}^2 x} \cdot [x \coth x - 1] \quad (\text{IV.7})$$

où  $x = \frac{\Delta\mu}{2T}$ . Si  $x \rightarrow 0$ , i.e. pour  $\Delta\mu \ll T$ , la fonction de corrélation  $C(\Delta\mu)$

tend vers 1, alors que pour  $\Delta\mu \gg T$ ,  $C(\Delta\mu) \underset{x \rightarrow \infty}{\sim} 12 \left( \frac{\Delta\mu}{T} \right) e^{-\Delta\mu/T}$ . La température  $T$  apparaît donc comme l'énergie de corrélation des fluctuations de conductance lorsque  $\Delta\mu$  varie. C'est-à-dire que pour des  $\Delta\mu$  suffisamment grands, de l'ordre de la température  $T$ , les fluctuations de conductance deviennent décorréliées.

Observons maintenant ce qui se passe lorsque sur un même échantillon on fait varier la température à potentiel chimique fixé. On constate sur les résultats numériques présentés sur la figure (IV.3) que la conductance  $G(T)$  fluctue avec la température, mais rejoint la valeur obtenue en moyennant sur le désordre, i.e. sur  $\mu$ . Ici aussi on peut calculer la fonction de corrélation décrivant ces fluctuations :

$$C(\Delta T) = \langle \delta G(T) \delta G(T + \Delta T) \rangle \quad (IV.8)$$

soit

$$C(\Delta T) = \frac{\xi_0}{2L} e^{-2L/\xi_0} \frac{1}{\Delta\varepsilon} \int d\varepsilon \frac{1}{k_B T} \frac{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}}{\left( e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}} + 1 \right)^2} \cdot \frac{e^{\frac{\varepsilon-\mu}{k_B T}}}{\left( e^{\frac{\varepsilon-\mu}{(T+\Delta T)k_B}} + 1 \right)^2} \cdot \frac{1}{(T+\Delta T)k_B}$$

Pour évaluer l'intégrale ci-dessus, on va appliquer la formule de Fermi :

$$\int d\varepsilon \phi(\varepsilon) \left( - \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right)_T = \phi(\mu, T) + \frac{\pi^2}{6} (k_B T)^2 \phi''(\mu, T) + \dots \quad (IV.9)$$

En ne retenant que le premier terme, on obtient alors :

$$C(\Delta T) \approx \frac{\xi_0}{2L} e^{-2L/\xi_0} \cdot \frac{1}{\Delta\varepsilon} \cdot \frac{1}{T+\Delta T} \quad (IV.10)$$

c'est-à-dire une décroissance hyperbolique de la fonction de corrélation bien reproduite numériquement sur la figure (IV.4). En définitive, l'élargissement de la fonction  $\left( - \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \right)$  obtenu en augmentant la température équivaut à une moyenne d'ensemble et nous prédit une valeur de la conductance électrique égale à  $\langle G_e \rangle$  donnée par la relation (IV.2). Néanmoins dans cette étude, nous n'avons pris en compte que la contribution à  $G_e$  due aux modes résonants dans le milieu. C'est justifié à

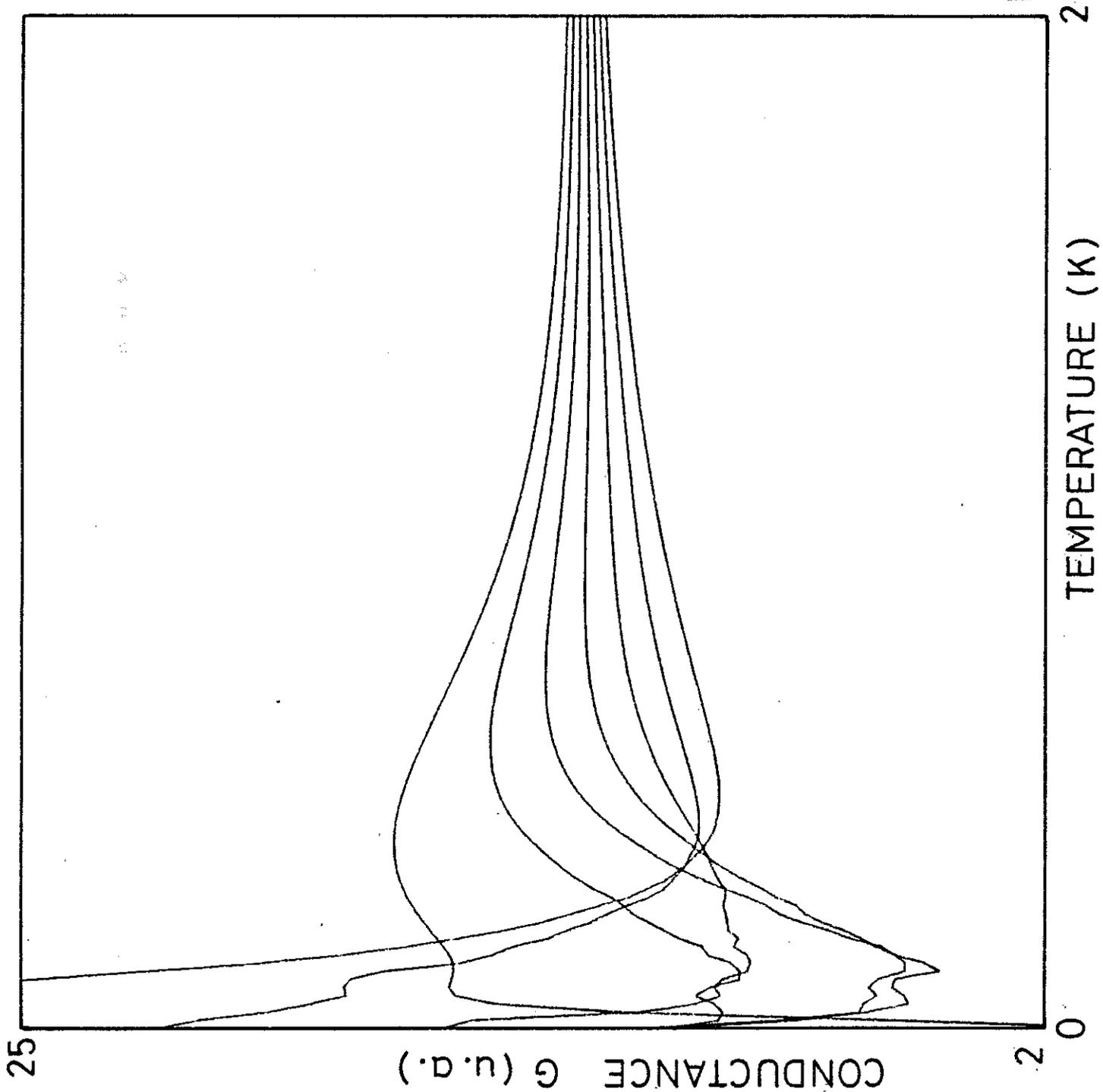


Fig. IV.3 : Variation de la conductance électrique  $G$  en fonction de la température. Les courbes sont tracées à des valeurs différentes du potentiel chimique.



basse température, mais si  $T$  augmente, nous devons prendre en compte la possibilité de conduction par sauts de Mott dans le système. C'est celle-ci que je voudrais décrire maintenant.



III - CONDUCTION PAR ACTIVATION THERMIQUE - RESONANCES DE LEE

Nous avons vu dans le paragraphe précédent comment la non-reproductibilité des grandeurs macroscopiques comme la conductance pouvait être associée aux caractéristiques microscopiques du système. En effet, à un échantillon donné correspond une répartition du désordre et donc une distribution précise des modes résonants pour lesquels  $G(T)$  présentera ses maxima. Néanmoins, nous n'avons accordé à la température, dans le modèle précédent de "tunnelling résonant" que la possibilité de moyenniser le système, en élargissant le nombre de niveaux à prendre en compte et donc en diminuant le poids des modes résonants. Il est toutefois une autre fonction que peut jouer la température, en autorisant par un processus inélastique (incohérent), une transition entre modes propres localisés. C'est le mécanisme de conduction par activation thermique introduit par Mott<sup>(3)</sup>. P. Lee a alors montré au moyen d'une simulation numérique directe de ce problème<sup>(4)</sup> que ce mécanisme inélastique pouvait aussi conduire à des résonances aléatoires de la conductance similaires à celles observées ci-dessus dans le cas de la transmission élastique le long d'un mode résonant particulier. Le modèle étudié est le suivant: On considère comme précédemment une chaîne de longueur  $L$  où chaque mode localisé est caractérisé par sa longueur de localisation  $\xi_0$  et où  $\mu$  est le potentiel chimique du système. Selon Miller et Abrahams<sup>(5)</sup>, le problème du transfert dans un tel système est de même nature que celui obtenu à partir d'une chaîne de résistances aléatoires le long de laquelle deux sites  $i$  et  $j$  sont reliés par la résistance  $R_{ij}$  telle que :

$$\ln\left(\frac{R_{ij}}{R_0}\right) = 2 \frac{|x_i - x_j|}{\xi_0} + \frac{1}{2k_B T} [ |E_i - \mu| + |E_j - \mu| + |E_i - E_j| ] \quad (\text{IV.11})$$

où  $R_0$  est une constante et  $x_i$  et  $E_i$  représentent respectivement le centre et l'énergie du site  $i$ . La relation (IV.11) peut être obtenue de la manière suivante : calculons le taux de transition  $\Gamma_{ij}$  du site  $i$  au site  $j$ . Celui-ci peut se mettre sous la forme :

$$\Gamma_{ij} = \langle n_i (1 - n_j) \gamma_{ij} \rangle \quad (\text{IV.12})$$

où  $\langle n_i \rangle = [1 + \exp(\frac{E_i}{k_B T})]^{-1}$ , l'énergie  $E_i$  étant mesurée par rapport à  $\mu$ . D'autre part,  $\gamma_{ij}$  doit être symétrique et obéir au principe de microréversibilité :

$$\gamma_{ij} = \gamma_{ji} e^{\frac{E_i - E_j}{k_B T}}$$

Physiquement,  $\gamma_{ij}$  mesure le tunnelling à travers les états localisés, i.e.  $\gamma_{ij} = \gamma_0 e^{-2 R_{ij}/\xi_0}$  où  $R_{ij} \equiv |x_i - x_j|$  et  $\gamma_0$  est une constante. En évaluant  $\langle n_i (1 - n_j) \rangle$ , et en identifiant la résistance  $R_{ij}$  avec la probabilité de transition  $\Gamma_{ij}$ , on retrouve la relation (IV.11) de Lee, dans l'approximation où les énergies de saut mises en jeu sont bien supérieures à  $k_B T$ . Nous sommes donc ramenés pour calculer le transport dans le système à calculer la somme des résistances  $R_{ij}$  associées en série. Mais d'autre part, comme cela est représenté sur la figure (IV.4), il y a de nombreux chemins possibles en parallèle. Parmi tous ces chemins, le transport se fera par celui dont la résistance est la plus petite. Soit  $R_c$  cette valeur correspondant donc à la résistance au-dessous de laquelle il n'y a plus percolation à travers la chaîne de taille  $L$ . Par conséquent, dans le modèle de Lee la résistance de chaque pas  $ij$  est telle que  $R_{ij} < R_c$ . Remarquons enfin que dans la limite  $T \rightarrow 0$  des basses températures, on obtient  $E_i \approx E_j \approx \mu$  et on retrouve donc les modes résonants d'Azbel tels que  $\ln(\frac{R_{ij}}{R_0}) = e^{\pm 2L/\xi_0}$ . Due au comportement exponentiel des résistances  $R_{ij}$ , la solution de Mott est alors donnée par la résistance  $R_{ij}$  de la paire  $(i,j)$  de résistance maximum qui impose sa valeur à tout le chemin. En fonction de la position des énergies  $E_i$  et  $E_j$  par rapport à  $\mu$  dans (IV.11), on obtiendra alors comme pente de  $\ln R$  en fonction de  $\mu$ ,  $\pm 1/k_B T$  ou zéro. C'est ce comportement erratique qui est représenté sur la figure (IV.5). On peut de plus obtenir le comportement en température dans ce modèle, et les oscillations les plus aiguës correspondent aux températures les plus basses.

Finalement, on constate que même à plus haute température les oscillations de résistances et la perte de sens des valeurs moyennes subsistent même si leurs causes sont très différentes. Il reste maintenant à trancher entre les deux approches pour savoir laquelle est la plus apte à décrire les résultats expérimentaux. Une étape nécessaire

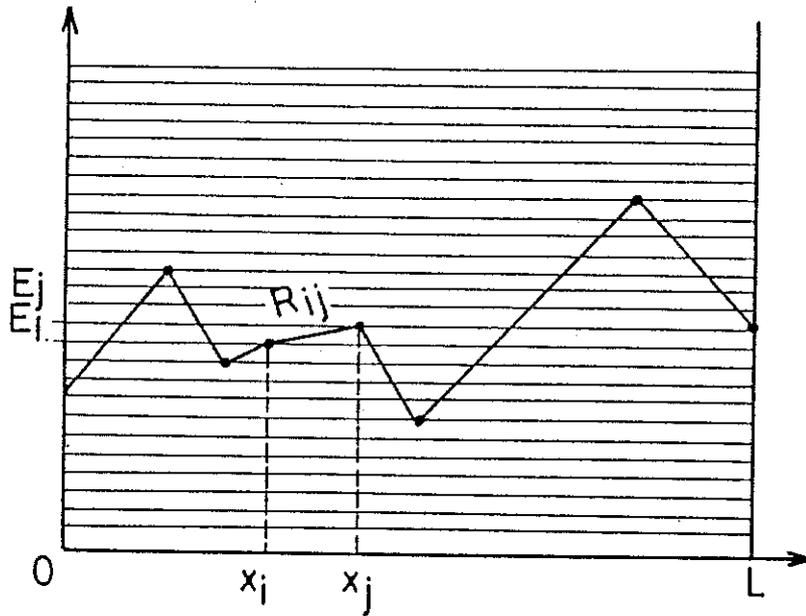


Fig. IV.4 : Calcul de la résistance R.

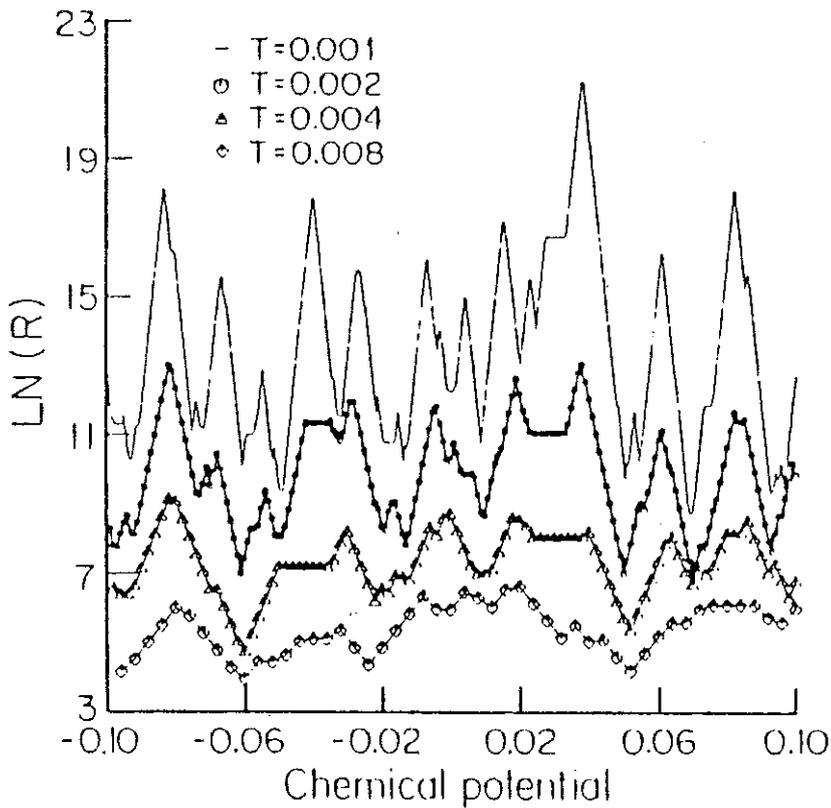


Fig. IV.5 : Résistance électrique en fonction du potentiel chimique pour le modèle de Lee (d'après P.A. Lee, Phys. Rev. Lett. 53 (1984) 2042).



pour cela consiste à étudier la transition entre le "tunnelling résonant" et la conduction par activation thermique. C'est ce but que nous nous sommes entre autres fixé dans la publication reproduite ci-après. A l'aide d'un modèle exactement soluble pour un électron dans un potentiel incommensurable, nous avons calculé exactement les coefficients de transport pour une chaîne de taille finie dans le cas où les modes propres sont localisés avec une longueur  $\xi_0$  identique à celle obtenue dans un modèle de désordre<sup>(6)</sup> et l'interpolation entre les différents régimes précédemment discutés.



#### REFERENCES

- 1 - R.F. Kwasnick, M.A. Kastner, J. Melngailis and P.A. Lee, Phys. Rev. Lett. 52 (1984) 224.
- 2 - M. Ya Azbel and D.P. Di Vincenzo, Solid State Commun. 49 (1984) 949.
- 3 - N.F. Mott, Philos. Mag. 19 (1969) 835.
- 4 - P.A. Lee, Phys. Rev. Lett. 53 (1984) 2042.
- 5 - A. Miller and E. Abrahams, Phys. Rev. 120 (1960) 745.
- 6 - P. Lloyd, J. Phys. C2 (1969) 1717.



(RU-85-043)

Transport Properties of an Incommensurate System\*

by

Eric Akkermans  
Centre de Recherches sur les Tres Basses Temperatures, C.N.R.S.  
38042 Grenoble Cedex, France

and

Michael J. Stephen  
Serin Physics Laboratory, Rutgers University  
Piscataway, NJ 08854

Abstract

The exactly solvable model of Grampel, Fishman and Prange of a particle in a potential having two periods is discussed. If the ratio of the periods is a typical irrational the states are all localized. A convenient form for the Green's function of the model is given and used to obtain a simple expression for the a.c. conductivity. In the one dimensional case, the frequency and temperature dependence of the conductivity is found and the crossover to Mott phonon assisted hopping is discussed. An expression for the transmission coefficient is found and its length dependence and resonances are considered.

\*Supported in part by the National Science Foundation under Grant No. 84-20282.

1. Introduction

Recently Grempel, Fishman and Prange in a series of papers<sup>1,2,3</sup> have discussed an interesting, exactly solvable model of quantum motion in an incommensurate potential. In one form the model is a tight binding model

$$(t_n - \epsilon)a_n + W(a_{n-1} + a_{n+1}) = 0 \quad (1.1)$$

where  $a_n$  is the amplitude of the wavefunction on site  $n$ ,  $W$  is the nearest neighbor hopping matrix element,  $\epsilon$  is the energy and  $t_n = \tan \frac{\alpha - n\tau}{2}$  where  $\alpha$  is a phase and  $\tau/2\pi$  can be rational or irrational. The model (1.1) was solved by Grempel et al<sup>1</sup> by noting that it is equivalent to a kicked oscillator and they showed that the model (for most irrational  $\tau$ ) has only localized eigenstates (in all dimensions<sup>3</sup>). This is a result of the special form of the site energies  $t_n$ . The model is related to the Lloyd model<sup>4</sup> for disorder -- the distribution of site energies for most irrational  $\tau$  is a Cauchy distribution and the localization length and average density of states are the same as in the Lloyd model.

Further insight into this model can be obtained by considering its dual. Assume  $\tau = 2\pi p/N$  where  $p$  and  $N$  are coprime and are the convergents of the irrational  $\tau/2\pi$  of interest. The irrational case is then obtained in the limit  $p, N \rightarrow \infty$ . To obtain the dual of (1.1) we introduce

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{m=0}^{N-1} e^{inm\tau} \hat{a}_m \quad (1.2)$$

and on substituting in (1.1) we find the equation for the  $\hat{a}_m$

$$(2W\cos mr - \epsilon)\hat{a}_m + \sum_r U_r \hat{a}_{m+r} = 0 \quad (1.3)$$

where

$$U_r = \frac{1}{N} \sum_{n=0}^{N-1} e^{inr} \tan \frac{\alpha - nr}{2} \quad (1.4)$$

Using the (non-convergent) Fourier expansion  $\tan x = 2\sin 2x - 2\sin 4x \dots$  we find

$$U_r = -i(e^{i\alpha}_{\delta_{r,1}} - e^{-i\alpha}_{\delta_{r,-1}}) + i(e^{2i\alpha}_{\delta_{r,2}} - e^{-2i\alpha}_{\delta_{r,-2}}) + \dots \quad (1.5)$$

Then the dual of (1.1) involves long range hopping and we would expect the dual states to be extended.

This model provides an interesting case in which the transport properties of a system possessing localized states can be discussed in some detail. In section 2 we give the solution of the tight binding model (1.1) and discuss some properties of the solution. This section is mainly given for completeness and follows the work of Grempel et al<sup>1</sup> quite closely. In section 3 we discuss the Green's function for this model. The Green's function has also been obtained by Pastur and Figotin<sup>5</sup> by a different method. In section 4 we use the Green's function to obtain a simple expression for the a.c. conductivity and discuss its frequency and temperature dependence. The low frequency conductivity at zero temperature has been discussed by Prange et al<sup>6</sup> and Pastur and Figotin<sup>5</sup> and our results are in agreement with theirs. In section 5 we discuss Mott hopping

conductivity for this incommensurate, localized model. In section 6 we derive an expression for the transmission coefficient of a finite length of the incommensurate system and discuss the conductivity, its length dependence and its resonances. Most of our results in this paper are for the one-dimensional case but the model (1.1) is solvable in all dimensions<sup>3</sup> and number of our results can be extended to higher dimensions.

## 2. Tight-binding Model

The model (1.1) was solved by Grempel et al<sup>1</sup> by noting that it is equivalent to a periodically kicked oscillator. For our purposes it is simpler to solve the model directly although the procedure is not very different. As noted above we take  $\tau = 2\pi p/N$  where  $p$  and  $N$  are the convergents of the irrational number  $\tau/2\pi$  of interest. The potential then has period  $N$  and the irrational case is obtained as the limit  $p, N \rightarrow \infty$ . We first investigate solutions in which  $a_{a+N} = a_n$ . These provide a complete set. Introducing the Fourier transform

$$a_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{ikn} u_k \quad (2.1)$$

where  $k = \frac{2\pi}{N} \ell$  ( $\ell = 1 \dots N$ ) in (1.1) we obtain

$$\sum_k e^{ikn} u_k (t_n - \epsilon + 2W \cos k) = 0 \quad (2.2)$$

Following Grempel et al let  $\epsilon - 2W \cos k = \tan V(k)/2$  and this equation can be written

$$\sum_k e^{ikn} \bar{u}_k (e^{-i/2 V(k)} - e^{-i(\alpha - n\tau - 1/2 V(k))}) = 0 \quad (2.3)$$

where  $u_k = \bar{u}_k \cos V(k)/2$ . As  $\tau$  is of the same form as  $k$ , we can set  $k+\tau=k'$  in the second term of (2.3) and obtain the relation

$$\bar{u}_{k+\tau} = \bar{u}_k e^{-i/2(2\alpha - V(k+\tau) - V(k))} \quad (2.4)$$

Using the conditions  $\bar{u}_{k+2\pi} = \bar{u}_k$ ,  $\bar{u}_{-k} = \bar{u}_k^*$  we set

$$\bar{u}_k = e^{-i\nu k + i\phi(k)} \quad (2.5)$$

where  $\nu$  is an integer and  $\phi(-k) = -\phi(k)$ . From (2.4) we find

$$\phi(k+\tau) - \phi(k) = \nu\tau - \alpha + 1/2(V(k+\tau) + V(k)) - 2\pi l \quad (2.6)$$

where  $l$  is an integer. Introducing the Fourier series

$$V(k) = \sum_{n=0}^{N-1} V_n e^{ikn} \quad (2.7)$$

$$\phi(k) = \sum_{n=1}^{N-1} \phi_n e^{ikn}$$

in (2.6) we find

$$\alpha - \nu\tau + 2\pi l = V_0(\epsilon) \quad (2.8)$$

$$\phi_n = -i/2 \cot n\tau/2 V_n \quad (2.9)$$

Eq. (2.8) is the eigenvalue condition. For later purposes it is convenient to introduce

$$\theta(k) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N-1} V_n \frac{\sin nk}{\sin \frac{n\tau}{2}} \quad (2.10)$$

From (2.5) and (2.7) the (unnormalized) wave function can then be written

$$a_n^{(\nu)} = \cos \frac{n\tau - \alpha}{2} F_{n-\nu} \quad (2.11)$$

$$F_n = \frac{1}{N} \sum_k e^{ikn + i\theta(k)}$$

These eigenstates can be shown to be orthogonal. In one dimension we note that

$$V_n = V_{N-n} = \frac{2}{n} e^{-\gamma n} \sin \mu n \quad (2.12)$$

where

$$\cosh \gamma \cos \mu = \epsilon/2W, \quad \sinh \gamma \sin \mu = 1/2W \quad (2.13)$$

The eigenstates have been discussed in detail by Prange, Grepel and Fishman.<sup>2</sup> For most irrationals they are exponentially localized with a

localization length  $\gamma^{-1}$ . This is the case of interest in this paper. The integer  $\nu$  can be regarded as the band index for  $N$  finite or as the center of the localized state in the limit  $N \rightarrow \infty$ . From (2.8) it follows that the average density of states is  $\rho(\epsilon) = \frac{1}{2\pi} \frac{\partial V_0}{\partial \epsilon}$ . This can be shown to be identical with that in the Lloyd model.

More general solutions of (1.1) can be obtained as follows: the potential  $t_n$  has period  $N$  and thus the unit cell has  $N$  sites and we expect  $N$  bands of states. From the Bloch theorem we can write  $a_n = e^{iqn} a_{q,n}$  where  $a_{q,n+N} = a_{q,n}$  has the period of the unit cell and the wave vector  $q$  ( $-\frac{\pi}{N} < q < \frac{\pi}{N}$ ) labels the states within each of the  $N$  bands. Proceeding as above the eigenvalue condition replacing (2.8) is

$$\alpha - \nu\tau - 2\pi\ell = \frac{2}{N} \sum_k \tan^{-1} (\epsilon - 2W\cos(k+q)) \quad (2.14)$$

As the band index  $\nu$  varies from 1 to  $N$   $\gamma\tau \pmod{2\pi}$  takes on the values  $\frac{2\pi}{N} \ell$  ( $\ell=1 \dots N$ ) but not in this order. Thus  $\gamma\tau$  for two neighboring energy bands (in energy) will differ by  $2\pi/N \pmod{2\pi}$  and thus from (2.10) the energy bands are separated in energy by  $1/\rho N$ . For a given band the wave vector  $q$  lies between  $\pm \pi/N$  and thus the energy width of a band is of order  $1/N^2$ . In the limit  $N \rightarrow \infty$  for typical irrationals we get a discrete spectrum of localized states. A much more detailed discussion of the eigenstates is given in ref.

For a discussion of transport properties it is useful to know how the states are distributed in space and in energy. The eigenvalues of the states localized at site  $\nu$  is determined by (2.8) and we discuss the formula in the case where  $\tau/2\pi$  approaches the golden mean. Then  $\tau$  is

approximated by  $\tau = 2\pi f_k/f_{k+1}$  where the  $f$  are Fibonacci numbers ( $f_0=f_1=1$ ) and the unit cell is of length  $f_{k+1}$ . Suppose we have a localized state  $\nu$  centered at site  $\nu$  and consider the state  $\nu \pm f_p$  which is localized  $f_p$  steps away. The difference in energy of these two states is given by

$$V_0(\epsilon_{\nu \pm f_p}) - V_0(\epsilon_\nu) = \pm f_p \tau (\text{mod } 2\pi) = \pm (-)^p 2\pi \frac{f_{k-p}}{f_{k+1}} \quad (2.15)$$

where we have used the relation  $f_k f_p = f_{k+1} f_{p-1} + (-)^p f_{k-p}$ . If  $p < k$  we can expand (2.15) and find

$$\epsilon_{\nu \pm f_p} - \epsilon_\nu = \pm (-)^p f_{k-p} / \rho f_{k+1} \quad (2.16)$$

where  $\rho$  is the density of states. For large  $k$  and  $p$ ,  $f_p = \phi^{p+1}/\sqrt{5}$  where  $\phi = \frac{1}{2}(1+\sqrt{5})$  and

$$\epsilon_{\nu \pm f_p} - \epsilon_\nu = \pm \frac{(-)^p}{\rho \phi^{p+1}} = \pm \frac{(-)^p}{\rho \sqrt{5} f_p} \quad (2.17)$$

We note the following special cases:

- (i)  $p=0$   $|\epsilon_{\nu+1} - \epsilon_\nu| = \tau/2\pi\rho$  so that states which are nearest neighbors in space have a large energy separation.
- (ii)  $p=k$   $|\epsilon_{\nu \pm f_k} - \epsilon_\nu| = \frac{1}{\rho \sqrt{5} f_k}$  so that eigenstates which are near neighbors in energy have a large spatial separation.

These results will be useful in the discussion of hopping conductivity. They are special to the case where  $\tau/2\pi$  approaches the

golden mean but similar results should apply to other quadratic or common irrationals. Eq. (2.17) does not take into account all the energy levels because the  $f_p$  do not cover all the integers but does include the levels closest in energy to a given level which are of most interest to us.

### 3. The Green's Function

The Green's function is the solution of

$$(\tau_m - \epsilon)G_{mn} + W(G_{m+1,n} + G_{m-1,n}) = \delta_{m,n} \quad (3.1)$$

and this can be solved in a similar manner to that used in the previous section.  $G_{mn}$  does not depend on  $m-n$  but we can take the Fourier transform on  $m$  and write

$$G_{mn} = \frac{1}{N} \sum_k e^{ik(m-n)} G(k) \quad (3.2)$$

where  $G(k)$  still depends on  $n$ . Substituting in (3.1) and following the same steps that led to (2.3) we obtain

$$\sum_k e^{ik(m-n)} [\bar{G}_k e^{-\frac{i}{2}V_k} - \bar{G}_k e^{-i(\alpha - m\tau - \frac{1}{2}V_k)} - i(1 + e^{-i(\alpha - n\tau)})] = 0 \quad (3.3)$$

where  $G_k = \cos V(k)/2 \bar{G}_k$ . Shifting  $k$  to  $k-\tau$  in the second term and equating the coefficient of  $e^{ikm}$  to zero gives

$$\bar{G}_k e^{-\frac{i}{2}V_k} - \bar{G}_{k-\tau} e^{-i(\alpha-n\tau-\frac{1}{2}V_{k-\tau})} = i(1+e^{-i(\alpha-n\tau)}) \quad (3.4)$$

We put  $\bar{G}_k = A(k)e^{i\phi(k)}$  where  $\phi(k)$  is given by (2.7) and (2.9) and use the relations

$$\phi(k) - \frac{1}{2} V(k) = \theta(k-\tau/2) - \frac{1}{2} V_0 \quad (3.5)$$

$$\phi(k-\tau) + \frac{1}{2} V(k-\tau) = \theta(k-\tau/2) + \frac{1}{2} V_0$$

Then

$$A(k) - A(k-\tau)e^{-i(\alpha-n\tau-V_0)} = ie^{-i(\theta(k-\tau/2)-\frac{1}{2}V_0)} (1+e^{-i(\alpha-n\tau)}) \quad (3.6)$$

This can be solved by expanding  $A(k)$  in a Fourier series

$$A(k) = \sum_{n'=0}^{N-1} e^{ikn'} A_{n'}$$

and it is found that

$$A_{n'} = \frac{c_n}{\sin \frac{1}{2}(\alpha - V_0 + (n' - n)\tau)} F_{n'} \quad (3.7)$$

where  $F_n$  is given in (2.11) and  $c_n = \cos \frac{1}{2}(\alpha - n\tau)$ . After some straightforward algebra we find

$$G_{mn} = \sum_{n'} \frac{c_n \cos \frac{1}{2}(V_0 - \tau(m-n'))}{\sin \frac{1}{2}(\alpha - V_0 - n'\tau)} F_{n-n'} F_{m-n'} \quad (3.8)$$

This can also be written in the symmetric form

$$G_{mn} = c_m c_n \sum_{n'} \cot \frac{1}{2}(\alpha - V_0 - n'\tau) F_{m-n'} F_{n-n'} + \frac{1}{2} \sin(\alpha - m\tau) \delta_{m,n} \quad (3.9)$$

The Green's function depends on  $\epsilon$  most importantly through the  $V_0(\epsilon)$  under the cotangent. The functions  $F$  are weakly dependent on  $\epsilon$ . The  $F_n \sim e^{-\gamma(n)}$  for large  $n$  and thus the Green's function is shortranged and proportional to  $e^{-\gamma(m-n)}$  for large  $(m-n)$ . Replacing  $\epsilon \rightarrow \epsilon + i\eta$  where  $\eta$  is small and positive we find

$$\text{Im } G_{mn} = \pi c_m c_n \sum_{n'} \delta(\sin \frac{1}{2}(\alpha - V_0 - n'\tau)) F_{m-n'} F_{n-n'} \quad (3.10)$$

which will be useful in calculating the conductivity in the next section.

The average density of states can also be obtained by averaging  $\text{Im } G_{mm}$  over sites  $m$ . A different form of the Green's function has been given by Pastur and Figotin.<sup>5</sup>

#### 4. A.C. Conductivity

The Kubo formula for the a.c. conductivity at frequency  $\omega$  when expressed in terms of the imaginary part of the Green's function is

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2 W^2}{\omega N \pi} \int d\epsilon (f(\epsilon') - f(\epsilon))$$

$$\sum_{nm} [\text{Im}G_{n+1,m}(\epsilon) \text{Im}G_{m+1,n}(\epsilon')$$

$$- \text{Im}G_{n+1,m+1}(\epsilon) \text{Im}G_{m,n}(\epsilon') + \text{terms}(\epsilon \leftrightarrow \epsilon')] \quad (4.1)$$

where  $\epsilon' = \epsilon - \omega$  and  $f$  is the Fermi function. Substituting from (3.10) for the Green's function, averaging over the phase  $\alpha$  and taking the limit as  $N \rightarrow \infty$  gives

$$\bar{\sigma}(\omega) = \frac{e^2 W^2}{\omega} \int d\epsilon (f(\epsilon') - f(\epsilon))$$

$$\sum_{n=-\infty}^{\infty} \delta(\sin \frac{1}{2}(V_0(\epsilon) - V_0(\epsilon') - n\tau) H_n^2 \quad (4.2)$$

where

$$H_n = \sum_m [\bar{F}_{m+1}(\epsilon) \bar{F}_{m-n}(\epsilon') - \bar{F}_m(\epsilon) \bar{F}_{m+1-n}(\epsilon')] \quad (4.3)$$

and  $\bar{F}_m(\epsilon) = \cos \frac{1}{2}(V_0(\epsilon) - m\tau) F_m(\epsilon)$ . Using the results (2.7), (2.10) and (3.5) it is not difficult to show that

$$H_n = \frac{2i}{N} \sum_k e^{ikn} \text{sinc} \cos \frac{V(k)}{2} \cos \frac{V'(k)}{2} e^{i(\phi(k) - \phi'(k))} \quad (4.4)$$

where  $V(k) = V(k, \epsilon)$ ,  $V'(k) = V(k, \epsilon')$  and similarly for  $\phi(k)$  and  $\phi'(k)$ . This expression does not depend sensitively on  $\omega = \epsilon - \epsilon'$  and at low frequencies setting  $\epsilon = \epsilon'$  in (4.4) we obtain (for  $N \rightarrow \infty$ )

$$H_n = \frac{i}{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dk e^{ikn} \sin k \cos^2 \frac{V(k)}{2}$$

$$= \frac{4}{W} e^{-\gamma|n|} \sin \mu n + \frac{1}{2} (\delta_{n-1,0} - \delta_{n+1,0}) \quad (4.5)$$

At low frequencies the terms with  $n = \pm 1$  do not contribute to (4.2) and substituting from (4.5) we obtain the simple expression for the average conductivity

$$\bar{\sigma}(\omega) = \frac{e^2}{\omega} \int d\epsilon (f(\epsilon') - f(\epsilon))$$

$$\sum_n \delta(\sin \frac{1}{2}(V_0(\epsilon) - V_0(\epsilon')) - n\tau) e^{-2\gamma|n|} \sin^2 \mu n \quad (4.6)$$

The term with  $n=0$  vanishes so that the d.c. conductivity is zero. We discuss this formula firstly at  $T=0^\circ\text{K}$  and then at finite temperature.

(A)  $T=0^\circ\text{K}$ . Introducing the variable  $\epsilon'' = \epsilon - \mu - \omega/2$  where  $\mu$  is the Fermi energy we then have at low frequencies

$$V_0(\epsilon) - V_0(\epsilon') = 2\pi\omega(\rho_F + \epsilon'' \rho'_F) \quad (4.7)$$

where  $\rho_F$  and  $\rho'_F$  are the density of states and its derivative at the Fermi energy. In the delta function we can replace  $n\tau$  by  $2\pi\langle n\bar{\tau} \rangle$  where  $\bar{\tau} = \tau/2\pi$  and the angular brackets indicate the fractional part. Then

$$\bar{\sigma}(\omega) = \frac{e^2}{\pi\omega} \int_{-\omega/2}^{\omega/2} d\epsilon'' \sum_n \delta(\omega(\rho_F + \epsilon'' \rho'_F) - \langle n\bar{\tau} \rangle) e^{-2\gamma|n|} \sin^2 \mu n \quad (4.8)$$

We have replaced the sin by its argument which is small. We now evaluate this formula close to certain special frequencies  $\omega_{k0}$  such that  $\rho_F \omega_{k0} = q_k(\bar{\tau} - p_k/q_k)$  where  $p_k$  and  $q_k$  are the  $k^{\text{th}}$  convergents of  $\bar{\tau}$ . Thus  $\bar{\tau} = \frac{p_k}{q_k} + \delta_k$  where  $\delta_k = \bar{\tau} - p_k/q_k$  and is small and positive if  $k$  is large and even and  $\langle q_k \bar{\tau} \rangle = q_k \delta_k$ . Substituting these results in (4.8) we find

$$\bar{\sigma}(\omega_{k0}) = \frac{e^2}{\pi \rho'_F \omega_{k0}^2} e^{-2\gamma q_k} \sin^2 \mu q_k \quad (4.9)$$

This formula applies for frequencies such that  $|\omega - \omega_{k0}| < \omega_{k0}^2 \rho'_F / 2\rho_F$ . The conductivity thus has a series of steps at the frequencies  $\omega_{k0}$  of width given above. From the inequality  $\frac{1}{q_k(q_{k+1} + q_k)} < \delta_k < \frac{1}{q_k q_{k+1}}$  we see that

$$\rho_F \omega_{k0} = q_k \delta_k \sim \frac{1}{q_k} \quad (4.10)$$

$q_k$  is the spatial distance between states differing in energy by  $\omega_{k0}$ . The frequency difference between successive steps is

$$\rho_F(\omega_{k0} - \omega_{k+20}) = \bar{\tau}(q_k - q_{k+2}) - (p_k - p_{k+2})$$

$$= a_{k+2} q_{k+1} |\delta_{k+1}| \quad (4.11)$$

where we have used the recursion relations for the convergents  $q_k = a_k q_{k-1} + q_{k-2}$  and similarly for  $p_k$ . Thus the frequency difference between steps is of order  $\omega_{k0} - \omega_{k+20} = \rho_F \frac{1}{q_{k+1}}$  which is larger than the width of a step.

In (4.9) using  $q_k = \frac{1}{\rho_F \omega_{k0}}$  the conductivity is approximated by the continuous function

$$\bar{\sigma}(\omega) = \frac{e^2}{\pi \rho_F' \omega^2} e^{-2\gamma/\rho\omega} \sin^2 \mu/\rho\omega \quad (4.12)$$

The exponential dependence of the conductivity on inverse frequency at low frequencies has been obtained by Prange et al<sup>6</sup> and Pastur and Figotin.<sup>5</sup> They also pointed out that the incommensurate case has a smaller conductivity than the disordered case where  $\sigma \sim \omega^2$ .

(B)  $T \neq 0^\circ K$ . We consider the case where  $\kappa T > \omega$  but  $\kappa T$  is much less than the Fermi energy  $\mu$ . In (4.6) put  $\epsilon = \mu + \epsilon'$  and expand

$$V_0(\epsilon) - V_0(\epsilon - \omega) = 2\pi\omega(\rho_{F+\epsilon'} \rho_F') \quad (4.13)$$

Then (4.8) is replaced by

$$\bar{\sigma}(\omega) = \frac{e^2}{4\pi\kappa T} \int d\epsilon' \frac{1}{\cosh^2 \beta\epsilon'} \sum_n \delta(\rho_{F+\epsilon'} \rho_F' - \langle n\tau \rangle) e^{-2\gamma|n|} \sin^2 \mu n \quad (4.14)$$

The integral is effectively over the interval  $|\epsilon''| < \kappa T$  which broadens the steps at the special frequencies  $\omega_{ko}$ . From (4.14)

$$\bar{\sigma}(\omega)_{ko} = \frac{e^2}{4\pi\rho'_F\kappa T\omega} e^{-2\gamma q_k} \sin^2 \mu q_k$$

which replaces (4.9) in the case  $\kappa T > \omega$ . This formula applies for frequencies  $|\omega - \omega_{ko}| < \frac{\omega_{ko} \kappa T \rho'_F}{\rho_F}$ . Thus the steps are broadened by temperature and the conductivity is temperature dependent  $\sigma \sim T^{-1}$ . Such a behavior has been discussed recently for systems with localized states by Azbel et al.<sup>7</sup> The width of steps will only be comparable with the distance between steps, i.e.

$$\begin{aligned} \omega_{ko} \kappa T \rho'_F \sim \rho_F |\omega_{ko} - \omega_{k+2o}| &= q_{k+2} q_{k+1} |\delta_{k+1}| \\ &\sim \rho_F \omega_{ko} \end{aligned} \quad (4.15)$$

where we have used  $q_{k+1} \delta_{k+1} \sim 1/q_{k+1} \sim \rho_F \omega_{ko}$ . This gives  $\kappa T \sim \rho_F / \rho'_F$  a high temperature. Thus the steps or resonances in the a.c. conductivity are not readily smoothed out by finite temperatures. However, we have not considered inelastic effects which would be expected to become important before the above temperature is reached. These are discussed in the next section.

## 5. Hopping Conductivity

The model (1.1) and the conductivity in section 4 only take elastic scattering of the electrons into account. At finite temperatures inelastic effects will be important and eventually dominate the conductivity. We have not attempted to include inelastic scattering in (1.1) in any detailed way but will attempt to treat it in the same way as is done in disordered systems.<sup>7</sup> The phonon assisted hopping rate  $W_{ij}$  between localized states of energies  $\epsilon_i$  and  $\epsilon_j$  at positions  $R_i$  and  $R_j$  is taken to be

$$W_{ij} = V e^{-\gamma|R_i - R_j| - |\epsilon_i - \epsilon_j|/\kappa T} \quad (5.1)$$

where  $V$  is a constant dependent on the electron-phonon coupling and  $\gamma$  is the localization length defined in (2.13). In the case where  $r/2\pi$  is the golden mean the distribution of localized states in energy and position has been discussed above (2.13). Substituting these results in (5.1) we find for two states a distance  $f_p$  apart

$$W_{f_p} = V e^{-\gamma f_p - 1/\kappa T \rho f_p \sqrt{5}} \quad (5.2)$$

so that  $W_{f_p}$  only depends on the distance between the two sites. In this case the motion of the electrons can be defined by a simple master equation

$$\frac{dP_i}{dt} = \sum_j W_{ij} (P_j - P_i) \quad (5.3)$$

where  $P_i$  is the probability of finding the electron on site  $i$ . The diffusion constant is given by

$$D = \frac{1}{2} \sum_j (i-j)^2 W_{ij} \quad (5.4)$$

We maximize the hopping probability  $W_{f_p}$  with respect to  $f_p$  and find that the most probable transition is for  $f_p^* = (\sqrt{5}\kappa T \rho \gamma)^{-1/2}$  and

$$W_{f_p^*} = V e^{-(T_0/T)^{1/2}} \quad (5.5)$$

where  $T_0 = \gamma/\kappa\rho\sqrt{5}$ . This result is exactly the same as the Mott law<sup>7</sup> for hopping conductivity in disordered systems. A more accurate formula for the diffusion constant can be obtained from (5.4).

The crossover between resonance tunnelling conductivity considered in the previous section and phonon assisted hopping conductivity will occur when the length  $f_p^*$  for the most probable hop becomes less than the distance  $q_k = 1/\rho\omega_{k0}$  needed to tunnel to find a resonant state with frequency difference  $\omega_{k0}$ . Setting these two lengths equal (ignoring numerical factors) gives a relation between temperature and frequency

$$\kappa T \gamma = \rho \omega^2 \quad (5.6)$$

at which this crossover should occur. We have derived the Mott law for incommensurate systems in the case of the golden mean but we would expect the same result to hold for ordinary irrational  $\tau$ .

### 6. Transmission Coefficient

In this section we discuss the transmission of an incident electron wave of energy  $\epsilon = 2W\cos k$  through a one-dimensional incommensurate system of length  $L$  described by (1.1). We suppose that the incommensurate lattice is connected at each end to a perfect lattice and the sites of the incommensurate lattice are labelled 1 to  $L$ . The transmission coefficient  $T_L$  is related to the conductance  $G_L$  by the Landauer<sup>9</sup> formula

$$G_L = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \frac{T_L}{1-T_L} \quad (6.1)$$

In Appendix A we express the transmission coefficient in terms of the Green's function (3.9) at energy  $\epsilon$ :

$$T_L = \frac{4\sin^2 k}{W^2} \left| \frac{G_{0L+1}}{D} \right|^2 \quad (6.2)$$

where

$$D = (G_{10} - e^{-ik} G_{00})(e^{ik} G_{LL+1} - G_{L+1L+1}) \\ + (e^{-ik} G_{0L+1} - G_{1L+1})(e^{ik} G_{L0} - G_{L+10}) \quad (6.3)$$

$G$  is the Green's function for the infinite system and is expressed in (3.9) in terms of the eigenstates of the infinite system. Eq. (6.2) is an exact formula for the transmission coefficient of a finite system of length  $L$ . As the eigenstates are exponentially localized the eigenstates of the finite system will not differ much from those of the infinite system except close to the boundaries. We will find that the transmission due to states close to the boundaries is small and thus (6.2) is an appropriate formula for the discussion of the transmission coefficient.

For energies  $\epsilon$  not near resonance with a localized state the Green's function in the numerator of (6.2) decreases exponentially with  $L$  like  $G_{0L} \sim e^{-\gamma L}$  while in the denominator  $D$  the Green's functions  $G_{00}$ ,  $G_{LL+1}$ , etc. do not decrease with  $L$ . Thus, as expected,  $T_L \sim e^{-2\gamma L}$  when we are not near a resonance.

We now investigate how  $T_L$  behaves when  $\epsilon$  is very close to resonance with a localized mode of energy  $\epsilon_\nu$  located at  $\nu$  ( $1 < \nu < L$ ).  $\epsilon_\nu$  is related to  $\nu$  by (2.8). We can now write the Green's function as the sum of two parts, the first coming from the nearly resonant mode and the remainder

$$G_{mn} = c_m c_n \cot \frac{1}{2} (\alpha - V_0(\epsilon) - \nu\tau) F_{m-\nu} F_{n-\nu} + G'_{mn} \quad (6.4)$$

and using  $\alpha - \nu\tau + 2\pi l = V_0(\epsilon_\nu)$  for  $\epsilon$  close to  $\epsilon_\nu$  we can write this as

$$G_{mn} = g_{mn}^{(\nu)} / \delta_\nu + G'_{mn} \quad (6.5)$$

where  $\delta_\nu = \epsilon_\nu - \epsilon$  and  $g_{mn}^{(\nu)} = c_m c_n F_{m-\nu} F_{n-\nu} / \pi\rho$ . We now substitute (6.5) in (6.2). It should be noted that the terms in  $\delta_\nu^{-2}$  cancel in the denominator D and we find

$$T_L = \frac{4\sin^2 k}{W^2} \left| \frac{g_{0L+1}^{(\nu)} + \delta_\nu G'_{0L+1}}{A + \delta_\nu B} \right|^2 \quad (6.6)$$

where

$$A = (g_{10}^{(\nu)} - e^{-ik} g_{00}^{(\nu)}) (e^{ik} G'_{LL+1} - G'_{L+1L+1}) + (G'_{10} - e^{-ik} G'_{00}) (e^{ik} g_{LL+1}^{(\nu)} - g_{L+1L+1}^{(\nu)}) \quad (6.7)$$

$$B = (G'_{10} - e^{-ik} G'_{00}) (e^{ik} G'_{L+1L} - G'_{L+1L+1}) \quad (6.8)$$

In A and B we have omitted exponentially small terms  $-e^{-\gamma L}$ . In order to exhibit the important features of (6.6) we make the following simplifying but reasonable assumptions: (a) the state  $\nu$  of interest is located deep inside the incommensurate system  $1 \ll \nu \ll L$  and set  $\nu = L/2 + \nu'$ . (b) The wavefunctions  $F_\nu = e^{-\gamma\nu}$ ,  $F_{L-\nu} = e^{-\gamma(L-\nu)}$ ,  $F_{L-\nu} = e^{-\gamma(L-\nu)}$  and thus  $g_{10}^{(\nu)} = g_{00}^{(\nu)} = e^{-2\gamma\nu}/\rho$  and  $g_{LL+1}^{(\nu)} = g_{L+1L+1}^{(\nu)} = e^{-2\gamma(L-\nu)}/\rho$  and neglect all phase factors. (c) The Green's functions  $G'_{10} = G'_{00} = G'_{L+1L} = G'_{L+1L+1}$  are all of order  $G'$  independent of  $L$ . With these assumptions  $g_{0L+1}^{(\nu)} = e^{-\gamma L}/\rho$ ,  $A = e^{-\gamma L} \cosh 2\gamma\nu' G'/\rho$  and  $B = G'^2$  and the transmission coefficient has the form

$$T_L = \left| \frac{1}{\cosh 2\gamma\nu' + \delta_\nu \rho G' e^{\gamma L}} \right|^2 \quad (6.9)$$

This formula shows that the width of the resonances in  $T_L$  due to localized states is proportional to  $e^{-\gamma L}$ . Exactly at resonance,  $\delta_\nu = 0$ , the

transmission coefficient is proportional to  $1/\cosh^2 2\delta\nu'$  and then localized states located near the center of the wire ( $\nu' \sim 0$ ) give the largest contribution and states near the edges ( $\nu' = \pm L/2$ ) give a negligible contribution to the transmission. These results are in general agreement with those expected for disordered systems as discussed by Azbel and Soven,<sup>10</sup> Azbel<sup>11</sup> and Maynard and Akkermans.<sup>12</sup> DeVincenzo and Azbel<sup>13</sup> have discussed the temperature dependence of the conductance in this case and the crossover to a Mott-like law. The conductance at finite temperatures is given by

$$G = \frac{e^2}{2\pi\hbar} \int d\epsilon \left( -\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) T_L(\epsilon) \quad (6.10)$$

where  $f$  is the Fermi function. Since  $T$  is exponentially large at the resonances the integral is dominated by the resonances and the contribution of a resonance  $\epsilon_\nu$  at site  $\nu$  (measured from the center of wire) is

$$G \sim -\left(\frac{\partial f}{\partial \epsilon}\right) \delta\epsilon_\nu T_L(\epsilon_\nu) = e^{-\gamma L - 2\gamma|\nu| - 2\beta|\epsilon_\nu - \mu|} \quad (6.11)$$

where  $\delta\epsilon_\nu \sim e^{-\gamma L}$  is the width of the resonance,  $e^{-2\gamma|\nu|}$  is the value of  $T$  at resonance and the third factor comes from the Fermi function. Suppose that the chemical potential  $\mu$  is approximately in resonance with a state  $\epsilon_{\nu_0}$  where  $\nu_0$  is near the center of the sample. Then maximizing (6.11) with respect to  $\nu$  assuming  $(\epsilon_\nu - \mu) \sim 1/\rho|\nu|$  we find  $G \sim e^{-\gamma L - (T_0/T)^{1/2}}$  where  $T_0$  is same as in the phonon assisted case (5.5). The temperature dependence is the same as in the Mott hopping law.

## 7. Discussion

We have discussed three types of conductivity (a) resonant tunnelling (sect. 4) (b) phonon assisted hopping (sect. 5) (c) transmission through a system of finite length. Each of these involves a length scale: (a) For resonant tunnelling the length scale is set by the frequency and is of order  $1/\rho\omega$  (b) For phonon assisted hopping the length scale is set by the distance for the most probable hop  $(\kappa T \rho \gamma)^{-1/2}$  (c) For transmission the size  $L$  of the system sets the scale. The relative values of these three length scales determines the type of conductivity expected the shortest length scale being the dominant one.

The incommensurate model of Grempel, Fishman and Prange<sup>1</sup> provides a simple example in which the different types of transport processes occurring in incommensurate systems with localized states can be investigated in some detail.

## Appendix

We derive an expression for the transmission coefficient of an incident electron wave of energy  $\epsilon = 2W\cos k$  through a one-dimensional incommensurate system of length  $L$  described by

$$(\tau_m - \epsilon)a_m + W(a_{m+1} + a_{m-1}) = 0 \quad (\text{A.1})$$

We suppose the incommensurate lattice occupies the sites 1 to L and is connected at each end to a perfect lattice ( $\tau_m=0$ ). We thus require a solution of (A.1) such that

$$\begin{aligned} a_m &= e^{ikm} + r e^{-ikm} & m < 1 \\ &= t e^{ikm} & m > L \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Let  $G_{m,n}$  be the Green's function for the infinite incommensurate system which includes the piece L of interest. Then

$$a_m = \alpha G_{m,n_1} + \beta G_{m,n_2}, \quad 2 < m < L-1 \quad (\text{A.3})$$

where  $n_1 < 1$  and  $n_2 > L$ . From (A.2) and (A.3) we see that (A.1) is satisfied for (i)  $m < 0$  (ii)  $m > L+1$  (iii)  $3 < m < L-2$ . We are left with the four equations (A.1) for  $m = 1, 2, L-1$  and  $L$ . Substituting (A.2) and (A.3) in these equations provides four equations for the unknowns  $r, t, \alpha$  and  $\beta$ . After some algebra we find

$$t = 2i \operatorname{sinc} e^{-ikL} \frac{N_{n_1 n_2}}{D_{n_1 n_2}} \quad (\text{A.4})$$

where

$$N_{n_1 n_2} = G_{Ln_1} G_{L-1n_2} - G_{L-1n_1} G_{Ln_2} \quad (\text{A.5})$$

$$D_{n_1 n_2} = [G_{1n_1} - e^{-ik(G_{0n_1} - \delta_{1,n_1})}] [e^{ikG_{Ln_2} - G_{L+1n_2} + \delta_{1,n_2}}]$$

$$+ (e^{-ik} G_{0n_2}^{-G_{1n_2}})(e^{ik} G_{Ln_1}^{-G_{L+1n_1}}) \quad (\text{A.6})$$

The index  $n_1$  must be to the left and  $n_2$  to the right of the incommensurate system but are otherwise arbitrary. We have conveniently chosen them to be  $n_1 = 0$   $n_2 = L+1$  which eliminates the delta functions in (A.6).

The numerator (A.5) can be simplified by using the identity

$$W(G_{m+ln_1} G_{mn_2}^{-G_{m+ln_2}} G_{mn_1}) - W(G_{mn_1} G_{m-ln_2}^{-G_{mn_2}} G_{m-ln_1}) = \delta_{m,n_1} G_{mn_2} - \delta_{m,n_2} G_{mn_1} \quad (\text{A.7})$$

We can write

$$N_{0L+1} = G_{L0} G_{L-1L+1}^{-G_{L-10}} G_{LL+1} - G_{m0} G_{m-1L+1}^{-G_{m-10}} G_{mL+1}, \quad 0 < m < L+1 \quad (\text{A.8})$$

If we now use the formula (A.7) to shift  $m$  to  $\pm\infty$  we pick up a contribution from one of the delta functions in (A.7) and the remainder vanishes as  $m \rightarrow \pm\infty$ . Thus

$$N_{0L+1} = W^{-1} G_{0L+1} \quad (\text{A.9})$$

Substituting (A.6) and (A.9) in (A.4) gives (6.2).

References

1. D.R. Grempel, S. Fishman and R.E. Prange, Phys. Rev. Lett. 49, 833 (1982).
2. R.E. Prange, D.R. Grempel and S. Fishman, Phys. Rev. B 29, 6500 (1984).
3. S. Fishman, D.R. Grempel and R.E. Prange, Phys. Rev. B 29, 4272 (1984).
4. P.L. Lloyd, J. Phys. C 2, 1717 (1969).
5. L.A. Pastur and A.L. Figotin, Pisma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 37, 575 (1983) [JETP Lett. 37, 686 (1983)].
6. R.E. Prange, D.R. Grempel and S. Fishman, Phys. Rev. Lett. 53, 1582 (1984).
7. M. Ya. Azbel, A. Hartstein and D.P. DiVincenzo, Phys. Rev. Lett. 52, 1641 (1984).
8. N.F. Mott, Phil. Mag. 19, 835 (1969).
9. R. Landauer, Phil. Mag. 21, 863 (1970).
10. M. Ya. Azbel and P. Soven, Phys. Rev. B 27, 831 (1983).
11. M. Ya. Azbel, Solid State Commun. 45, 527 (1983).
12. R. Maynard and E. Akkermans, to be published.
13. D.P. DiVincenzo and M. Ya. Azbel, Phys. Rev. Lett. 50, 2102 (1983).

C H A P I T R E V

LOCALISATION FAIBLE DES PHONONS HARMONIQUES  
EN DIMENSIONS 2 ET 3



## I - INTRODUCTION

Dans la première partie de cette thèse, nous avons étudié quelques propriétés relatives à la nature des modes et au transport de la chaleur dans les milieux désordonnés unidimensionnels. Nous avons vu que ces milieux appartiennent à la classe des modèles de localisation forte pour laquelle les modes propres sont exponentiellement localisés. Au contraire, nous avons vu au chapitre I que pour les systèmes électroniques, l'extension à des dimensionalités supérieures (typiquement  $d = 2$  ou  $d = 3$ ), a permis de mettre en évidence entre la localisation forte et le comportement usuel du type Boltzmann, un régime intermédiaire pour lequel on obtient des corrections aux coefficients de transport de nature essentiellement quantique tendant à les réduire. Pour cette raison et aussi pour des raisons historiques, un tel régime a été appelé localisation faible.

Notre ambition dans ce chapitre consiste à montrer d'une part que ce régime de localisation faible peut être étendu au cas des phonons se propageant dans des milieux faiblement désordonnés bi- et tridimensionnels et que de plus il permet de décrire les caractéristiques essentielles de cette propagation. Nous pouvons formuler le problème physique que nous nous posons de la façon suivante : on considère un gaz de phonons libres se propageant dans un milieu désordonné ( $d = 2$  ou  $d = 3$ ) comportant par exemple des défauts de masse (désordre isotopique) ou des défauts harmoniques (le désordre sera dans tous les cas supposé sans corrélation). Quelles sont les propriétés de transport associées à ce système ? Celles-ci s'obtiennent à partir de la fonction de corrélation densité-densité définie par :

$$C(\vec{r}, \vec{r}' ; t, t') = \langle n(\vec{r}, t) n(\vec{r}', t') \rangle - \langle n^2 \rangle \quad (V.1)$$

C mesure les fluctuations de densité dans le système et on peut montrer que tous les coefficients de transport (conductivité, propagation de l'énergie, ...) se déduisent de C et n.

L'évaluation de la fonction de corrélation  $C$  (et notre problème en général) peut se formuler à partir de deux longueurs caractéristiques. L'une, la longueur d'onde  $\lambda = \frac{2\pi v}{\omega}$ , décrit la nature des phonons se propageant dans le milieu. Typiquement, pour le phonon dominant, on a  $\omega \approx T \approx 5$  K ce qui pour une vitesse du son  $v$  dans le milieu de l'ordre de  $10^3$  m/s, nous donne des longueurs d'onde  $\lambda \approx 100$  Å. L'autre longueur décrit les propriétés du milieu et des collisions que subissent les phonons. Si les impuretés (par exemple les défauts de masse) sont suffisamment isolées, une bonne approximation consiste à employer une loi du type Rayleigh-Klemens<sup>(1)</sup> pour décrire les processus de relaxation élastique. Le temps de relaxation  $\tau(\omega)$  associé est alors :

$$\frac{1}{\tau(\omega)} = \sigma_M^2 \omega^2 g_d(\omega) \quad (V.2)$$

où  $\sigma_M^2$  représente la fluctuation locale de masse (ou de constante de rappel harmonique) et est donnée par la variance :

$$\sigma_M^2 = n_D \overline{\left(\frac{\Delta M}{M}\right)^2} \quad (V.3)$$

où  $n_D$  est la concentration de défauts. Dans ce contexte, le cas des verres est obtenu pour des valeurs typiques  $\sigma_M^2 \lesssim 1$ . D'autre part, la densité spectrale de modes par atome,  $g_d(\omega)$  est donnée en dimension  $d$  par :

$$g_d(\omega) = d \frac{\omega^{d-1}}{\omega_D^d} \quad (V.4)$$

où  $\omega_D$  est la fréquence de Debye associée à l'unique branche de phonons à laquelle nous nous restreindrons ici. On obtient donc finalement une dépendance  $\tau(\omega) \propto \omega^{-(d+1)}$  pour le temps de relaxation élastique (ou de façon équivalente pour la longueur élastique  $l(\omega) = v\tau(\omega)$ ). Une telle dépendance en fréquence révèle déjà une des modifications essentielles par rapport aux électrons. En effet, pour ceux-ci, la statistique de Fermi-Dirac restreint l'espace des phases de telle sorte que l'énergie de Fermi soit la seule caractéristique du problème ; le libre parcours moyen ne varie donc pas. Une autre différence provient de la dispersion linéaire pour les phonons, quadratique pour les électrons. Un des buts de ce chapitre sera donc aussi de montrer que ces différences ne sont pas pertinentes.

II - DEFINITION D'UN CRITERE DE LOCALISATION - EFFETS D'INTERFERENCE  
ET COMPORTEMENT A LONGUE PORTEE

Contrairement au cas unidimensionnel où il est possible de montrer analytiquement que les modes sont localisés, la situation à  $d = 2$  ou  $d = 3$  est plus complexe car on ne sait pas déterminer la forme des états propres du système. Autrement dit, on ne sait pas calculer analytiquement la fonction de Green  $G(\vec{r}, t)$  du système, c'est-à-dire la solution de l'équation du mouvement comportant un terme source. Néanmoins, l'information expérimentale sur ces systèmes étant obtenue à partir des coefficients de transport, i.e. à partir de la fonction de corrélation  $C(\vec{r}, \vec{r}' ; t, t')$  introduite précédemment, c'est le comportement de  $C$  qui indirectement nous fournira la nature des états du système. Si le coefficient de diffusion  $D(\omega)$  associé à  $C$  pour le mode  $\omega$  est non nul, nous dirons que le mode propre  $\omega$  est étendu en ce sens que son amplitude est non nulle et non négligeable sur l'ensemble du système. Dans le cas contraire, si  $D(\omega)$  s'annule, nous dirons que le mode propre  $\omega$  est localisé, c'est-à-dire que son amplitude est confinée dans une région donnée du système.

Calcul de  $C(\vec{r}, \vec{r}' ; t, t')$  :

Nous venons de voir que l'on ne sait pas calculer la vraie fonction de Green du système. Aussi allons-nous envisager comme états de base des solutions du type milieu moyen, correspondant à des phonons lorentziens caractérisés par :

$$\langle G_k^{R,A}(\omega) \rangle = \frac{1}{\hbar(\omega - \omega(k)) \pm i \Gamma_d(\omega)} \quad (V.5)$$

où  $\Gamma_d(\omega)$  est la largeur en énergie des états à un phonon soumis à la diffusion du type Rayleigh-Klemens, soit  $\Gamma_d(\omega) = \hbar/\tau(\omega)$ . Les deux lettres R et A désignent respectivement les contributions retardée et

avancée des propagateurs. Il faut remarquer ici, que notre définition de  $G$  diffère de celle généralement employée<sup>(2)</sup> et ceci à cause du rôle fondamental que joue, comme nous allons le voir, la symétrie dans le renversement du temps. Pour des raisons pratiques qui apparaîtront clairement dans le développement ci-dessous, nous allons au lieu de  $C$  évaluer la quantité  $G_2(\omega, \Omega)$  dont la transformée de Fourier est donnée par :

$$G_2(\vec{k}, \vec{k}' ; \omega, \Omega) = \langle G_k^R(\omega + \Omega) G_{k'}^A(\omega) \rangle \quad (V.6)$$

où  $\langle \dots \rangle$  représente la valeur moyenne prise sur le désordre. La fonction de corrélation densité-densité  $C$  donnée par :

$$C(\vec{r}, \vec{r}' ; t, t') = \int d\Omega e^{i\Omega(t-t')} \int d\omega \frac{n_\omega - n_{\omega+\Omega}}{\Omega} G_2(\omega, \Omega) \quad (V.7)$$

où  $n_\omega$  représente le facteur d'occupation du niveau d'énergie  $\omega$  se ramène donc au calcul de  $G_2(\omega, \Omega)$ .

La forme même de  $G_2$  donnée par (V.6) suggère un effet d'interférence entre l'onde avancée décrite par  $G^A$  et l'onde retardée décrite par  $G^R$ . Et tout le secret du comportement de  $C$  et de la portée des fluctuations est lié à cet effet d'interférence. Supposons en effet qu'en première approximation on calcule  $G_2$  à partir de  $G_2 = \langle G^R \rangle \langle G^A \rangle$ . On perd alors l'effet d'interférence, et comme d'après (V.5)  $\langle G \rangle \propto e^{-r/\ell}$  on obtient pour  $G_2$  et par conséquent  $C$  un comportement exponentiellement décroissant. D'où l'importance de ne pas découpler la valeur moyenne afin que le brouillage associé aux phases aléatoires s'élimine par la conjugaison entre  $G^R$  et  $G^A$  ; on obtient ainsi un comportement à longue portée pour  $G_2$  et donc pour  $C$ .

### III - REGIME DE DIFFUSION POUR LA FONCTION DE CORRELATION DENSITE- DENSITE

#### A. Définition et sens physique des différentes classes de diagrammes.

Pour calculer  $G_2$ , nous allons effectuer un développement au moyen de diagrammes de Feynman représentant la collision des phonons sur les défauts de masse. C'est-à-dire que nous allons représenter graphiquement les processus microscopiques décrivant les collisions. Pour cela, nous allons résumer les règles usuelles suivantes <sup>(3)</sup> :

- i) le mouvement d'un phonon est représenté par une ligne avec une flèche indiquant le caractère retardé ou avancé du phonon ;
- ii) une collision élastique avec un défaut de masse sera représentée par un trait pointillé terminé par une croix.

Un exemple est illustré sur la figure (V.1) où un phonon retardé de vecteur d'onde  $\vec{k}$  subit une première collision sur une impureté, ressort avec un vecteur d'onde  $\vec{k}'$  et subit une seconde collision sur une impureté différente pour ressortir avec l'impulsion  $\vec{k}''$ . Néanmoins, pour le calcul de  $G_2$ , il faut évaluer des diagrammes avec deux lignes de phonons du type de ceux esquissés sur la figure (V.2). Sur cette figure, la ligne du haut décrit l'évolution d'un phonon retardé de vecteur d'onde  $\vec{k} + \vec{q}/2$  et d'énergie  $\hbar(\omega + \Omega)$ , tandis que la ligne du bas retrace la vie d'un phonon avancé de vecteur d'onde  $\vec{k} - \vec{q}/2$  et d'énergie  $\hbar\omega$ . Il est à noter dans ces diagrammes représentant  $G_2$  que les lignes pointillées désignant l'interaction avec un défaut de masse, décrivent une corrélation entre les deux phonons du haut et du bas et non pas une interaction entre eux (cas plus difficile qui ne sera abordé que dans le chapitre suivant). A cause de leur structure, nous allons appeler les diagrammes de la figure (V.2) diagrammes en échelle. Dans la limite des faibles transferts d'énergie et d'impulsion, i.e. pour  $\Omega\tau \ll 1$  et  $q\ell \ll 1$ ,

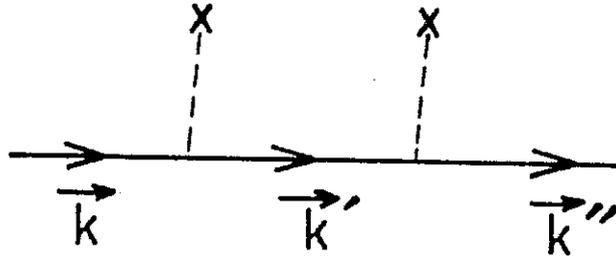


Fig. V.1 : Exemple de diagramme de Feynman permettant d'étudier les propriétés de collision d'une onde sur des impuretés.

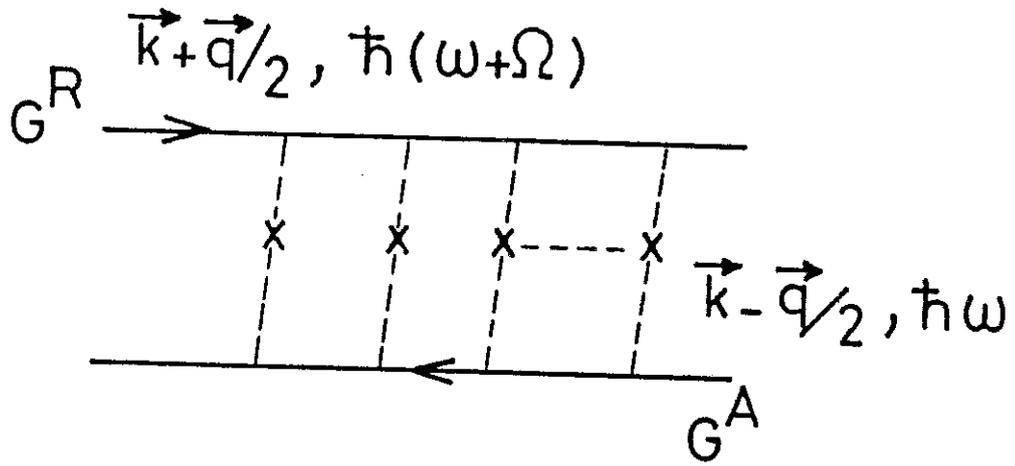


Fig. V.2 : Un diagramme utilisé pour calculer la fonction de corrélation densité-densité.

on peut calculer leur somme qui est proportionnelle à  $\frac{\tau}{-i\Omega + D_0 q^2}$ , où  $D_0(\omega) = \frac{\lambda^2(\omega)}{d\tau(\omega)}$  représente la constante de diffusion associée à un phonon  $\omega$ . Pour comprendre le sens du pôle de diffusion obtenu, on doit tout d'abord remarquer que les diagrammes correspondants (échelles) décrivent deux phonons, respectivement avancé et retardé, se propageant dans la même direction, subissant les mêmes collisions aux mêmes instants, et par conséquent corrélés à tous les temps. Ce pôle de diffusion n'est qu'une conséquence de la conservation du nombre des phonons d'énergie  $\omega$ . C'est pourquoi ce pôle de diffusion existe toujours même en présence d'effets inélastiques. Supposons maintenant qu'il y ait invariance par renversement dans le temps, non seulement du système en entier mais pour les états à un phonon, i.e. que les phonons de moment  $\vec{k}$  et  $-\vec{k}$  soient équivalents. Dans la somme des échelles représentée sur la figure (V.2), on peut changer le sens de tous les propagateurs correspondant aux phonons avancés de la ligne inférieure sans rien changer du tout à la somme moyennant le changement de signe des quantités de mouvement (cf. figure V.3.a). On obtient alors des diagrammes en échelle correspondant à des phonons du même type, retardé-retardé en l'occurrence. Pour retrouver à nouveau  $G_2$ , i.e. des diagrammes avec des phonons avancés-retardés il faut alors renverser le sens de toutes les flèches inférieures comme représenté sur la figure (V.3.b) obtenant ainsi les diagrammes en éventail bien connus. Le moment de transfert est maintenant donné par  $(\vec{k} + \vec{q}/2) - (-\vec{k}' + \vec{q}/2) = \vec{k} + \vec{k}'$  au lieu de  $\vec{q}$ , et l'équivalence avec les diagrammes en échelle permet d'écrire leur somme sous la forme :  $\tau / -i\Omega + D_0 |\vec{k} + \vec{k}'|^2$ . On obtient donc encore un pôle de diffusion mais dont l'origine est complètement différente, puisqu'il ne correspond plus à une loi de conservation, et peut disparaître si la symétrie  $\vec{k} \leftrightarrow -\vec{k}$  est brisée. Ce pôle de diffusion donne une contribution maximale pour la situation de rétrodiffusion où  $\vec{k} + \vec{k}' = \vec{0}$ . Par opposition au pôle obtenu en sommant les échelles de la figure (V.2), et par analogie avec les paires de Cooper dans les supraconducteurs où les électrons de moment  $\vec{k}$  et  $-\vec{k}$  sont couplés, le pôle obtenu en sommant les diagrammes en éventail est appelé pôle de Cooper ou "Cooperon".

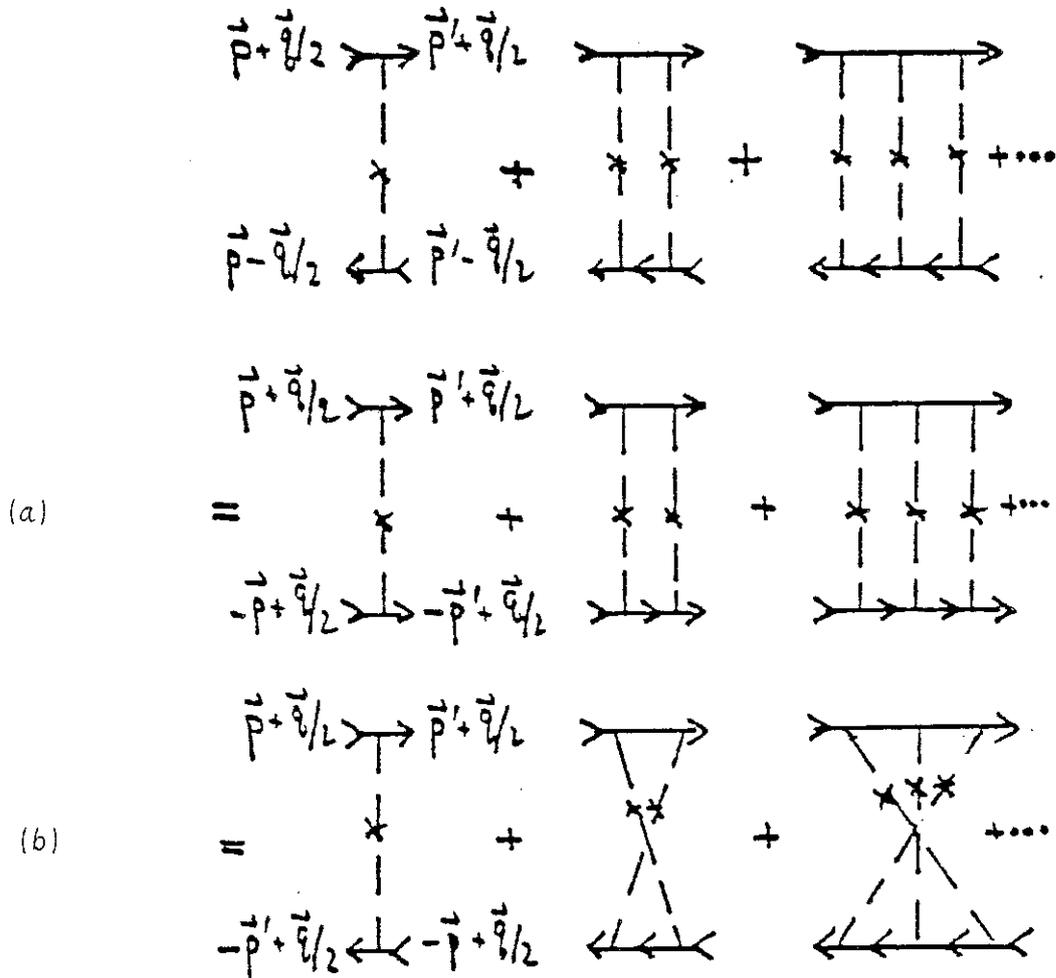


Fig. V.3 : Equivalence des diagrammes en échelle et en éventail.

B. Nature et justification du calcul de perturbation.

La présentation précédente des différents types de diagrammes, ceux en échelle et ceux en éventail, représente en fait un aboutissement révélant que la nature du phénomène de localisation faible est due à la symétrie par renversement du temps pour chaque état  $\vec{k}$ . Mais historiquement, les choses se passèrent autrement. En effet, les deux classes de diagrammes n'appartiennent pas au même ordre de perturbation. On peut en fait montrer que pour un même ordre  $s$ , correspondant au nombre d'impuretés mises en jeu, un diagramme croisé a un poids  $\lambda/\ell$  fois plus petit que son homologue en échelle<sup>(4)</sup>. C'est pourquoi, puisque le paramètre  $\lambda/\ell$  est très petit, les diagrammes croisés ont toujours été négligés. Ce fut le mérite de Langer et Neal<sup>(5)</sup> de montrer que si chacun d'eux était négligeable, il n'en était pas de même de leur somme qui peut même diverger pour la direction de rétrodiffusion, i.e. pour  $\vec{k} + \vec{k}' = \vec{0}$ . Il reste maintenant à justifier la validité du développement de perturbation en  $\lambda/\ell$  pour le calcul de  $G_2$  dans le cas des phonons. On a vu précédemment que la longueur d'onde du phonon dominant était donnée typiquement par  $\lambda(\omega) \approx 100 \text{ \AA}$ . Le libre parcours moyen élastique peut être évalué d'après (V.2) :

$$\ell(\omega) = \frac{v}{\sigma_M^2 \omega^2 g(\omega)}$$

Typiquement pour un milieu tri-dimensionnel on a :  $\omega \sim T \sim 10 \text{ K}$ ,  $v = 10^3 \text{ m/s}$ ,  $\theta_D = 300 \text{ K}$  et  $\sigma_M^2 \lesssim 1$  pour les verres, ce qui donne  $\ell(\omega) \approx 10^4 \text{ \AA}$ , justifiant ainsi le développement en  $\lambda/\ell$ .

Dans les limites de ce calcul de perturbation, on va montrer que les fluctuations de densité ("second son") mesurées par la fonction de corrélation  $C(\vec{r}, \vec{r}' ; t, t')$  sont de nature diffusive, avec une constante de diffusion anormale  $D(\omega, \Omega)$  associée à la correction au premier ordre en  $\lambda/\ell$  décrite par la somme des diagrammes croisés. Nous allons maintenant exposer les principales étapes du calcul de  $D(\omega, \Omega)$  qui est effectué en détail dans l'article reproduit à la fin du chapitre VI.



IV - CORRECTION AU COEFFICIENT DE DIFFUSION - LOCALISATION DU  
"DEUXIEME SON"

D'une façon naturelle, on va définir le coefficient de diffusion  $D(\omega, \Omega)$  associé aux fluctuations de densité à partir de la fonction de corrélation des courants :

$$D(\omega, \Omega) = \frac{v^2}{d} \cdot \frac{(\hbar v)^2}{\pi \omega^2 g_d(\omega)} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} \vec{k} \cdot \vec{k}' G_2(\vec{k}, \vec{k}' ; \omega, \Omega) \quad (V.8)$$

A l'ordre de perturbation où l'on s'est arrêté, l'équation du mouvement pour  $G_2$  (équation de Bethe-Salpeter) s'écrit :

$$G_2(\vec{k}, \vec{k}' ; \omega, \Omega) = G_{\vec{k}}^A(\omega) G_{\vec{k}'}^R(\omega + \Omega) \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} + G_{\vec{k}}^A(\omega) G_{\vec{k}'}^R(\omega + \Omega) \cdot U_{\vec{k}, \vec{k}'}(\omega, \Omega) \cdot G_{\vec{k}'}^A G_{\vec{k}}^R \quad (V.9)$$

où  $U_{\vec{k}, \vec{k}'}(\omega, \Omega)$  représente la somme des diagrammes croisés telle qu'elle a été évaluée dans le paragraphe précédent. La combinaison de (V.8) et (V.9) donne alors :

$$D(\omega, \Omega) = D_0(\omega) \left[ 1 - \frac{2}{\pi g_d(\omega)} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{-i\omega + D_0 q^2} + \dots \right] \quad (V.10)$$

où  $\sum_{\vec{q}}$  désigne la somme restreinte au régime hydrodynamique  $q\ell \ll 1$ . Il est à noter que la forme de la correction (V.10) coïncide avec la forme obtenue par Gorkov et al. <sup>(6)</sup> pour les électrons. En toute dimension, la relation (V.10) prédit une diminution de la constante de diffusion associée aux fluctuations de densité, c'est-à-dire une tendance pour ces dernières à se "localiser", mais nous allons voir que la forme de cette "localisation" varie énormément avec la dimensionnalité d'espace.

A. Seuil de mobilité à trois dimensions - transition.

La relation (V.10) se calcule aisément pour donner à  $d = 3$  :

$$D(\omega, \Omega) = D_0(\omega) \left[ 1 - \left( \frac{\omega}{\omega_3^*} \right)^6 + \dots \right] \quad (V.11)$$

où  $\omega_3^* \approx \omega_D / 2\sigma_M^{2/3}$  dépend fortement de la forme de la diffusion Rayleigh-Klemens. La validité du calcul de perturbation menant à la relation (V.11) est restreinte au régime où  $\omega \ll \omega_3^*$ . Néanmoins, la figure (V.4) suggère sans pouvoir bien entendu la démontrer l'existence d'un seuil à  $\omega_3^*$  au-delà duquel il y a absence complète de diffusion. L'existence de ce seuil, équivalent à la transition de localisation d'Anderson (cf. chapitre I) n'est pas limitée à notre approche perturbative et a pu être mise en évidence par S. John et M.J. Stephen<sup>(7)</sup> au moyen d'une correspondance entre notre système et le modèle  $\sigma$  non linéaire renormalisable.

B. Marginalité de la dimension deux - longueur de localisation associée.

En dimension deux, la relation (V.10) donne

$$D(\omega, \Omega) = D_0(\omega) \left[ 1 - \left( \frac{\omega}{\omega_2^*} \right)^2 \ln \frac{1}{\Omega \tau(\omega)} \right] \quad (V.12)$$

où  $\omega_2^* = \omega_D \frac{\pi}{2\sigma_M}$ . Dans la limite hydrodynamique imposée par notre calcul de perturbation,  $\Omega \tau(\omega) \ll 1$ ,  $D(\omega, \Omega)$  est négatif pour toute énergie  $\omega$ . Un tel comportement révèle une anomalie du développement de perturbation que nous allons essayer d'expliquer dans le paragraphe suivant. Précisons simplement ici que l'on définit une borne inférieure  $\tilde{\Omega}$  telle que  $D(\omega, \Omega) \geq 0$  pour  $\Omega \geq \tilde{\Omega}$ , soit

$$\tilde{\Omega} = \frac{1}{\tau(\omega)} \exp \left\{ - \left( \frac{\omega_2^*}{\omega} \right)^2 \right\}$$

On peut dès lors définir une longueur caractéristique

$$\xi(\omega) = \left[ \frac{D_0(\omega)}{\tilde{\Omega}} \right]^{1/2}$$

pour laquelle le développement (V.12) cesse d'être valable :

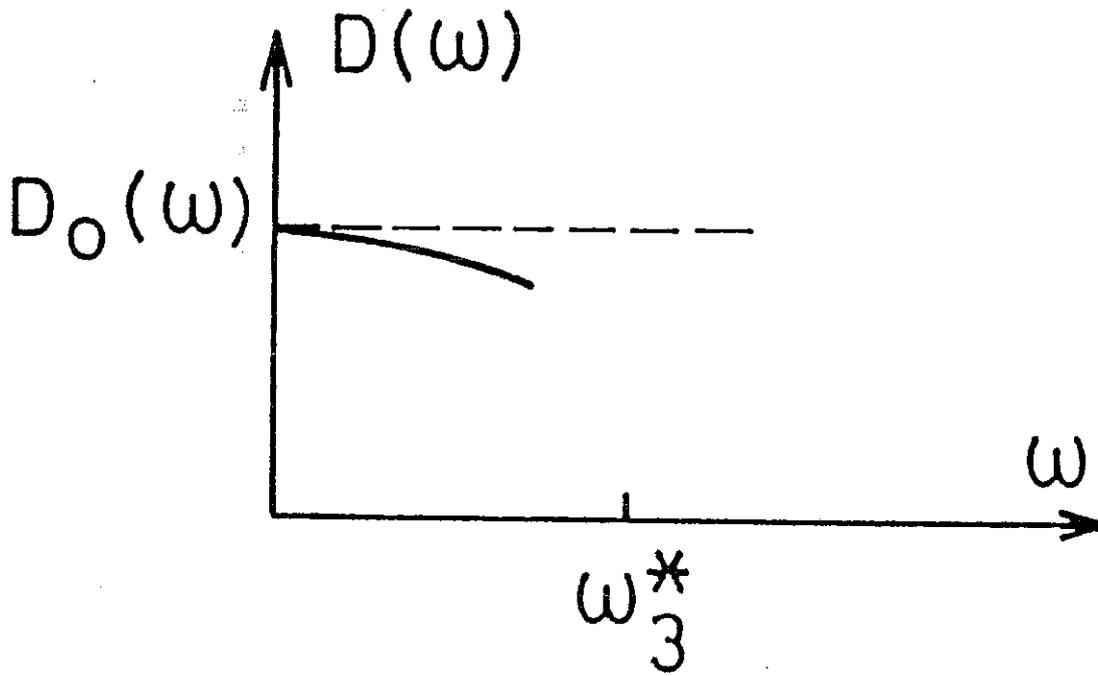


Fig. V.4 : Comportement de la constante de diffusion en fonction de l'énergie.

$$\xi(\omega) = \ell(\omega) e^{\left(\frac{\omega_2}{\omega}\right)^2} \quad (V.13)$$

qui coïncide avec la longueur de localisation  $\xi_0(\omega)$  obtenue par John et al. (7).

La divergence de  $\xi(\omega)$  pour  $\omega \rightarrow 0$  correspond à l'absence de diffusion pour les phonons de très grande longueur d'onde insensibles au désordre. Remarquons d'autre part que  $\xi(\omega) \gg \ell(\omega)$ , ce qui montre l'existence d'un régime de "localisation faible" à toute échelle de longueur intermédiaire entre  $\ell(\omega)$  et  $\xi(\omega)$ . Un tel comportement peut être opposé au cas unidimensionnel étudié dans la première partie où à cause de l'égalité  $\xi(\omega) \approx \ell(\omega)$  seul le régime de localisation forte subsiste.

V - INTERPRETATION PHYSIQUE DE LA CORRECTION AU COEFFICIENT DE  
DIFFUSION

Dans le contexte de la localisation faible des électrons, nous avons vu au chapitre I, que Khmel'nitskii et Larkin<sup>(8)</sup> ont proposé une interprétation physique de la correction aux coefficients de transport. Cette interprétation pour claire qu'elle soit ne fournit pas d'explication directe à la divergence logarithmique de la correction à  $D$  pour les systèmes bidimensionnels. C'est particulièrement ce problème que nous voudrions discuter ici. Désignons par  $\eta$  le paramètre sans dimension qui mesure la correction à  $D$  dans la relation (V.10) :

$$\eta = \frac{1}{L^d \rho g_d(\omega)} \sum_q \frac{1}{-i\Omega + D_0 q^2}$$

Le pôle de diffusion qui apparaît dans  $\eta$  représente la transformée de Fourier sur le temps et l'espace de la densité de probabilité  $P(\vec{r}, t) = (4\pi Dt)^{-d/2} e^{-r^2/4D_0 t}$  associée à la diffusion d'une particule lâchée en  $\vec{r} = \vec{0}$  à l'instant  $t = 0$ . La somme restreinte dans l'expression de  $\eta$  définit le temps de résidence  $\theta(\Omega)$  intégré jusqu'au temps  $t = 1/\Omega$  dans une boule de volume  $\ell^d$  au voisinage de  $\vec{r} = \vec{0}$ . Le temps de résidence est une mesure de la probabilité associée au retour d'une particule diffusive au point d'où elle a été lâchée.  $\theta(\Omega)$  est donc la somme de tous les temps pendant lesquels la particule a séjourné dans la boule de volume  $\ell^d$  :

$$\theta(\Omega) = \int dt e^{i\Omega t} \int_{\ell^d} d^d r P(\vec{r}, t) \quad (V.14)$$

A partir de la forme de  $P(\vec{r}, t)$ , on peut évaluer directement  $\theta(\Omega)$  :

$$\underline{d = 3} : \theta(\Omega) = \tau(\omega) \quad (V.15)$$

$$\underline{d = 2} : \theta(\Omega) = \tau(\omega) \ln(1/\Omega\tau(\omega))$$

A trois dimensions, la marche aléatoire est non récurrente, c'est-à-dire que la probabilité de retour à l'origine d'une particule diffusive tend vers zéro pour les temps infinis. Cela se traduit directement sur la forme de  $\theta(\Omega)$  qui est égal au temps passé par la particule dans la boule de rayon  $\ell$  où elle a été lâchée, avant qu'elle ne subisse sa première collision. Une fois celle-ci subie, la particule ne reviendra plus à son point de départ. Très différentes sont par contre les caractéristiques de la marche au hasard à deux dimensions. Ici,  $\theta(\Omega)$  diverge dans la limite des temps infinis. Cette divergence est associée à la nature récurrente de la marche aléatoire pour laquelle la particule retournera à son point de départ.

Jusqu'à maintenant, nous n'avons considéré que des propriétés relatives à la nature diffusive des fluctuations, et nous avons montré comment la divergence logarithmique leur était directement reliée. Il reste à expliquer la nature quantique ou plus précisément ondulatoire présente dans la correction  $\eta$  à D. L'autre temps caractéristique apparaissant dans  $\eta$  est  $t(\omega, \ell) = \rho g_D(\omega) \ell^d$ . Il représente le temps de vie associé à un état à deux phonons  $\vec{k}$  et  $-\vec{k}+\vec{q}$  confinés dans le volume  $\ell^d$ . Il apparaît assez naturellement puisque le processus de diffusion qui apparaît dans  $\eta$  est relié à la nature diffusive non pas des phonons, mais des fluctuations de densité cohérentes et récurrentes.  $\eta$  est alors donné par le rapport :

$$\eta(\omega, \Omega) = \frac{\theta(\Omega, \omega)}{t(\omega, \ell)} \quad (\text{VI.16})$$

On conçoit dès lors que la situation pour laquelle le temps de vie  $t(\omega, \ell)$  de l'état confiné coïncide avec le temps de résidence correspond à une localisation des fluctuations de densité et donc à une forte réduction de D.

## VI - CONCLUSION

Comme nous l'avons souligné en début de chapitre, notre motivation pour ce problème était double. Tout d'abord montrer que l'effet de localisation faible étudié de façon extensive pour les électrons est plus général en ce sens qu'il ne dépend pas de la statistique des excitations (bosons ou fermions) ni de la dispersion de celles-ci (quadratique vs linéaire). De plus, la localisation faible des phonons doit jouer un rôle important sur les propriétés de transport des milieux désordonnés puisqu'elle peut aller jusqu'à supprimer la diffusion à la transition de localisation. Dans de tels systèmes, les interactions anharmoniques deviennent importantes, aussi le but du chapitre suivant est d'étudier la coexistence entre localisation et anharmonicité en vue de l'application à des systèmes réels, les verres par exemple.



REFERENCES

1. P.G. KLEMENS, Proc. R. Soc. London, Ser. A208, 108 (1951).
2. A.A. MARADUDIN and A.E. FEIN, Phys. Rev. 128, 2589 (1962).
3. J.M. LUTTINGER, Phys. Rev. 135, A1505 (1964).
4. A.A. ABRIKOSOV, L.P. GORKOV and I.E. DZYALOSHINSKII, Quantum field  
Theoretical methods in Statistical Physics (Pergamon, New York,  
1965).
5. J.S. LANGER and T. NEAL, Phys. Rev. Lett. 16, 984 (1966).
6. L.P. GORKOV, A.I. LARKIN and D.E. KHMELNITZSKII, JETP Lett. 30,  
228 (1979).
7. S. JOHN, H. SOMPOLINSKY and M.J. STEPHEN, Phys. Rev. B27, 5592  
(1983).
8. D. KHMELNITZSKII, Physica (Amsterdam) 126B+C, 235 (1984).



C H A P I T R E VI

LOCALISATION FAIBLE ET INTERACTIONS ANHARMONIQUES DES  
PHONONS : APPLICATION AUX PROPRIETES DES VERRES  
A BASSE TEMPERATURE



Nous avons mis en évidence dans le chapitre précédent l'existence d'un effet de localisation faible pour les phonons harmoniques dans un milieu désordonné. Cependant, l'application de ce phénomène à l'étude des propriétés des verres doit inclure les effets supplémentaires associés à l'anharmonicité des phonons. C'est donc le but de ce chapitre d'étudier la combinaison de la localisation faible et de l'anharmonicité des phonons.

Les calculs détaillés ainsi qu'une discussion sur les propriétés des verres sont reproduits in extenso dans la publication située en fin de chapitre. Aussi, à leur place, je voudrais reprendre plus en détail les effets d'interaction coulombienne entre électrons faiblement localisés, discutés dans le chapitre I, et établir un parallèle avec le cas des phonons en montrant ce qui rapproche ou différencie les deux problèmes.

## I - RAPPEL SUR LES PROPRIETES DU GAZ DE FERMIONS DESORDONNE EN INTERACTION

Nous avons vu comment la présence de collisions élastiques des électrons sur des impuretés réparties aléatoirement pouvait modifier les propriétés de transport du système par le biais d'une diminution de la constante de diffusion : c'est l'effet de localisation faible. Mais il est vite apparu qu'il était important d'introduire les effets d'interaction coulombienne, si on voulait comparer aux résultats expérimentaux. Ils demeureraient en effet inexplicables si on se satisfaisait seulement de la remarque que l'interaction coulombienne entre électrons étant fortement écrantée, elle ne devait avoir que peu d'influence sur la localisation.

D'une façon générale, la seule interaction électron-électron conserve l'impulsion et ne peut donc, de fait, contribuer à la résistance électrique. C'est pourquoi l'effet des collisions sur les impuretés en changeant l'impulsion des électrons devient essentielle. Comme nous l'avons vu dans le chapitre précédent, cet effet est caractérisé par un transfert d'impulsion  $q$  (avec  $q\lambda \ll 1$ ) et d'énergie  $\hbar\Omega$  (avec  $\Omega\tau \ll 1$ ),

où  $\ell$  est le libre parcours moyen élastique caractéristique de ces collisions (avec  $\ell = v_F \tau$ ). On peut donc définir un temps caractéristique  $t_0 = \frac{2\pi}{\Omega}$ , tel que  $t_0 \gg \tau$ . Pendant ce "temps de corrélation"  $t_0$ , les électrons ont subi un grand nombre de collisions sur les impuretés, donnant lieu ainsi à une modification qualitative de l'interaction coulombienne nue. L'interaction effective obtenue dépend donc fortement du transfert d'énergie  $\hbar\Omega$ . Comme nous allons le voir, c'est cela qui modifie fortement la conductivité  $\sigma$  et la densité d'états  $N$  au niveau de Fermi.

#### A. Calcul de la correction à $\sigma$ et à $N$ .

Pour calculer le temps de vie et la correction de densité d'états à un électron, il nous faut évaluer la "self-energie" associée à l'interaction coulombienne que l'on traitera en perturbation. Ce développement nécessite la connaissance des états propres du système sans interaction, i.e. ceux du système désordonné qui, on le sait, ne sont pas des ondes planes. Soit  $\psi_i$  et  $E_i$  la fonction d'onde et l'énergie d'un état propre électronique. La fonction de Green à une particule est alors donnée par :

$$G_{ii}(\omega) = [\omega - E_i - \Sigma_i(\omega)]^{-1} \quad (\text{VI.1})$$

où  $\Sigma_i(\omega) = \Delta_i(\omega) + i \Gamma_i(\omega)$  représente la correction associée aux interactions. Nous devons d'autre part évaluer la self-énergie moyennée sur toutes les configurations, c'est-à-dire que lors de la moyenne, l'énergie  $E_i$  ne reste plus un bon nombre quantique et qu'il nous faut dès lors calculer :

$$\Sigma(E, \omega) = \frac{1}{N_0} \sum_i \overline{\delta(E - E_i) \Sigma_i(\omega)} \quad (\text{VI.2})$$

où  $N_0$  est la densité d'états à un électron et où la valeur moyenne est prise sur toutes les configurations de désordre. Pour calculer  $\Sigma(E, \omega)$ , il nous faut évaluer le diagramme représenté figure (VI.1). Pourquoi est-ce le diagramme pertinent ? En fait l'hamiltonien de perturbation associé à l'interaction coulombienne s'écrit :

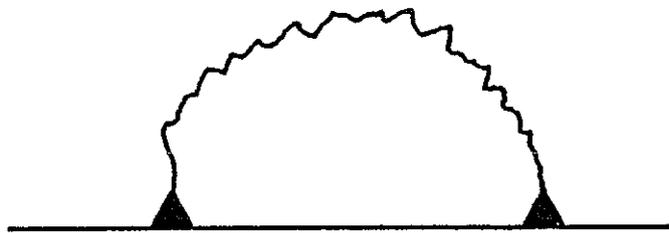
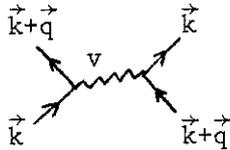


Fig. VI.1 : Correction à l'auto-énergie associée à l'interaction coulombienne.

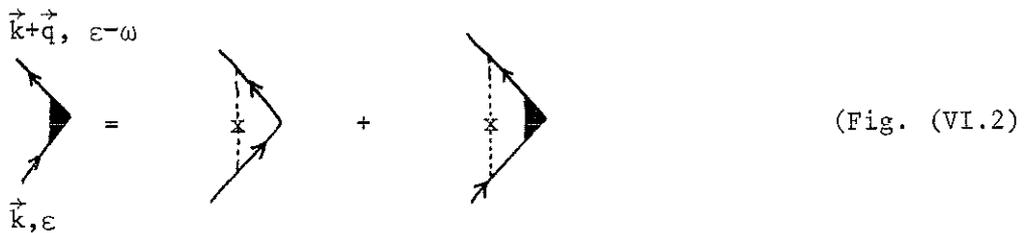


$$H_c = \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}+\vec{q}} v(\vec{q}) a_{\vec{k}+\vec{q}}^+ a_{\vec{k}} \quad (\text{VI.3})$$

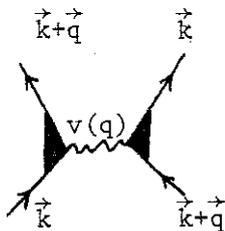
où  $v(\vec{q})$  représente dans un premier temps l'interaction coulombienne non écrantée. La correction au premier ordre en  $v$  associée à  $H_c$  est représentée par le diagramme :



où le potentiel  $v(\vec{q})$  donne lieu au transfert d'impulsion  $q$ . En présence de désordre, l'interaction des électrons avec les impuretés donne aussi lieu à un transfert de quantité de mouvement que l'on obtient en évaluant la correction de vertex représentée par :



Cette correction s'obtient au premier ordre, i.e. dans la limite  $k_F \ell \gg 1$ , en sommant les diagrammes en échelle discutés dans le chapitre V. Donc en présence de désordre, le terme d'interaction au premier ordre devient :



qui est topologiquement équivalent au diagramme représenté sur la figure (VI.1). Ce diagramme représente en fait la correction d'échange (Hartree-Fock) à  $\Sigma(E, \omega)$  ; la correction d'interaction directe (Hartree) donnant un comportement similaire après des calculs beaucoup plus obscurs, nous ne la traiterons pas ici (cf. réf. (1)). Le terme

d'échange s'écrit alors :

$$E_c = - \sum_{\substack{\text{états} \\ \text{occupés}}} \int d^3r d^3r' \psi_i^*(\vec{r}) \psi_j^*(\vec{r}') \psi_i(\vec{r}') \psi_j(\vec{r}) \cdot v(\vec{r}-\vec{r}')$$

et donc la self-énergie associée à l'échange en présence de désordre s'écrit :  $\Sigma(E) = \frac{1}{N_0} \overline{E_c \delta(E-E_c)}$  . Soit

$$\Sigma(E) = \frac{-1}{N_0} \sum_{ij} \int d^3r d^3r' \overline{\psi_i^*(\vec{r}) \psi_j^*(\vec{r}') \psi_i(\vec{r}') \psi_j(\vec{r}) \delta(E-E_i)} \cdot v(\vec{r}-\vec{r}')$$

ou de façon équivalente :

$$\Sigma(E) = - \int_{-\infty}^0 dE' \int d^3r d^3r' v(\vec{r}-\vec{r}') F(E, E', \vec{r}, \vec{r}') \quad (\text{VI.4})$$

où

$$F(E, E'; \vec{r}, \vec{r}') = \sum_{ij} \overline{\delta(E-E_i) \delta(E-E_j) \psi_i^*(\vec{r}) \psi_j^*(\vec{r}') \psi_i(\vec{r}') \psi_j(\vec{r})} \quad (\text{VI.5})$$

On ne peut pas à priori évaluer F car nous n'avons pas accès aux états propres  $\psi_i$  ; néanmoins la forme de F montre qu'elle peut être reliée à la fonction de corrélation densité-densité du gaz d'électrons. En effet, la transformée de Fourier de cette fonction de corrélation s'écrit :

$$\mathcal{E}(q, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt \int d^3r d^3r' e^{i\omega t} e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}-\vec{r}')} \langle [\rho(\vec{r}, t), \rho(\vec{r}', 0)] \rangle$$

Soit

$$\mathcal{E}(q, \omega) = \int d^3r d^3r' e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}-\vec{r}')} \int_0^{\infty} dE \int_{-\infty}^0 dE' \delta(E-E'-\omega) \overline{\sum_{ij} \psi_i(\vec{r}) \psi_j^*(\vec{r}) \psi_i^*(\vec{r}') \psi_j(\vec{r}') \delta(E-E_i) \delta(E-E_j)}$$

et en faisant l'hypothèse que le milieu moyen est invariant par translation, on obtient finalement :

$$\mathcal{E}(q, \omega) = \omega \int d^3r e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} F(\omega, \vec{r}) \quad (\text{VI.6})$$

Pour calculer explicitement  $F(\omega, \vec{r})$ , nous allons maintenant nous servir du fait que les fluctuations de densité dans le milieu s'éteignent par

diffusion ainsi que nous l'avons montré (dans le cas des phonons) dans le chapitre V. La fonction de réponse s'écrit alors :

$$\mathcal{E}(q, \omega) = \omega \frac{\partial n}{\partial \mu} \cdot \frac{Dq^2}{\omega^2 + (Dq^2)^2} \quad (\text{VI.7})$$

En combinant les équations (VI.4) à (VI.7), on obtient alors :

$$\Sigma(E) = - \frac{\partial n}{\partial \mu} \int_{-\infty}^0 dE' \int d^d q \frac{v(q) D_0 q^2}{(E-E')^2 + (D_0 q^2)^2} \quad (\text{VI.8})$$

comme correction associée à l'échange entre un électron d'énergie donnée E et le reste des électrons d'énergie E' de la mer de Fermi. La relation (VI.8) suscite un certain nombre de remarques :

i) Elle montre tout d'abord que  $\Sigma(E)$  associée à l'échange dépend très fortement de la différence d'énergie entre les électrons échangés. D'autre part, puisqu'elle dépend explicitement de E, elle conduit à une modification de la densité d'états à un électron :

$$\delta N = \frac{\partial \Sigma(E)}{\partial E} = \int d^d q \frac{v(q) D_0 q^2}{E^2 + (D_0 q^2)^2}$$

Pour évaluer cette correction, on fera l'approximation  $v(q) \cong v(0)$  puisque la contribution principale à  $\delta N$  s'obtient dans la limite  $q \rightarrow 0$ . On obtient alors :

$$\begin{aligned} \delta N &\propto v(0) \ln E & d = 2 \\ \delta N &\propto v(0) \sqrt{E} & d = 3 \end{aligned} \quad (\text{VI.9-})$$

Cette correction est directement reliée à un décalage des énergies propres du système sans interaction et pas à une modification du poids spectral des quasi-particules ; elle doit donc directement affecter la chaleur spécifique ou la densité d'états mesurée par effet tunnel ce qui a effectivement été observé<sup>(2)</sup> expérimentalement.

ii) La self-énergie donnée par l'équation (VI.8) est purement réelle et ne dépend pas de  $\omega$ , elle ne donne par conséquent aucun temps de vie

fini aux quasi-particules. En fait, d'une façon plus générale, il faut considérer l'interaction coulombienne écrantée en présence des impuretés et reprendre le calcul précédent. Nous ne le ferons pas ici, renvoyant plutôt à la référence (1) dont nous allons simplement rappeler les résultats. Si  $\Gamma(E)$  est la largeur du niveau d'énergie  $E$  alors :

$$\Gamma(E) \propto E^{3/2} \quad d = 3 \quad (VI.10)$$
$$\Gamma(E) \propto T \ln T \quad d = 2 \quad (\text{pour } |\omega - E| \ll k_B T)$$

Avant de discuter ces comportements plus avant, nous allons essayer de les retrouver tous au moyen d'arguments plus heuristiques.

#### B. Estimation de la correction à $\sigma$ et à $N$ .

Nous venons de voir dans le calcul précédent que les corrections à la conductivité et à la densité d'états du gaz d'électrons en interactions, avaient un comportement similaire aux corrections à  $\sigma$  dues au désordre (diffusion élastique) et mises en évidence dans le chapitre précédent. En particulier nous avons retrouvé pour  $d = 2$  la correction logarithmique obtenue précédemment par des considérations sur l'interférence des chemins de diffusion et cela alors que justement, nous n'avons pas tenu compte de ce phénomène dans les calculs du paragraphe précédent. Ce n'est pas un hasard, mais une conséquence commune de la nature diffusive des fluctuations de densité qui pour le gaz en interaction coulombienne intervient pour modifier la portée de l'interaction effective.

Afin d'obtenir cette portée, considérons à nouveau l'interaction entre deux électrons d'énergies  $E$  et  $E + \hbar\omega$  (mesurées par rapport à la surface de Fermi) correspondant à un transfert d'énergie  $\hbar\omega \approx E$  (afin que la largeur  $\Gamma$  des modes coïncide avec l'inverse du temps d'interaction inélastique). Un ordre de grandeur du temps pendant lequel cet état à deux électrons en interaction reste cohérent est donné par  $t_0 \sim \hbar/E$ . Pendant ce temps, l'interférence entre ces deux électrons

due aux collisions sur les impuretés est possible. Il faut alors pondérer l'amplitude de l'interaction  $V$  par la probabilité  $P(E)$  que pendant un temps inférieur à  $t_0$ , les deux particules se retrouvent au même endroit. On obtient alors une amplitude effective de l'interaction  $V_{\text{eff}}$  de la forme  $V_{\text{eff}} = V(1 + P(E))$ . D'autre part, les fluctuations de densité étant diffusives,  $P(E)$  est donnée par :

$$P(E) = \int_{\tau}^{\hbar/E} \frac{dt}{(D_0 t)^{d/2}} \quad (\text{VI.11})$$

Si on suppose maintenant que les corrections à la densité d'états et à la conductivité sont proportionnelles à la variation de portée de l'interaction, on obtient alors :

$$\frac{\delta\sigma}{\sigma} \propto \frac{\delta N}{N_0} \propto VP(E) \quad (\text{VI.12})$$

ce qui donne exactement les résultats obtenus dans le paragraphe précédent pour  $d = 2$  et  $d = 3$ .



## II - INFLUENCE DES CORRECTIONS DE LOCALISATION FAIBLE

Dans le calcul effectué dans le paragraphe (VI.I.A), nous avons traité le désordre à l'ordre zéro en  $(k_F \ell)^{-1}$ , c'est-à-dire en nous contentant dans les corrections de vertex du diagramme de la figure (VI.2) d'inclure uniquement les diagrammes en échelle (diffusion) et pas les diagrammes croisés (cooperon). Or nous disposons dans le modèle de deux paramètres de perturbation. L'un  $(k_F \ell)^{-1}$  décrit les corrections dues au milieu désordonné et l'autre décrit les interactions coulombiennes entre les électrons. Nous avons donc étudié précédemment un développement à l'ordre zéro en  $(k_F \ell)^{-1}$  et à l'ordre 1 en l'interaction. Pour prendre en compte les corrections de localisation faible, il faut donc étudier l'ordre 1 par rapport au désordre et à l'interaction. Ce travail a été effectué par Isawa et Fukuyama<sup>(3)</sup> qui ne trouvent pas de comportement singulier nouveau associé à l'insertion du cooperon mais plutôt un résultat identique à celui obtenu dans le paragraphe (VI.I.A) avec une modification des préfacteurs. Cela n'est guère étonnant puisque dans la limite  $q \rightarrow 0$  considérée ici pour l'interaction, le comportement de diffusion (diagrammes en échelle) et du cooperon (diagrammes croisés) sont similaires. Cela n'est évidemment plus vrai si l'on va à des ordres supérieurs pour le désordre ou l'interaction où l'approche de la transition de localisation en présence d'interaction donne lieu à une prolifération des diagrammes à considérer qui ne permet pas de définir simplement de bonnes variables d'échelle<sup>(4)</sup>.



### III - DISCUSSION DU CAS DES PHONONS

Sans reprendre les calculs sur l'interaction anharmonique des phonons localisés qui sont développés de façon extensive dans la publication qui suit ce chapitre, on peut établir un parallèle avec le cas des électrons discuté précédemment. Il faut noter tout d'abord les différences fondamentales associées à la nature locale de l'interaction anharmonique et à l'absence d'effet d'écran (l'interaction est toujours statique). Nous avons vu que, physiquement, le rôle du désordre est d'augmenter l'intensité de l'interaction coulombienne à cause de la nature diffusive du mouvement des électrons dans une région donnée de l'espace. Ce raisonnement tient aussi dans le cas des phonons mais non pas pour augmenter l'interaction anharmonique entre les phonons, mais plutôt parce que l'effet d'interférence décrit par le cooperon permet de coupler des phonons générés par interaction anharmonique et donc de les localiser ce qui ne serait pas le cas en l'absence de désordre. Ainsi, si on considère le cas du couplage  $\gamma_4$  représenté sur la figure (VI.3(a) et (b)), on constate que le phonon virtuel  $(\omega_1, \vec{k}_1)$  a, à basse énergie, un temps de vie suffisamment long pour pouvoir être corrélé via le désordre au phonon  $(\omega, \vec{k})$  qui lui a donné naissance. Ce dernier se trouve alors piégé dans une fluctuation de densité ce qui a pour effet de le localiser et lui donner un temps de vie fini :

$$\Gamma^{(4)}(\omega) \propto \gamma_4 [1 - (\omega/\omega^*)^6]^{-7/2} \quad (\text{VI}/13)$$

Cet effet est d'autant plus intéressant qu'en l'absence de désordre, ce diagramme donne une self-énergie réelle, c'est-à-dire seulement une modification de la densité d'états, mais n'introduit pas de durée de vie finie au phonon  $(\omega, \vec{k})$ . L'exposant élevé qui intervient dans la relation (VI.13) provient de la forte dépendance en fréquence de la diffusion Rayleigh-Klemens comme nous l'avons déjà remarqué dans le chapitre V précédent. De plus,  $\omega^*$  représente la fréquence correspondant à un seuil de localisation. On obtient donc au voisinage de ce seuil une diminution très brutale du temps de vie des phonons et

une annulation à  $\omega^*$ . De même, on obtient une forte augmentation de la densité d'états.

Une correction du même ordre mais beaucoup plus classique est obtenue dans l'interaction anharmonique à trois phonons représentée par les diagrammes de la figure (VI.4(a) et (b)). Ce terme est beaucoup plus classique en ce sens que déjà en l'absence de désordre, il donne un temps de vie fini aux phonons de la forme :

$$\frac{1}{\tau} \propto \omega T C_V(t) \quad (\text{VI.14})$$

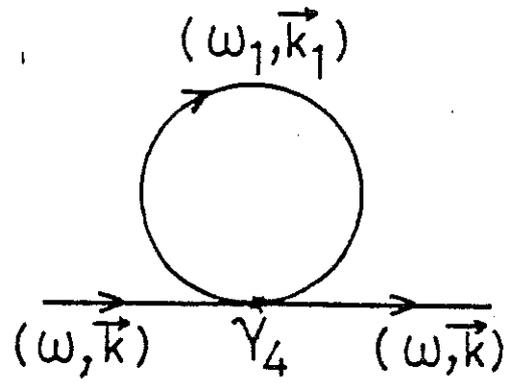
où  $C_V(T)$  est la chaleur spécifique ; c'est la formule de Landau-Rumer <sup>(5)</sup>. Mais ici encore, le rôle du désordre va être de corrélérer des phonons issus d'interactions anharmoniques et donc de les localiser en diminuant leur temps de vie. On obtient alors :

$$\Gamma^{(3)}(\omega) \propto \gamma_3^2 [1 - (T/T^*)^6]^{-7/2} \quad (\text{VI.15})$$

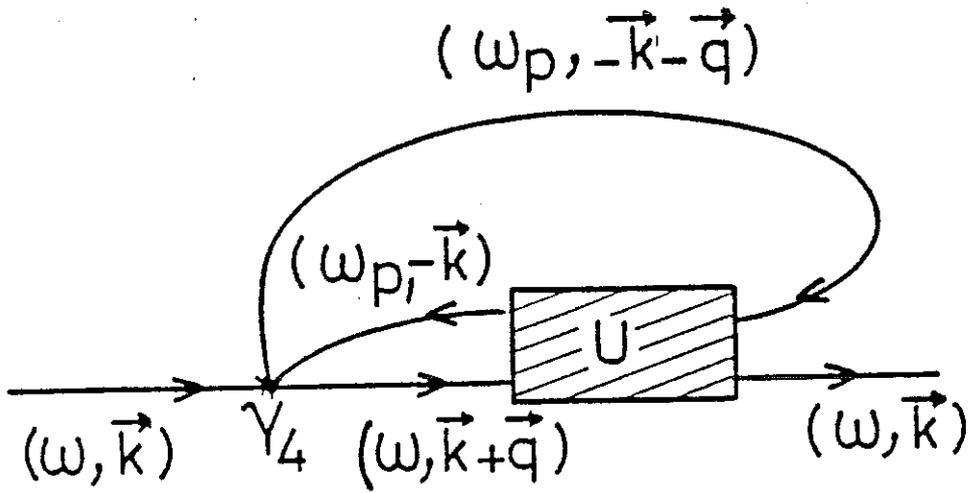
et une variation relative de densité d'états :

$$\frac{\delta g}{g} \propto \gamma_3^2 [1 - (T/T^*)^6]^3 \quad (\text{VI.16})$$

où  $T^* = \frac{\hbar\omega^*}{k_B}$ . Ces mêmes corrections peuvent aussi être calculées à deux dimensions et nous permettent finalement de récapituler tous les résultats de ce chapitre au moyen du tableau ci-dessous.

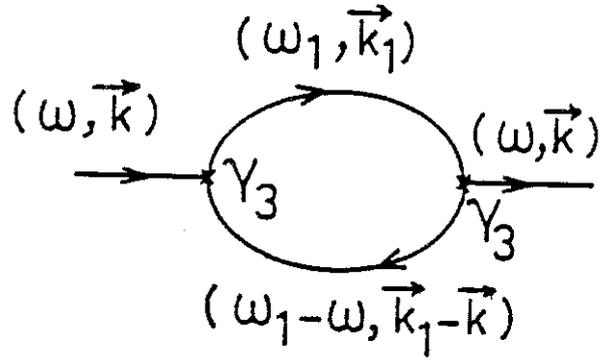


(a)

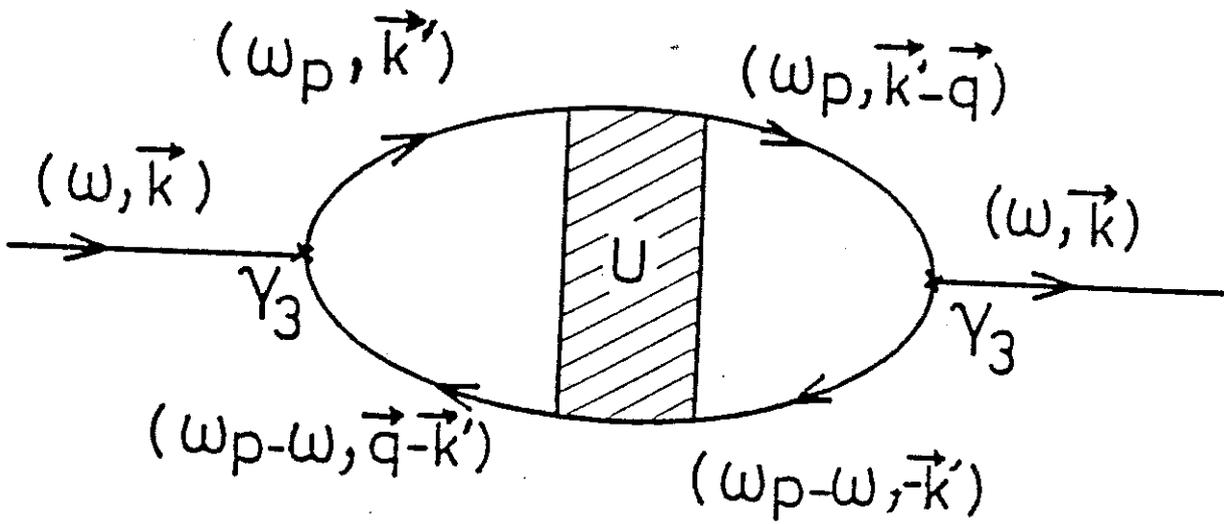


(b)

Fig. VI.3



(a)



(b)

Fig. VI.4

	Anharmonique $\gamma_4$	Anharmonique $\gamma_3^2$	Interaction coulombienne écranée
Variation de densité d'états $\delta g/g$	$\gamma_4 \Gamma^2 (\omega) n(\frac{\omega}{T}) [1 - (\frac{\omega}{T})^6]^{-3}$	$\gamma_3^2 (\frac{T}{\theta_D})^7 [1 - (T/T^*)^6]^{-3}$	$v(0) (\frac{T}{2D})^{1/2}$
Temps de vie inverse $\Gamma$	$\gamma_4 \Gamma^2 (\omega) n(\frac{\omega}{T}) [1 - (\frac{\omega}{T})^6]^{-7/2}$	$\gamma_3^2 \omega^2 (\frac{T}{\theta_D})^5 [1 - (T/T^*)^6]^{-7/2}$	$E^{3/2}$
Variation de densité d'états $\delta g/g$	$\frac{T_1}{\omega^2 T} \ln(\frac{\omega}{T})$ $T_1 = \frac{32}{k_B \gamma_4}$	$\gamma_3^2 (\frac{T}{\theta_D})^3 \ln(\frac{1}{\omega T(T)})$	$\frac{v(0)}{E_F T} \ln  \Omega \tau $
Temps de vie inverse $\Gamma$	$\gamma_4 T \Gamma(\omega)$	$\gamma_3^2 \omega (\frac{T}{\theta_D})^3 [1 - (\frac{T}{T^*})^2 \ln(\frac{1}{\omega T(T)})]^{-3}$	$T \ln T ( \omega - E  \ll k_B T)$

Dans ce tableau,  $\Gamma(\omega)$  représente l'inverse du temps de vie Rayleigh-Klemens,  $n(\frac{\omega}{T})$  le facteur d'occupation de Bose-Einstein et  $\theta_D$  la température de Debye.

d=3

d=2



REFERENCES

- 1 - B.L. Altschuler, A.G. Aronov and P.A. Lee, Phys. Rev. Lett. 44  
(1980) 1288.
- 2 - Y. Imry and Z. Ovadyahu, Phys. Rev. Lett. 49 (1982) 841.
- 3 - Y. Isawa, K. Hoshino and H. Fukuyama, J. Phys. Soc. of Jpn 51  
(1982) 3262.
- 4 - C. Castellani, C. di Castro, P.A. Lee and M. Ma, Phys. Rev. B 30  
(1984) 527.
- 5 - L. Landau and G. Rumer, Phys. Z. Sowjet union 11 (1937) 18.



## Weak localization and anharmonicity of phonons

E. Akkermans and R. Maynard

*Centre de Recherches sur les Très Basses Températures, Centre National de la Recherche Scientifique et Université Scientifique et Médicale de Grenoble (USMG), Boîte Postale 166X,**38042 Grenoble Cédex, France*

(Received 28 December 1984)

The problem of localization of phonons in disordered materials is studied in the framework of the weak-localization theory. Quantum correction to phonon diffusion is calculated by the resummation technique of maximally crossed diagrams in two and three dimensions. The strong energy dependence of the elastic mean free path—the Rayleigh-Klemens scattering—is responsible for the existence of a threshold frequency  $\omega_j^*$  where the diffusion constant vanishes. The value of  $\omega_j^*$  depends only on the local fluctuation of masses and on the Debye frequency in three dimensions. This threshold describes the phenomenon of localization of phonon density fluctuations or second sound. The self-energies of the phonons are strongly affected by this quantum correction via the anharmonic interactions. The two basic anharmonic couplings contribute to the one-phonon renormalization and provide shortening of the mean lifetime as well as excess of spectral density in the vicinity of the threshold. In two dimensions, as for the electrons, the dynamical quantum correction diverges logarithmically when the frequency goes to zero. A procedure of convergence is used by cutting off the low-frequency contributions at the inelastic relaxation rate. Renormalization of phonons are obtained in a self-consistent way. Finally a tentative application of the previous results to the low-temperature properties of glasses is discussed. In particular the existence of a plateau in thermal conductivity accompanied by excess specific heat in all the glasses measured so far could be understood as the manifestation of localization of acoustic-phonon density at the critical threshold  $\omega_j^*$ .

## I. INTRODUCTION

The problem of localization of particles in a disordered medium has received considerable attention in recent years.<sup>1</sup> Important progress has been obtained in describing electron diffusion in the weak-localization regime where both the elastic scattering and the interparticle interaction are treated as perturbations. One important result is the quantum correction to the two-particle propagator which decreases the diffusion constant of the density fluctuations by constructive interferences of the back-scattering at the site origin. This quantum correction has been verified by magnetoresistance experiments where the magnetic field destroys the coherence. The transposition of this new concept to phonons is the main motivation of this article and has never been attempted as yet to our knowledge. Passing from electrons to phonons implies many modifications which must be carefully discussed, particularly the relevance of the statistics (bosons or fermions) for building up the diffusion kernel of the two-particle interaction as well as the different dispersions: linear for the phonons and quadratic for electrons. A striking difference arises from the strong frequency dependence of the characteristic length or time in the phonon problem. In particular, the strong energy dependence of the elastic mean free path must be contrasted to that of the electron whose mean free path varies both smoothly and weakly. Moreover, the Fermi-Dirac statistics restrict the range of energy to a narrow vicinity of the Fermi level at low temperatures. Let us call the elastic relaxation time  $\tau(\omega)$ ; it is well known that it obeys the Rayleigh-

Klemens<sup>2</sup> law which is written in  $d$  dimensions:

$$\frac{1}{\tau(\omega)} = \sigma_M^2 \omega^2 g_d(\omega), \quad (1)$$

where  $\sigma_M^2$  is the local fluctuation of masses—or harmonic restoring forces—and  $g_d(\omega)$  is the spectral density of modes (per atom) in  $d$  dimensions:

$$g_d(\omega) = d \frac{\omega^{d-1}}{\omega_D^d}, \quad (2)$$

$\omega_D$  being the Debye cutoff frequency of a unique branch of phonons we will consider here. In three dimensions, the elastic relaxation time varies strongly, as  $\omega^{-4}$ , which clearly distinguishes phonons from electrons: A dramatic consequence of this  $\omega$  dependence will be the vanishing diffusivity of phonon density fluctuations—called second sound—at a threshold frequency  $\omega_j^*$ . Although the critical localization phenomenon is, strictly speaking, beyond the perturbation theory of weak localization, we believe that the occurrence of this critical frequency  $\omega_j^*$  for the diffusion constant reveals the existence of a genuine threshold of mobility for phonons in three dimensions. The same phenomenon, absence of diffusion, for the static case is a signature of the general localization of modes in two dimensions. This result confirms the recent work of John *et al.*<sup>3</sup> where a mobility edge was found in three dimensions by a renormalization treatment of the nonlinear  $\sigma$  model. Here, a quite different approach based on diagrammatic expansion of the maximally crossed diagrams<sup>4</sup> in the weak-localization regime gives a correct

starting point for a scaling treatment. Another new consequence of the reduction of the diffusion constant at high frequency is the shortening of the mean lifetime of phonons. Phonons are coupled to the phonon density fluctuations by anharmonic interactions; this effect provides the well-known Landau-Rumer<sup>5,6</sup> mean lifetime of phonons in a perfect crystal. The counterpart of the Landau-Rumer attenuation time is obtained here in the weak-localization regime, and the prediction of a considerable reduction of the phonon lifetime at high frequency when  $\omega$  approaches  $\omega_j^*$ , or at high temperature when  $T$  tends to  $T^*$  ( $\equiv \hbar\omega_j^*/k_B B$ ), is obtained directly from the coupling of the phonon with local-density fluctuations.

This drastic shortening of the phonon mean free path seems to us very important in the context of glasses.<sup>7</sup> As a matter of fact, it has been well known for a long time that the thermal conductivity of glasses at low temperature has a plateau, even a dip sometimes, around 10 K. The value of the conductivity at the plateau is very low, of the order of  $10^{-1} \text{ W m}^{-1} \text{ K}^{-1}$ . The mean free path derived from the kinetic formula of conduction is very short, typically a few angstroms, sometimes less. Accompanying this plateau, an excess specific heat has been observed in the same temperature range. These observations have inspired many attempts at explanation during the last decade. Let us mention the most recent one where it was assumed that, at short length scales, glasses have a fractal structure.<sup>8</sup> In this model, the spectral density of modes changes from phonons to fractons at a characteristic frequency related to the length scale of the fractal structure. Since the fractons are localized they do not contribute to the thermal conductivity but only to the specific heat. Although describing qualitatively the experimental situation, this model calls for careful structural analysis of the local order in a possible fractal structure. In contrast, without any special assumption as to the structure of glasses, we believe that present weak localization and anharmonicity theory provide an indication for the occurrence of a plateau in the thermal conductivity and the excess specific heat.<sup>7</sup> We note that no special parameters are necessary in our model except the basic features of phonons: sound velocity and Debye temperature. It is, therefore, natural that all glasses exhibit this universal behavior of a plateau in the thermal conduction and excess specific heat.

This article is organized in four sections. In Sec. II, the quantum correction to diffusion is calculated by the well-known series expansion of the maximally crossed diagrams of the two-phonon propagator. The diffusion constant of phonon density (second sound) exhibits a strong frequency dependence and vanishes in three dimensions at a critical value  $\omega_j^*$ . In two dimensions the same diffusion constant is defined only in the dynamical regime  $\Omega \neq 0$ , as expected from the general result of localization in two dimensions.<sup>9,10</sup> A simple physical picture of this quantum correction is put forward in terms of the ratio of the residence time of the two-phonon coherent state at the origin over the lifetime of the same two-phonon state. Section III is devoted to the self-energy of phonons coupled via anharmonicity to density fluctuations. The two basic diagrams of the anharmonic expansion, to third and

fourth order, are modified in order to take into account the formation of the two-phonon coherent backscattered state. As a result the phonon lifetime is obtained as a function of frequency and temperature and is strongly reduced when  $\omega$  tends towards  $\omega_j^*$  or  $T$  towards  $T^*$ . In a similar way, the density of states is obtained for both anharmonic interactions and shows an important enhancement around  $\omega_j^*$ . In Sec. IV, the problem of two-dimensional weak localization is carefully analyzed, since a low-frequency cutoff is necessary for preventing the infrared divergence. A discussion of the basic expressions of the phonon self-energy is developed in terms of the cutoff frequency. The possible applications of the previous results to low-temperature thermal properties of glasses are discussed in Sec. V, while this work is summarized in Sec. VI.

## II. QUANTUM CORRECTION TO DIFFUSION AND THE EXPRESSION FOR THE PHONON DIFFUSION KERNEL

The analysis for the phonon diffusion kernel is based on the standard diagrammatic techniques<sup>11</sup> for a particle moving in the field of randomly distributed impurities considered as elastic scatterers. The transport coefficients or the diffusion constant can be derived from the average two-phonon Green's function

$$G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega, \Omega) = \langle G_{\mathbf{k}}^R(\omega + \Omega) G_{\mathbf{k}'}^A(\omega) \rangle, \quad (3)$$

where  $\langle \rangle$  represents the mean value over all configurations of impurity centers, and where  $G_{\mathbf{k}}^R(\omega + \Omega)$  and  $G_{\mathbf{k}'}^A(\omega)$  describe, respectively, the retarded and advanced one-phonon Green's function with momentum  $\mathbf{k}$  and energy  $\omega + \Omega$  ( $\mathbf{k}'$  and  $\omega$ , respectively).

The first diagrams for  $G_2$  are depicted in Fig. 1. In order to calculate the dominant contribution to  $G_2$  given in Eq. (3), the most divergent terms in the density expansion must be resummed.<sup>4</sup> This resummation will ultimately lead to localization of density fluctuations.

Let us start from the well-known Bethe-Salpeter equation (rederived in Appendix A) for  $G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega, \Omega)$ :

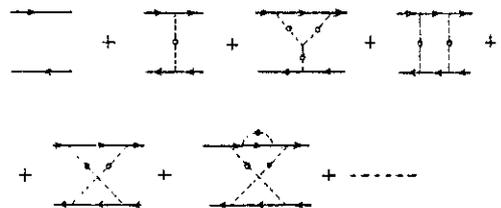


FIG. 1. Relevant diagrammatic expansion for  $G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega, \Omega)$ . The lines with arrows correspond to the one-phonon Green's function and the dashed lines represent the Fourier transforms of the interaction potential between a phonon and an impurity.

$$G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega, \omega') = G_k^A(\omega) G_{k'}^R(\omega') \left[ \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}_1} U_{\mathbf{k}, \mathbf{k}_1}(\omega, \omega') G_2(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}'; \omega, \omega') \right]. \quad (4)$$

This equation relates the two-phonon propagator to the one-phonon propagators  $G_k^{A,R}$  and the irreducible part of the vertex interaction  $U_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}(\omega, \omega')$  as shown in Fig. 2.

$U$  is built up from impurity scatterers which break the momentum conservation law but conserve the energy. At first sight it may be surprising that the interaction  $U_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}(\omega, \omega')$  couples two phonons of different energy  $\hbar\omega$  and  $\hbar\omega'$ , while the basic scattering is elastic. But this is true and it results from the quantum treatment of diffusion. Let us call  $D_0(\omega)$  the diffusion constant of one phonon  $\omega$ . Classically we know that diffusion introduces a relationship between space (or  $k$ ) and time variables. By breaking the translational invariance and, consequently, changing the  $\mathbf{k}$ 's at each collision, the diffusive one-phonon motion introduces a frequency dependence  $\omega - \omega' \sim D_0(k - k')^2$  which, by virtue of the uncertain energy-time relation, extends the energy shell for the interaction. The dominant contribution to  $U$  comes from the maximally crossed diagrams (or fan-shaped diagrams) which can be summed up as a geometrical series.<sup>12</sup> The most divergent part of these diagrams comes from back-scattering where  $\mathbf{k}' = -\mathbf{k} + \mathbf{q}$ ,  $q$  small  $q l(\omega) \ll 1$ , and  $|\omega' - \omega| = \Omega$  small,  $\Omega \tau(\omega) \ll 1$ , where  $l(\omega) = v\tau(\omega)$  is the elastic mean free path of a phonon  $\omega$ . In Appendix A, we report the calculation of the vertex  $U$  which, at the lowest order in  $\Omega$  and  $q$  in the denominator gives

$$U(q; \Omega, \omega) = \frac{2v^4 \hbar^2}{\pi D_0^2(\omega) g_d(\omega)} \frac{1}{-i\Omega + D_0(\omega)q^2}, \quad (5)$$

where  $v$  is the sound velocity for the unique branch of acoustic phonons  $\omega = vk$  as assumed and the spectral density  $g_d(\omega)$  is given by Eq. (2). The expression given by Eq. (5) of the diffusion vertex calls for some remarks.

(1) It is the phonon counterpart of the electron diffusion vertex which has been established in the context of impure metals [see, for example, Eq. (16) of Ref. 12]. In Eq. (5),  $\omega$  stands for Fermi energy in the electron problem while  $D_0(\omega)$  represents the diffusion coefficient of electrons at the Fermi level.

(2) Although the acoustic approximation  $\omega = vk$  is used in the expansion in  $q$  of the denominator, a term in  $q^2$  is obtained in two and three dimensions as in the electron problem where  $E \sim k^2$ . This is not true in one dimension where the general condition of validity of perturbation expansion is not fulfilled.<sup>12</sup>

(3) The diffusion coefficient  $D_0(\omega)$  is related to the Rayleigh-Klemens scattering time  $\tau(\omega)$  or the elastic

linewidth of the phonon propagator (see Appendix A),  $\Gamma(\omega) = \hbar/\tau(\omega)$  by the well-known relation

$$D_0(\omega) = \frac{v^2 \tau(\omega)}{d} = \frac{\hbar v^2}{d \Gamma_d(\omega)}. \quad (6)$$

Since the Rayleigh scattering frequency is proportional to  $\sigma_M^2$ , the local fluctuations of masses,  $U$  varies like  $\sigma_M^4 g_d(\omega)$  as expected. Therefore, the first term of the series expansion is a good representation of the  $X$  or crossed diagram.

(4) The denominator of Eq. (5) exhibits a diffusion pole: It implies that the dominant contribution will come from the vicinity of the diffusion pole  $\Omega \sim D_0 q^2$  in the  $\Omega$ - $q$  plane. Let us define the diffusion coefficient  $D(\omega, \Omega)$  by the velocity currents correlation function.<sup>9,13</sup> This leads, in the limit of acoustic phonons, to the following expression:

$$D(\omega, \Omega) = \frac{v^2}{d} \frac{(\hbar v)^2}{\pi \omega^2 g_d(\omega)} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega, \omega'). \quad (7)$$

For  $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{q}$  and  $\Omega = |\omega' - \omega|$ , as before, we expand the Green's functions in powers of  $\Omega$  and  $q^2$ , and we solve the Bethe-Salpeter equation given by Eq. (2) to first order to obtain

$$\begin{aligned} G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega, \omega') &= G_k^A(\omega) G_{k'}^R(\omega') \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \\ &+ G_k^A(\omega) G_{k'}^R(\omega') U_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}(\omega, \omega') G_k^A(\omega) G_{k'}^R(\omega'), \end{aligned} \quad (8)$$

where

$$U_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}(\omega, \omega') = U(q, \Omega, \omega)$$

is given by Eq. (5). By replacing Eq. (8) in the expression of  $D(\omega, \Omega)$ , one obtains two terms. The first one proportional to  $\sum_{\mathbf{k}} k^2 G_k^A(\omega) G_{\mathbf{k}'}^R(\omega')$  gives  $D_0(\omega)$ , the single-phonon diffusion coefficient, while the second produces the quantum correction to classical diffusion, and involves the scalar product  $\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}' = \mathbf{k} \cdot (\mathbf{q} - \mathbf{k})$ .

Just as before (cf. Appendix A), the sum  $\sum_{\mathbf{k}} \mathbf{k} \cdot \mathbf{q}$  cancels and there remains only a term proportional to  $-k^2$  which gives finally, for  $D(\omega, \Omega)$ ,

$$D(\omega, \Omega) = D_0(\omega) \left[ 1 - \frac{2}{\pi g_d(\omega)} \sum_q' \frac{1}{-i\Omega + D_0(\omega)q^2} + \dots \right]. \quad (9)$$

This is the expression for the quantum correction to the dynamical diffusion coefficient at frequency  $\Omega$ , associated with the density fluctuations. It was first derived by Gor'kov *et al.*<sup>9</sup> for electrons for  $d = 1, 2, 3$  in a very similar form. The summation  $\sum_q'$  indicates a restriction in

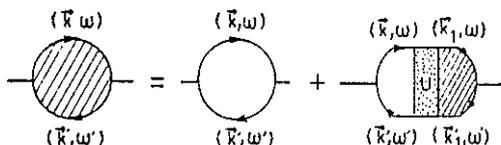


FIG. 2. Bethe-Salpeter equation for the two-phonon Green's function.

the range of  $q$  for which the regime of density fluctuations is hydrodynamic:  $ql \ll 1$  and  $\Omega\tau \ll 1$ .

The quantum correction term is complex, but the imaginary part is reduced from the real part by a factor  $(\Omega\tau)^{1/2}$  for  $d=3$  and  $(-\ln\Omega\tau)^{-1}$  for  $d=2$  and will be neglected. The calculation of the integral over  $q$  is straightforward and gives, in the limit  $\Omega\tau \ll 1$ , the following expressions: for  $d=3$ ,

$$D(\omega) = D_0(\omega) \left[ 1 - \frac{3}{\pi^2 \rho} \frac{\tau}{g_3(\omega) l^3} \right], \quad (10)$$

and for  $d=2$ ,

$$D(\omega, \Omega) = D_0(\omega) \left[ 1 - \frac{1}{\pi^2 \rho} \frac{\tau}{g_2(\omega) l^2} \ln \left[ \frac{1}{\Omega\tau} \right] \right], \quad (11)$$

where  $\rho = N/L^d$  is the density.

It is remarkable that at three dimensions  $D(\omega)$  does not depend on frequency  $\Omega$ , while at two dimensions the  $\ln$  dependence of  $D(\omega, \Omega)$  introduces a singularity when  $\Omega \rightarrow 0$  which is considered as a signature for the localization of the two-dimensional (2D) systems. Since  $l = v\tau$  and  $\tau(\omega)$  varies for Rayleigh scattering as  $\omega^{-(d+1)}$ , we obtain finally the following  $\omega$  dependence for phonons of energy  $\omega$ : for  $d=3$ ,

$$D(\omega) = D_0(\omega) \left[ 1 - \left[ \frac{\omega}{\omega_3^*} \right]^6 \right], \quad (12)$$

with  $\omega_3^* = 0.51 \alpha_M^{-2/3} \omega_D$ , and for  $d=2$ ,

$$D(\omega, \Omega) = D_0(\omega) \left[ 1 - \left[ \frac{\omega}{\omega_2^*} \right]^2 \ln \frac{1}{\Omega\tau(\omega)} \right], \quad (13)$$

with  $\omega_2^* = (2\sigma_M/\pi)^{-1} \omega_D$ .

At  $d=3$ , the relation (12) describes a vanishing static diffusion constant when  $\omega$  approaches the threshold  $\omega_3^*$ . For the extreme case of disorder—glasses for instance— $\sigma_M \approx 1$  and  $\omega_3^*$  is less, but not far from,  $\omega_D$ . This result has been established for Rayleigh-type scattering relaxation time which is valid only for dilute concentration of impurities. Although the validity of the present calculation in the weak-localization limit is of a perturbative nature and restricted to  $\omega \ll \omega_3^*$ , we observe that the quantum correction to the diffusion constant increases strongly with  $\omega$  up to a threshold frequency  $\omega_3^*$  where a complete absence of diffusion occurs. It must be realized that this absence of diffusion affects the fluctuations of phonon density. Since these excitations of the phonon density are called second sound, we could describe this effect as *the localization of second sound near  $\omega_3^*$* . In fact, the one-phonon mean free path is also strongly affected by this coherence effect through the anharmonic coupling to this density fluctuation.

This result distinguishes the present theory from a previous approach of John *et al.*<sup>3</sup> where a mobility edge is found by scaling considerations on the one-phonon problem. The two-dimensional case needs special discussion since, as shown by Eq. (13), the diffusion constant vanishes for any energy in the static regime  $\Omega \rightarrow 0$  (see Sec. IV).

A simple physical interpretation of weak localization has been largely used recently for the electron localization problem in terms of coherent backscattering.<sup>15</sup> We think that a similar analysis could be very useful here in the context of phonons and will make more transparent the underlying physical picture.

Let us call  $\eta$  the dimensionless quantum correction to diffusion from Eq. (9):

$$\eta \sim \frac{1}{L^d g_d \rho} \sum_q \frac{1}{-i\Omega + D_0 q^2}. \quad (14)$$

The diffusion pole in Eq. (14) given by the expression  $(-i\Omega + D_0 q^2)^{-1}$ , is nothing but the Fourier transform in  $q$  and  $\Omega$  of the probability density

$$P(r, t) \sim (Dt)^{d/2} \exp(-r^2/4Dt)$$

for a diffusing particle starting from  $r=0$  at  $t=0$ . Then the sum over  $q$  up to  $|q|=1/l$  describes precisely the residence time  $\Theta(\Omega)$  up to  $t=1/\Omega$  for the diffusing particle to be found in a volume  $l^d$  in the neighborhood of  $r=0$ :

$$\Theta(\Omega) = \int dt e^{i\Omega t} \int_{(l^d)} d^d r P(r, t), \quad (15)$$

where the spatial integration of  $P(r, t)$  represents the return probability near the origin in a sphere of radius  $l$ .

By a direct calculation of Eq. (15) using the standard expression of  $P(r, t)$  it is easy to derive Eqs. (10) and (11) for  $d=2$  and  $d=3$ :  $\Theta \sim \tau$  for  $d=3$  and  $\Theta \sim \tau \ln(1/\Omega\tau)$  in  $d=2$  where a divergence is obtained for  $\Omega \rightarrow 0$  since the two-dimensional random walk is *recurrent*, but so far this argument is purely classical; how does the quantum nature enter into the problem? First, it is the return probability in the sphere  $l^d$  which measures the occurrence of a two-coherent-phonon pair ( $+k, -k+q$ ) to build up. Secondly, the residence time  $\Theta$  in the initial sphere is, therefore, directly related to the lifetime of the coherent backscattered pair. The characteristic time  $\rho g_d(\omega) l^d$  represents the lifetime of a two-phonon state confined in a sphere of volume  $l^d$ . The quantum correction is, therefore, directly proportional to the ratio of the residence time in the sphere  $l$  around the origin to the mean lifetime of the two-phonon state in the sphere  $l$ . A natural maximum value of one is then obtained which corresponds to the situation of localization where the residence time of the coherent pair is comparable to the persistence time of the two-phonon state. For this limiting situation  $D$  vanishes. The localization of phonon density fluctuations occurs because this ratio increases strongly near  $\omega_3^*$  due, basically, to the strong frequency dependence of the Rayleigh scattering at three dimensions. At two dimensions all the stationary modes are localized as expected, owing to the recurrent nature of the random walk for  $d \leq 2$ .

The strong decrease of the diffusion constant  $D$  when the frequency increases must also renormalize the diffusion vertex  $U$ . We propose to take into account this renormalization, following Gor'kov *et al.*,<sup>9</sup> by redefining a diffusive vertex  $\bar{U}(q; \omega, \Omega)$ :

$$\bar{U}(q; \omega, \Omega) \simeq \frac{2v^4}{\pi D^2(\omega, \Omega)} \frac{\hbar^2}{g_d(\omega)} \frac{1}{-i\Omega + D(\omega, \Omega) q^2}. \quad (16)$$

This has not been strictly derived from the diagram resummation techniques but should constitute a better approximation for the calculation of the transport coefficients.

### III. THREE-DIMENSIONAL ANHARMONIC INTERACTIONS

In a perfect crystal, the first two anharmonic terms,  $\gamma_3$  and  $\gamma_4$ , arising from the expansion of the Hamiltonian of the system, give rise to the lowest order of perturbation, to interactions between a given phonon  $(\omega, \mathbf{k})$ , and the thermal phonons in equilibrium in the system. Such interactions are shown diagrammatically in Figs. 3(a) and 3(b).

The  $\gamma_4$  diagram represented in Fig. 3(b) corresponds to the excitation of a virtual phonon. In a pure crystal, such an interaction process cannot produce a finite lifetime and only renormalizes the sound velocity.

The  $\gamma_3^2$  diagram described in Fig. 3(a) represents the coupling of the incoming phonon with two thermal phonons of the medium. The lowest-order diagram of perturbation theory has two vertices of interaction and then is proportional to  $\gamma_3^2$ . Actually, the perturbation expansion of the anharmonic interaction shows that  $\gamma_3^2$  is of the same order of magnitude as  $\gamma_4$ . Unlike  $\gamma_4$ , the  $\gamma_3^2$  diagram provides a finite lifetime for the given phonon. It is this diagram which leads to the well-known Landau-Rumer<sup>5</sup> lifetime  $\tau$  for low-frequency phonons, where  $\tau^{-1}$  is proportional to  $\omega TC_p(T)$ ,  $C_p(T)$  being the specific heat. For impure materials or glasses, the presence of Rayleigh

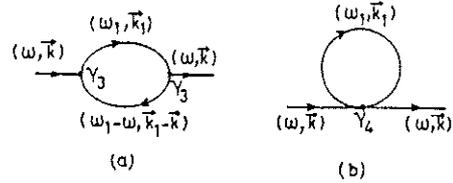


FIG. 3. Relevant diagrams for the anharmonic interactions in crystals.

scattering will produce an additional interaction between the excited phonons and the incoming phonon of the diagram given in Fig. 3(b) or the two thermal phonons of diagram given by Fig. 3(a). Via this anharmonic coupling,  $\gamma_3$  and  $\gamma_4$ , the phonons, will be coupled to the phonon density fluctuations and will acquire a strongly reduced mean lifetime. Let us calculate separately both contributions to the renormalization of the phonon self-energy.

#### A. Self-energy for the $\gamma_4$ interaction

The modified diagram including the diffusion kernel  $\bar{U}$  from Eq. (16) is represented in Fig. 4. The basic process is related to the coherent backscattering interference between the incoming phonon  $(\omega, \mathbf{k})$  and the thermal excited phonon created by  $\gamma_4$ .

If  $V^{(4)}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, -\mathbf{k} - \mathbf{q})$  represents the anharmonic interaction potential, we can write for the self-energy  $\Sigma_3^{(4)}(\omega)$  the following expression:

$$\Sigma_3^{(4)}(\omega) = k_B T \frac{V}{g(\omega)} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} V^{(4)}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{k} + \mathbf{q}, -\mathbf{k} - \mathbf{q}) \langle G_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}^R(\omega_p) \delta(\omega - \omega(k)) \rangle \delta_{\mathbf{k}', -\mathbf{k}-\mathbf{q}}, \quad (17)$$

where  $\omega_p$  represents the usual Matsubara frequency and  $\langle \rangle$  the average value associated with the disorder. In  $\Sigma_3^{(4)}(\omega)$ , an average over all the  $\mathbf{k}$  on the energy shell  $\omega$  must be performed. With the standard relation

$$\delta(\omega - \omega(k)) = -(\hbar/2i\pi) [G_k^R(\omega) - G_k^A(\omega)]$$

and with the help of Eqs. (4) and (16) we can show that (cf. Appendix B)

$$\Sigma_3^{(4)}(\omega) = \frac{(\hbar v)^4 \omega^2 V}{4\pi \Gamma(\omega) g(\omega)} \gamma_4 \frac{1}{D^2(\omega)} \int d\omega' n(\omega'/T) \frac{1}{\Gamma^2(\omega) + \hbar^2(\omega' - \omega)^2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{i(\omega - \omega') + D(\omega)q^2}, \quad (18)$$

where  $n(\omega'/T)$  is the Bose-Einstein occupation factor.

The inverse lifetime  $\Gamma_3^{(4)}(\omega)$  is given by the imaginary part of  $\Sigma_3^{(4)}(\omega)$ . Considering first the integration over the  $\mathbf{q}$  variable from 0 to  $l^{-1}(\omega)$ , one has

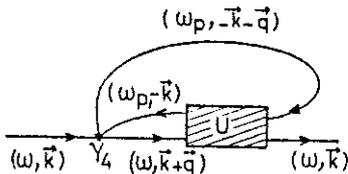


FIG. 4. Diagram contributing to the  $\gamma_4$  anharmonic interaction. Note the coupling of the loop phonon with the  $(\omega, \mathbf{k})$  phonon due to the effective  $\bar{U}$  interaction.

$$\frac{1}{V} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\omega - \omega'}{(\omega - \omega')^2 + (Dq^2)^2} = 2\pi(\arctan 2) \cdot \left[ \frac{|\omega - \omega'|^{1/2}}{D^{3/2}(\omega)} \right]. \quad (19)$$

We then obtain for the expression  $\Gamma_3^{(4)}(\omega)$ ,

$$\Gamma_3^{(4)}(\omega) = \frac{\arctan 2}{2} \frac{\hbar^4 v^4 \omega^2}{\Gamma^2(\omega) g(\omega)} \frac{V \gamma_4}{D^{7/2}(\omega)} \times \int d\omega' n(\omega'/T) \frac{|\omega' - \omega|^{1/2} \Gamma(\omega)}{\Gamma^2(\omega) + \hbar^2(\omega - \omega')^2}. \quad (20)$$

The function

$$\frac{\Gamma(\omega)}{\Gamma^2(\omega) + \hbar^2(\omega - \omega')^2}$$

defines a Lorentzian with width  $\Gamma(\omega)$  and height  $\Gamma^{-1}(\omega)$ , centered at  $\omega' = \omega$ . We approximate this Lorentzian by a rectangular function with the same width and height, and then

$$\int d\omega' n(\omega'/T) \frac{|\omega - \omega'|^{1/2} \Gamma(\omega)}{\Gamma^2(\omega) + \hbar^2(\omega - \omega')^2} \simeq n(\omega/T) \frac{\pi}{2\hbar^{1/2}} \Gamma^{1/2}(\omega), \quad (21)$$

and finally  $\Gamma_3^{(4)}(\omega)$  reads

$$\Gamma_3^{(4)}(\omega) = \frac{\arctan 2}{12} \gamma_4 \Gamma^2(\omega) \frac{n(\omega/T)}{[1 - (\omega/\omega_3^*)^6]^{7/2}}. \quad (22)$$

Some specific features must be emphasized for the mean attenuation  $\Gamma_3^{(4)}(\omega)$ . The condition for the most divergent diffusion kernel implies that  $|\omega - \omega'| \tau \ll 1$ . This condition is fulfilled here when the excited phonon  $\omega'$  has nearly the same frequency as the incoming phonon  $\omega$ . This dominant contribution in the expression of  $\Sigma_3^{(4)}(\omega)$  of the thermal phonons belonging to the energy shell  $\hbar\omega$  of the incoming phonon explains the Planck occupation number in the final expression given by Eq. (22). At low frequency and low temperature  $\Gamma_3^{(4)}(\omega)$  is very weak as compared to  $\Gamma(\omega)$ , and it is at higher frequency  $\omega \sim \omega_3^*$  and high temperature ( $T \sim T^*$ ) that the effect of localization will act efficiently.

As for the renormalized density of states, it is defined by

$$g^{(4)}(\omega) = \pi^{-1} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im} D_{\mathbf{k}}(\omega).$$

If  $\bar{\omega}(k)$  are the new eigenenergies of the system then

$$\bar{\omega}(k) = \omega(k) + \Delta_3^{(4)}(\bar{\omega}(k)),$$

$$\Sigma_3^{(3)}(\omega) = k_B T \frac{\hbar}{g(\omega)} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}} V^{(3)}(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \mathbf{q} - \mathbf{k}') V^{(3)}(\mathbf{k}' - \mathbf{q}, \mathbf{k}, -\mathbf{k}') \delta(\omega - \omega(k)) \langle D_{\mathbf{k}}^R(\omega_p) D_{\mathbf{q}-\mathbf{k}'}^A(\omega_p - \omega) \rangle, \quad (25)$$

where the interaction potential  $V^{(3)}$  is defined by

$$V^{(3)}(\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_2, \mathbf{k}_3) = \gamma_3 (\hbar/2)^{3/2} [\omega(k_1)\omega(k_2)\omega(k_3)]^{1/2}.$$

In a way quite similar to those studied in Appendix B, we obtain

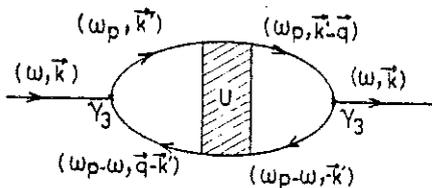


FIG. 5. Graph related to the  $\gamma_3^2$  anharmonic interaction. Note the difference between  $\gamma_4$  and  $\gamma_3^2$  relative to the nature of the coupling to the density fluctuations.

where  $\Delta_3^{(4)}(\bar{\omega}(k))$  is the real part of  $\Sigma_3^{(4)}(\omega)$ . An expansion

$$\Delta_3^{(4)}(\omega) = \Delta_3^{(4)}(\bar{\omega}(k)) + [\omega - \bar{\omega}(k)] \frac{\partial \Delta_3^{(4)}}{\partial \omega}$$

of  $\Delta_3^{(4)}(\omega)$  around  $\bar{\omega}(k)$  gives the following expression for the renormalized density of states:

$$g^{(4)}(\omega) = \frac{A(\omega)}{\pi \hbar} g(\omega), \quad (23)$$

where

$$A(\omega) \equiv \left[ 1 - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \Delta_3^{(4)}}{\partial \omega} \right]^{-1}$$

with for  $\Delta_3^{(4)}(\omega)$  the expression derived from Eq. (18):

$$\Delta_3^{(4)}(\omega) = \frac{1}{12} \gamma_4 \Gamma^2(\omega) \frac{n(\omega/T)}{[1 - (\omega/\omega_3^*)^6]^3}. \quad (24)$$

This expression shows a great enhancement of the density of states near  $\omega_3^*$  and  $T \sim T^*$ . This situation will be confirmed by the calculation of the self-energy  $\Sigma_3^{(3)}(\omega)$ .

#### B. Self-energy $\Sigma_3^{(3)}(\omega)$ associated with $\gamma_3^2$ interactions

The diagram associated with this interaction is represented in Fig. 5, but the structure of this diagram is more "classic" than those of the  $\gamma_4$  interaction. The constructive interferences between excited phonons  $\mathbf{k}$  and  $\mathbf{q} - \mathbf{k}$  is described by the renormalized diffusive kernel  $\bar{U}$  of Sec. II. By considering the breakdown of translational invariance, it is natural to consider only local fluctuations of phonon density coupled to the incoming phonon. This implies a violation of the momentum conservation law and consequently an unrestricted summation over momentum  $\mathbf{k}$  and  $\mathbf{q}$  in the self-energy. Then, we have

$$\Sigma_3^{(3)}(\omega) = \frac{\pi}{2} \gamma_3^2 \hbar^2 v^4 \omega \frac{V}{N} \int d\omega' n(\omega'/T) \frac{(\omega')^2}{\Gamma^3(\omega') D^2(\omega, \omega')} \times \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{-i\omega + D(\omega, \omega') q^2}, \quad (26)$$

which gives for the inverse lifetime  $\Gamma_3^{(3)}(\omega)$  associated with this anharmonic process

$$\Gamma_3^{(3)}(\omega) = \frac{3\pi}{4} (\arctan 2) \gamma_3^2 \frac{(\hbar\omega)^{3/2}}{\omega_D^3} \times \int d\omega' n(\omega'/T) \frac{\Gamma^{1/2}(\omega')(\omega')^2}{[1 - (\omega'/\omega_3^*)^6]^{7/2}}, \quad (27)$$

and for the real-part  $\Delta_3^{(3)}(\omega)$  of the self-energy

$$\Delta_3^{(3)}(\omega) = \frac{3\pi}{2} \gamma_3^2 \frac{\hbar\omega}{\omega_D^3} \int d\omega' \frac{\Gamma(\omega')(\omega')^2}{[1 - (\omega'/\omega_3^*)^6]^3} n(\omega'/T). \quad (28)$$

Both the expressions given by Eqs. (27) and (28) are divergent when  $\omega'$  approaches  $\omega_2^*$ , but we know that this limit is out of range of validity of our calculation of weak localization. A convergent version of Eqs. (27) and (28) can be obtained in the approximation of the dominant phonon at temperature  $T$  by replacing the summation over  $\omega'$  by the average value  $\omega' \simeq k_B T / \hbar$  in Eqs. (27) and (28). Therefore, approximate expressions are

$$\Gamma_3^{(3)}(\omega) = \frac{3\pi \arctan 2}{4} \sigma_M \gamma_3^2 (\hbar \omega_D)^{1/2} \times (\hbar \omega)^{3/2} \frac{1}{[1 - (T/T^*)^6]^{7/2}} \left[ \frac{T}{\Theta_D} \right]^5 \quad (29)$$

and

$$\Delta_3^{(3)}(\omega) = \frac{3\pi}{2} (\hbar \omega_D) \sigma_M^2 \gamma_3^2 (\hbar \omega) \left[ \frac{T}{\Theta_D} \right]^7 \frac{1}{[1 - (T/T^*)^6]^3}, \quad (30)$$

where the correction to the density of states is always given by Eq. (23), i.e., the relative variation  $\delta g/g$  is given by

$$\frac{\delta g}{g} \simeq \frac{3\pi}{2} (\hbar \omega_D) \sigma_M^2 \gamma_3^2 \left[ \frac{T}{\Theta_D} \right]^7 \frac{1}{[1 - (T/T^*)^6]^3}. \quad (31)$$

Just as before, this expression provides a great enhancement of the density of states for  $T \sim T^*$  for all the spectrum, even for phonons with  $\omega < \omega^*$ .

-IV.-TWO-DIMENSIONAL CASE

We can, as before, find the correction to the lifetime and the density of states in a two-dimensional disordered system due to anharmonic coupling. Now, however, we must take into account the *dynamic singularity* given by Eq. (13) for the diffusion coefficient. Because of the logarithmic divergence of the quantum correction in the limit  $\Omega \tau \ll 1$ , we define a cutoff frequency  $\tilde{\Omega}$  such that  $D(\omega, \tilde{\Omega}) = 0$ . Such a cutoff is imposed by the necessarily positive value of the diffusion coefficient. Then  $\tilde{\Omega}$  is defined by

$$\left[ \frac{\omega}{\omega_2^*} \right]^2 \ln \left[ \frac{1}{\tilde{\Omega} \tau} \right] = 1,$$

which implies

$$\tilde{\Omega} = \frac{1}{\tau(\omega)} e^{-\omega_2^{*2}/\omega^2}. \quad (32)$$

This value  $\tilde{\Omega}$  can serve to define a wave-vector cutoff  $\tilde{q}$  or, equivalently, a characteristic length  $\xi(\omega)$  such that  $\xi(\omega) = [D_0(\omega)/\tilde{\Omega}]^{1/2}$ . We then obtain

$$\xi(\omega) = l(\omega) e^{(\omega_2^*/\omega)^2}. \quad (33)$$

This length coincides with the localization length  $\xi_0(\omega)$  defined by John *et al.*<sup>3</sup> for the case of a noncorrelated potential. It must be noted that  $\xi(\omega)$  is much greater than  $l(\omega)$  and defines a second characteristic length and a weak-localization regime for  $\xi(\omega) \gg l(\omega)$  in the two-dimensional case; by contrast, in one-dimensional systems

we have only one characteristic length  $\xi_0(\omega) = l(\omega)$  and only the strong localization regime occurs.<sup>16</sup> However, for two-dimensional films, as for the one-dimensional case, the mobility edge, defined by a diverging localization length, is obtained for  $\omega = 0$  only, with an essential singularity, which ensures localization for density fluctuations over the whole spectrum.

A.  $\gamma_3$  anharmonic interaction

The structures of  $\gamma_4$  and  $\gamma_3^2$  diagrams given by Figs. 3(a) and 3(b) are the same in the two-dimensional case. Starting from the general expression for the self-energy  $\Sigma_2^{(3)}(\omega)$  given by Eq. (25), one obtains for the attenuation

$$\Gamma_2^{(3)}(\omega) = \frac{1}{8} \gamma_3^2 \hbar^5 v^6 \frac{\omega^2}{\omega_D^2} \int d\omega' \frac{(\omega')^2}{\Gamma^3(\omega') D^2(\omega, \omega')} \times n(\omega'/T) \sum_q' \frac{1}{\omega^2 + D^2 q^4}, \quad (34)$$

where the notation  $\sum_q'$  always indicates a sum over the hydrodynamic modes  $q^l(\omega) \ll 1$ , but with the supplementary condition imposed by Eq. (33),  $q > \xi^{-1}(\omega)$ :

$$\sum_q' \frac{1}{\omega^2 + D^2 q^4} = \frac{\pi^2}{2D\omega}.$$

Then,

$$\Gamma_2^{(3)}(\omega) = \frac{\pi^2}{16} \gamma_3^2 \frac{\hbar^2 \omega}{\omega_D^2} \int d\omega' (\omega')^2 n(\omega'/T) \times \left[ 1 - \left[ \frac{\omega'}{\omega_2^*} \right]^2 \ln \left[ \frac{1}{\omega \tau(\omega')} \right] \right]^{-3} \quad (35)$$

We can, just as before, approximate this relation by keeping only the contribution to the integral of the dominant phonons which  $\hbar \omega' \sim k_B T$  to obtain finally

$$\Gamma_2^{(3)}(\omega) = \frac{\pi^2}{16} \gamma_3^2 (\hbar \omega_D) \hbar \omega \left[ \frac{T}{\Theta_D} \right]^3 \times \left[ 1 - \left[ \frac{T}{T^*} \right]^2 \ln \left[ \frac{1}{\omega \tau(T)} \right] \right]^{-3}, \quad (36)$$

where

$$T^* \equiv \frac{\hbar \omega_2^*}{k_B}.$$

We can in the same way derive an expression for the correction to the density of states given generally by Eq. (23). But in the 2D case, the sum  $\sum_q' D q^2 / (\omega^2 + D^2 q^4)$  reduces to  $(\pi/2D) \ln(1/\omega \tau)$  because of the weak-localization condition  $\xi(\omega) \gg l(\omega)$ . Then with the same approximation of the dominant phonon, keeping only the most important correction, one finally has

$$\Delta_2^{(3)}(\omega) = \frac{\pi^2}{16} \gamma_3^2(\hbar\omega_D)(\hbar\omega) \left[ \frac{T}{\Theta_D} \right]^3 \ln \left[ \frac{1}{\omega\tau(T)} \right], \quad (37)$$

and the correction to the density of states is given by

$$\frac{\delta g}{g} \simeq \frac{\pi^2}{16} \gamma_3^2(\hbar\omega_D) \left[ \frac{T}{\Theta_D} \right]^3 \ln \left[ \frac{1}{\omega\tau(T)} \right], \quad (38)$$

which still provides a greater enhancement of the density of states in the regime  $\omega\tau(T) \ll 1$  previously defined.

### B. $\gamma_4$ anharmonic interaction

As for the three-phonon interaction, the diagram given by Fig. 4 remains relevant in the case of 2D films. But here, the specific dependence of the diffusion constant on the frequency  $\Omega$  given by Eq. (13) gives rise to a strong divergence for the expressions of  $\Gamma_2^{(4)}(\omega)$  and  $\Delta_2^{(4)}(\omega)$ .

The origin of this divergence is quite clear and comes from the peculiar structure of the  $\gamma_4$  diagram. Here, the

dynamic singularity is indeed associated to the energy difference  $\Omega = |\omega - \omega'|$  of phonons in the coherent back-scattering situation. Then, for all energy values  $\hbar\omega$  of the incident phonon, there exists a value  $\omega'$  in the spectrum of the system for which  $\Omega = |\omega - \omega'| \simeq \bar{\Omega}$  leading to the divergence of  $\Gamma_2^{(4)}(\omega)$  and  $\Delta_2^{(4)}(\omega)$ . But, it must be emphasized that this singularity is to be attributed equally to the structure of the  $\gamma_4$  diagram and to the two-dimensional character of the system. Indeed, the previous expressions of  $\Gamma_2^{(3)}(\omega)$  and  $\Delta_2^{(3)}(\omega)$  do not produce such a singular behavior because, in this case, the energy difference  $\Omega$  is fixed at the value of the incident phonon energy  $\omega$ .

Now, in order for the self-energy to converge, we introduce a natural cutoff for frequencies: the inelastic width  $\hbar/\tau_l(\omega, T)$  of the modes, which restricts the dynamical quantum correction to a range of frequencies between  $1/\tau_l$  and  $1/\tau$ . This leads to the following modified expression for  $D(\omega, \Omega; T)$ :

$$D(\omega, \Omega; T) = D_0(\omega) \left[ 1 - \frac{2}{\pi g(\omega)} \sum_q' \frac{1}{-i\Omega + D_0 q^2 + \frac{1}{\tau_l(\omega, T)}} + \dots \right], \quad (39)$$

instead of Eq. (9), where no special assumption is made on the physical nature of  $\tau_l(\omega, T)$ . In the limit of weak localization,  $\tau_l \gg \tau$ , one obtains

$$D(\omega, T) = D_0(\omega) \left[ 1 - \left[ \frac{\omega}{\omega_2^*} \right]^2 \ln \left[ \frac{\tau_l(\omega, T)}{\tau_e(\omega)} \right] \right] \quad (40)$$

The relation (40) will lead to a convergent expression for  $\Gamma_2^{(4)}(\omega)$  and  $\Delta_2^{(4)}(\omega)$  generally given by Eq. (18). We now have

$$\Gamma_2^{(4)}(\omega) = \frac{\pi(\hbar\omega)^4 V \omega^2}{8\Gamma(\omega)g(\omega)} \gamma_4 \times \int d\omega' n(\omega'/T) \frac{D^{-3}(\omega', T)}{\Gamma^2(\omega) + \hbar^2(\omega - \omega')^2}, \quad (41)$$

where the Lorentzian can be summed to give

$$\Gamma_2^{(4)}(\omega) = \frac{\gamma_4}{32} \hbar\omega \Gamma(\omega) n(\omega/T) \times \left[ 1 - \left[ \frac{\omega}{\omega_2^*} \right]^2 \ln \left[ \frac{\tau_l(\omega, T)}{\tau_e(\omega)} \right] \right]^{-3} \quad (42)$$

In the same way, we can derive for  $\Delta_2^{(4)}(\omega)$  the following expression:

$$\Delta_2^{(4)}(\omega, T) \simeq \frac{\gamma_4}{8\pi} (\hbar\omega) \Gamma(\omega) n(\omega/T) \ln \left[ \frac{\tau_l(\omega, T)}{\tau_e(\omega)} \right] \times \left[ 1 - \left[ \frac{\omega}{\omega_2^*} \right]^2 \ln \left[ \frac{\tau_l(\omega, T)}{\tau_e(\omega)} \right] \right]^{-3} \quad (43)$$

### C. Self-consistent approximation

As for the electrons case,<sup>17,18</sup> we can develop a self-consistent approximation and identify the inelastic scattering time and the mean lifetime of quasiparticles given by  $\hbar/\Gamma_2^{(4)}(\omega, T)$ . It gives at low frequency  $\omega$  less than  $T$  and  $\omega_2^*$

$$\Gamma_2^{(4)}(\omega, T) = \frac{\gamma_4}{32} k_B T \Gamma(\omega) \quad (44)$$

and

$$\Delta_2^{(4)}(\omega, T) = \frac{\gamma_4}{8\pi} k_B T \Gamma(\omega) \ln \left[ \frac{T_1}{T} \right], \quad (45)$$

where

$$k_B T_1 \equiv \frac{32}{\gamma_4}.$$

Then the relative variation of the density of states is proportional to

$$\frac{\delta g}{g} \propto \omega^2 T \ln \left[ \frac{T_1}{T} \right], \quad (46)$$

an expression which recalls the corrections of the electronic density of states in the weak-localization regime for interacting fermions.<sup>17,18</sup>

## V. APPLICATIONS

### TO LOW-TEMPERATURE THERMAL PROPERTIES OF THREE-DIMENSIONAL GLASSES

We have seen that the elastic relaxation time or Rayleigh-Klemens time plays a crucial role in the theory of weak localization. Therefore, it is natural to turn towards the situation where the harmonic disorder is the strongest: the glasses. This situation has already been discussed in a classical article by Zeller and Pohl<sup>19</sup> where

the Rayleigh-Klemens mechanism was used to explain the plateau of the thermal conductivity. In this paper, they model a glass as a crystal where each atom can be considered as a mass defect. In such a case  $\sigma_M^2 = 1$ . By using the classical approximation of the dominant phonon, they were able to explain both the magnitude and the temperature dependence of the "kinetic" mean free path derived from the gas kinetic expression of the thermal conductivity:  $K = \frac{1}{3} C v l$ . If the value  $\sigma_M^2 = 1$  seems justified for the case of glasses, the association of the dominant phonon approximation with the gas kinetic thermal conductivity is misleading for a strong frequency dependence of relaxation time. Here we will retain from the basic work of Zeller and Pohl the limit value  $\sigma_M^2 = 1$  for glasses. It also must be indicated at this point in the discussion that the two-level systems<sup>20</sup> cannot play the role of elastic scatterers we had considered previously. We will neglect them for the present analysis.

The present theory of phonon weak localization and anharmonicity provides two sets of expression for the attenuation and the excess spectral density contained in relations (22), (24), (29), and (30). These relations are frequency and temperature dependent and involve the threshold frequency  $\omega_3^*$  or threshold temperature  $T^*$  at which a divergence occurs. We will consider only regimes of low frequency  $\omega < \omega_3^*$  and low temperature  $T < T^*$ .

The expressions involving  $\gamma_4$  are valid for any frequency or temperature, especially for thermal phonons where  $\omega$  is of the order of  $T$  and can be applied to the analysis of the thermal conductivity. The expression (22) of  $\Gamma_3^{(4)}$  can be compared to the Rayleigh-Klemens scattering  $\Gamma$  by forming the ratio  $\Gamma_3^{(4)}/\Gamma$ . The known expressions for the anharmonic coupling constants are

$$\gamma_4 \approx \gamma_3^2 \approx \frac{\gamma_G^2}{Mv^2} \sim \frac{1}{\alpha \Theta_D}, \quad (47)$$

where  $\gamma_G$  is the Grüneisen parameter ( $\approx 1$ ) and  $M$  is the mass of the atom. The parameter  $\alpha$  is typically of the order of 10 for a canonical glasslike vitreous silica. One obtains

$$\frac{\Gamma_3^{(4)}}{\Gamma} \approx \frac{\sigma_M^2}{\alpha} \frac{\omega^4}{\Theta_D^4} \frac{1}{[1 - (\omega/\omega_3^*)^6]^{7/2}} n \left( \frac{\omega}{T} \right) \quad (48)$$

( $\omega$  and  $T$  in same units), which shows that  $\Gamma_3^{(4)} \ll \Gamma$  in the regime  $\omega, T \ll \omega_3^*$ . It is only in the range of  $\omega \lesssim \omega_3^*$  and  $T \lesssim T^*$  that  $\Gamma_3^{(4)}$  can be more efficient than  $\Gamma$ . For the excess density of modes we find

$$\frac{\delta g}{g} \approx \frac{\sigma_M^2}{\alpha} \left( \frac{\omega}{\omega_D} \right)^7 n(\omega/T) \frac{1}{[1 - (\omega/\omega_3^*)^6]^{7/2}}. \quad (49)$$

The very strong frequency dependence comes from the Rayleigh scattering, and here, as for the lifetime, the excess density is negligible except in the vicinity of  $\omega_3^*$  and  $T^*$ .

A similar conclusion can be achieved for the  $\gamma_3^2$  interaction which applies only to low-frequency phonons as compared to the temperature. The expressions (29) and (30) of  $\Gamma_3^{(3)}$  and  $\Delta_3^{(3)}$  are candidates for predicting the sound at-

tenuation and spectral density for hypersound phonons. Naturally we are led to compare  $\Gamma_3^{(3)}$  to the Landau-Rumer<sup>5,6</sup> expression:

$$\Gamma_{LR} = \gamma_3^2 \omega T (T/\Theta_D)^3. \quad (50)$$

By forming the ratio  $\Gamma_3^{(3)}/\Gamma_{LR}$ , the  $\gamma_3^2$  coupling constant is eliminated and gives

$$\frac{\Gamma_3^{(3)}}{\Gamma_{LR}} \approx \sigma_M^2 \left[ \frac{\omega}{\omega_D} \right]^{1/2} \frac{T}{\Theta_D} \frac{1}{[1 - (T/T^*)^6]^{7/2}}.$$

The value of this ratio is less than 1 except when  $T$  approaches  $T^*$  where the divergence occurs.

A similar result is obtained for the excess spectral density for the  $\gamma_3^2$  interaction:

$$\frac{\delta g}{g} = \frac{3\pi}{2\alpha} \sigma_M^2 \left[ \frac{T}{\Theta_D} \right]^7 \frac{1}{[1 - (T/T^*)^6]^{7/2}},$$

the contribution of which becomes sizable only when  $T$  tends towards  $T^*$ . Actually, the general conclusion of this analysis is that a strong enhancement of the excess density of states as well as the attenuation is predicted when  $\omega$  and  $T$  approach  $\omega_3^* = k_B T^*/\hbar$ . This prediction must be compared to the experiments on glasses which exhibit a plateau in thermal conduction accompanied by a bump in the specific heat around 10 K in all glasses which have been tested.<sup>7</sup> The standard analysis of these features exhibits, therefore, an abrupt decrease of the phonon mean free path and, at the same time, a strong excess of the spectral density. It is tempting to apply the previous conclusions to this situation by identifying the critical frequency  $\omega_3^*$  or temperature  $T^*$  with the temperature of occurrence of the plateau in the thermal conduction namely  $T^* \approx 10$  K. From the expression (12), we can derive a value of  $\omega_3^*$  less than  $\omega_D$ :  $\omega_3^* = 0.51\omega_D$  for  $\sigma_M^2 = 1$ . This value is very high, typically above 100 K, and cannot be applied directly to the case of glasses. We think that it is a consequence of the approximation of weak localization which cannot produce a good value of the threshold of localization. We believe that higher-order contributions to the diagram expansion as well as more realistic spectral density could result in a lower value of  $\omega_3^*$ . If  $\omega_3^*$  is considered as a parameter which fits, the present theory of weak localization is able to describe the qualitative features of glasses, namely, the occurrence of a plateau in the thermal conduction and, simultaneously, an excess specific heat at low temperature. At  $T = 0$  K the present model does not predict any localization for the single-mode problem. As a matter of fact, the mean lifetime shortening, as well as the spectral density contribution, vanish either exponentially or as a power law for both the  $\gamma_4$  and  $\gamma_3^2$  interactions. But the two-phonon correlator contributing to the diffusion constant is localized when  $\omega$  approaches  $\omega_3^*$ . This prediction does not contradict the recent numerical study of Nagel *et al.*<sup>21</sup> which was performed at  $T = 0$  K on a three-dimensional model of glass where atoms interact via 6-12 potential. They only observed a localization of vibration modes at high frequency near the cutoff. Our analysis leads to a situation of localization for "second sound" at

critical frequency which is reflected in the first sound via the anharmonic coupling. A finite temperature is necessary in order to observe localization in the one-phonon problem.

As a final remark on the application of the localization in glasses, let us specify the domain of validity of the present model. The energy of phonons is limited by  $\omega_j^*$  at high frequency in order to satisfy the condition of perturbation expansion incident plane waves instead of localized modes. A supplementary condition is that the inelastic collision frequency must be less efficient than the elastic or the Rayleigh-Klemens relaxation. This is true for the anharmonic interaction as reported by expression (48). In glasses, however, at low frequency and low temperature, we know that two-level systems are present and inelastically scatter the phonons. More precisely it is accepted<sup>19,20</sup> that below 1 K, the two-level systems are more efficient than mass defects for scattering phonons. Actually, the domain of validity of the weak localization is reduced in the range of temperature or frequency between 1 and 10 K where the mean free path drops abruptly to interatomic distances.

VI. SUMMARY

Let us summarize the main steps of the transposition of the weak-localization theory from electrons to phonons.

(1) Quantum corrections to diffusion are obtained by the resummation technique of the maximally crossed diagrams. A pole of diffusion in the effective vertex interaction subsists, despite the change in statistics, from fermions to bosons and in dispersion from quadratic to linear.

(2) The strong energy dependence of the elastic Rayleigh-Klemens scattering produces a threshold energy  $\omega_j^*$  in the renormalized diffusion constant in three dimensions. At this critical value  $\omega_j^*$ , the two-phonon density fluctuations—or second sound—become localized.

(3) In two dimensions the divergence at low frequency,  $\Omega \rightarrow 0$ , of the dynamical quantum correction indicates the general localization effect in low dimensionality ( $d \leq 2$ ).

(4) The anharmonic interactions couple the one-phonon propagator to the phonon density fluctuations. Phonon self-energies are calculated for two basic anharmonic interactions and diverge when  $\omega$  or  $T$  approach the critical energy  $\omega_j^*$ . Strong shortening of the phonon mean free path and additional spectral density reflect the approach to this localization threshold.

(5) In the two-dimensional case, a low-frequency cutoff (the inelastic rate of collisions) is indispensable to ensure the convergence of the quantum correction when one kind of anharmonic interaction is switched on. The resulting phonon self-energy is quite similar to the electronic one.

(6) A tentative application of the previous concepts to glasses is developed: Qualitative features of low-temperature anomalies of glasses—plateau in thermal conduction and bump in excess specific heat—are understandable in the framework of weak localization providing that the value of the phonon threshold energy is reduced to around 10 K.

APPENDIX A: DERIVATION OF THE EFFECTIVE INTERACTION  $U$  OF PHONONS

In this appendix we would like to sketch the expansion of Green's functions in order to obtain the expressions (4) and (5) of the kinetic equation for  $G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}', \omega, \Omega)$  and the effective  $U$  interaction between interfering phonons leading to the coherent backscattering effect. First, if  $\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{des}$  represents the Hamiltonian for the phonon gas moving in the field of randomly fixed impurities, we can write the usual development for the Green's operator  $\hat{D}(\omega)$ :

$$\hat{D}(\omega) \equiv \hat{D}_0(\omega) + \hat{D}_0(\omega) \hat{\Gamma}(\omega) \hat{D}(\omega), \tag{A1}$$

where

$$\hat{D}_0(\omega) = (\hbar\omega \hat{I} - \hat{H}_0)^{-1}$$

and where

$$\hat{\Gamma}(\omega) = \hat{H}_{des} (\hbar\omega \hat{I} - \hat{H}_0 - \hat{H}_{des})^{-1} (\hbar\omega \hat{I} - \hat{H}_0)$$

represents the collision operator. Equation (A1) can be written more explicitly in the form

$$\begin{aligned} \hat{D}(\omega) = & \hat{D}_0(\omega) + \sum_n \hat{D}_0(\omega) \hat{\Gamma}(\omega, \mathbf{X}_n) \hat{D}_0(\omega) \\ & + \sum_{\substack{m,n \\ m \neq n}} \hat{D}_0(\omega) \hat{\Gamma}(\omega, \mathbf{X}_n) \hat{D}_0(\omega) \hat{\Gamma}(\omega, \mathbf{X}_m) \hat{D}_0(\omega) + \dots, \end{aligned} \tag{A2}$$

where  $\{\mathbf{X}_n\}$  represents the impurities' positions.

From Eq. (A2), we can write

$$G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega, \Omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \lim_{\delta \rightarrow 0} \langle G_{\mathbf{k}}(\omega + \Omega + i\delta) G_{\mathbf{k}'}(\omega - i\epsilon) \rangle$$

in the form

$$\begin{aligned} G_2(\mathbf{k}, \mathbf{k}'; \omega, \Omega) = & \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} G_{\mathbf{k}}^A(\omega) G_{\mathbf{k}}^R(\omega + \Omega) \\ & + G_{\mathbf{k}}^A(\omega) G_{\mathbf{k}}^R(\omega + \Omega) \Gamma_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'}(\Omega) \\ & \times G_{\mathbf{k}}^A(\omega) G_{\mathbf{k}}^R(\omega + \Omega), \end{aligned} \tag{A3}$$

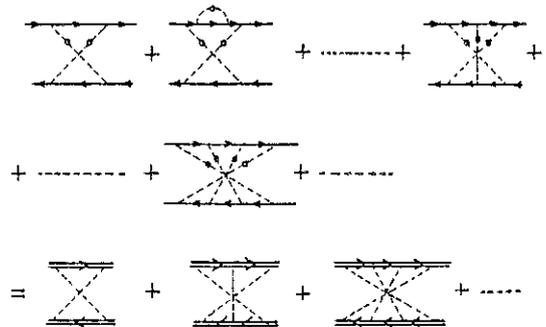


FIG. 6. Resummation of the most divergent diagrams in the hydrodynamic limit  $ql(\omega) \ll 1$ . The simple lines  $\Rightarrow$  represent the free propagator and the double lines  $\Rightarrow$  the renormalized phonon propagator.

where the vertex function  $\Gamma_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\Omega)$  describes the interaction of phonons with impurity centers as shown in Fig. 1. Now, we can express  $\Gamma_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\Omega)$  as the sum of two terms, one of them,  $U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\Omega)$ , giving the sum of irreducible diagrams. Then we have

$$\Gamma_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\Omega) = U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\Omega) + \sum_{\mathbf{k}_1} U_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1}(\Omega) \Gamma_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}'}(\Omega) \times G_{\mathbf{k}_1}^A(\omega) G_{\mathbf{k}_1}^R(\omega + \Omega), \quad (\text{A4})$$

and (A3) and (A4) lead to

$$G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}'; \omega, \Omega) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} G_{\mathbf{k}}^A(\omega) G_{\mathbf{k}}^R(\omega + \Omega) + G_{\mathbf{k}}^A(\omega) G_{\mathbf{k}}^R(\omega + \Omega) G_{\mathbf{k}}^A(\omega) G_{\mathbf{k}}^R(\omega + \Omega) \times [U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\Omega) + \sum_{\mathbf{k}_1} U_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1}(\Omega) G_{\mathbf{k}_1}^A(\omega) G_{\mathbf{k}_1}^R(\omega + \Omega) \Gamma_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}'}(\Omega)],$$

which implies

$$G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}'; \omega, \Omega) = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} G_{\mathbf{k}}^A(\omega) G_{\mathbf{k}}^R(\omega + \Omega) + G_{\mathbf{k}}^A(\omega) G_{\mathbf{k}}^R(\omega + \Omega) U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\Omega) G_{\mathbf{k}}^A(\omega) G_{\mathbf{k}}^R(\omega + \Omega) + G_{\mathbf{k}}^A(\omega) G_{\mathbf{k}}^R(\omega + \Omega) \sum_{\mathbf{k}_1} U_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1}(\Omega) G_{\mathbf{k}_1}^A(\omega) G_{\mathbf{k}_1}^R(\omega + \Omega) \Gamma_{\mathbf{k}_1,\mathbf{k}'}(\Omega) G_{\mathbf{k}_1}^A(\omega) G_{\mathbf{k}_1}^R(\omega + \Omega),$$

and from Eq. (A3) we finally get

$$G_2(\mathbf{k},\mathbf{k}'; \omega, \Omega) = G_{\mathbf{k}}^A(\omega) G_{\mathbf{k}}^R(\omega + \Omega) \left[ \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} + \sum_{\mathbf{k}_1} U_{\mathbf{k},\mathbf{k}_1}(\Omega) G_2(\mathbf{k}_1,\mathbf{k}'; \omega, \Omega) \right],$$

which coincides with Eq. (4).

The effective interaction between phonons is then defined by the sum of irreducible diagrams. The most divergent set of these diagrams, as shown by Langer and Neal,<sup>4</sup> is given by the maximally crossed diagrams and can be resummed (cf. Fig. 6) to give  $U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\Omega)$  as the sum of a geometric series

$$U_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}(\Omega) = \frac{b_d^2 I_d(\omega, \Omega; q)}{1 - b_d I_d(\omega, \Omega; q)}, \quad (\text{A5})$$

where

$$I_d(\omega, \Omega; q) \equiv \sum_{\mathbf{k}} G_{\mathbf{k}}^A(\omega) G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^R(\omega + \Omega),$$

and  $b_d$  is given by the Fermi golden rule,

$$b_d = \frac{\hbar \Gamma_d(\omega)}{\pi g_d(\omega)}. \quad (\text{A6})$$

In this last expression,  $g_d(\omega)$  is the  $d$ -dimensional density of states and  $\Gamma_d(\omega)$  is the inverse Rayleigh-Klemens lifetime proportional to  $\omega^{d+1}$ .

We would like now to have a perturbative expression in powers of  $\Omega$  and  $q^2$  (where we recall that  $\mathbf{k} + \mathbf{k}' = \mathbf{q}$ ) in the limit  $q^l(\omega) \ll 1$  and  $\Omega \tau(\omega) \ll 1$  of the product  $G_{\mathbf{k}}^A(\omega) G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^R(\omega + \Omega)$ . First, we write

$$G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^R(\omega + \Omega) G_{\mathbf{k}}^A(\omega) = \frac{G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^R(\omega + \Omega) - G_{\mathbf{k}}^A(\omega)}{[G_{\mathbf{k}}^A(\omega)]^{-1} - [G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^R(\omega + \Omega)]^{-1}},$$

where the Green's functions for phonons in the field on impurities are defined by

$$G_{\mathbf{k}}^A(\omega) = \frac{1}{\hbar[\omega - \omega(\mathbf{k})] + i\Gamma_d(\omega)}$$

and

$$G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^R(\omega + \Omega) = \frac{1}{\hbar[\omega + \Omega - \omega(\mathbf{k} - \mathbf{q})] - i\Gamma_d(\omega + \Omega)}.$$

We prefer these definitions of the phonon propagators to those generally given<sup>22</sup> because of the fundamental role played by time reversal in the constructive interference effect between phonons. On the other hand, the acoustic approximation for the dispersion relation allows us to write

$$[G_{\mathbf{k}}^A(\omega)]^{-1} - [G_{\mathbf{k}-\mathbf{q}}^R(\omega + \Omega)]^{-1} = \hbar \left[ \frac{2i}{\hbar} \Gamma_d(\omega) + \Omega \left( 1 + \frac{2i\Gamma_d(\omega)}{\hbar\omega} \right) + \frac{vq^2}{2k} + v \frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{q}}{k} \right],$$

and the denominator of Eq. (A5) with the help of Eq. (A6) reads

$$1 - b_d I_d(\omega, \Omega; q) = \frac{b_d}{2i\Gamma_d(\omega)} \left[ -\frac{\hbar\Omega}{2i\Gamma_d(\omega)} \frac{2i\pi}{\hbar} g_d(\omega) + \frac{v^2 \hbar^2 q^2}{4\Gamma_d^2(\omega)} \frac{2i\pi}{\hbar} g_d(\omega) + \frac{\hbar\omega q^2}{2i\Gamma_d(\omega)} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{k} [G_{\mathbf{k}}^A(\omega) - G_{\mathbf{k}}^R(\omega)] \right], \quad (\text{A7})$$

where the term proportional to  $q$  cancels because it appears only in the sum

$$\sum_{\mathbf{k}} k^{-1} \mathbf{k} \cdot \mathbf{q} \propto q \int_0^\pi \cos\theta d\theta,$$

where  $\theta = \arccos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{q} / kq)$ . In Eq. (A7) the last term proportional to  $\Gamma^{-1}(\omega)$  is negligible because the Rayleigh-Klemens expression for  $\Gamma(\omega)$  is proportional to  $n$ , where  $n$  is the impurity density assumed to be very small and then  $\Gamma^{-2}(\omega) \gg \Gamma^{-1}(\omega)$ . Finally, we get

$$1 - b_d I_d(\omega, \Omega, q) = \frac{\hbar}{2\Gamma_d(\omega)} \left[ -i\Omega + \frac{\hbar v^2}{\Gamma_d(\omega)} q^2 \right]$$

and

$$U_{k,k}(\Omega) = \frac{2v^4}{\pi D_0^2(\omega)} \frac{\hbar^2}{g_d(\omega)} \frac{1}{-i\Omega + D_0(\omega)q^2}, \quad (A8)$$

where  $D_0(\omega)$ , defined by  $D_0(\omega) = \hbar v^2 / \Gamma_d(\omega)$ , is the single-phonon diffusion constant. Equation (A8) is the desired Eq. (5) given in the text.

APPENDIX B: SELF-ENERGY  $\Sigma^{(4)}(\omega)$  ASSOCIATED WITH THE FOUR-PHONON ANHARMONIC PROCESSES AND THE  $\tilde{U}$  INTERACTION

Starting from the general relation given by

$$\Sigma_j^{(4)}(\omega) = k_B T \frac{V}{g(\omega)} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{k}'} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{p}} V^{(4)}(\mathbf{k}, -\mathbf{k}, \mathbf{k}+\mathbf{q}, -\mathbf{k}-\mathbf{q}) \langle D_{-\mathbf{k}-\mathbf{q}}^R(\omega_p) \delta(\omega - \omega(k)) \rangle \delta_{\mathbf{k}', -\mathbf{k}-\mathbf{q}},$$

we can begin to calculate the sum  $S$  defined by

$$S = \frac{\hbar^2}{4} \gamma_4 \sum_{\mathbf{k}} \omega^2(k) D_{\mathbf{k}}^R(\omega_p) D_{\mathbf{k}}^A(\omega_p) D_{\mathbf{k}}^R(\omega) D_{\mathbf{k}}^A(\omega), \quad (B1)$$

where the renormalized propagators in the presence of impurities can be expressed by

$$D_{\mathbf{k}}^{R,A}(\omega) = \frac{1}{\hbar[\omega - \omega(k)] \pm i\Gamma_d(\omega)},$$

in which  $\Gamma_d(\omega) = \hbar v^2 / dD_0(\omega)$  is the Rayleigh width of the modes proportional to the impurity density, assumed to be small. Then Eq. (B1) can be replaced by

$$S = \frac{\hbar^2}{4} \gamma_4 \frac{1}{\Gamma_d^2(\omega)} \frac{\pi}{\hbar} \int d\omega'' (\omega'')^2 g(\omega'') \delta(\omega - \omega'') \times \frac{\Gamma(\omega)}{\Gamma^2(\omega) + \hbar^2(\omega' - \omega'')^2},$$

and finally we get for  $d = 3$

$$S = \frac{\hbar}{4} \gamma_4 \frac{\pi}{\Gamma(\omega)} \frac{\omega^2 g(\omega)}{\Gamma^2(\omega) + \hbar^2(\omega' - \omega)^2}. \quad (B2)$$

Equation (B2) combined with the expression given by Eq. (6) for the effective interaction  $\tilde{U}$  leads for  $\Sigma_j^{(4)}(\omega)$  to the expression

$$\Sigma_j^{(4)}(\omega) = V \frac{(\hbar v)^4 \omega^2}{4\pi \Gamma(\omega) g(\omega)} \gamma_4 \int d\omega' \times \sum_{\mathbf{q}} \frac{n(\omega'/T) D^{-2}(\omega, \omega')}{-i(\omega' - \omega) + D(\omega, \omega')q^2} \times \frac{1}{\Gamma^2(\omega) + \hbar^2(\omega' - \omega)^2}$$

which is the Eq. (18) given in the text for a three-dimensional system.

<sup>1</sup>G. Bergmann, Phys. Rep. 107, 1 (1984).  
<sup>2</sup>P. G. Klemens, Proc. R. Soc. London, Ser. A 208, 108 (1951).  
<sup>3</sup>S. John, H. Sompolinsky, and M. J. Stephen, Phys. Rev. B 27, 5592 (1983).  
<sup>4</sup>J. S. Langer and T. Neal, Phys. Rev. Lett. 16, 984 (1966).  
<sup>5</sup>L. Landau and G. Rumer, Phys. Z. Sowjetunion 11, 18 (1937).  
<sup>6</sup>H. J. Maris, Physical Acoustics, edited by W. P. Mason and R. N. Thurston, (Academic, New York, 1971), Vol. VII.  
<sup>7</sup>For a review, see S. Hunklinger, J. Phys. (Paris) Colloq. 43, C9-461 (1982).  
<sup>8</sup>S. Alexander, C. Laermans, R. Orbach, and H. M. Rosenberg, Phys. Rev. B 28, 4615 (1983).  
<sup>9</sup>L. P. Gor'kov, A. I. Larkin, and D. E. Khmel'nitzkii, Zh. Eksp. Teor. Fiz. Pis'ma Red. 30, 248 (1979) [JETP Lett. 30, 228 (1979)].  
<sup>10</sup>E. Abrahams, P. W. Anderson, P. A. Lee, and T. V. Ramakrishnan, Phys. Rev. B 24, 6783 (1981).  
<sup>11</sup>A. A. Abrikosov, L. P. Gor'kov, and I. E. Dzyaloshinskii, Quantum Field Theoretical Methods in Statistical Physics (Pergamon, New York, 1965).  
<sup>12</sup>S. V. Maleev and B. P. Toperverg, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 69, 1440 (1975) [Sov. Phys.—JETP 42, 734 (1975)].  
<sup>13</sup>S. V. Maleev, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 65, 1237 (1973) [Sov. Phys.—JETP 38, 613 (1974)].  
<sup>14</sup>The different meanings of the two characteristic frequencies  $\omega_3^*$  and  $\omega_1^*$  must be emphasized. While  $\omega_3^*$  reveals the existence of a threshold in the phonon spectrum at which the static ( $\Omega$ -independent) diffusion constant vanishes, the two-dimensional diffusion constant has a singularity in the static limit  $\Omega \rightarrow 0$  and vanishes for any energy in the phonon spectrum preventing the existence of a threshold.  
<sup>15</sup>G. Bergmann, Phys. Rev. B 28, 2914 (1983).  
<sup>16</sup>L. P. Gor'kov, O. N. Dorokhov, and F. V. Prigara, Zh. Eksp. Teor. Fiz. 84, 1440 (1983) [Sov. Phys.—JETP 57, 838 (1983)].  
<sup>17</sup>B. L. Altschuler, D. Khmel'nitzkii, A. I. Larkin, and P. A.

- Lee, Phys. Rev. B 22, 5142 (1980).
- <sup>18</sup>H. Fukuyama and E. Abrahams, Phys. Rev. B 27, 5976 (1983).
- <sup>19</sup>R. C. Zeller and R. O. Pohl, Phys. Rev. B 4, 2029 (1971).
- <sup>20</sup>S. Hunklinger and W. Arnold, *Physical Acoustics*, edited by W. P. Mason and R. N. Thurston (Academic, New York, 1971), Vol. XII.
- <sup>21</sup>S. R. Nagel, G. S. Grest, and A. Rahman, Phys. Rev. Lett. 53, 368 (1984).
- <sup>22</sup>A. A. Maradudin and A. E. Fein, Phys. Rev. 128, 2589 (1962).



C H A P I T R E VII

EFFETS COHERENTS DANS LA DIFFUSION MULTIPLE DES ONDES



## I - INTRODUCTION

Dans l'ensemble des chapitres précédents, nous avons vu comment le phénomène de localisation faible pouvait être observé et interprété dans des problèmes aussi variés que des électrons ou des phonons subissant des collisions sur des impuretés réparties aléatoirement. La généralité des conclusions obtenues sur ce problème de localisation faible, indépendance relativement à la statistique (bosons, fermions), à la dispersion des excitations (linéaire vs quadratique), nous suggère de l'appréhender comme le dernier effet cohérent caractéristique de la propagation d'une onde (quelle que soit sa nature) dans un milieu faiblement désordonné. Le secret de cet effet est donc associé, comme nous l'avons mentionné dans le chapitre I, à un problème d'interférence affectant la diffusion multiple des ondes soumises aux collisions sur les impuretés. Notre but dans ce chapitre et dans la publication qui le suit est de caractériser complètement cet effet, directement à partir des propriétés de collisions multiples des ondes et de montrer comment en retour il affecte la section efficace et plus généralement le transport dans le système désordonné. Aussi, avant d'aller plus loin, une brève mise au point sur la propagation des ondes en milieu aléatoire s'impose.



## II - PROPAGATION D'ONDES EN MILIEUX DESORDONNES

Dans ce problème il est nécessaire tout d'abord de bien spécifier la nature du milieu désordonné. Nous en distinguerons essentiellement deux types. Le premier, appelé désordre discret, consiste à distribuer des centres diffuseurs au hasard dans le milieu et à les caractériser par une densité finie ; c'est ce type de désordre que nous considérerons tout au long de ce travail. Le second correspond à un désordre continu, où les paramètres physiques caractéristiques du milieu fluctuent ; c'est le cas par exemple de milieux turbulents dont l'indice optique est une variable aléatoire.

Une fois le désordre caractérisé, il faut spécifier le mode d'interaction entre une onde incidente et les centres diffuseurs. On calcule pour cela le champ diffusé par un diffuseur à une distance  $R$  asymptotiquement grande. La nature de la collision est alors parfaitement déterminée (dans l'approximation linéaire) par la donnée de l'amplitude de diffusion  $f(\hat{s}, \hat{s}')$  qui est un nombre complexe, dépendant de la direction  $\hat{s}$  de l'onde incidente et de la direction  $\hat{s}'$  de l'onde diffusée. On définit alors la section efficace différentielle par  $\sigma(\hat{s}, \hat{s}') = |f(\hat{s}, \hat{s}')|^2$ . Elle fournit les propriétés de transport de l'intensité en présence des collisions.

Dans la limite d'un milieu ne comportant qu'une très faible densité de centres diffuseurs, la probabilité pour une onde de subir plusieurs collisions est très faible et on calculera les propriétés du système dans l'approximation à une collision, ce qui a l'avantage de donner des calculs simples.

Si la densité de centres diffuseurs augmente alors l'approximation précédente n'est plus valable et il faut avoir recours à d'autres méthodes pour connaître les propriétés de transport du système. Une première méthode appelée théorie du transfert radiatif consiste à écrire pour l'intensité de l'onde une équation de transport

phénoménologique qui est l'analogue de l'équation de Boltzmann en théorie cinétique. Elle repose essentiellement sur un principe de conservation de l'énergie et peut pour une onde scalaire s'écrire sous la forme (cf. figure VII.1) :

$$(\hat{s} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{x}}) I(\vec{x}, \hat{s}) = -\kappa I(\vec{x}, \hat{s}) + \int d^2\hat{s}' f(\hat{s}, \hat{s}') I(\vec{x}, \hat{s}') \quad (\text{VII.1})$$

où  $I(\vec{x}, \hat{s})$  représente l'intensité de l'onde au point  $\vec{x}$ , se propageant dans la direction  $\hat{s}$ ,  $f(\hat{s}, \hat{s}')$  est l'amplitude de diffusion de  $\hat{s}$  en  $\hat{s}'$  telle qu'elle a été introduite précédemment et  $\kappa$  est l'inverse du libre parcours moyen ou coefficient d'extinction relié à  $f$  par la relation :

$$\kappa = \int d^2\hat{s} f(\hat{s}, \hat{s}) \quad (\text{VII.2})$$

qui est une simple conséquence du théorème optique. L'équation de transport (VII.1) initialement introduite par Schwarzschild<sup>(1)</sup> pour l'étude de l'albedo de l'atmosphère, a ensuite été reprise plus en détail par Chandrasekhar<sup>(2)</sup> pour étudier de façon systématique la propagation des ondes électromagnétiques. Les solutions de l'équation intégral-différentielle (VII.1) ne sont en général pas accessibles. Néanmoins, il est des situations, comme nous le verrons plus loin, où on peut raisonnablement la remplacer par une équation de diffusion.

Cependant, les paramètres intervenant dans (VII.1) n'ont pas de dérivation microscopique a priori ce qui est excessivement ennuyeux, si on veut prendre en compte des effets plus subtils associés par exemple à des corrélations entre les centres diffuseurs. Une alternative microscopique à l'équation de transfert radiatif est donc obtenue dans le cadre de la théorie de diffusion multiple. Celle-ci est basée sur l'équation d'onde proprement dite et sur les propriétés statistiques du milieu. On part donc de :

$$(\Delta_{\vec{x}}^2 + k_0^2 + V(\vec{x})) G(\vec{x}, \vec{x}') = \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (\text{VII.3})$$

qui est l'équation d'onde pour la fonction de Green  $G(\vec{x}, \vec{x}')$ , où  $V(\vec{x})$  représente le potentiel effectif des centres diffuseurs et  $k_0^2$  l'énergie de l'onde. Le comportement moyen de l'onde ainsi que les propriétés de

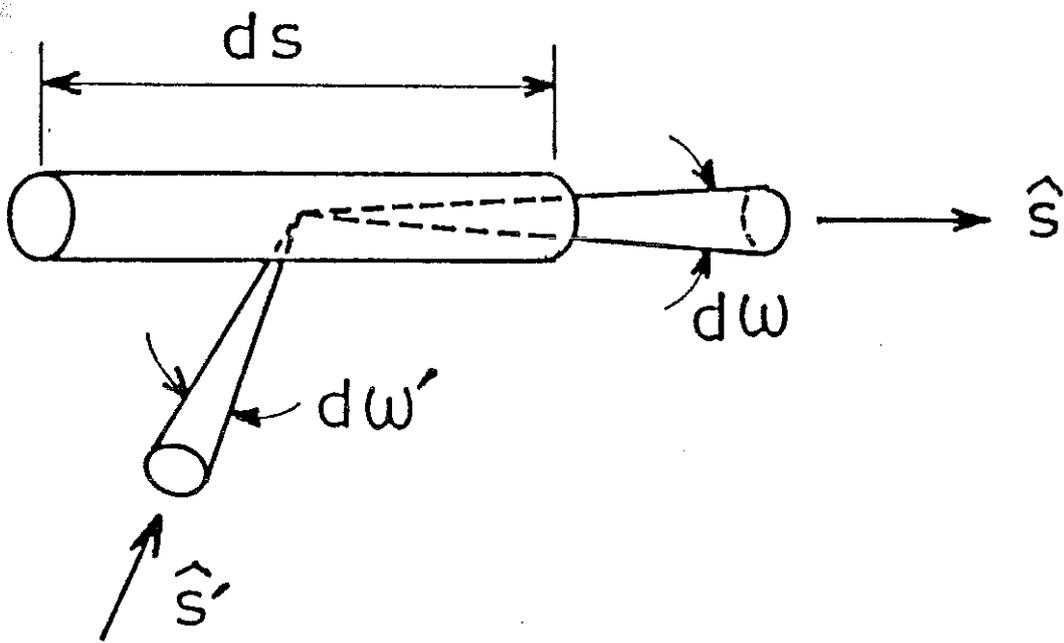


Fig. VII.1 : Conservation de l'énergie lumineuse et équation de transfert radiatif.



transport sont alors données par la moyenne  $\langle G(\vec{x}, \vec{x}') \rangle$  et par la fonction de corrélation  $\langle G(\vec{x}, \vec{x}') G^{\mathbf{x}}(\vec{y}, \vec{y}') \rangle$  obéissant respectivement aux équations de Dyson et Bethe-Salpeter :

$$\begin{aligned} \langle G \rangle &= G_0 + G_0 M \langle G \rangle \\ \langle GG^{\mathbf{x}} \rangle &= \langle G \rangle \langle G^{\mathbf{x}} \rangle + \langle G \rangle \langle G^{\mathbf{x}} \rangle K \langle GG^{\mathbf{x}} \rangle \end{aligned} \tag{VII.4}$$

où  $G_0$  est la fonction de Green libre du milieu sans impuretés,  $M$  et  $K$  les opérateurs de masse et d'intensité rendant compte de la renormalisation de  $\langle G \rangle$  et  $\langle GG^{\mathbf{x}} \rangle$  due à la diffusion multiple. Ces opérateurs peuvent être obtenus de façon perturbative par un développement en diagrammes de Feynman. Comme précédemment, les équations (VII.4) admettent des solutions dans le cadre de certaines approximations et redonnent l'équation de transport phénoménologique (VII.1).



III - DIFFUSION MULTIPLE COHERENTE ET INCOHERENTE : CONE DE RETRODIFFUSION COHERENTE ET FACTEUR 2

Nous venons de voir comment calculer les propriétés de transport associées à la diffusion multiple élastique d'une onde dans un milieu désordonné, c'est-à-dire que nous savons donner une expression de la section efficace différentielle  $\sigma(\hat{s}, \hat{s}')$  dans le cadre de l'approche classique, ce qui a été fait maintes fois<sup>(3)</sup>. Nous allons voir néanmoins qu'il existe dans un tel système des effets d'interférence, négligés jusqu'à présent, pour lesquels la théorie précédente doit être modifiée. Nous avons déjà discuté de ces effets dans le chapitre I dans le cadre de la très élégante approche de Larkin et Khmel'nitzkii<sup>(4)</sup> du problème de localisation faible des électrons. Considérons ici d'une manière générale le problème d'une onde plane, solution d'une équation d'onde linéaire se propageant dans un milieu décrit par une densité de centres diffuseurs élastiques fixes. On suppose de plus que le désordre est sans corrélation. Nous disposons alors pour décrire le problème, de deux longueurs caractéristiques. La première est la longueur d'onde. La seconde, le libre parcours moyen élastique, reflète la nature des collisions dans le milieu. Nous supposons alors que l'amplitude de transition dans la collision faisant passer du vecteur d'onde  $\vec{k}_1$  au vecteur d'onde  $\vec{k}_2$  est une fonction  $v(\vec{k}_2 - \vec{k}_1)$ . Considérons alors dans le système les séquences de diffusion multiple du type de celle représentée sur la figure (VII.2). Dans le cadre d'une théorie de transport classique, tous les trajets de diffusion multiple sont supposés non corrélés. Mais cependant, si on calcule les amplitudes associées à chacun des chemins représentés sur la figure (VII.2), on obtient :

$$A' = v(\vec{k}_1 - \vec{k}_0) e^{i(\vec{k}_1 - \vec{k}_0) \cdot \vec{r}_1} v(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) e^{i(\vec{k}_2 - \vec{k}_1) \cdot \vec{r}_2} v(\vec{k}_3 - \vec{k}_2) e^{i(\vec{k}_3 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}_3} v(-\vec{k}_0 - \vec{k}_3) e^{i(-\vec{k}_0 - \vec{k}_3) \cdot \vec{r}_4}$$

$$A'' = v(-\vec{k}_3 - \vec{k}_0) e^{-i(\vec{k}_3 + \vec{k}_0) \cdot \vec{r}_4} v(-\vec{k}_2 + \vec{k}_3) e^{-i(\vec{k}_2 - \vec{k}_3) \cdot \vec{r}_3} v(-\vec{k}_1 + \vec{k}_2) e^{-i(\vec{k}_1 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}_2} v(-\vec{k}_0 + \vec{k}_1) e^{i(-\vec{k}_0 + \vec{k}_1) \cdot \vec{r}_1}$$



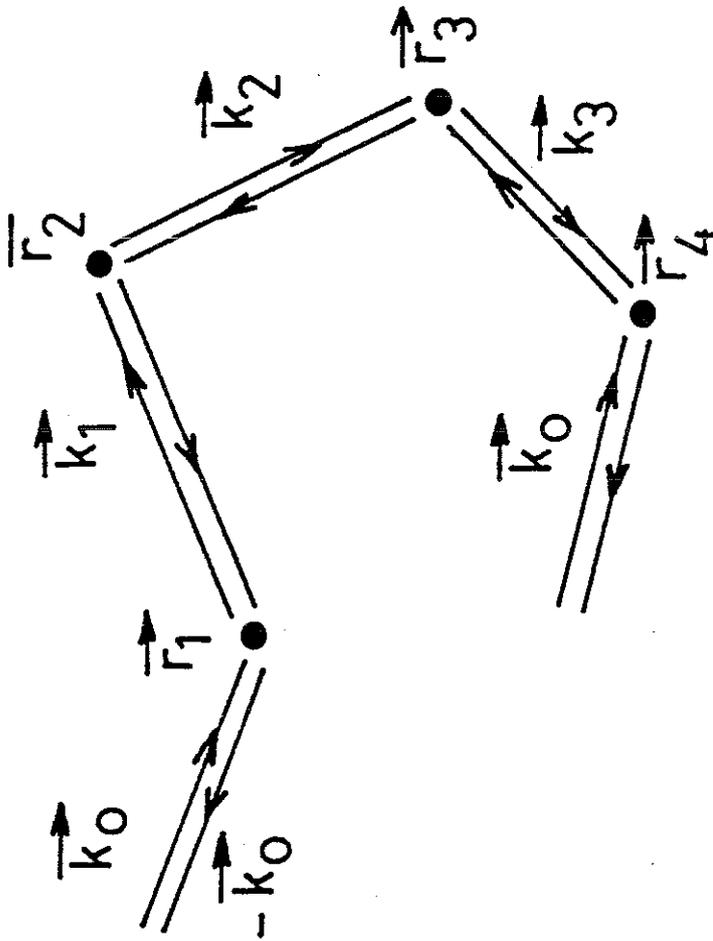


Fig. VII.2 : Un type de processus de diffusion multiple cohérente.

Sur la forme de A et A', on reconnaît aisément la structure du diagramme croisé telle qu'elle fut introduite par Langer et Neal et expliquée dans le chapitre V. On remarque d'autre part que les deux amplitudes A et A' sont égales. Dans le cadre de l'approximation incohérente, l'intensité associée à ces trajets est  $I_{inc} = |A'|^2 + |A''|^2 = 2|A'|^2$  alors que tenant compte des phases de A et A', l'intensité cohérente s'écrit  $I_{coh} = |A+A'|^2 = 4|A'|^2$ . On retrouve donc bien le résultat de Larkin et Khmel'nitzkii selon lequel l'intensité rétrodiffusée cohérente est exactement le double de celle obtenue dans l'approximation cohérente. Mais nous pouvons aller plus loin encore. Considérons pour cela un lacet (et non une boucle) (figure VII.2) et tel que le front d'onde de l'onde plane soit supérieure à la distance  $|\vec{r}_1 - \vec{r}_n|$  afin d'assurer la cohérence spatiale de l'onde entre les points  $\vec{r}_1$  et  $\vec{r}_n$ . On peut alors comme précédemment calculer les amplitudes associées à un chemin et à son homologue renversé dans le temps. Le déphasage entre ces chemins est donné par  $\varphi = (\vec{k}_i + \vec{k}_F) \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_n)$  et on retrouve le cas précédent lorsque  $\vec{k}_i = -\vec{k}_F$ , i.e. dans la direction de rétrodiffusion. Si on appelle  $\theta$  l'angle que font entre eux les vecteurs  $\vec{k}_i$  et  $\vec{k}_F$ , alors la cohérence sera perdue pour des valeurs de  $\theta$  supérieures à  $\lambda/|\vec{r}_1 - \vec{r}_n|$ . Et puisque la valeur moyenne de  $|\vec{r}_1 - \vec{r}_n|$  pour la séquence la plus petite ( $n = 1$ ) est justement mesurée par le libre parcours moyen élastique  $\ell$ , nous aurons une anomalie de la section efficace différentielle  $\sigma(\hat{s}, \hat{s}')$  dans un cône centré autour de  $\hat{s}' = -\hat{s}$  et d'ouverture  $\varphi_c \approx \lambda/\ell$  associée à la diffusion multiple cohérente. Une dérivation plus "technique" de cet effet se trouve dans le paragraphe 2 de la publication située à la fin de ce chapitre.

Enfin, une telle anisotropie de la section efficace différentielle modifie les coefficients de transport du système et particulièrement la constante de diffusion de l'intensité. Ces effets sont étudiés en détail dans les paragraphes 4 à 6 de l'article ci-après.

REFERENCES

- 1 - K. Schwarzschild, Göttingen Nachrichten, p. 41 (1906) and Sitzungs Berichte d. Preuss; Akad. Berlin, p. 1183 (1914).
- 2 - S. Chandrasekhar, Radiative transfer, Dover Pub. Inc. (New York, 1960).
- 3 - Voir par exemple, A. Ishimaru  
Wave propagation and scattering in random media  
(Academic Press, New York) 1978.
- 4 - A.I. Larkin and D.E. Khmel'nitzkii, Sov. Phys. Usp. 25 (1980) 185.



Classification

Physics Abstracts

42.20 — 63.50 — 71.55J

## Weak localization of waves

E. Akkermans and R. Maynard (\*)

Centre de Recherches sur les Très Basses Températures,  
C.N.R.S., BP 166 X, 38042 Grenoble Cedex, France

(\*) and Université Scientifique et Médicale de Grenoble, France

(Reçu le 20 juin 1985, accepté le 24 septembre 1985)

**Résumé.** — La localisation faible des ondes est obtenue à partir d'une théorie de diffusion multiple cohérente. Cela conduit à une augmentation de la section efficace différentielle dans la direction de rétrodiffusion. Celle-ci se manifeste de façon macroscopique par une valeur deux fois plus grande de l'intensité rétrodiffusée dans un cône très étroit autour de la direction d'incidence, d'ouverture angulaire  $\phi_c = \frac{\lambda}{l} \cdot \frac{\theta(\Omega)}{\tau}$ , où  $\theta(\Omega)$  est le temps de résidence. Les corrections aux coefficients de transport sont alors obtenues à deux et trois dimensions à partir de  $\phi_c$ . Un développement en  $\varepsilon$  autour de la dimension critique inférieure  $d_c = 2$  permet alors d'obtenir un seuil de localisation pour les ondes à  $d > 2$  et le comportement critique associé. On discute enfin de différentes situations expérimentales permettant d'observer à la fois le cône de rétrodiffusion et les exposants critiques.

**Abstract.** — The weak localization of waves is formulated in terms of coherent multiple scattering theory. This leads, in the backscattering direction, to an enhancement of the differential cross-section. It manifests itself macroscopically by the doubling of the backscattering intensity in a narrow cone of width  $\phi_c = \frac{\lambda}{l} \cdot \frac{\theta(\Omega)}{\tau}$ , where  $\theta(\Omega)$  is the residence time around the incident direction. The corrections to transport coefficients are then derived both in two and three dimensions in terms of  $\phi_c$ . An  $\varepsilon$ -expansion around the lower critical dimension  $d_c = 2$  is then performed and leads to a wave localization threshold for  $d > 2$  around which the critical behaviour is studied. Different kinds of experimental situations leading to the observation of this backscattering cone and critical exponents are then discussed.

### 1. Introduction.

The localization problem is now well-known to be an enormous and very dissymmetric hydra. While its electrical aspect, i.e. localization in electronic systems concerns a great number of solid state physicists, its non-electronic counterpart, for wave propagation in disordered media has been neglected until very recently. Most of theoretical predictions were limited to transport coefficients of metals as magnetoresistance of impure metals, temperature dependence of electrical conductivity, etc. The experimental confirmation of these predictions establishes the theory of weak localization on a strong basis. However, it is legitimate to ask if more direct observation of this general phenomenon might be envisaged in the field of wave scattering in random media.

Recent progress in the interpretation of the weak localization phenomenon as a constructive interference effect shows that it only depends on the wave nature of the excitation and neither on quantum aspects nor on the nature of the statistics. To first order in  $\lambda/l$ , where  $\lambda$  is the wave length and  $l$  the elastic mean free path, this interference effect leads to a large anisotropy of the differential cross-section in the vicinity of the backscattering direction. We have found that inside a cone with an aperture of the order  $\lambda/l$ , the backscattered intensity is twice the value obtained within the standard incoherent multiple scattering approximation. Moreover, the specificity of this effect also appears in the power law time dependence of the backscattered echo from an incident pulse instead of exponential relaxation for the incoherent wave. A direct consequence of this constructive interference is the reduction of the radiation diffusion coefficient as in the case of electrons. This reduction can lead to a complete vanishing of the diffusion constant for  $\lambda \lesssim l$ . This conclusion is supported by a simple multiplicative renormalization group approach in  $2 + \epsilon$  dimension which produces the critical exponents near the threshold. Finally, the sensitivity of the coherence effect to different dephasing processes is analysed, mainly those associated with confined geometry and moving impurities.

In this Letter, we attempt to present the weak localization phenomenon of waves in 2 and 3 dimensions in a somewhat transparent way. Some of the results established here are well-known : time-dependence of the response (echo) to an incident pulse [1], dephasing process due to impurity motion [2]. However some of our results are new :

- i) Critical cone for coherent backscattering  $\phi_c = \frac{\lambda}{l} \cdot \frac{0(\Omega)}{\tau}$  (where  $\Omega$  is the frequency bandwidth of the backscattered wave and  $\tau$  the elastic relaxation times).
- ii) Preliminary results on the frequency threshold  $\omega^*$  for localization of waves due to Rayleigh scattering.
- iii) Critical behaviour of diffusion constant near  $\omega^*$ , and
- iv) Dephasing effect associated with restricted geometry. We hope that this simple presentation will motivate new experiments in these fields.

## 2. Incoherent and coherent multiple scattering : the factor 2 !

We consider the problem of the propagation of an incident plane wave in an inhomogeneous medium with a density  $\rho$  of fixed impurities described by a linear wave equation. We assume that these impurities act as pure elastic scatterers and that no absorption of the radiation results from this scattering. This problem can be defined in terms of several characteristic lengths. First, the wavelength  $\lambda$  of the incident field, and second, the mean distance  $\rho^{-1/d}$  between impurities ( $d$  being the space dimensionality). In the limit  $\lambda \ll \rho^{-1/d}$ , the transport of the incoherent field intensity through the medium can be described in terms of a Boltzmann-like equation leading to the elastic mean free path  $l$ . Now the two characteristic lengths of the inhomogeneous medium are  $\lambda$  and  $l$  for an incident wave which are functions of the frequency  $\omega$ .

Let us define the quantity  $p(\hat{s}, \hat{s}')$  as the probability for the incoming field in direction  $\hat{s}$  to be scattered in direction  $\hat{s}'$  ( $\hat{s}$  and  $\hat{s}'$  being unit vectors). Under stationarity conditions,  $p(\hat{s}, \hat{s}')$  is given by

$$p(\hat{s}, \hat{s}') = \frac{4\pi}{\sigma_1} |\phi(\hat{s}, \hat{s}')|^2 \quad (1)$$

where  $\sigma_1$  is the total scattering cross-section and  $\phi(\hat{s}, \hat{s}')$  the scattering amplitude. The expression of  $p(\hat{s}, \hat{s}')$  can be derived from the vertex function associated to the two propagator correlation function  $C(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2; \mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) = \langle G^R(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) G^A(\mathbf{r}'_1, \mathbf{r}'_2) \rangle$ ,  $G^R$  and  $G^A$  being respectively retarded

and advanced Green functions of the free propagating field, or from its Fourier transform  $C(\mathbf{p}, \mathbf{p}'; \mathbf{q}, \mathbf{q}')$  by :

$$p(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}') = C(k\hat{\mathbf{s}}, k\hat{\mathbf{s}}'; k\hat{\mathbf{s}}, k\hat{\mathbf{s}}'). \quad (2)$$

There are two classes of diagrams for multiple scattering :

— The ladder diagrams (Fig. 1a) which give the incoherent contribution  $p_L$  to the scattering probability.

— The crossed diagrams (Fig. 1b) describing the coherent contribution  $p_C$  to the probability.

Then, we have :

$$p(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}') = p_L(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}') + p_C(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}'). \quad (3)$$

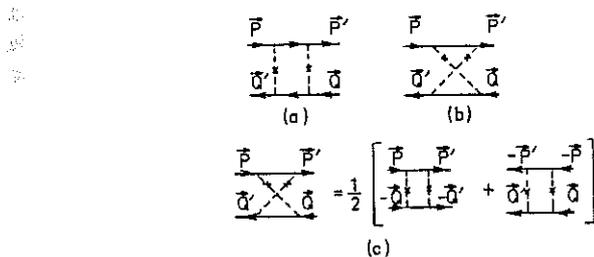


Fig. 1. — (a) Ladder diagram for incoherent multiple scattering ; (b) crossed diagram for coherent multiple scattering and (c) identity relation for crossed diagrams in terms of ladder diagrams.

By using the time reversal symmetry of the scattering potential of the impurities, the crossed diagrams can be expressed at each order of the multiple scattering expansion by the equality of figure 1c. More precisely,

$$p_C(\hat{\mathbf{s}}, \hat{\mathbf{s}}') = \frac{1}{2} [C(k\hat{\mathbf{s}}, k\hat{\mathbf{s}}'; -k\hat{\mathbf{s}}', -k\hat{\mathbf{s}}) + C(-k\hat{\mathbf{s}}', -k\hat{\mathbf{s}}; k\hat{\mathbf{s}}, k\hat{\mathbf{s}}')]. \quad (4)$$

Note that for the special situation of backscattering,  $\hat{\mathbf{s}}' = -\hat{\mathbf{s}}$

$$p_C(\hat{\mathbf{s}}, -\hat{\mathbf{s}}) = C(k\hat{\mathbf{s}}, -k\hat{\mathbf{s}}; +k\hat{\mathbf{s}}, -k\hat{\mathbf{s}}) = p_L(\hat{\mathbf{s}}, -\hat{\mathbf{s}}) \quad (5)$$

and

$$p(\hat{\mathbf{s}}, -\hat{\mathbf{s}}) = 2 p_L(\hat{\mathbf{s}}, -\hat{\mathbf{s}}). \quad (6)$$

Therefore, the total probability of backscattering  $p(\hat{\mathbf{s}}, -\hat{\mathbf{s}})$  including coherent and incoherent scattering is exactly twice the incoherent multiple scattering probability. This result is well known [1, 3] and our proof shows its full generality.

### 3. Cone of backscattering and coherence bandwidth.

We have calculated the coherent backscattered intensity by the Bethe-Salpeter equation for the maximally crossed diagrams and the detail of this calculation will be reported elsewhere [4]. Here, we want to establish the main results of the diagrammatic expansion in a very simple and physical way following the presentation of G. Bergmann [1] for the weak localization : « time of flight experiment with conduction electrons ». Let us assume first that the propagation in this

very inhomogeneous medium is such that the waves become depolarized rapidly over distances of the order of the mean free path  $l$ . The radiation fields will therefore be considered as scalar waves without polarization.

Assume that, at  $t = 0$ , a pulse enters the medium with wave vector  $k = 2\pi/\lambda$ . The available final states for the elastic incoherent multiple scattering are located in the spherical shell of radius  $k$  and thickness  $1/l$ . The number of final states is given for isotropic scattering described by  $l$  ( $d = 2$  or  $3$ ) by

$$2^{d-1} \pi k^{d-1} \cdot \frac{1}{l}. \quad (7)$$

At time  $t$  later, the wave field explores a volume of linear size  $(D_0 t)^{1/2}$  where  $D_0$  is the unperturbed diffusion coefficient. The smearing of the wave vector  $\Delta k$  due to this confinement is given by  $(D_0 t)^{-1/2}$ . The available states for the coherent backscattering is therefore given by  $(\Delta k)^d$  from which we obtain the ratio of coherent backscattering intensity over the total number of scattered states surviving up to time  $t$  :

$$\frac{(\Delta k)^d}{2^{d-1} \pi k^{d-1} l^{-1}} = \frac{1}{(kl)^{d-1}} \cdot \left(\frac{\tau}{t}\right)^{d/2} \quad (t \gg \tau). \quad (8)$$

This result has been already established [1] for  $d = 2$  : the long time tail of this echo originates in the multiple scattering processes of the incoming wave field of the pulse for a time  $t$ . All possible paths from  $+\mathbf{k}$  to  $-\mathbf{k}$  are taken into account in the infinite medium (for a restricted geometry such as a slab, a typical cut-off in time would describe the limitation in the number of multiple scattering events (see Sect. 5)). The classical analog of this result is the probability of return to the origin at time  $t$  which involves all possible loops of a free random walk.

From scattering wave theory we know that the real part of the Fourier transform of time development of the echo is related to the two-frequency correlation function or equivalently to the coherence bandwidth [5] (broadening of a pulse due to the random medium). Let us call  $\theta_d(\Omega)$  this Fourier transform where  $\Omega$  measures the frequency shift of the backscattered radiation. For vanishing  $\Omega$ , i.e. for  $\Omega\tau \ll 1$ , we obtain from equation (8) :

$$\frac{\theta_d(\Omega)}{\tau} \approx \begin{cases} \text{cte} & d = 3 \\ \ln \frac{1}{\Omega\tau} & d = 2 \end{cases}. \quad (9)$$

This result has a classical analog in the theory of the random motion of a particle.  $\theta_d(\Omega)$  is the residence time of the particle at the origin during a time interval of order  $1/\Omega$ . In 3 dimensions, the residence time of the particle at the origin is finite and of order  $\tau$  while, due to the recurrent nature of the random walk in  $d = 2$ , it diverges although it explores all the space. Then, the logarithmic divergence of  $\theta(\tau)$ , which has been settled by various authors [6], is a signature of the two-dimensional localization of waves. From equations (8) and (9) we have access to the *spectral* relative intensity of coherent backscattering which is proportional to

$$\left(\frac{\lambda}{l}\right)^{d-1} \frac{\theta_d(\Omega)}{\tau}. \quad (10)$$

This result has a direct implication for the differential cross-section. Let us call  $\sigma_i$  the incoherent contribution to the differential cross-section in the direction of backscattering. We have previously established that the intensity of coherent backscattering is twice the intensity of incoherent backscattering. Then for the backscattering direction, the *coherent* differential cross-section  $\sigma_c$  is just twice  $\sigma_i$  at each frequency. Expression (10) allows us to go beyond this property, since

it gives the value of the *total* cross-section for backscattering. It defines a cone in such a way that :

$$\text{solid angle} \propto \phi^{d-1} \approx \left(\frac{\lambda}{l}\right)^{d-1} \cdot \frac{\theta_d(\Omega)}{\tau} \quad (11)$$

where  $\phi^{d-1}$  is the small angular aperture of the cone in  $d$  dimensions with  $\phi$  the angle of the cone in the direction of the backscattering defined in figure 2. From equation (11) one obtains the characteristic angular aperture  $\phi_c$  of the cone for the coherent backscattered intensity :

$$\phi_c = \begin{cases} a \frac{\lambda}{l} & d = 3 \\ b \frac{\lambda}{l} \ln \frac{1}{\Omega \tau} & d = 2 \end{cases} \quad (12)$$

where  $a$  and  $b$  are numerical constants we identify below.

The main physical result is contained in the dimensionless ratio  $\lambda/l$  of the wavelength over the elastic mean free path of the radiation. This result of a perturbative nature is valid not only for  $\lambda/l \ll 1$  but also, in 2 dimensions for  $\lambda/l \cdot \ln 1/\Omega \tau \ll 1$ . This condition limits the validity of this formula to the low frequency range : it is precisely the range of validity of the perturbation theory for the weak localization in 2 dimensions. We believe that the singularity at  $\Omega = 0$  is non-physical and needs a scaling treatment as developed in section 5 where, in the singular limit  $\Omega \rightarrow 0$ , the dimensionless ratio  $\lambda/l$  is renormalized and provides a term which suppresses the logarithmic divergence.

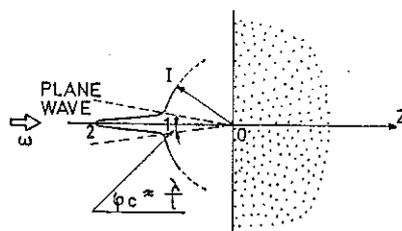


Fig. 2. — Profile intensity in the backscattering direction.  $\phi_c \cong \lambda/l$  is the characteristic angle of the cone inside of which coherent intensity is backscattered.

#### 4. Correction to the diffusion coefficient.

It is well known in transport theory [7] that the mean free path can be directly deduced from the differential cross-section  $\sigma(\phi)$  by the following formula :

$$\begin{cases} \frac{1}{l} = \rho \int_0^\pi (\sigma_i + \sigma_e) (1 + \cos \phi) 2 \pi \sin \phi \, d\phi & d = 3 \\ \frac{1}{l} = 2 \rho \int_0^\pi (\sigma_i + \sigma_e) (1 + \cos \phi) \, d\phi & d = 2 \end{cases} \quad (13)$$

where  $1 + \cos \phi$  is the geometrical term entering the transport theory due to the anisotropy of the relaxation process. Actually it weighs on the backscattering by an extra factor  $1 + \cos \phi \cong 2$ . The additional contribution of the coherent backscattering will shorten the mean free path as compared to the incoherent contribution. For an isotropic scattering where  $\sigma_1$  is independent of  $\phi$ , this shortening of  $l$  is better described by the reduction of the diffusion coefficient from the incoherent value  $D_0$

$$\begin{cases} D \cong D_0(1 - \phi_c^2) & d = 3 \\ D \cong D_0\left(1 - \frac{4}{\pi} \phi_c\right) & d = 2 \end{cases} \quad (14)$$

By comparing these expressions with exact results obtained by summing the infinite series of maximally crossed diagrams [4] we identify the numerical constants  $a = 3/4 \pi$  and  $b = 1/4 \pi$ .

First it must be noticed that this diffusion coefficient is parametrized by the energy  $\omega$  through  $D_0$  and the ratio  $\lambda/l$ . As expected the contribution of the coherent backscattering reduces the diffusion coefficient and consequently all the transport coefficients by a term proportional to the characteristic angle  $\phi_c$ . Here again, the validity of the present approximation of weak localization limits the correction to small value of  $\phi_c$ . But nevertheless the question of the vanishing diffusion coefficient or equivalently the existence of an edge of localization for waves emerges from this context. Additional assumptions are then necessary to establish such a localization threshold. These are developed in the next section.

### 5. Renormalization-group treatment of the perturbation expansion-scaling.

The previous perturbation expansion of  $D$  shows how disorder modifies the diffusion coefficient  $D_0$ . The form of the correction to  $D$  for  $d = 2$  given by equations (12) and (14) can be rewritten as :

$$D = D_0 \left[ 1 + \frac{\lambda}{l} \ln \left( \frac{\Omega}{\Lambda^2} \right) \right]. \quad (15)$$

It strongly suggests the possibility of a scaling theory based on one parameter only  $t_0 = \lambda/l$  and with a characteristic frequency cut-off  $\Lambda^2 = 1/\tau$ . This scaling behaviour can be obtained within the usual one-parameter renormalization group treatment [8].

The divergence in  $d = 2$  of the corrections to  $D$  at each order of perturbation [6] shows that  $d = 2$  is the lower critical dimension for the problem of localization. It allows us to perform an  $\varepsilon$ -expansion in  $d = 2 + \varepsilon$  dimension. Consider the renormalization of the vertex  $\Gamma_0(t, \Omega)$  defined by  $D = D_0 \Gamma_0(t, \Omega)$ , according to

$$\Gamma(t, \Omega) = Z(\Lambda) \Gamma_0(t, \Omega). \quad (16)$$

The correction to  $D$  to first order in  $t_0$  is proportional to  $t_0(\Omega\tau)^{\varepsilon/2}$ . Then, if we rescale the frequency  $\Omega$  according to  $\Omega/\Lambda^2$ , the coupling constant scales as  $\Lambda^\varepsilon t(\Lambda)$ . This leads to the following relation for the scaling variables :

$$\begin{cases} t_0 = \Lambda^\varepsilon Z^{-1}(\Lambda) t(\Lambda) \\ \Omega = \Lambda^2 Z(\Lambda) \Omega(\Lambda) \end{cases} \quad (17)$$

The identification of both the standard  $1/\varepsilon$  expansion of  $Z$  and  $\Gamma_0$  to first order in  $1/\varepsilon$  gives :

$$Z(t) = 1 + 2 \pi \frac{t}{\varepsilon}. \quad (18)$$

Then the low frequency behaviour of  $D(\Omega)$  is obtained by taking the limit  $\Lambda \rightarrow \infty$ , where the scale invariance of the renormalized vertex  $\Gamma$  leads to the following renormalization group equation for  $\Gamma_0$  :

$$\left[ A(\Omega) \frac{\partial}{\partial \Omega} + \beta(t) \frac{\partial}{\partial t} - \eta(t) \right] \Gamma_0 = 0 \quad (19)$$

with

$$A(\Omega) = \frac{\partial \Omega}{\partial \ln \Lambda}, \quad \beta(t) = \frac{\partial t}{\partial \ln \Lambda} \quad \text{and} \quad \eta(t) = \frac{d \ln Z^{-1}}{d \ln \Lambda}. \quad (20)$$

Studying the critical behaviour of  $D$  when  $\Omega \rightarrow 0$  is equivalent to study that of  $t(\Lambda)$  in the same limit  $\Lambda \rightarrow \infty$ . Now, we have :

$$\beta(t) = \varepsilon t \left( 1 + \frac{\partial \ln Z}{\partial \ln t} \right)^{-1} \quad (21)$$

and with the aid of equation (18) :  $\beta(t) = t(\varepsilon - 2\pi t)$ .

Then, for  $d > 2$ , the trivial fixed point  $t = 0$  exchanges its stability with the non-trivial solution  $t^* = \varepsilon/2\pi$  which is stable for  $\Lambda \rightarrow \infty$  as shown in figure 3. This fixed point corresponds to a mobility edge for  $d > 2$  in the spectrum parametrized by  $\omega$  between delocalized modes at low energies and localized modes for  $\omega > \omega^*$  where  $t(\omega^*) = t^*$ . An equivalent result has been obtained [9] by means of a mapping of the localization problem to a non-linear  $\sigma$ -model.

The renormalization group equation (19) allows us to obtain the frequency dependence of  $D$  at the critical point  $\omega^*$ . We then have

$$A(\Omega, t^*) = \Omega(2 + \varepsilon) \quad \text{and} \quad \eta(t^*) = -\varepsilon \quad (22)$$

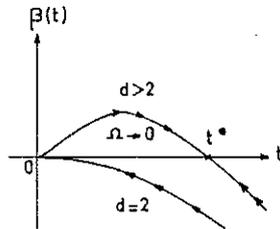


Fig. 3. — Plot of  $\beta(t)$  vs.  $t$  for  $d > 2$  and  $d = 2$ .  $\beta(t)$  represents the variation of the coupling constant  $t = \lambda/l$  with the frequency scale and  $t^*$  the fixed point corresponding to the localization transition.

and the resolution of equation (19) gives :

$$D(\Omega, \omega^*) \underset{\Omega \rightarrow 0}{\sim} D_0 \Omega^{d-2/d} \quad (23)$$

and

$$D(0, \omega) \underset{\omega \rightarrow \omega^*}{\sim} |\omega^* - \omega|^{1/d} \quad (24)$$

which confirms the vanishing of  $D$  at  $\omega^*$  for  $\Omega \rightarrow 0$  and gives the behaviour of  $D$  at zero frequency near the localization threshold. It is then possible to derive a complete scaling theory for the Anderson transition [10] for wave propagation in a random medium, without knowing the underlying field theory.

6. Discussion and conclusion.

There are two main results in this study. First, the characteristic angles  $\phi_c$  in equation (12) of the spectral intensity cone of backscattering are obtained in 2 and 3 dimensions, in terms of the ratios  $\lambda/l$  and  $\theta(\Omega)/\tau$ . Second the appearance of a threshold of localization as well as the critical behaviour of diffusion coefficient around the critical point are discussed by a direct scaling argument.

The possible existence of this cone would be a direct confirmation of the concepts of weak localization and calls for new experiments. In view of measurements we must discuss various phase breaking processes for coherent backscattered radiation. To any kind of dephasing process we can associate a *characteristic cut-off* time  $\tau_c$  beyond which the contribution of the multiple scattering path to the coherent backscattering vanishes. This is well known for electrons where the inelastic scattering time introduces a natural cut-off to the correction of electrical conductivity. The general method for handling  $\tau_c$  in the theory is to cut-off time development of the echo above  $\tau_c$ . In the limit of very low frequency  $\Omega\tau_c \ll 1$ , the dephasing correction is simply evaluated for  $\tau_c \gg \tau$  :

$$\begin{cases} \phi_c = a \frac{\lambda}{l} \left( 1 - \sqrt{\frac{\tau}{\tau_c}} \right) & d = 3 \\ \phi_c = b \ln \frac{\tau_c}{\tau} & d = 2 \end{cases} \quad (25)$$

In 2 dimensions the divergence for  $\Omega \rightarrow 0$  is indeed suppressed :  $\tau_c^{-1}$  is the lower cut-off frequency for scaling invariance. In 3 dimensions three types of dephasing processes could be encountered for weak localization of waves : absorption with a characteristic time  $\tau_a$ , impurity motion for which  $\tau_c = \tau_\lambda$  is the time of motion of the impurity over a distance  $\lambda$ , and finally finite geometry effect. The correction  $\tau_\lambda$  has already [2] been discussed : it is weak since it involves the ratio of the impurity average velocity over the velocity of light or sound (for ultrasound this correction could be sizeable). More precisely, we find

$$\frac{\tau}{\tau_\lambda} = \frac{v_i}{c} \cdot \frac{l}{\lambda} \quad (26)$$

for a dilute gas of impurities with velocity  $v_i$ , while for Brownian motion (diffusion coefficient  $D_i$ ) the correction is still weaker :  $\tau_\lambda = \lambda^2/D_i$ . The case of impurities imbedded in a slab of thickness  $\mu$  can be simply treated if the incoming wave from the left is totally transmitted outside on the right. In this case the cut-off time  $\tau_c$  is just the time for the radiation to diffuse up to a length scale of order  $\mu$  :

$$\tau_c \simeq \tau_\mu \simeq \frac{\mu^2}{D} \quad (27)$$

The finite geometry correction at  $d = 3$  is therefore  $(\tau/\tau_\mu)^{1/2} = l/\mu$ , i.e. the ratio of  $l$  over  $\mu$ .

The problem of localization threshold deserves to be discussed in the context of the Rayleigh scattering [5] of electromagnetic waves. From a standard formula for the Rayleigh mean free path  $l(\omega) \approx \omega^{-4}$  we define in  $d = 3$  :

$$\frac{\lambda}{l} = \left( \frac{\omega}{\omega_R} \right)^3 \quad (28)$$

with

$$\omega_R = \left( \frac{16}{3} \right)^{1/3} n_1^{-1/3} \frac{c}{a^2} \left| \frac{\epsilon_r - 1}{\epsilon_r + 2} \right|^{2/3},$$

where  $a$  is the radius of spherical particles of relative dielectric constant  $\epsilon_r$  (involving the condition of validity :  $\lambda \gg a$ ). The frequency threshold  $\omega^*$  is given at  $d = 3$  by the extrapolated expression (21) for  $2 + \epsilon = 3$ . From this relation we obtain a threshold  $\omega^* = 0.54 \omega_R$ . A very similar result [4] can be obtained for sound waves with Klemens scattering on mass impurities :  $\omega^* = 0.54 \omega_K$  where  $\omega_K = 0.14 \sigma_M^{-2/3} \omega_D$ .

The approach of the threshold should correspond in both cases to situation of very dense concentration of defects :  $n_i a^3 \rightarrow 1$  for light and each atom considered as mass defect for phonons. The realization or observation of such situations would produce blackhole for high frequency waves since no intensity could emerge from such dirty medium despite the fact that no absorption occurs in the scattering on impurities.

#### Acknowledgments.

It is a pleasure to thank Prof. A. Lagendijk and Dr. P. E. Wolf for valuable discussions, Dr. R. Rammal for a critical reading of the manuscript.

#### References

- [1] BERGMANN, G., *Phys. Rep.* **107** (1984) 1.
- [2] GOLUBENTSEV, A. A., *Sov. Phys. JETP* **59** (1984) 26.
- [3] See KHMELNITSKII, D. E., *Physica B + C* **126** (1984) 235.
- [4] AKKERMANS, E. and MAYNARD, R., to be published.
- [5] ISHIMARU, A., *Wave Propagation and Scattering in Random Media* (Academic Press, New York) 1978.
- [6] GORKOV, L. P., LARKIN, A. I. and KHMELNITSKII, D. E., *JETP Lett.* **30** (1979) 228.
- [7] LANDAU, L. D. and LIFSHITZ, E. M., *Course of Theoretical Physics, Physical Kinetics* (Pergamon Press) 1981.
- [8] WILSON, K. G. and KOGUT, J. B., *Phys. Rep.* **12** (1974) 75.  
BREZIN, E., LE GUILLOU, J. C. and ZINN-JUSTIN, J., *Phase Transitions and Critical Phenomena*, Vol. 6, ed. C. Domb and M. S. Green (London : Academic Press) 1976.
- [9] JOHN, S., SOMPOLINSKI, H. and STEPHEN, M. J., *Phys. Rev. B* **27** (1983) 5592.
- [10] ABRAHAMS, E., ANDERSON, P. W., LICCIARDELLO, D. C. and RAMAKRISHNAN, T. V., *Phys. Rev. Lett.* **42** (1979) 673.



CHAPITRE VIII

EFFET COHERENT DANS LA DIFFUSION MULTIPLE DE LA LUMIERE  
DANS UN MILIEU SEMI-INFINI



## I - INTRODUCTION

Dans un milieu désordonné, les chemins de diffusion associés à l'onde peuvent interférer pour donner lieu à une forte anisotropie de la section efficace différentielle. Celle-ci induit des corrections importantes des coefficients de transport pouvant éventuellement diverger ( $d = 2$ ). Une autre manifestation de ces effets de cohérence doit être visible sur la dépendance angulaire de l'intensité réfléchie par un milieu semi-infini désordonné éclairé par une lumière monochromatique cohérente et parallèle. Cet effet macroscopique constitue alors la preuve indiscutable de l'existence de ces effets cohérents et par-là même de la localisation faible.

Le cône de rétrodiffusion cohérente a été récemment mis en évidence expérimentalement<sup>(1)</sup>, et notre ambition dans ce chapitre est d'expliquer ses caractéristiques à la fois qualitativement et quantitativement. Dans ce but, nous développerons au cours de ce chapitre plusieurs parties. La première consistera à établir une formule phénoménologique pour le profil d'intensité réfléchie en insistant sur le sens physique de ses différents ingrédients. Celle-ci sera utilisée pour caractériser complètement le comportement de l'albedo stationnaire observée expérimentalement ainsi que pour prédire le comportement dynamique, les effets dus à l'absorption et à la modulation de la lumière incidente. Dans une seconde partie, on établira l'expression de l'albedo  $\alpha$  en se basant sur les mécanismes de collision multiple de l'onde plane sur les centres diffuseurs. Ce calcul microscopique nous permettra alors de développer  $\alpha$  en fonction de l'ordre  $n$  de la diffusion, et donc d'étudier la contribution à  $\alpha$  des différents chemins de diffusion. Enfin dans les deux dernières parties, nous verrons comment est modifiée  $\alpha$  dans le cas d'une lumière se propageant dans un milieu fractal ainsi que l'influence des effets de polarisation de la lumière incidente.

II - EXPRESSION PHENOMENOLOGIQUE DE L'ALBEDO

Nous nous plaçons ici dans le cas de figure décrit dans le chapitre (VII), c'est-à-dire que l'on considère le cas d'une onde plane se propageant dans un milieu désordonné caractérisé par une densité finie  $\rho$  de centres diffuseurs élastiques fixes. Nous supposons de même que l'onde est scalaire, c'est-à-dire que pour l'instant nous laissons de côté les effets dus à la polarisation de la lumière. Nous supposons en outre que les seuls processus d'interférence présents sont ceux décrits dans le chapitre VII entre un chemin de diffusion et son homologue renversé dans le temps. Nous pouvons donc évaluer ces effets et utiliser pour le transfert de l'intensité lumineuse la théorie classique du transfert radiatif. A des distances suffisamment grandes de l'interface (i.e. grandes devant le libre parcours moyen élastique  $\ell$ ), l'équation de transport<sup>(2)</sup> se réduit simplement à une équation de diffusion avec une constante  $D = \frac{\ell c}{3}$  où  $c$  est la vitesse de la lumière dans le milieu moyen. Dans le cadre de cette approximation, on peut alors écrire pour l'albedo  $\alpha(\hat{k}_i, \hat{k}_f)$  l'expression :

$$\alpha(\hat{k}_i, \hat{k}_f) = \frac{c}{4\pi\ell^2} \int e^{-z/\mu_0\ell} (1 + \cos(\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')))) P(\vec{r}, \vec{r}'; t) e^{-z'/\mu\ell} dz dz' d\Omega^2 dt$$

(VIII.1)

$\alpha$  est ici définie comme le rapport du flux d'énergie lumineuse émergeant par unité d'angle solide  $d\Omega$  autour de la direction  $\hat{k}_f$  et du flux d'énergie incident sur le milieu le long de la direction  $\hat{k}_i$ . Comme cela est représenté sur la figure (VIII.1),  $\mu$  et  $\mu_0$  sont les cosinus directeurs de  $\hat{k}_f$  et  $\hat{k}_i$  le long de l'axe Oz tandis que  $\vec{\rho}$  représente la projection de  $(\vec{r} - \vec{r}')$  sur le plan de l'interface. L'expression (VIII.1) a été obtenue de la manière suivante :

a)  $e^{-z/\mu_0\ell} \frac{dz_1}{\ell} d^2r dt$  représente la fraction de l'intensité incidente ayant subi sa première collision dans le volume élémentaire  $d^2r dz$  pendant l'intervalle de temps  $dt$ .

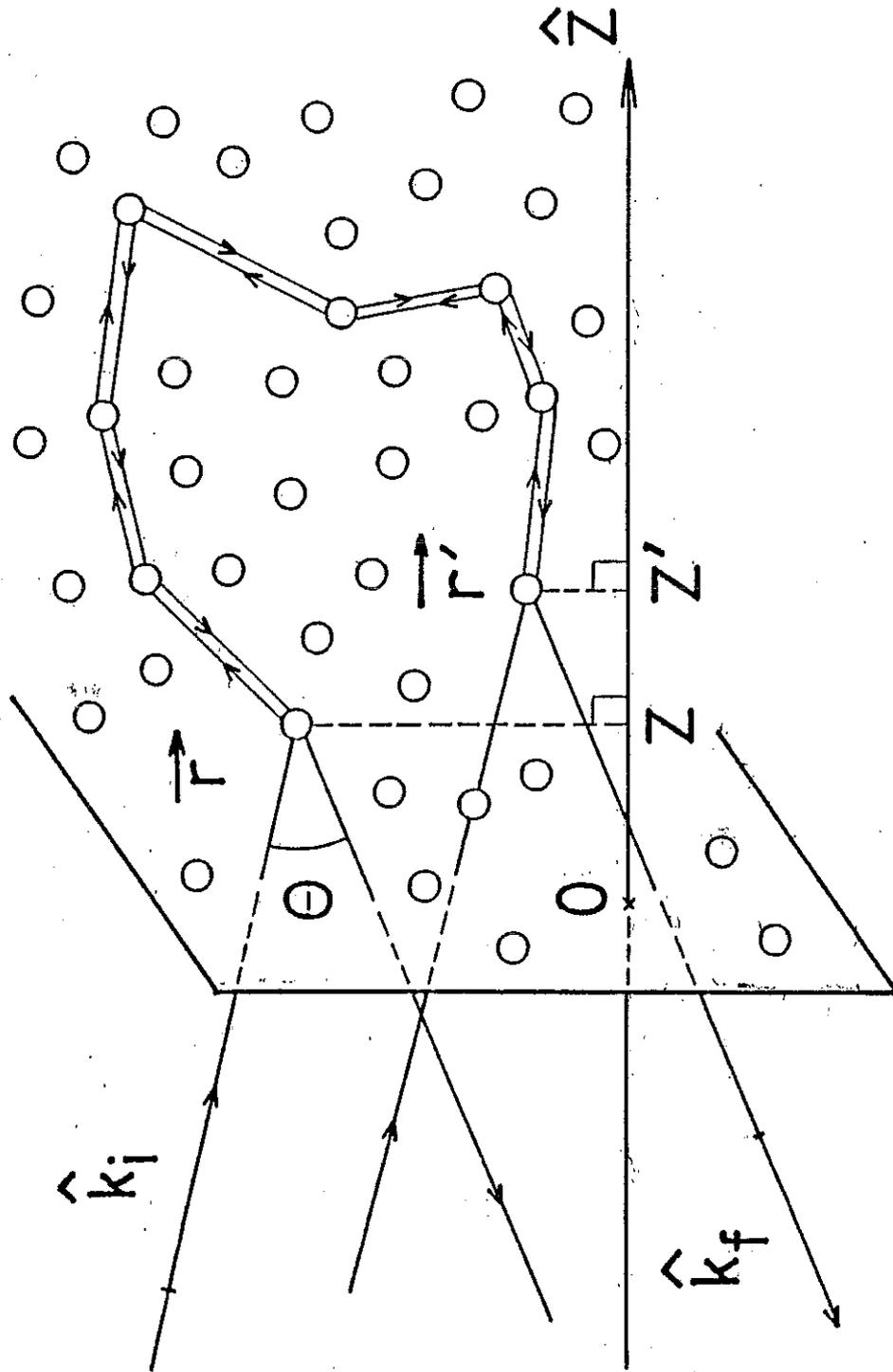


Fig. VIII.1 : Géométrie utilisée pour la rétrodiffusion cohérente.

b) L'intensité lumineuse diffuse dans le milieu avec la loi de probabilité  $P$  de telle sorte qu'une fraction  $Pd^3r'$  de l'intensité lumineuse se trouve à l'instant  $t$  dans le volume  $d^3r'$ .

c) En ce point, seule une partie  $c \frac{dz'}{\ell} \cdot \frac{d\Omega}{4\pi\lambda}$  du flux est diffusée dans l'angle solide  $d\Omega$  autour de la direction  $k_f$ .

d) Finalement, une portion  $e^{-z'/\mu\ell}$  du flux émerge du système sans avoir subi de nouvelles collisions.

Enfin, le facteur  $1 + \cos(\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}'))$  rend compte de l'effet d'interférence entre les chemins de diffusion précédemment décrit ; où  $\vec{q}$  est le vecteur d'onde de transfert  $\vec{q} = \hat{k}_i + \hat{k}_f$ . Il faut noter dans l'expression (VIII.1) que nous avons négligé certains effets d'interférence. Plus précisément, nous n'avons pas tenu compte de la modification de la constante de diffusion due à l'effet d'interférence pour des boucles fermées donnant lieu à la correction de localisation faible que nous avons développée dans le chapitre VII. La correction relative à  $D$  est de l'ordre de  $(\frac{\lambda}{\ell})^2$  pour un milieu tridimensionnel infini. Ici, à cause de la présence de l'interface, cette correction doit être modifiée (i.e. doit être différente pour les chemins de diffusion touchant ou non l'interface). Néanmoins, celle-ci doit rester petite tant que  $\lambda \ll \ell$ , ou de façon équivalente tant que l'ouverture angulaire du cône est petite ce qui est le cas expérimentalement. Nous ne tiendrons donc pas compte de la correction et nous garderons  $D = \frac{\ell c}{3}$ . Remarquons cependant que pour traiter l'approche à la transition de localisation ou le problème bidimensionnel, une telle approximation n'est pas justifiée.

Afin d'évaluer  $\alpha(\hat{k}_i, \hat{k}_f)$  donnée par (VIII.1), il nous faut avoir maintenant une expression de  $P(\vec{r}, \vec{r}'; t)$ , c'est-à-dire de la probabilité associée à une marche au hasard entre  $\vec{r}$  et  $\vec{r}'$  pendant le temps  $t$  ne traversant jamais l'interface, puisque celui-ci représente un plan piège pour la lumière émergente. Cette condition aux limites s'exprime en annulant la probabilité  $P$  sur le plan  $z = -z_0$ , où  $z_0$  est de l'ordre du libre parcours moyen élastique  $\ell$ , et peut-être évalué exactement dans le cas stationnaire et pour des centres diffuseurs ponctuels,  $z_0 = 0,7104... \ell$ , par comparaison avec la solution exacte

stationnaire de l'équation de transfert radiatif pour une source ponctuelle<sup>(3)</sup>. Cette valeur de  $z_0$  sera donc particulièrement appropriée au calcul de l'albedo stationnaire. Néanmoins, pour discuter au moins qualitativement le comportement temporel, nous supposons que  $z_0 = 0,71 \ell$  représente une bonne approximation pour le calcul de  $P(\vec{r}, \vec{r}' ; t)$  que nous prendrons alors sous la forme :

$$P(\vec{r}, \vec{r}' ; t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{3/2}} e^{-\frac{\rho^2}{4Dt}} \cdot \left[ e^{-\frac{(z-z')^2}{4Dt}} - e^{-\frac{(z+z'+2z_0)^2}{4Dt}} \right] \quad (\text{VIII.2})$$

Dans cette relation, l'invariance par translation du milieu moyen suivant les directions  $x$  et  $y$  impose que  $P$  ne dépende que de  $\rho = |\vec{r} - \vec{r}'|_{\perp}$ , tandis que les termes entre crochet et particulièrement le terme image imposent que seuls les chemins ne coupant pas l'interface soient sélectionnés dans le calcul de  $P$ .

#### A. Albedo dépendant du temps.

Le calcul de  $\alpha(t)$  est intéressant d'une part par la compréhension qu'il nous permet d'avoir du phénomène d'interférence mais aussi parce que c'est une quantité qui peut en principe être mesurée, en étudiant la réponse à une impulsion.  $\alpha(t)$  représente alors la dépendance angulaire de l'écho détecté après un temps  $t$  compté à partir du moment où l'impulsion est entrée dans le système. Dans la limite d'une incidence normale ( $\mu_0 = 1$ ) et d'une émergence quasi-normale ( $\mu \approx 1$ ) valable dans l'approximation des petits angles, on peut écrire la partie cohérente  $\alpha_c(\theta, t)$  de l'albedo sous la forme :

$$\alpha_c(\theta, t) = \frac{1}{4\pi\ell} \frac{1}{2\sqrt{\pi Dt}} \int \left[ \exp\left(-\frac{(z-z')^2}{4Dt}\right) - \exp\left(-\frac{(z+z'+2z_0)^2}{4Dt}\right) \right] e^{-z/\ell} \cdot e^{-z'/\ell} dz dz' \cdot \int d^2\rho e^{i\vec{k}_{\perp} \cdot \vec{\rho}} \cdot \frac{\exp(-\rho^2/4Dt)}{4\pi Dt} \quad (\text{VIII.3})$$

où  $\vec{k}_{\perp}$  est la composante de  $\hat{k}_i + \hat{k}_f$  parallèle à l'interface, c'est-à-dire  $k_{\perp} = \frac{4\pi}{\lambda} \sin \frac{\theta}{2}$ . On voit donc sur (VIII.3) que la dépendance angulaire de

$\alpha_c(\theta, t)$  ne dépend que de l'intégration sur  $\rho$  et est donnée par la gaussienne  $\exp(-Dt k_1^2)$ . Le terme en facteur de cette gaussienne est déterminé par l'intégrale sur  $z$  et  $z'$ . Dans la limite des temps longs, i.e. pour  $\sqrt{Dt} \gg \ell$ , on obtient :

$$\alpha_c(\theta, t) \approx \frac{\ell}{8\pi^{3/2}} \cdot \frac{(z_0 + \ell)^2}{(Dt)^{3/2}} e^{-Dtk_1^2} \quad (\text{VIII.4})$$

ou encore 
$$\frac{\alpha_c(\theta, t)}{\alpha_{inc}(\theta, t)} = e^{-Dtk_1^2}.$$

Les principales caractéristiques données par (VIII.4) sont :

- a) A un temps  $t$  donné, l'écho réfléchi est d'amplitude renforcée à l'intérieur d'un cône d'ouverture angulaire  $\theta_c \lesssim \frac{\lambda}{2\pi\sqrt{Dt}}$ . Ceci est une conséquence du fait que la taille typique transverse d'un chemin de diffusion de longueur  $ct$  est  $\sqrt{Dt}$ .
- b) L'amplitude  $\alpha_{inc}(t)$  de la partie incohérente de l'écho ( $\alpha_{inc}(t) = \alpha_c(0, t)$ ) est proportionnelle à la probabilité de traverser le plan  $z = 0$  au temps  $t$  et décroît comme  $t^{-3/2}$ . Ce résultat est vrai à toute dimension supérieure ou égale à 2.
- c) La relation (VIII.4) nous donne aussi le comportement de  $\alpha_c(\theta, t)$  en fonction du temps.  
On constate que pour des temps  $t < t_c(\theta_0)$  où  $t_c(\theta_0) = \frac{1}{Dk_1^2(\theta_0)}$ , les chemins de diffusion sont cohérents entre eux et l'écho réfléchi décroît alors comme  $(\frac{1}{t})^{3/2}$ . Cela signifie que pour une valeur donnée  $\theta_0$ , la diffusion des fluctuations d'intensité est cohérente pour les chemins d'extension  $\sqrt{Dt} < \sqrt{Dt_c(\theta_0)}$ . Pour  $t > t_c(\theta_0)$ , on n'a plus accès à l'effet d'interférence et

$$\alpha_c(\theta, t) \propto \frac{e^{-t/t_c}}{t^{3/2}}.$$

B. Albedo stationnaire.

Calculons maintenant l'albedo pour un flux incident stationnaire, correspondant à la situation expérimentale. Pour cela, nous allons sommer  $\alpha_c(\theta, t)$  donné par la relation (VIII.3) sur le temps, c'est-à-dire additionner les différentes contributions gaussiennes pondérées par leur amplitude respective. Remarquons déjà à ce niveau que l'intégrale sur le temps de la formule asymptotique (VIII.4) donnée par

$$\int_{\tau}^{\infty} \frac{dt}{t^{3/2}} e^{-Dk_{\perp}^2 t}$$

se comporte comme  $\frac{3}{4\pi} \frac{(z_0 + \ell)^2}{\ell^2} (1 - (k_{\perp} \ell))$  dans la limite  $k_{\perp}$  tendant vers 0. Par conséquent, la pente du signal cohérent tend vers une constante aux petits angles. Cette propriété est due essentiellement au comportement diffusif ( $\propto t^{-3/2}$ ) aux grands temps. Pour obtenir la relation précise donnant  $\alpha(\theta)$ , revenons à l'intégrale de (VIII.3). Pour faciliter le calcul, nous allons utiliser la transformée de Fourier de P :

$$P(\vec{r}, \vec{r}'; t) = \int \frac{d\Omega}{2\pi} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} e^{-i\Omega t} \frac{1}{-i\Omega + Dq^2} [e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} - e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}'^*)}] \quad (\text{VIII.5})$$

où  $\vec{r}'^* = (\vec{r}'_{\perp}, -2z_0 - z')$ . Comme précédemment, l'intégrale sur  $\rho$  dans (VIII.3) sélectionne comme seules composantes de  $\vec{q}$  parallèles à l'interface, celles égales à  $\vec{k}_{\perp}$  de telle sorte que l'albedo dépende de l'intégrale :

$$\int \frac{dq}{2\pi} \cdot \frac{1}{D(k_{\perp}^2 + q^2)} [e^{iq(z-z')} - e^{-iq(z+z'+2z_0)}]$$

$$= \frac{1}{2Dk_{\perp}} [e^{-k_{\perp}|z-z'|} - e^{-k_{\perp}(z+z'+2z_0)}] \quad (\text{VIII.6})$$

L'intégrale de (VIII.6) pondérée par  $\frac{e^{-z/\mu_0 \ell} \cdot e^{-z'/\mu \ell}}{4\pi \ell \tau}$ , sur  $z$  et  $z'$  donne finalement :

$$\alpha_{\text{coh}}(\theta) = \frac{3}{8\pi \ell} \cdot \frac{\mu \mu_0}{k_{\perp}} \cdot (1 + \mu k_{\perp} \ell)^{-1} \cdot (1 + \mu_0 k_{\perp} \ell)^{-1} \cdot (1 - e^{-2k_{\perp} z_0} + 2k_{\perp} \ell \frac{\mu \mu_0}{\mu + \mu_0}) \quad (\text{VIII.7})$$

où on a utilisé la relation  $D\tau = \ell^2/3$ . Dans l'hypothèse faite précédemment des petits angles ( $\mu \approx \mu_0 \approx 1$ ) on obtient finalement :

$$\alpha_{\text{coh}}(\theta) = \frac{3}{8\pi} \frac{1}{(1+k_{\perp}\ell)^2} \cdot \left[ 1 + \frac{1-e^{-2k_{\perp}z_0}}{k_{\perp}\ell} \right] \quad (\text{VIII.8})$$

Par conséquent,  $\alpha_{\text{inc}} = \alpha_{\text{coh}}(\theta = 0) = \frac{3}{8\pi} \left( 1 + \frac{2z_0}{\ell} \right)$  (VIII.9).

Dans les deux régimes asymptotiques  $\alpha_c(\theta)$  se réduit à :

i) limite des petits angles :  $k_{\perp}\ell \ll 1$  :

$$\begin{aligned} \alpha_c(\theta) &= \alpha_{\text{inc}} - \frac{3}{4\pi} \frac{(\ell + z_0)^2}{\ell^2} \cdot k_{\perp}\ell \\ &= \alpha_{\text{inc}} \left( 1 - 2 \frac{(\ell + z_0)^2}{\ell + 2z_0} k_{\perp}\ell \right) \end{aligned}$$

ii) limite des grands angles :  $k_{\perp}\ell \gg 1$

$$\alpha_c(\theta) \approx \frac{3}{8\pi} \frac{1}{(k_{\perp}\ell)^2}$$

Ces résultats sont à comparer avec la formule approchée de  $\alpha_c$  obtenue en faisant l'approximation  $z = z' = \ell$  dans la relation (VIII.6) qui conduit à :

$$\alpha_c^{\text{app}}(\theta) = \frac{3}{8\pi} \cdot \frac{1 - e^{-2k_{\perp}(z_0 + \ell)}}{k_{\perp}\ell} \quad (\text{VIII.10})$$

avec comme limites asymptotiques :

i)  $\alpha_c^{\text{app}}(\theta) \approx \alpha_{\text{inc}}^{\text{app}} \left( 1 - \frac{\ell + z_0}{\ell} \cdot k_{\perp}\ell \right) \quad k_{\perp}\ell \ll 1$

ii)  $\alpha_c^{\text{app}}(\theta) \approx \frac{3}{8\pi} \frac{1}{k_{\perp}\ell} \quad k_{\perp}\ell \gg 1$

La pente absolue de  $\alpha_c^{\text{app}}(\theta)$  est donc identique à celle de  $\alpha_c(\theta)$ , ce qui s'explique aisément, puisque celle-ci est donnée par les chemins de diffusion les plus longs pour lesquels l'approximation  $z = z' = \ell$  dans

$P(r, r'; t)$  est correcte. Par contre, le poids des petites boucles de diffusion est surestimé dans cette approximation. Cela explique la différence entre les valeurs  $\alpha_c^{app}$  et  $\alpha_c$  obtenues asymptotiquement. A cause de cette différence, la pente exacte de  $\alpha_c(\theta)$  (par rapport à  $\alpha_c(0)$ ) qui est une quantité aisément mesurable, est plus grande que celle obtenue de manière approchée, d'un facteur  $(2z_o + 2\ell)/(2z_o + \ell) \approx 1.45$ . Cette extrême sensibilité de la pente relative à la contribution des petites boucles montre combien les résultats obtenus sont sévèrement limités par la validité de l'approximation de diffusion.

Afin de comparer aux résultats expérimentaux, écrivons la formule complète donnant l'albedo :

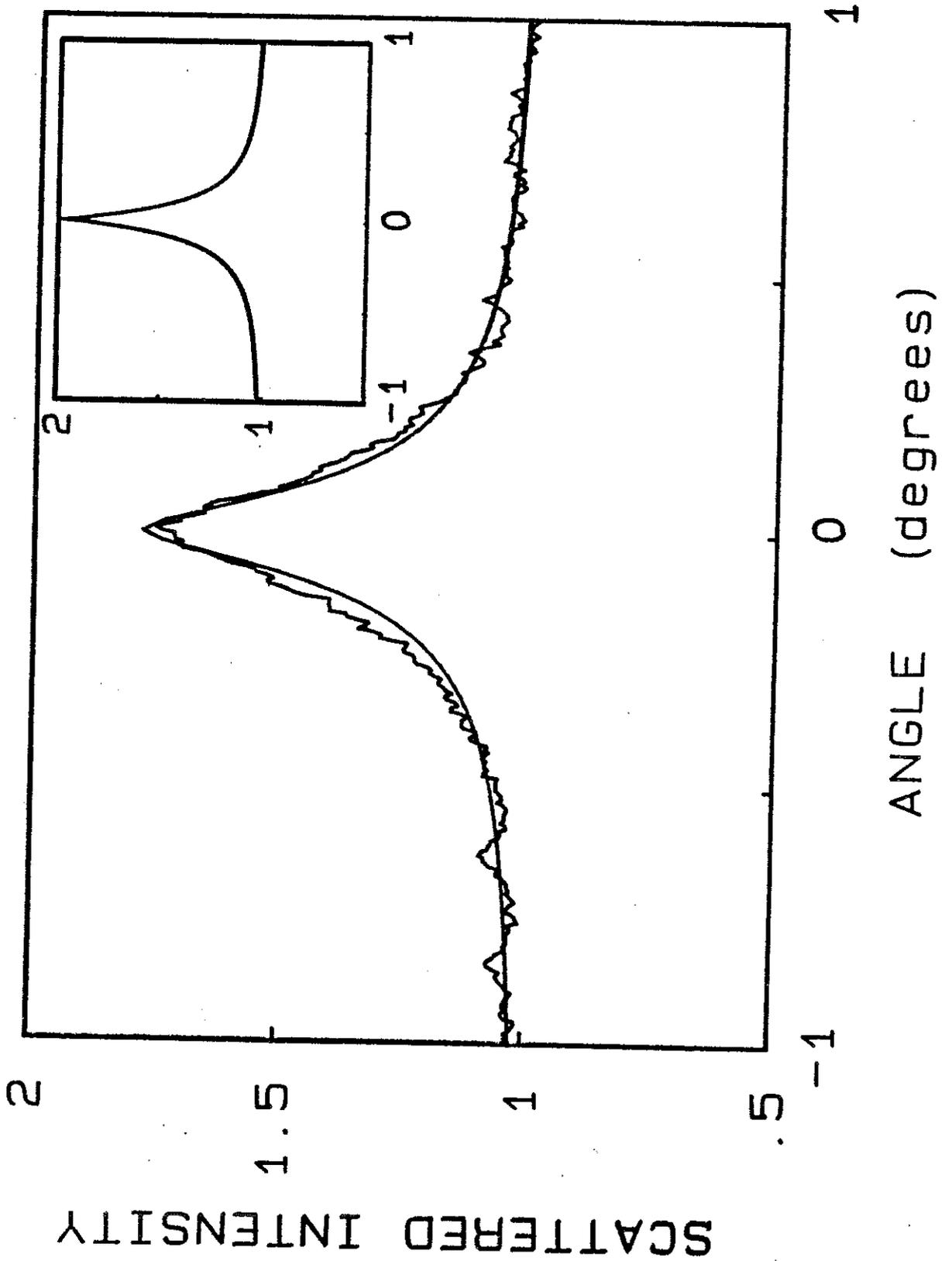
$$\alpha(\theta) = \frac{3}{8\pi} \left[ 1 + \frac{2z_o}{\ell} + \frac{1}{(1+k_{\perp}\ell)^2} \left( 1 + \frac{1 - e^{-2k_{\perp}z_o}}{k_{\perp}\ell} \right) \right] \quad (\text{VIII.11})$$

obtenue en sommant les contributions cohérentes et incohérentes. Il faut noter que cette relation n'est en principe valable que pour une diffusion isotrope. Pour rendre compte des résultats expérimentaux, pour lesquels les collisions sont anisotropes, il faut remplacer dans (VIII.11) le libre parcours moyen élastique  $\ell$  par le libre parcours moyen de transport  $\ell^*$ , obtenu en divisant  $\ell$  par la valeur moyenne de  $(1 - \cos \omega)$  où  $\omega$  est l'ouverture du cône d'anisotropie pour une bille de latex. Sur la figure (VIII.2), nous avons comparé la forme de raie expérimentale avec celle prédite par la relation (VIII.11) convoluée avec le profil instrumental mesuré indépendamment. Il est à noter que pour cela aucun paramètre ajustable n'a été utilisé,  $\ell^*$  ayant aussi été mesuré indépendamment. Compte tenu de l'approximation que représente l'équation de diffusion, l'accord est remarquable.

### C. Effets de la fréquence ou de l'absorption.

Afin de tester la validité de l'image de diffusion précédemment développée, nous allons maintenant en étudier deux autres conséquences. La première représente la contrepartie de l'expérience d'impulsion décrite dans le paragraphe (VIII.II.A). En effet, au lieu de suivre la réponse à une impulsion, il est aussi possible de moduler la lumière incidente et

*Fig. VIII.2 : Comparaison entre la relation VIII.11 et les résultats expérimentaux*



de mesurer la dépendance angulaire de la composante modulée de l'albedo:  $\alpha(\theta, \Omega)$  où  $\Omega$  représente la fréquence de modulation. A cause de la linéarité de l'équation de diffusion par rapport au temps, et du fait que le facteur  $\cos(\vec{k}_\perp \cdot \vec{\rho})$  est purement géométrique,  $\alpha(\theta, \Omega)$  n'est autre que la transformée de Fourier à la fréquence  $\Omega$  de l'écho  $\alpha(\theta, t)$ . On obtient ainsi :

$$\alpha(\theta, \Omega) = \frac{1}{4\pi\ell\tau} \int dz dz' d^2\rho e^{-z/\mu_0\ell} e^{-z'/\mu\ell} P(\vec{r}, \vec{r}'; \Omega) (1 + \cos(\vec{k}_\perp \cdot \vec{\rho})) \quad (\text{VIII.12})$$

où  $P(\vec{r}, \vec{r}'; \Omega)$  est obtenue à partir de (VIII.2), de telle sorte que  $\alpha(\theta, \Omega)$  est formellement obtenue par la substitution  $k_\perp^2 \leftrightarrow k_\perp^2 - i \frac{\Omega}{D} \equiv k_\perp^2 - i\xi^{-2}$  où  $\xi = \sqrt{D/\Omega}$  est la longueur de diffusion à la fréquence  $\Omega$ . Dans la limite  $k_\perp \xi \gg 1$ , la réponse cohérente modulée est identique à la formule stationnaire obtenue à fréquence nulle. Dans la limite  $k_\perp \xi \ll 1$ , le module de l'albedo cohérente est :

$$|\alpha_{\text{coh}}(\theta, \Omega)| = \frac{3}{8\pi\ell} \left[ (2z_0 + \ell) - \frac{\sqrt{2}}{\xi} (z_0 + \ell)^2 - (k_\perp \xi)^2 \frac{\sqrt{2}}{2\xi} (z_0 + \ell)^2 \right] \quad (\text{VIII.13})$$

Donc,  $\alpha_{\text{coh}}(0, \Omega)$  est inférieure à  $\alpha_{\text{coh}}(0, 0)$  d'une quantité de l'ordre de  $1/\xi$  (il faut noter cependant que l'on a toujours  $\alpha_{\text{coh}}(0, \Omega) = \alpha_{\text{inc}}(0, \Omega)$ ). Par conséquent, le comportement linéaire aux petits angles disparaît au profit d'un comportement parabolique comme cela est représenté sur la figure (VIII.3). Ce comportement s'explique aisément par le fait que les processus cohérents sont brouillés pour les chemins de diffusion d'extension supérieure à  $\xi$ . Seuls les chemins d'extension inférieure à  $\sqrt{D/\Omega} = \xi$  vont contribuer à  $\alpha_{\text{coh}}(\theta, \Omega)$  et à  $\alpha_{\text{inc}}(\Omega)$ , ce qui explique pourquoi la relation  $\alpha_{\text{coh}}(\theta = 0, \Omega) = \alpha_{\text{inc}}(\Omega)$  est maintenue. Donc pour un angle  $\theta$  donné, la partie cohérente du signal est comme précédemment déterminée par les chemins de longueur inférieure à  $\lambda/\theta^2$  et donc  $\alpha_{\text{coh}}(\theta, \Omega) = \alpha_{\text{coh}}(\theta, \Omega=0)$  pour les angles supérieurs à  $\lambda/\xi$  (i.e. pour  $k_\perp \xi \ll 1$ ). Pour des valeurs plus petites de l'angle, plus aucun chemin de diffusion ne contribue à  $\alpha_{\text{coh}}(\theta, \Omega)$  et on obtient :

$$\alpha_{\text{coh}}(0, \Omega) = 3\mu_0^2 \left(1 + \frac{z_0}{\ell}\right) \cdot \left[1 - \frac{1}{\sqrt{2}} \left(1 + \frac{z_0}{\ell}\right) \sqrt{3\Omega\tau}\right] \quad (\text{VIII.14})$$

A ce stade de la discussion, je voudrais donner quelques ordres de grandeur relatifs à l'observation de l'effet en fréquence ou

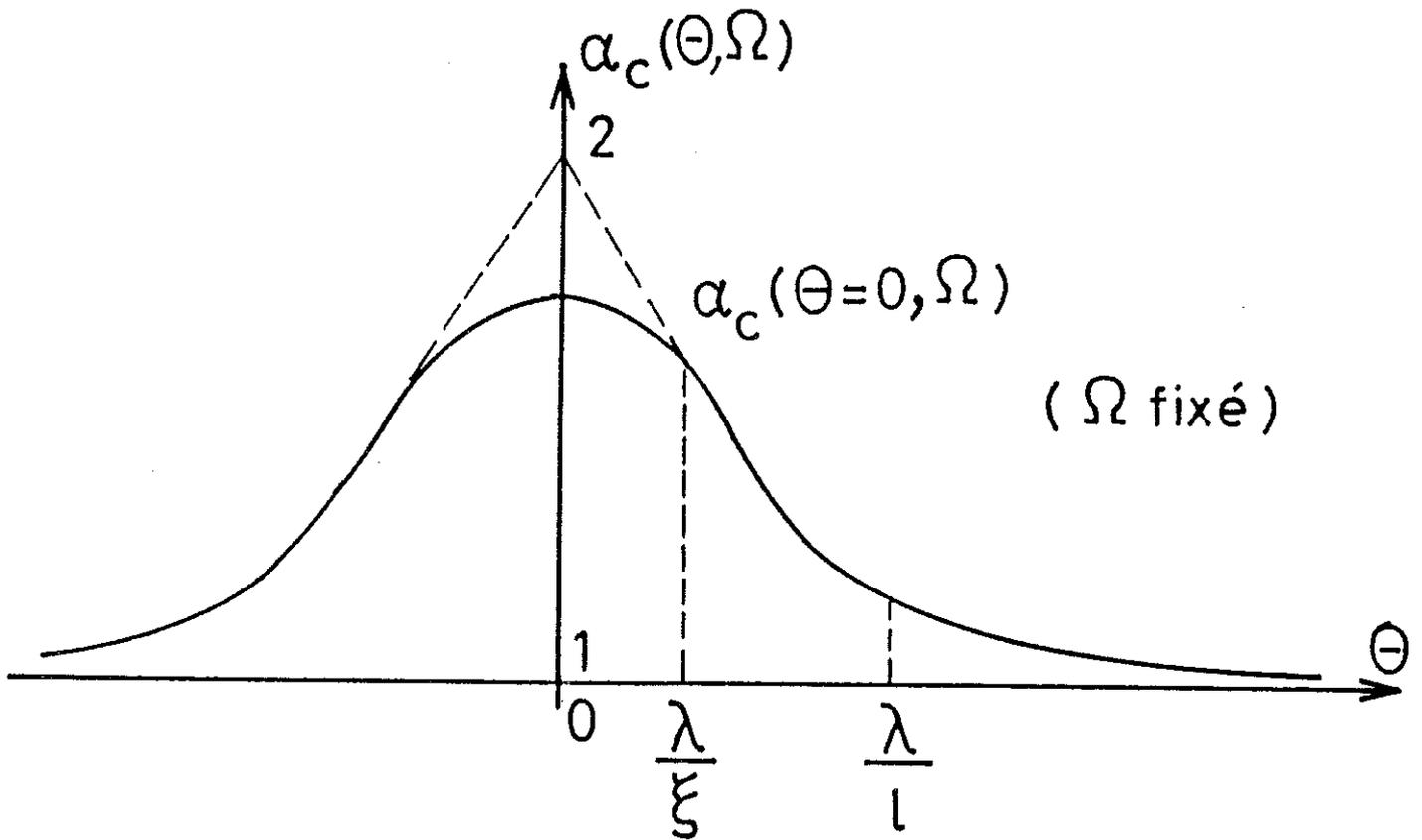


Fig. VIII.3 : Forme du cône de rétrodiffusion cohérente correspondant à une modulation de la lumière incidente.

en temps discutés ci-dessus. Sur les résultats expérimentaux obtenus pour l'albedo stationnaire, l'ouverture angulaire du cône cohérent est de l'ordre de 10 mrad, correspondant à un libre parcours moyen de transport d'environ 30  $\mu\text{m}$ . La résolution angulaire typique étant de l'ordre du mrad, les effets d'arrondissement du pic décrits précédemment ne pourront être observables que pour des temps inférieurs à 10 ps ou des fréquences de modulation supérieures à  $10^{11}$  Hz. De telles valeurs représentent une réelle difficulté expérimentale pour voir l'effet qui n'existerait pas si on employait par exemple à la place de l'optique des ondes acoustiques ou des microondes.

Une alternative supplémentaire, si on est intéressé par une "spectroscopie" des boucles de diffusion cohérentes, consiste à étudier les effets d'absorption plutôt que les effets en temps ou en fréquence. La présence d'absorption dans le milieu se traduit par l'existence d'un temps caractéristique  $\tau_i$  associé à la relaxation de l'énergie, c'est-à-dire en particulier à la perte de cohérence de phase. L'albedo est alors donnée par :

$$\alpha_{\text{abs}} = \int_0^{\infty} \alpha(t) e^{-t/\tau_i} \frac{dt}{\tau} \quad (\text{VIII.15})$$

où  $\alpha(t)$  est l'albedo dépendant du temps donnée par la relation (VIII.3). La partie cohérente de l'albedo,  $\alpha_c(\tau_i, \theta)$  est alors obtenue en remplaçant formellement  $-i\Omega$  par  $1/\tau_i$  dans l'expression (VIII.13) de  $\alpha_c(\theta, \Omega)$ . La forme de raie est alors identique à celle obtenue pour  $\alpha_c(\theta, \Omega)$  mais où l'angle caractéristique  $\theta_\xi = \lambda/2\pi\xi$  est ici remplacé par  $\theta_i = \lambda/2\pi\sqrt{\lambda\ell_i}$ . Par conséquent, on retrouve les comportements suivants :

- i) pour  $\theta \gg \theta_i$ ,  $\alpha_{\text{coh}}^{\text{abs}}(\theta) = \alpha_{\text{coh}}(\theta)$
- ii) pour  $\theta \ll \theta_i$ , la forme de  $\alpha_{\text{coh}}^{\text{abs}}(\theta)$  devient parabolique et non plus linéaire.

Ce comportement a bien entendu la même origine physique que pour le problème à fréquence non nulle, c'est-à-dire qu'à cause de l'absorption, tous les chemins de diffusion de longueur développée inférieure à  $\ell_i$  contribuent à la partie cohérente de l'albedo mais pas ceux correspondant à des angles inférieurs à  $\lambda/2\pi\sqrt{\lambda\ell_i}$ .



III - DEMONSTRATION MICROSCOPIQUE DE L'EXPRESSION DE L'ALBEDO

Je voudrais dans cette partie donner une démonstration de l'expression heuristique de  $\alpha(\theta, t)$  basée sur des arguments microscopiques, c'est-à-dire à partir des collisions élémentaires subies par une onde plane incidente.

Introduisons les deux quantités fondamentales qui vont décrire les propriétés macroscopiques de l'onde dans le milieu désordonné. Tout d'abord, la valeur moyenne  $\langle G(\vec{r}, \vec{r}') \rangle$  du propagateur qui dans une approximation de champ moyen, donne l'amplitude de l'onde au point  $\vec{r}'$  en réponse à une source placée au point  $\vec{r}$ . La fonction de Green  $G(\vec{r}, \vec{r}')$  obéit à l'équation du mouvement :

$$[\nabla_{\vec{r}}^2 + k^2 + V(\vec{r}')] G(\vec{r}, \vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \quad (\text{VIII.16})$$

où  $k^2$  représente l'énergie du mode et  $V$  le potentiel effectif de diffusion dû aux impuretés. Afin de décrire les propriétés de transport dans le milieu désordonné, introduisons maintenant la fonction de corrélation des deux propagateurs :

$$G_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}'_1, \vec{r}'_2) = \langle G^R(\vec{r}_1, \vec{r}_2) G^A(\vec{r}'_1, \vec{r}'_2) \rangle \quad (\text{VIII.17})$$

où  $G^R$  et  $G^A$  représentent respectivement les fonctions de Green avancée et retardée, solution de l'équation (VIII.16). A partir de  $G_2$ , on définit la probabilité pour que l'intensité du champ incident le long de la direction  $\hat{s}_0$  soit diffusée le long de la direction  $\hat{s}$  par :

$$p(\hat{s}_0, \hat{s}) = G_2(k\hat{s}_0, k\hat{s}; k\hat{s}_0, k\hat{s}) \quad (\text{VIII.18})$$

où  $G_2(\vec{p}, \vec{p}'; \vec{q}, \vec{q}')$  est la transformée de Fourier de  $G_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}'_1, \vec{r}'_2)$ . Les deux quantités  $\langle G \rangle$  et  $G_2$  obéissent respectivement aux équations de Dyson et Bethe-Salpeter données par :

$$\langle G \rangle = G_0 + G_0 M \langle G \rangle \quad (\text{VIII.19})$$

$$G_2 = \langle G^R \rangle \langle G^A \rangle + \langle G^R \rangle \langle G^A \rangle \Gamma G_2 \quad (\text{VIII.20})$$

L'opérateur M dans la relation (VIII.19) est l'opérateur de "masse" qui renormalise le propagateur libre et permet de définir une solution du type champ moyen à l'équation de Dyson :

$$\langle G(\vec{r}, \vec{r}') \rangle = \frac{1}{4\pi |\vec{r} - \vec{r}'|} e^{ik_{\text{eff}} \cdot |\vec{r} - \vec{r}'|} \quad (\text{VIII.21})$$

où  $k_{\text{eff}} = k - \frac{M(k)}{2k}$ . Par conséquent, le libre parcours moyen élastique ou longueur d'extinction est défini par :  $\frac{1}{\ell(\omega)} = -\text{Im} \frac{M(k)}{k}$  et est donnée par une expression du type Rayleigh :  $\ell(\omega) = \lambda(\omega) \left(\frac{\omega_R}{\omega}\right)^3$  où  $\omega_R$  est une fréquence caractéristique qui dépend de la nature de l'onde (électromagnétique, élastique...). Il est d'autre part important de noter que l'équation (VIII.19) n'est pas une équation de transport et que par conséquent,  $\ell(\omega)$  n'est pas le libre parcours moyen de transport, mais décrit seulement les propriétés de collision du milieu désordonné moyen.

Etudions alors l'équation de Bethe-Salpeter (VIII.20). C'est l'équivalent à l'échelle microscopique de l'équation de transport de Boltzman ou équation de transfert radiatif habituellement utilisée dans les modèles phénoménologiques macroscopiques. Dans cette équation,  $\Gamma$  représente la somme de tous les diagrammes obtenus lors de l'interaction de l'onde plane avec les diffuseurs. Il est de plus possible de montrer que la probabilité donnée par la transformée de Fourier (VIII.18) peut s'écrire sous la forme :

$$p(k\hat{s}_0, k\hat{s}; \omega, \Omega) = \langle G^A(k\hat{s}_0, \omega) \rangle \langle G^R(k\hat{s}, \omega + \Omega) \rangle \left[ \delta_{\hat{s}, \hat{s}_0} + \sum_{\vec{k}_1} U(k\hat{s}_0, \vec{k}_1, \Omega) \right. \\ \left. \cdot p(\vec{k}_1, k\hat{s}; \omega; \Omega) \right] \quad (\text{VIII.22})$$

où  $U(k\hat{s}_0, \vec{k}_1, \Omega)$  est la somme de tous les diagrammes irréductibles représentés sur la figure (VIII.4). La solution à l'approximation du premier ordre de l'équation de Bethe-Salpeter (VIII.22) est :

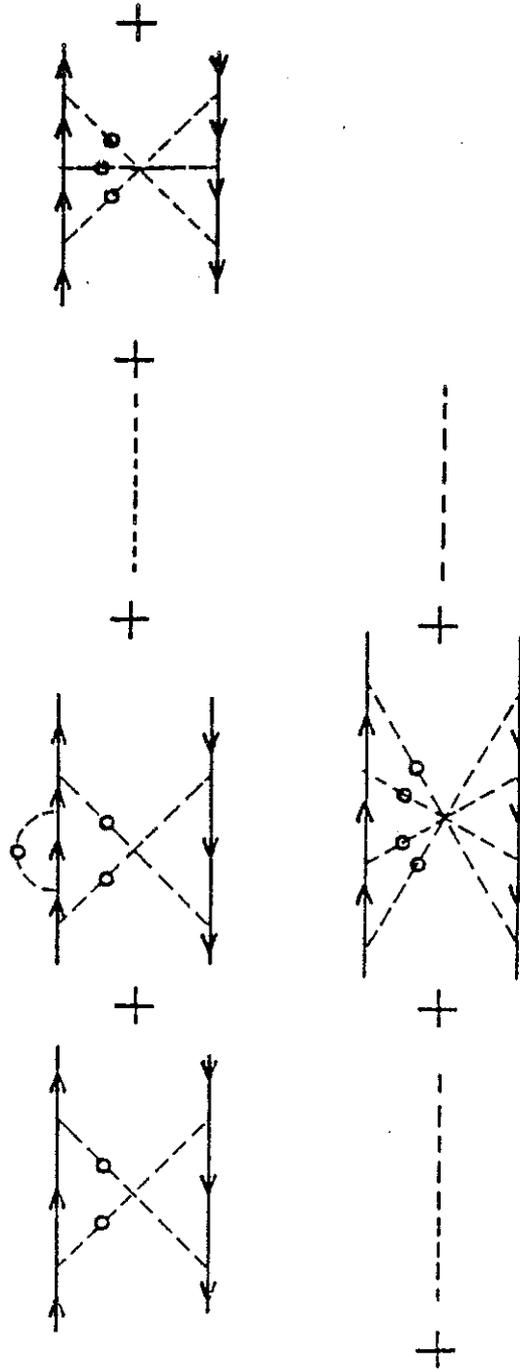


Fig. VIII.4 : Somme de tous les diagrammes irréductibles.

$$\begin{aligned}
 p(k\hat{s}_0, k\hat{s}; \Omega, \omega) &= \langle G^A(k\hat{s}_0, \omega) \rangle \langle G^R(k\hat{s}, \omega + \Omega) \rangle \delta_{\hat{s}, \hat{s}_0} + \\
 &+ \langle G^A(k\hat{s}_0, \omega) \rangle \langle G^R(k\hat{s}, \omega + \Omega) \rangle U(k\hat{s}_0, k\hat{s}, \Omega) \langle G^A(k\hat{s}_0, \omega) \rangle \langle G^R(k\hat{s}, \omega + \Omega) \rangle
 \end{aligned}
 \tag{VIII.23}$$

et la contribution  $U$  des diagrammes irréductibles est obtenue en sommant tous les diagrammes en éventail. La somme est celle d'une série géométrique et peut-être finalement exprimée par :

$$U(k(\hat{s} + \hat{s}_0), \vec{q}, \Omega, \omega) = \frac{1}{4\pi\lambda(\omega)\tau(\omega)} \cdot \frac{1}{-i\Omega + Dq^2}
 \tag{VIII.24}$$

où  $D = \frac{\ell^2}{3\tau}$  est la constante de diffusion de l'intensité dans le système. L'expression (VIII.24) pour  $U$  est la signature de l'existence d'un processus de diffusion dépendant du temps régissant la propagation de l'intensité. Néanmoins, l'expression du pôle de diffusion dans (VIII.24) suscite les remarques suivantes. Tout d'abord, il a été obtenu en sommant la série infinie des collisions moyennée sur le désordre. De plus, le comportement diffusif de l'intensité n'est qu'un régime asymptotique valable dans la limite macroscopique ou hydrodynamique  $\Omega\tau \ll 1$  et  $q\ell \ll 1$ . Dans cette limite, c'est une généralisation de l'équation de transport en régime transitoire.

Expression de  $G_2(\vec{r}, \hat{s}_0; \vec{r}', \hat{s}, \Omega)$  dans un milieu infini tridimensionnel :

Les calculs ci-dessus nous permettent d'obtenir par l'intermédiaire de l'équation de Bethe-Salpeter une expression de la probabilité  $p(k\hat{s}_0, k\hat{s}; \omega, \Omega)$ . Retournons pour cela à l'équation (VIII.20) de départ pour la fonction de corrélation de l'intensité  $G_2(\vec{r}_1, \vec{r}_2; \vec{r}'_1, \vec{r}'_2)$ . Afin de comprendre la nature d'une séquence donnée de collisions, concentrons-nous sur un événement typique à deux collisions caractérisé par :

$$Q = \langle G^R(\vec{r}_1, \vec{r}) \rangle \langle G^A(\vec{r}'_1, \vec{r}') \rangle \Gamma \langle G^R(\vec{r}, \vec{r}') \rangle \langle G^A(\vec{r}, \vec{r}') \rangle \Gamma \langle G^R(\vec{r}', \vec{r}_2) \rangle \langle G^A(\vec{r}', \vec{r}'_2) \rangle$$

(VIII.25)

La contribution à  $G_2$  de la relation (VIII.25) est donnée par la somme sur  $\vec{r}$  et  $\vec{r}'$  :

$$Q = \int d^3 r \int d^3 r' \langle G^R(\vec{r}_1 - \vec{r}) \rangle \langle G^A(\vec{r}'_1 - \vec{r}) \rangle \Gamma(k\hat{s}_{r_1 r}, k\hat{s}_{rr'} ; k\hat{s}_{rr'_1}, k\hat{s}_{rr'}) .$$

$$. \langle G^R(\vec{r} - \vec{r}') \rangle \langle G^A(\vec{r}' - \vec{r}) \rangle \Gamma(k\hat{s}_{rr'}, k\hat{s}_{r'r_2} ; k\hat{s}_{rr'}, k\hat{s}_{r'r'_2}) .$$

$$. \langle G^R(\vec{r}' - \vec{r}_2) \rangle \langle G^A(\vec{r}' - \vec{r}_2) \rangle$$

Afin de simplifier le terme de collision ci-dessus, introduisons les quantités :

$$F_0(\vec{r}, \hat{s}; \vec{r}', \hat{s}') \equiv \langle G^R(\vec{r} - \vec{r}') \rangle \langle G^A(\vec{r}' - \vec{r}) \rangle \delta(\hat{s} - \hat{s}') \delta(\hat{s} - \frac{\vec{r} - \vec{r}'}{|\vec{r} - \vec{r}'|})$$

$$\text{et } \tau(\vec{r}, \hat{s}; \vec{r}', \hat{s}') \equiv \delta(\vec{r} - \vec{r}') \Gamma(k\hat{s}, k\hat{s}'; k\hat{s}, k\hat{s}') \quad (\text{VIII.27})$$

On peut maintenant écrire l'équation de Bethe-Salpeter sous la forme :

$$G_2 = F_0 + F_0 \tau F_0 + F_0 \tau F_0 \tau F_0 + \dots \quad (\text{VIII.28})$$

Le premier terme  $F_0$  représente la propagation libre sans aucune collision sur les impuretés.

Le transport de  $\vec{r}$  à  $\vec{r}'$  est le produit de deux contributions distinctes. Tout d'abord, les deux termes  $F_0$  représentent la probabilité pour les ondes incidentes et réfléchies de se propager librement, c'est-à-dire sans collision de  $\vec{r}$  à  $\vec{r}_1$  et de  $\vec{r}_2$  à  $\vec{r}'$  respectivement le long des directions  $\hat{s}_0 = \vec{r} - \vec{r}_1 / |\vec{r} - \vec{r}_1|$  et  $\hat{s} = \vec{r}_2 - \vec{r}' / |\vec{r}_2 - \vec{r}'|$ . Puis vient la contribution de tous les termes représentant les collisions entre  $\vec{r}_1$  et  $\vec{r}_2$ , prenant en compte tous les diagrammes réductibles et irréductibles. Si  $\Gamma$  est l'opérateur qui décrit cette contribution, alors on a :

$$G_2(\vec{r}, \hat{s}_0; \vec{r}', \hat{s}, \Omega) = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 F_0(\vec{r} - \vec{r}_1) \Gamma(\vec{r}_1, \vec{r}_2, \Omega) F_0(\vec{r}' - \vec{r}_2) \quad (\text{VIII.28})$$

où on a omis dans  $G_2$  les contributions associées à la propagation libre et aux événements à une collision.

Contribution des processus cohérents et incohérents :

L'opérateur  $\Gamma$  décrivant les collisions entre les points  $\vec{r}_1$  et  $\vec{r}_2$  est la somme de deux classes de diagrammes, qui peuvent être sommées comme des séries géométriques pour donner un pôle de diffusion comme dans la relation (VIII.24) reflétant la nature diffusive de la propagation de l'intensité à travers le milieu. Ces deux classes de diagrammes sont données par les diagrammes en échelle et par les diagrammes en éventail. Cette dernière classe a d'ailleurs été étudiée précédemment afin d'évaluer la contribution irréductible  $U$  à  $p(k\hat{s}_0, k\hat{s}; \omega, \Omega)$ . Par conséquent, la fonction de corrélation  $G_2$  peut être divisée en deux parties, chacune étant associée à une classe de diagrammes. Appelons  $G_2^{(L)}(\hat{s}_0, \hat{s})$  la partie due aux diagrammes en échelle et  $G_2^{(F)}(\hat{s}_0, \hat{s})$  celle associée aux diagrammes en éventail de telle sorte que

$$G_2(\hat{s}, \hat{s}_0) = G_2^{(L)}(\hat{s}, \hat{s}_0) + G_2^{(F)}(\hat{s}, \hat{s}_0) \quad (\text{VIII.29})$$

Grâce à l'invariance par translation du milieu moyen,  $G_2^{(L)}(\hat{s}, \hat{s}_0)$  peut être obtenu à partir de la transformée de Fourier :

$$\mathcal{K}(\vec{p}, \vec{p}'; \vec{q}, \vec{q}') = \int d^3r \int d^3r' e^{-i(\vec{p}-\vec{q}) \cdot \vec{r}} e^{i(\vec{p}'-\vec{q}') \cdot \vec{r}'} \cdot A(\vec{r}, \frac{\vec{p}+\vec{q}}{2}; \vec{r}', \frac{\vec{p}'+\vec{q}'}{2}) \quad (\text{VIII.30})$$

où  $\vec{p} = \vec{q} = k\hat{s}_0$  et  $\vec{p}' = \vec{q}' = k\hat{s}$ . On obtient donc :

$$G_2^{(L)}(\hat{s}, \hat{s}_0) = \mathcal{K}(k\hat{s}_0, k\hat{s}; k\hat{s}_0, k\hat{s}) \quad (\text{VIII.31})$$

et  $G_2^{(L)}(\vec{r}, \hat{s}; \vec{r}', \hat{s}_0) \equiv A(\vec{r}, \hat{s}; \vec{r}', \hat{s}_0)$

Utilisons maintenant l'invariance par renversement du temps et l'isotropie du potentiel de collision sur les impuretés afin d'exprimer à chaque ordre du développement en diffusion multiple l'égalité représentée sur la figure (VIII.5) entre les diagrammes croisés et en échelle pour obtenir finalement :

$$G_2^{(F)}(\hat{s}, \hat{s}_0) = \frac{1}{2} [\mathcal{K}(k\hat{s}_0, k\hat{s}, -k\hat{s}, -k\hat{s}_0) + \mathcal{K}(-k\hat{s}, -k\hat{s}_0; k\hat{s}_0, k\hat{s})] \quad (\text{VIII.32})$$

et avec l'aide de la relation (VIII.30), on obtient :

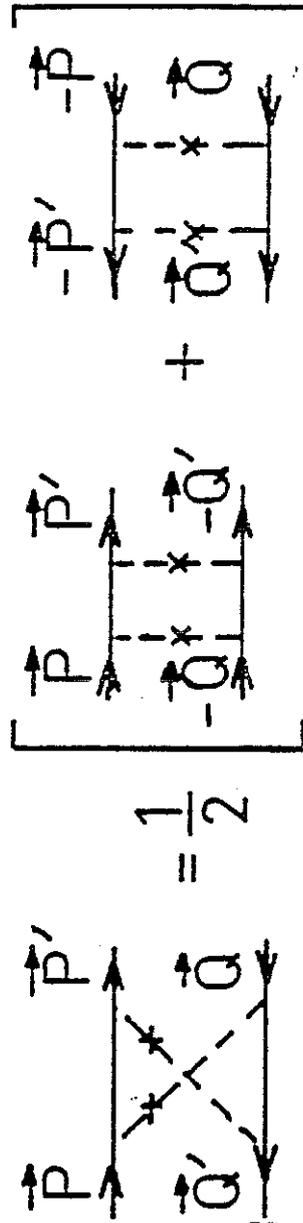


Fig. VIII.5 : Egalité entre les diagrammes et en échelle.

$$G_2^{(F)}(\hat{s}, \hat{s}_0) = \frac{1}{2} \left[ \int d^3r \int d^3r' e^{-ik(\hat{s}+\hat{s}_0)\cdot\vec{r}} e^{ik(\hat{s}+\hat{s}_0)\cdot\vec{r}'} A(\vec{r}, \frac{1}{2}(\hat{s}_0-\hat{s}); \vec{r}', \frac{1}{2}(\hat{s}-\hat{s}_0)) \right. \\ \left. + \int d^3r \int d^3r' e^{ik(\hat{s}+\hat{s}_0)\cdot\vec{r}} e^{-ik(\hat{s}+\hat{s}_0)\cdot\vec{r}'} A(\vec{r}, \frac{1}{2}(\hat{s}_0-\hat{s}); \vec{r}', \frac{1}{2}(\hat{s}-\hat{s}_0)) \right]$$

(VIII.33)

Au voisinage de la direction de rétrodiffusion, on a  $\hat{s} \approx -\hat{s}_0$ . Soit  $\vec{s}_1 = \hat{s} + \hat{s}_0$  de telle sorte que le vecteur  $\vec{q}$  défini dans l'équation (VIII.24) soit égal à  $\vec{q} = k\vec{s}_1$ . Donc si  $\hat{s} \approx -\hat{s}_0$ , i.e. pour  $q \ll 1$ , la relation (VIII.33) se réduit à :

$$G_2^{(F)}(\hat{s}, \hat{s}_0) = \int d^3r \int d^3r' \cos [k\vec{s}_1 \cdot (\vec{r} - \vec{r}')] G_2^{(L)}(\vec{r}, \hat{s}_0; \vec{r}', \hat{s}) \quad \text{-VIII.34}$$

Finalement, en rassemblant les relations (VIII.29), (VIII.34) et l'égalité :

$$G_2^{(L)}(\hat{s}, \hat{s}_0) = \int d^3r \int d^3r' G_2^{(L)}(\vec{r}, \hat{s}_0; \vec{r}', \hat{s})$$

on obtient :

$$G_2(\hat{s}, \hat{s}_0) = \int d^3r \int d^3r' \left\{ 1 + \cos [\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')] \right\} G_2^{(L)}(\vec{r}, \hat{s}_0; \vec{r}', \hat{s}) \quad \text{(VIII.35)}$$

où  $G_2^{(L)}$  est la partie de la relation (VIII.28) associée aux diagrammes réductibles, c'est-à-dire en échelle, de la fonction de vertex  $\Gamma$ .

Expression du coefficient de transport de l'intensité :  $\alpha_B(\hat{s}, \hat{s}_0; \Omega)$  :

Nous avons maintenant une expression de l'équation de Bethe-Salpeter qui tient compte des effets de cohérence par l'intermédiaire des équations (VIII.35) et (VIII.28), qui relie  $G_2^{(L)}(\vec{r}, \hat{s}_0; \vec{r}', \hat{s})$  à la somme des diagrammes en échelle. Mais comme nous l'avons mentionné plus haut, la contribution totale  $G_2(\vec{r}, \hat{s}_0; \vec{r}', \hat{s})$  donne la fonction de corrélation des intensités respectivement en  $\vec{r}$  le long de la direction  $\hat{s}_0$  et en  $\vec{r}'$  le long de la direction  $\hat{s}$ . Le coefficient de transport de l'intensité dans le "bulk",  $\alpha_B(\hat{s}, \hat{s}_0; \Omega, \omega)$  est alors donné par la fonction de corrélation courant-courant et peut donc s'écrire

$$\alpha_B(\hat{s}, \hat{s}_0; \Omega, \omega) = \int d^3 r \int d^3 r' (\hat{s}_0 \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}}) (\hat{s} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}'}) G_2(\vec{r}, \hat{s}_0; \vec{r}', \hat{s}) \quad (\text{VIII.36})$$

On prendra en compte les effets cohérents dans l'expression de  $\alpha_B$  en suivant exactement la même procédure que celle décrite plus haut, en remplaçant formellement l'opérateur  $G_2^{(L)}(\vec{r}, \hat{s}_0; \vec{r}', \hat{s})$  par sa fonction de corrélation courant-courant pour obtenir finalement :

$$\alpha_B(\hat{s}, \hat{s}_0; \Omega, \omega) = \int d^3 r \int d^3 r' \{1 + \cos[\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')] \} (\hat{s}_0 \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}}) (\hat{s} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}'}) G_2^{(L)}(\vec{r}, \hat{s}_0; \vec{r}', \hat{s}) \quad (\text{VIII.37})$$

Finalement, pour avoir une expression complète de  $\alpha_B$ , nous devons évaluer la somme des diagrammes en échelle nécessaire pour calculer  $G_2^{(L)}$ . L'équivalence des diagrammes en échelle et des diagrammes en éventail dans la direction de rétrodiffusion, établie dans le chapitre V, et la relation (VIII.24) nous donnent :

$$G_2^{(L)}(\vec{r}, \hat{s}_0; \vec{r}', \hat{s}; \Omega) = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 F_0(\vec{r} - \vec{r}_1) \cdot \left\{ \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3 q \frac{1}{4\pi\ell\tau} \cdot \frac{e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)}}{-i\Omega + D_0 q^2} \right\} \cdot F_0(\vec{r}' - \vec{r}_2) \quad (\text{VIII.38})$$

L'expression (VIII.37) pour  $\alpha_B$  est très générale et a été établie au moyen de quelques hypothèses que nous avons résumées au début de cette partie. Elle suscite néanmoins quelques remarques que j'aimerais donner maintenant :

i) La solution de l'équation (VIII.20) pour le transport de l'intensité a été obtenue dans la limite  $\lambda \ll \ell$ , où le libre parcours moyen élastique ou longueur d'atténuation  $\ell(\omega)$  est donné par la solution champ moyen (VIII.21) de l'équation (VIII.19). Cette condition est nécessaire afin de pouvoir reconstituer une onde plane entre chaque collision élastique.

ii) L'approximation de diffusion pour le transport de l'intensité à travers le milieu désordonné comme elle est donnée par l'équation (VIII.39), n'a de sens que dans la limite asymptotique des grandes longueurs d'onde  $q\ell \ll 1$  et des grands temps  $\Omega\tau \ll 1$ . Pour la

propagation sur des longueurs inférieures ou de l'ordre de  $\ell$ , on a un régime transitoire décrit par la fonction  $F_0(\vec{r}, \vec{r}') \propto e^{-|\vec{r}-\vec{r}'|/\ell}$  introduite par l'équation (VIII.26). Néanmoins, si l'on se réfère aux résultats de Case, de Hoffmann et Placzek<sup>(4)</sup>, pour des longueurs  $L = \ell$ , le régime transitoire représente seulement 8,5 % de la contribution au transport de l'intensité, tandis que pour  $L = 2,5 \ell$ , il ne représente plus que 0,7 % de la contribution totale. Cela justifie par conséquent l'utilisation de l'approximation de diffusion dans toute la gamme de vecteurs d'onde  $q$  comme nous l'avons développée dans toute la première partie de ce chapitre.

Expression de  $\alpha(\hat{s}, \hat{s}_0)$  dans le cas d'un milieu désordonné semi-infini :  
Problème de l'albedo

Je voudrais donner maintenant une expression de  $\alpha(\hat{s}, \hat{s}_0)$  dans le cas d'un milieu semi-infini comme représenté sur la figure (VIII.1) correspondant à la situation expérimentale. Nous nous plaçons dans les conditions évoquées au début de ce chapitre en gardant les mêmes notations. Dans l'expression (VIII.26) de  $F_0$ , la fonction delta et la valeur de  $\vec{r}_1$  fixée déterminent  $\vec{r}$  et  $\hat{s}$  de telle façon que  $\hat{s} \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}}$ , et  $\hat{s}_0 \cdot \vec{\nabla}_{\vec{r}}$  ne représentent plus que les dérivées le long des directions  $\mu_0 z$  et  $\mu z'$ . Avec l'aide de la relation (VIII.28), l'expression de  $\alpha(\hat{s}, \hat{s}_0)$  devient :

$$\alpha(\hat{s}, \hat{s}_0) = \int d^3 r_1 \int d^3 r_2 \int d^2 r_{1\perp} \int d^2 r'_{1\perp} [1 + \cos k\vec{s}_1 \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}'_2)] \mu \mu_0 \int_0^\infty dz \int_0^\infty dz' \cdot \frac{\partial^2}{\partial z \partial z'} F_0(R_{1\perp}, z_1 - z) U(\vec{r}_1, \vec{r}'_2; \Omega, \omega) F_0(R_{2\perp}, z' - z_2) \quad (\text{VIII.39})$$

où  $\vec{R}_{1\perp} = (\vec{r}_1 - \vec{r})_{\perp}$  et  $\vec{R}_{2\perp} = (\vec{r}_2 - \vec{r}')_{\perp}$ .

Posons maintenant  $\vec{\rho} = (\vec{r}_1 - \vec{r}'_2)_{\perp}$  et intégrons (VIII.39) sur  $z$  :

$$\alpha(\hat{s}, \hat{s}_0) = \mu \mu_0 \int d^3 R_1 \int d^3 R_2 F_0(R_1) F_0(R_2) \int d^2 \rho [1 + \cos [k\vec{s}_1 \cdot (\vec{\rho} + (z_1 - z_2)\hat{e}_z)]] \cdot U(\vec{\rho}, z_1, z_2) \quad (\text{VIII.40})$$

où on a effectué le changement de variables :  $\vec{R}_1 = \vec{R}_{1\perp} + z_1 \hat{e}_z$  et  $\vec{R}_2 = \vec{R}_{2\perp} + z_2 \hat{e}_z$  et où  $\alpha(\hat{s}, \hat{s}_0)$  est maintenant donnée par unité de surface. Finalement, pour retrouver l'expression obtenue heuristiquement dans la première partie du chapitre et donnée par la relation (VIII.1), il reste à trouver la forme de  $U(\vec{\rho}, z_1, z_2)$  pour un milieu semi-infini, c'est-à-dire à prendre en compte les conditions aux limites imposées au processus de diffusion. L'expression (VIII.24) pour  $U$  ou sa transformée de Fourier par rapport au temps, montre que  $U$  n'est autre que la fonction de distribution de probabilité  $P(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t)$  associée à la propagation de l'intensité lumineuse du point  $\vec{r}_1$  au point  $\vec{r}_2$  pendant le temps  $t$ . De plus, nous avons à prendre en compte la présence du plan piège en  $z = 0$ , puisque la lumière arrivant sur ce plan émerge nécessairement et ne peut être réfléchi à nouveau à l'intérieur du milieu. Comme nous l'avons vu dans la première partie, cette condition peut aisément être prise en compte par la méthode des images. Ainsi, on obtient pour  $U$  la forme :

$$U(\vec{r}_1, \vec{r}_2; t) = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} d\Omega e^{-i\Omega t} \int d^3q \frac{1}{4\pi\ell\tau} \cdot \frac{1}{-i\Omega + Dq^2} \left\{ e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2)} - e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}_1 - \vec{r}_2^*)} \right\} \quad (\text{VIII.41})$$

où  $\vec{r}_2^*$  est l'image d'un vecteur donné  $\vec{r}_2$  pris dans le milieu désordonné, c'est-à-dire que si  $\vec{r}_2 = (x_2, y_2, z_2)$  alors  $\vec{r}_2^* = (x_2, y_2, -z_2 - 2z_0)$  afin d'avoir  $U(\vec{\rho}, -z_0, z_2) = U(\vec{\rho}, z_1, -z_0) = 0$ . Il faut remarquer néanmoins que l'introduction du terme image et de la valeur de  $z_0$  ne sont pas réellement des ingrédients de l'approche microscopique basée sur la diffusion multiple mais restent des notions introduites heuristiquement.

En conclusion de cette section, remarquons que l'on retrouve exactement dans le cadre de la diffusion multiple élastique, la relation donnant  $\alpha(\hat{s}, \hat{s}_0)$  établie précédemment. De plus, comme nous allons le voir maintenant, elle permet de présenter une autre façon d'étudier l'albedo stationnaire.



IV - DEVELOPPEMENT DE L'ALBEDO EN FONCTION DE L'ORDRE N DE DIFFUSION -  
CONTRIBUTION DES DIFFERENTS CHEMINS DE DIFFUSION

Le pôle de diffusion de U est le résultat de la somme d'une série géométrique dont le terme générique d'ordre n représente la valeur moyenne de toutes les séquences de collision comportant (n+2) centres diffuseurs. Il est par conséquent possible d'étudier la contribution cohérente au cône de rétrodiffusion associée à chaque chemin de longueur moyenne nλ. Partons pour cela de la forme simplifiée de la relation (VIII.1) obtenue en faisant l'approximation z<sub>1</sub> = z<sub>2</sub> = λ. Nous avons vu qu'elle était d'autant mieux justifiée que n était grand, c'est-à-dire pour des valeurs petites de l'angle θ, ce qui correspond exactement au régime que nous voulons étudier. La contribution cohérente α<sub>c</sub>(θ) dans le régime stationnaire (Ω = 0) s'écrit :

$$\alpha_c(\theta) = \frac{3\mu_0}{(2\pi)^3} \ell \int d^2\rho e^{-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{\rho}} \int d^3q \frac{1}{\ell^2 q^2} e^{i\vec{q}_\perp \cdot \vec{\rho}} (1 - e^{2iq_z(\ell+z_0)}) \quad (\text{VIII.42})$$

Or le dénominateur  $\ell^2 q^2$  est la somme  $\sum_{n=0}^{\infty} (1 - (q\ell)^2)^n$  dans le rayon de convergence  $q\ell < 1$ . Donc :

$$\alpha_c(\theta) = \frac{3\mu_0}{(2\pi)^3} \ell \int d^2\rho e^{-i\vec{k}_\perp \cdot \vec{\rho}} \int_{q < 1/\ell} d^3q \sum_{n=0}^{\infty} (1 - (q\ell)^2)^n e^{i\vec{q}_\perp \cdot \vec{\rho}} (1 - e^{2iq_z(\ell+z_0)}) \quad (\text{VIII.43})$$

Notons que la coupure  $q\ell < 1$  imposée par la convergence de la série, annule toutes les contributions à α<sub>c</sub>(θ) pour lesquelles  $k_\perp < 1/\ell$ , c'est-à-dire pour des angles  $\theta > \frac{\lambda}{2\pi\ell}$ , ce qui n'est pas très important dans le cadre de notre approximation. On obtient alors :

$$\alpha_c(\theta) = \frac{3\mu_0}{2\pi} \ell \sum_{n=0}^{\infty} \int' dq_z (1 - e^{2iq_z(\ell+z_0)}) \cdot (1 - (k_\perp \ell)^2 - (q_z \ell)^2)^n \quad (\text{VIII.44})$$

où la notation ' représente une restriction aux valeurs de q<sub>z</sub> telles que :  $q_z^2 < \frac{1}{\ell^2} - k_\perp^2$ . L'équation (VIII.44) s'écrit :

$$\alpha_c(\theta) = \frac{3\mu_0}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \int_{-\sqrt{1-(k_{\perp}\ell)^2}}^{\sqrt{1-(k_{\perp}\ell)^2}} dQ \cdot (1 - e^{2iQ(1 + \frac{z_0}{\ell})}) (1 - (k_{\perp}\ell)^2 - Q^2)^n \quad (\text{VIII.45})$$

ce qui finalement donne :

$$\alpha_c(\theta) = \frac{3\mu_0}{2\pi} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^{n+1} n!}{(2n+1)!!} (1 - (k_{\perp}\ell)^2)^{n+1/2} \cdot [1 - (2n+1)!! \frac{j_n[\frac{a}{\ell} \sqrt{1-(k_{\perp}\ell)^2}]}{(\frac{a}{\ell} \sqrt{1-(k_{\perp}\ell)^2})^n}] \quad (\text{VIII.46})$$

où  $a \equiv 2(\ell + z_0)$  et  $j_n(x)$  est la fonction de Bessel sphérique de première espèce. Sur la relation (VIII.46), l'intensité réfléchie cohérente apparaît comme la superposition des contributions  $I_n(\theta)$  des valeurs moyennes sur les chemins cohérents comportant  $(n+2)$  centres diffuseurs, et où  $I_n(\theta)$  est définie par la relation  $\alpha_c(\theta) = 3\mu_0/2\pi \sum_{n=0}^{\infty} I_n(\theta)$ . La figure (VIII.6) montre comment le profil complet  $\alpha_c(\theta)$  peut être obtenue à partir de la somme des  $I_n(\theta)$ .

Il est d'autre part possible pour chaque valeur de  $n$  d'avoir le profil de  $I_n(\theta)$ . Comme cela est représenté sur la figure (VIII.6) l'angle caractéristique  $\theta_n \approx \lambda/2\pi\ell \sqrt{n}$  (pour  $n$  grand), mesure de la largeur de la région où la contribution cohérente est maximale pour les chemins de diffusion d'ordre  $n$ . On peut donc s'attendre physiquement à ce que les chemins cohérents de grande longueur soient ceux qui contribuent principalement à  $\alpha_c(\theta)$  pour les petits angles. Il serait donc possible dans la limite d'une résolution expérimentale infinie, de connaître la longueur maximale des chemins cohérents en mesurant directement la hauteur de  $\alpha_c(\theta)$ . C'est une manière très précise de tester les propriétés des milieux désordonnés.

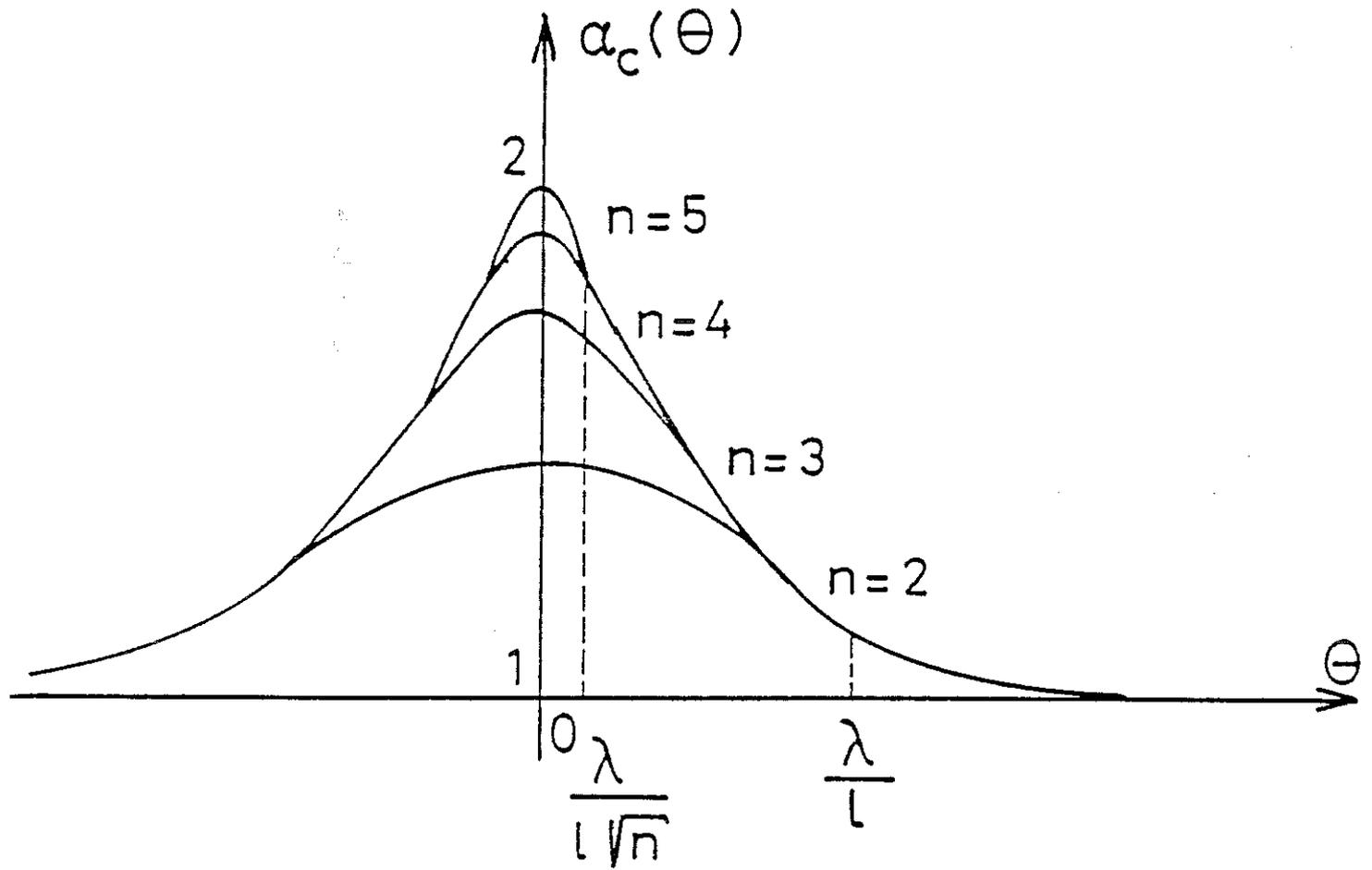


Fig. VIII.6 : Contribution des différentes tailles de boucles au cône de rétrodiffusion cohérente.



V - EXPRESSION DE L'ALBEDO STATIONNAIRE POUR UNE LUMIERE SE PROPAGEANT DANS UN MILIEU FRACTAL

Dans cette dernière section, je voudrais établir une expression de la partie cohérente  $\alpha_c(\theta)$  de l'albedo stationnaire dans le cas particulier où la distribution des centres diffuseurs a une structure fractale. Dans ce cas, la diffusion de l'intensité lumineuse a lieu sur un fractal et l'on sait que la marche aléatoire dans un tel espace non euclidien est modifiée de telle sorte que la valeur moyenne du carré du déplacement  $\langle R^2 \rangle$  compté depuis l'origine au bout du temps  $t$  est donnée asymptotiquement par<sup>(5)</sup> :

$$\langle R^2 \rangle \propto t^{2\nu} \quad (\text{VIII.47})$$

où au lieu de la valeur habituelle  $\nu = \frac{1}{2}$  obtenue dans un espace euclidien, on a  $\nu = \frac{1}{2} \frac{\tilde{d}}{\bar{d}}$ . Pour l'espace euclidien, on a  $\bar{d} = \tilde{d} = d$  et on retrouve  $\nu = \frac{1}{2}$ .  $\tilde{d}$  est la dimension de Hausdorff qui caractérise la topologie du fractal tandis que  $\bar{d}$  est la dimension spectrale associée à la densité d'états de ses excitations.

Dans le cadre de l'approximation développée dans la section VIII.2, l'expression de  $\alpha_c(\theta)$  devient ici :

$$\alpha_c(\theta) = \frac{\mu\mu_0}{(2\pi)^3} \cdot \frac{\ell}{\tau} \int d^2\rho e^{-ik_{\perp} \cdot \rho} \int d^3q \frac{1}{Dq} e^{i\vec{q}_{\perp} \cdot \vec{\rho}} [1 - e^{2i(\ell+z_0)q_z}] \quad (\text{VIII.48})$$

Après avoir effectué les deux intégrales sur  $\vec{\rho}$  et  $\vec{q}$  on obtient :

$$\alpha_c(\theta) = \frac{\mu\mu_0}{2\pi\ell} \left[ \frac{\sqrt{\pi}\Gamma(\frac{1}{2\nu} - \frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2\nu})} k_{\perp}^{1-1/\nu} - \frac{2}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{2k_{\perp}}{a}\right)^{\frac{1}{2} - \frac{1}{2\nu}} \sin\left(\frac{\pi}{2\nu}\right) \Gamma\left(1 - \frac{1}{2\nu}\right) K_{\frac{1}{2\nu} - \frac{1}{2}}(ak_{\perp}) \right] \quad (\text{VIII.49})$$

où  $K_{\nu}(z)$  est la fonction de Bessel modifiée et  $a \equiv 2(\ell+z_0)$ . La relation (VIII.49) peut enfin être réduite à :

$$\alpha_c(\theta) = \frac{\mu\mu_0}{2\sqrt{\pi}\ell} \frac{\Gamma(\frac{1}{2\nu} - \frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2\nu})} k_{\perp}^{1 - \frac{1}{\nu}} \left[ 1 - 2\left(\frac{ak_{\perp}}{2}\right)^{\frac{1}{2\nu} - \frac{1}{2}} \frac{K_{\frac{1}{2\nu} - \frac{1}{2}}(ak_{\perp})}{\Gamma(\frac{1}{2\nu} - \frac{1}{2})} \right] \quad (\text{VIII.50})$$

Il est bien entendu possible à partir de la relation précédente de retrouver la relation (VIII.10) obtenue dans le cas euclidien dans la limite  $\nu \rightarrow \frac{1}{2}$ , sachant que  $K_{1/2}(z) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2ak_{\perp}}} e^{-ak_{\perp}}$ . Notons de plus ici que les conditions aux limites pour le milieu semi-infini n'affectent pas la structure fractale puisque le pôle de diffusion intervenant dans  $\alpha_c(\theta)$  est obtenu dans l'approximation d'un milieu infini (cf. section VIII.3) et que la nature semi-infinie est complètement décrite par le terme image.

Il est maintenant intéressant de comparer la forme de raie obtenue aux petits angles ( $\theta < \frac{\lambda}{2\pi\ell}$ ) d'après la relation (VIII.50) au comportement linéaire précédemment étudié. Un développement en puissance de  $k_{\perp}$  de (VIII.50) donne :

$$\alpha_c(\theta) = \frac{\mu\mu_0}{2\ell\sqrt{\pi}} \cdot \frac{\Gamma(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\nu})}{\Gamma(\frac{1}{2\nu})} \cdot (\frac{a}{2})^{\frac{1}{\nu} - 1} \cdot [1 - \frac{2}{3 - \frac{1}{\nu}} \cdot \frac{\Gamma(\frac{1}{2\nu} - \frac{1}{2})}{\Gamma(\frac{1}{2} - \frac{1}{2\nu})} (\frac{ak_{\perp}}{2})^{3 - \frac{1}{\nu}}]$$

(VIII.51)

Une fois de plus, on remarque que dans la limite  $\nu \rightarrow 1/2$  on retrouve la correction linéaire à  $\alpha_c(\theta)$ . Mais plus intéressant est l'exposant  $3 - \frac{1}{\nu}$ . Afin de mieux comprendre le rôle que joue la valeur  $\nu = \frac{1}{3}$ , reconsidérons les intégrales de la relation (VIII.48). La dernière intégration sur  $q_z$  est

$$\int_0^{\infty} dq_z \frac{1 - \cos(aq_z)}{(k_{\perp}^2 + q_z^2)^{1/2\nu}}$$

Pour  $k_{\perp} = 0$ , c'est-à-dire en situation exacte de rétrodiffusion, l'intégrale est convergente pour  $q_z = 0$  si et seulement si  $3 - \frac{1}{\nu} > 0$ . La signification physique de cette condition devient alors claire : le rôle du terme image représenté par  $1 - \cos(aq_z)$  dans l'intégrale ci-dessus, est d'annuler dans un espace euclidien la divergence usuelle associée à la localisation faible pour  $q_z = 0$ . En effet, la présence d'un plan piège détruit la nature récurrente de la marche aléatoire. Mais pour une distribution fractale, la décroissance de  $\tilde{d}$  signifie que la région de l'espace explorée durant la diffusion décroît aussi de façon à obtenir finalement un confinement de l'intensité qui diffuse, et donc une nette augmentation des boucles de diffusion cohérentes. Il est alors possible d'annuler la contribution du terme image et d'obtenir

à nouveau une divergence pour  $q_z = 0$ . Donc dans l'intervalle  $\frac{1}{3} < \nu \leq \frac{1}{2}$ , l'expression (VIII.51) garde un sens et donne une réduction du nombre de chemins cohérents de grande longueur comme représenté sur la figure (VIII.8). Enfin, pour  $\nu \leq \frac{1}{3}$ , à cause de la nature récurrente de la marche aléatoire, même en présence d'un plan piège, on obtient une expression divergente pour  $\alpha_c(\theta)$  dans la limite  $\theta = 0$ .

Pour conclure ce paragraphe, disons que l'effet de rétrodiffusion cohérente représente une manière intéressante d'obtenir une détermination précise de la dimension spectrale  $\tilde{d}$  calculée à partir de la forme de  $\alpha_c(\theta)$  aux petits angles.



VI - EFFET DE LA POLARISATION

Jusqu'à maintenant, nous n'avons considéré que le cas d'ondes scalaires. Je voudrais maintenant prendre en compte les effets de polarisation et montrer qu'ils peuvent a priori modifier l'expression de l'albedo pour deux raisons. Ils peuvent en effet agir

- i) sur la contribution incohérente des chemins de diffusion,
- ii) sur le terme d'interférence.

Concernant le premier point, on peut montrer qu'une lumière polarisée incidente est complètement dépolarisée au bout de quelques collisions seulement (en négligeant les effets cohérents bien entendu). La contribution incohérente à l'intensité peut alors être obtenue au moyen d'une théorie scalaire et calculée dans l'approximation de diffusion. Par contre, concernant les effets d'interférence, le rôle de la polarisation est fondamental. En effet, pour pouvoir interférer, les deux ondes renversées dans le temps correspondant à un chemin de diffusion doivent être dans le même état de polarisation. Nous devons donc calculer cet état de polarisation pour des séquences de collision du type :  $\vec{k}_0 \rightarrow \vec{k}_1 \rightarrow \dots \rightarrow \vec{k}_n = -\vec{k}_0$ , c'est-à-dire en se plaçant directement en situation de rétrodiffusion. Pour la diffusion Rayleigh, l'état de polarisation après une diffusion est donné par :

$$\vec{P}_1 = (\vec{k}_1 \wedge \vec{P}_0) \wedge \vec{k}_1 \quad (\text{VIII.52})$$

où  $\vec{k}_1$  est le vecteur d'onde après la collision et  $\vec{P}_0$  est le vecteur polarisation de l'onde incidente. Il est intéressant de représenter la relation (VIII.52) sous forme matricielle, i.e.  $\vec{P}_1 = \tilde{M} \vec{P}_0$  où  $\tilde{M}$  est une matrice 3 x 3 définie par :

$$\tilde{M} = \begin{bmatrix} 1 - k_{1x}^2 & -k_{1x}k_{1y} & -k_{1x}k_{1z} \\ -k_{1x}k_{1y} & 1 - k_{1y}^2 & -k_{1y}k_{1z} \\ -k_{1x}k_{1z} & -k_{1y}k_{1z} & 1 - k_{1z}^2 \end{bmatrix} \quad (\text{VIII.53})$$

Pour une séquence du type  $(\vec{k}_0, \dots, \vec{k}_n = -\vec{k}_0)$  telle que celle considérée ci-dessus, le vecteur polarisation final est :

$$\vec{P}_n = M_{n-1} M_{n-2} \dots M_1 \vec{P}_0 \quad (\text{VIII.54})$$

Puisque  $M_i$  est une matrice symétrique, la transposée de la matrice  $M = \prod_{i=1}^{n-1} M_{n-i}$  est  $M^+ = \prod_{i=1}^{n-1} M_i$  et représente l'état de polarisation pour l'onde renversée dans le temps correspondant à la même séquence d'impuretés. Choisissons maintenant de prendre l'axe Ox comme direction pour la polarisation incidente  $\vec{P}_0$  et l'axe Oz comme support du vecteur d'onde incident  $\vec{k}_0$ . Désignons par  $\vec{P}_n$  et  $\vec{P}'_n$  les vecteurs polarisation émergents correspondant aux deux ondes. On obtient alors :

$$\begin{cases} P_{nx} = P'_{nx} = M_{xx} \\ P_{ny} = M_{xy} \quad \text{et} \quad P'_{ny} = M_{yx} \end{cases} \quad (\text{VIII.55})$$

Par conséquent, si on mesure l'intensité émergente dans une configuration de polarisation parallèle à la lumière incidente, alors d'après (VIII.55) la cohérence est complètement maintenue pour chaque séquence à n collisions en situation de rétrodiffusion ( $\theta = 0$ ). Le facteur deux mesuré par rapport à la contribution incohérente est donc préservé. D'autre part, le comportement linéaire de  $\alpha_c(\theta)$  obtenu aux petits angles doit rester le même que celui calculé dans le cas d'une onde scalaire, puisqu'il provient de la contribution des grandes boucles pour lesquelles l'approximation de diffusion est toujours valable.

Il en va par contre autrement si on analyse la lumière émergente dans une configuration perpendiculaire à l'état de polarisation de la lumière incidente. Dans ce cas, le théorème (VIII.55) sur l'égalité des projections le long de  $\vec{P}_0$  n'est plus valable et il faut calculer le taux de corrélation :

$$C(n) = \frac{\langle P_{n\perp} P'_{n\perp} \rangle}{\langle P_{n\perp}^2 \rangle} \quad (\text{VIII.56})$$

où  $\langle \dots \rangle$  dénote la valeur moyenne sur tous les chemins de diffusion.

Pour calculer  $C(n)$ , nous ferons l'hypothèse, justifiée dans le cas des grandes boucles, qu'il n'y a aucune corrélation entre les différentes collisions successives. Afin de calculer  $C(n)$ , nous allons établir quelques relations de récurrence. Introduisons pour cela les notations suivantes :

$$\begin{cases} P_{ny} = (M_{n-1} M_{n-2} \dots M_1 \vec{P}_0) \cdot \hat{e}_y \\ P'_{ny} = (M_1 M_2 \dots M_{n-1} \vec{P}_0) \cdot \hat{e}_y \end{cases} \quad (\text{VIII.57})$$

et soit  $A_{n-1} \equiv \prod_{i=1}^{n-1} M_{n-i}$  et  $A'_{n-1} = {}^t A_{n-1}$ . Il nous faut alors calculer  $\xi_{n-1} \equiv \langle P_{ny} P'_{ny} \rangle$ , soit  $\xi_{n-1} = \langle A_{23}^{(n-1)} A_{32}^{(n-1)} \rangle$  où  $A_{ij}^{(n-1)}$  sont les éléments de la matrice  $A_{n-1}$ . Si on écrit le produit de matrice à l'ordre  $n$ , i.e. en calculant  $M_n A_{n-1} \vec{P}_0$  on obtient la relation :

$$A_{23}^{(n)} = k_y k_x A_{13}^{(n-1)} - (1 - k_y^2) A_{23}^{(n-1)} + k_y k_z A_{33}^{(n-1)} = P_{ny} \quad (\text{VIII.58})$$

et

$$A_{32}^{(n)} = k_x k_z A_{12}^{(n-1)} + k_y k_z A_{22}^{(n-1)} + (1 - k_z^2) A_{32}^{(n-1)} = P'_{ny} \quad (\text{VIII.59})$$

En faisant le produit de (VIII.58) et (VIII.59) on obtient alors :

$$\xi_n = \langle A_{23}^{(n)} A_{32}^{(n)} \rangle = \langle (1 - k_y^2) (1 - k_z^2) \rangle \xi_{n-1} + \langle k_y^2 k_z^2 \rangle \eta_{n-1} \quad (\text{VIII.60})$$

où  $\eta_{n-1} \equiv \langle A_{22}^{(n-1)} A_{33}^{(n-1)} \rangle$ . Or on a :

$$A_{22}^{(n)} = k_x k_y A_{12}^{(n-1)} + (k_y^2 - 1) A_{22}^{(n-1)} + k_y k_z A_{22}^{(n-1)} \quad (\text{VIII.61})$$

et

$$A_{33}^{(n)} = k_x k_z A_{13}^{(n-1)} + k_y k_z A_{23}^{(n-1)} + (k_z^2 - 1) A_{33}^{(n-1)} \quad (\text{VIII.62})$$

Ce qui conduit à :

$$\eta_n = \langle A_{22}^{(n)} A_{33}^{(n)} \rangle = \langle (k_y^2 - 1) (k_z^2 - 1) \rangle \eta_{n-1} + \langle k_y^2 k_z^2 \rangle \xi_{n-1} \quad (\text{VIII.63})$$

Les relations (VIII.60) et (VIII.61) constituent les relations de récurrence qui nous intéressent. Il nous faut évaluer maintenant les

différentes valeurs moyennes, ce qui est possible dans le cadre de collisions non corrélées :

$$\begin{aligned} \langle k_y^2 k_z^2 \rangle &= \langle \sin^2 \theta \sin^2 \varphi \cos^2 \theta \rangle = \frac{1}{15} \\ \langle (k_y^2 - 1)(k_z^2 - 1) \rangle &= \frac{6}{15} \end{aligned}$$

On obtient donc :

$$\begin{cases} \xi_n = \frac{6}{15} \xi_{n-1} + \frac{1}{15} \eta_{n-1} \\ \eta_n = \frac{6}{15} \eta_{n-1} + \frac{1}{15} \xi_{n-1} \end{cases} \quad (\text{VIII.64})$$

Ce système se résout aisément pour donner finalement :

$$C(n) = \frac{3}{2} \frac{(0.7)^{n-1} - (0.5)^{n-1}}{1 - (0.7)^{n-1}} \quad (\text{VIII.65})$$

Il est à noter que l'on retrouve grâce aux calculs précédents, que dans la limite  $n \rightarrow \infty$ , on obtient  $\langle P_y^2 \rangle = \langle P_x^2 \rangle$ , c'est-à-dire que la lumière incohérente est totalement dépolarisée. Le taux de corrélation  $C(n)$  varie quant à lui de la valeur 1 pour  $n = 2$ , correspondant à une égalité entre les deux polarisations perpendiculaires  $P_{2y} = P'_{2y}$  à la valeur zéro vers laquelle on tend exponentiellement  $C(n) \underset{n \rightarrow \infty}{\sim} (0.7)^n$ . Comme nous l'avons déjà dit, ces résultats ne sont valables que dans la limite des grandes boucles afin d'assurer l'indépendance entre elles des différentes collisions. Néanmoins, dans le but d'expliquer les résultats expérimentaux de la figure (VIII.9), on peut étendre le domaine de validité de la relation (VIII.65) à toutes les boucles. On peut ainsi calculer la valeur de l'albedo cohérente en polarisation croisée et en situation de rétrodiffusion exacte en pondérant la contribution de chaque chemin d'ordre  $n$ ,  $I_n(0)$  calculée au moyen de la relation (VIII.46) par  $C(n)$ , soit :

$$\alpha_{\text{coh}}^{\perp}(\theta = 0) = \frac{\sum_n C(n) I_n(0)}{\sum_n I_n(0)} \quad (\text{VIII.66})$$

On obtient ainsi  $\alpha_{\text{coh}}^{\perp}(\theta = 0) \approx 0.5 \alpha_{\text{inc}}^{\perp}$ . Cette valeur est à comparer au résultat expérimental qui donne  $\alpha_{\text{coh}}^{\perp}(\theta = 0) \approx 0.3 \alpha_{\text{inc}}^{\perp}$ . La valeur théorique est donc d'autant plus acceptable que l'on a fait d'importantes approximations. Néanmoins, il faut comprendre que l'ambition de ce dernier calcul était autre. Elle consistait en effet en calculant  $C(n)$  à expliquer pourquoi un effet cohérent subsiste malgré tout en polarisation croisée alors que l'on pouvait penser qu'il annihilerait l'effet d'interférences constructives.

## VII - CONCLUSION

Dans ce chapitre, nous avons présenté quelques arguments physiques afin, entre autres, d'expliquer le pic de rétrodiffusion cohérente observé dans l'albedo des milieux désordonnés. Ce pic est le résultat du dernier effet cohérent pouvant exister en présence d'un désordre complet. Il est obtenu à partir des interférences constructives dans la marche aléatoire de la lumière.

D'autre part, la forme de raie, valide à deux et trois dimensions est spécifique de la présence d'une interface. Elle résulte de l'addition de toutes les contributions des collisions multiples d'ordre  $n$  et la singularité triangulaire à  $\theta = 0$  ne peut être obtenue que dans la limite où  $n$  tend vers l'infini. Tout processus pouvant introduire une limitation dans l'ordre  $n$  de la diffusion multiple ou en d'autres termes dans la longueur totale des chemins de diffusion conduira à un arrondissement du pic. Les effets de taille finie, l'absorption ou la modulation de l'intensité lumineuse sont de bons candidats pour cet effet d'arrondissement. De plus, puisque la forme du pic donne une information directe sur le transport de la lumière dans un milieu désordonné, une extension de cette analyse à des milieux non euclidiens (fractals) est intéressante. Ces considérations montrent l'intérêt de ce type d'expériences et d'analyse pour la caractérisation des milieux aléatoires.



REFERENCES

- 1 - M.P. Van Albada and A. Lagendijk, Phys. Rev. Lett. 55 (1985) 2692.  
P.E. Wolf and G. Maret, Phys. Rev. Lett. 55 (1985) 2696.
- 2 - A. Ishimaru  
Wave propagation and scattering in random media  
(Academic, New York) 1978, Vol. 1.
- 3 - B. Davison and J.B. Sykes  
Neutron transport theory  
(Oxford Univ. Press, New York, 1957).
- 4 - K.M. Case, F. de Hoffmann and G. Placzek  
Introduction to the theory of neutron diffusion, I,  
Los Alamos Scientific Laboratory, 1953 (voir aussi ref. 3).
- 5 - S. Alexander and R. Orbach, J. Phys. Lett. 43 (1982) L-625.



## Coherent Backscattering of Light by Disordered Media: Analysis of the Peak Line Shape

E. Akkermans, P. E. Wolf, and R. Maynard

*Centre de Recherches sur les Très Basses Températures, Centre National de Recherche Scientifique, 38042 Grenoble Cédex, France  
and Université Scientifique et Médicale de Grenoble, Grenoble, France*

(Received 28 January 1986)

Recent experiments have confirmed that coherent effects in the multiple scattering of light affect the angular dependence of the intensity reflected by disordered media. By considering the constructive interferences between time-reversed paths of light in a semi-infinite medium, we analyze the experimental line shape of the albedo within the diffusion approximation and explain the observed effects of polarization.

PACS numbers: 42.20.-y, 71.55.-i

The propagation of a wave in a dense distribution of elastic scatterers is a difficult problem to handle in the framework of the multiple-scattering theory. The classical approach, which assumes that phases are uncorrelated on scales larger than the elastic mean free path  $l$ , leads to an intensity transport equation of the Boltzmann type in which any interference effects are neglected. In the simple regime where the length or time scales are larger than  $l$  or  $\tau$  ( $\tau = l/c$ , where  $c$  is the wave velocity), this equation reduces to a diffusion equation with a diffusion constant  $D = lc/3$ . The classical approach is generally well justified for study of the intensity scattered from a bounded, weakly disordered medium. However, it must be corrected when the wave emerges from the medium around the backscattering direction (i.e., the direction opposite to the incident one). In this case, constructive interferences arise and must be taken into account in order to explain the enhancement of the backscattered intensity with respect to the classical prediction. This phenomenon has been recognized almost independently in two different fields. In condensed-matter physics, it is the basis of the weak-localization regime for electrons in impure metals,<sup>1,2</sup> where the quantum correction to the diffusion constant<sup>3</sup> is obtained from the pioneering work of Langer and Neal.<sup>4</sup> In optics, it was first considered by de Wolf<sup>5</sup> for electromagnetic waves propagating in turbulent atmosphere. More recently, this effect has been directly demonstrated by three experiments<sup>6-8</sup> which show that the intensity of light scattered from a concentrated aqueous suspension of latex microspheres presents a sharp peak centered at the backscattering direction. The sharpness of this peak as well as the effects of light polarization are typical enough to call for a detailed analysis of this coherent backscattering effect, which is the purpose of this Letter. Two previous works must be mentioned here: one<sup>9</sup> about the contribution of double scattering to the backscattering intensity enhancement and another one by Golubentsev<sup>10</sup> who discusses the reduction of this peak due to the motion of impurities and the gyrotropy

of the medium. We shall follow here the features of his analysis.

The basis of the interference effect in multiple scattering is very general. We assume that the waves are of scalar nature (the important effect of light polarization will be discussed later). Consider a sequence of  $n$  scattering events characterized by the wave vectors  $\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_n = \mathbf{k}_f$ , where  $\mathbf{k}_j$  is the wave vector after the  $j$ th scattering event and  $\mathbf{k}_i$  and  $\mathbf{k}_f$  stand for the initial and final wave vectors. In classical transport theory all  $n$ -order sequences are assumed to be uncorrelated as a result of the random nature of the distribution of scatterers. However, any given sequence and its time reverse  $\mathbf{k}_f, -\mathbf{k}_{n-1}, -\mathbf{k}_{n-2}, \dots, -\mathbf{k}_1, \mathbf{k}_i$ , where the light is scattered by the same centers but in opposite order, can interfere constructively for a special choice of  $\mathbf{k}_f$  relative to  $\mathbf{k}_i$ . The total phase shift between the two corresponding partial waves is simply  $\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_n)$ , where  $\mathbf{q}$  is the transfer wave vector  $\mathbf{k}_i + \mathbf{k}_f$  and  $\mathbf{r}_1$  and  $\mathbf{r}_n$  are the positions of the first and last scattering centers. For the backscattering situation ( $\mathbf{k}_f = -\mathbf{k}_i$ ) these two partial waves have the same amplitude and phase and add coherently. If  $\theta$  is the relative angle between  $\mathbf{k}_i$  and  $\mathbf{k}_f$ , the coherence is lost for angles  $\theta$  larger than  $\lambda/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_n|$ , where  $\lambda$  is the

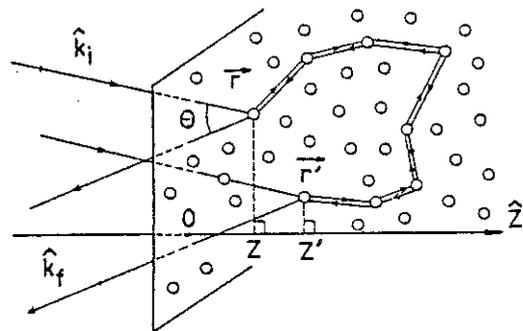


FIG. 1. Geometry used for the calculation of the coherent albedo, showing two interfering light paths.

wavelength. Since the average value of  $|r_1 - r_n|$  for the shortest sequence ( $n=2$ ) is the mean distance between two scattering events, i.e., the elastic mean free path  $l$ , one expects<sup>11</sup> the reflected intensity to increase by up to a factor 2 inside a cone of angular width of order  $\lambda/l$ . More quantitatively, the interference correction to the multiple-scattering contribution of all paths of  $n$  steps from  $r_1$  to  $r_n$  will be obtained by a weighting of the corresponding incoherent intensity

$$\alpha(\hat{k}_i, \hat{k}_f) = (c/4\pi l^2) \int dz dz' d^2\rho \exp(-z/\mu_0 l) \{1 + \cos[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')]\} Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \exp(-z'/\mu l), \quad (1)$$

where  $z$  and  $z'$  are the projections of  $\mathbf{r}$  and  $\mathbf{r}'$  on the  $z$  axis,  $\rho$  is the projection of  $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$  on the interface plane, while  $\mu_0$  and  $\mu$  are respectively the projections of  $\mathbf{k}_i$  and  $\mathbf{k}_f$  on the  $z$  axis. The physical meaning of the different terms appearing in (1) is the following:  $l^{-1} \exp(-z/\mu_0 l)$  is the ratio to the incident flux of the energy scattered per unit time and unit volume at point  $\mathbf{r}$ .  $Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  is the Green's function which describes the light transport from a point source located at  $\mathbf{r}$  to  $\mathbf{r}'$ . It is given by the ratio of the energy density at  $\mathbf{r}'$  to the source production rate of energy.  $(c/4\pi) dz'/l$  is the fraction of the energy density at  $\mathbf{r}'$  which contributes to the flux scattered per solid angle  $d\Omega$  around  $\hat{k}_f$ , while  $e^{-z'/\mu l}$  is the part of this flux which emerges without being again scattered. Finally, the factor  $1 + \cos[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')]$  accounts for the interference effect. Note that since this interference is irrelevant for single scattering, Eq. (1) is only valid for the multiple-scattering part of the albedo.

The problem of the calculation of  $Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$  has been studied in classical transport theory.<sup>13</sup> From the intensity transport equation, it can be shown that far

$$\alpha(\theta) = (3/4\pi^2 l) \int d^2\rho [1 + \cos(\mathbf{q}_\perp \cdot \rho)] [\rho^{-1} - (\rho^2 + a^2)^{-1/2}], \quad (3)$$

where  $a = 2(l + z_0)$  and  $\mathbf{q}_\perp$  is the component of  $\mathbf{q}$  normal to the  $z$  axis, with  $q_\perp = 2\pi\theta/\lambda$ . The integration in Eq. (3) leads to

$$\alpha(\theta) = (3a/4\pi l) \{1 + [1 - \exp(-q_\perp a)]/q_\perp a\}. \quad (4)$$

This expression exhibits the following features: (i) For  $\theta = q_\perp = 0$ , i.e., right in the backscattering direction, the albedo is exactly twice the incoherent value  $\alpha_{\text{inc}}$  obtained for "large" angles. (ii) The angular width in which the coherent effect is observable is of order  $\lambda/2\pi l$ . (iii) Close to the exact backscattering direction, the albedo varies linearly,  $\alpha(\theta) = \alpha_{\text{inc}} [2 - 2\pi l + z_0/\lambda |\theta|]$ , so that, near  $\theta = 0$ , the line shape is triangular. The exact expression of  $\alpha(\theta)$  derived by going beyond the previous approximation is given by

$$\alpha(\theta) = \frac{3}{8\pi} \left[ 1 + \frac{2z_0}{l} + \frac{1}{(1 + q_\perp l)^2} \left[ 1 + \frac{1 - \exp(-2q_\perp z_0)}{q_\perp l} \right] \right] \quad (5)$$

which preserves the previous features. This expression is in principle only valid for isotropic scattering. An approximate extension to the experimental case of anisotropic scattering is obtained<sup>15</sup> by replacing  $l$  everywhere by the transport mean free path  $l^*$ . In Fig. 2, we thus compare an experimental line shape with the predicted one, obtained by a convolution of Eq. (5) with the relevant instrumental profile.<sup>8</sup> No adjustable parameter is used, since  $l^*$  was determined by a different experiment.<sup>16</sup> If we consider the approximate nature of the diffusive behavior,

by a factor  $\cos[\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_n)]$ . It is now well known that these interferences reduce the bulk transport coefficients,<sup>3,12</sup> like the diffusion constant  $D$ . Here, we consider their consequence on the albedo problem.

We study the light reflected by a semi-infinite scattering medium occupying the half space  $z > 0$  (Fig. 1). We define the albedo  $\alpha(\hat{k}_i, \hat{k}_f)$  as the ratio of the emergent flux per unit solid angle  $d\Omega$  and unit interface area around the direction  $\mathbf{k}_f$  to the incident energy flux.  $\alpha$  is given by

enough from the interface,  $Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  obeys a diffusion equation with the boundary condition  $Q(-z_0) = 0$ , i.e., with a trapping plane located at  $-z_0$  (for pointlike scatterers,  $z_0$  is about  $0.7l$ ).  $Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$  is then given by

$$Q(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = Q_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - Q_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}^*). \quad (2)$$

Here,  $Q_0$  is the homogeneous solution of the stationary diffusion equation,  $Q_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = [4\pi D |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|]^{-1}$  (i.e., the "3D Coulomb potential"), where  $D = lc/3$  is the diffusion constant<sup>14</sup> of the light, while  $\mathbf{r}^*$  is the image of  $\mathbf{r}'$  in the mirror plane in  $-z_0$ . Physically, the image term in Eq. (2) ensures that only paths not crossing the trapping plane are selected in the evaluation of  $Q$  since the emergent light is lost for the medium.

Let us now simplify the expression for  $\alpha$  by assuming that in  $Q(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ ,  $\mathbf{r}$  and  $\mathbf{r}'$  are located on the same plane  $z = l$ . This is justified by the exponential terms  $\exp(-z/\mu_0 l)$  and  $\exp(-z'/\mu l)$ . For quasinormal incidence and emergence ( $\mu \approx \mu_0 \approx 1$ ), the albedo (1) becomes

the agreement between the two curves is remarkable.

The small-angle linear behavior of  $\alpha(\theta)$  is the signature of the large-distance asymptotic diffusive behavior of  $Q(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$  in the presence of the interface. Because of the image term in Eq. (2), the  $\rho^{-1}$  law valid for  $Q$  in the bulk is modified to  $\rho^{-3}$ . The surface element in the integration over the separation plane provides an additional factor  $\rho$  which leads to a  $\rho^{-2}$  behavior whose Fourier transform yields the linear dependence at small angles. It should be noted that a similar analysis in other dimensions yields the same triangular line shape.<sup>17</sup>

Expression (3) shows that the coherent contribution to the albedo is nothing but the small-angle "structure factor" of the correlation function  $Q(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$  given by Eq. (2). Therefore, the smaller the angle  $\theta$  is, the larger the maximal size of the probed diffusion paths is. We can be more explicit by considering the contribution to the albedo of paths of a given length  $L$  (this contribution is also of interest since it can be measured experimentally, e.g., by a pulse experiment). Within the previous approximation,  $z=z'=l$ , justified for large  $L$ , the contribution of these loops to  $Q(\rho)$  is

$$Q(\rho, L) = \left( \frac{3}{4\pi l} \right)^{3/2} \frac{1 - \exp[-3(l+z_0)^2/Ll]}{L^{1/2}} \frac{\exp(-3\rho^2/4Ll)}{L} \quad (6)$$

The  $\rho$  Fourier transform of  $Q(\rho)$  is a Gaussian function. Its width, of order  $\lambda/(Li)^{1/2}$ , results from the diffusion process parallel to the interface, while the  $1/L^{3/2}$  dependence of its amplitude is the signature of a one-dimensional random walk with a trap.<sup>18</sup> Thus, at a given small angle  $\theta$ , only the paths of length  $L$  smaller than  $\lambda^2/\theta^2$  contribute significantly to the coherent albedo. In this respect,  $\lambda^2/D\theta^2$  is analogous to the phase coherence time  $\tau_\phi$  introduced by Khmel'nitskii (see Ref. 1).

The previous results have been obtained within the diffusion approximation. Nevertheless, it must be noted that an expression of the coherent part of the albedo can be carried out from a direct  $n$ th-order multiple-scattering theory by means of an expansion in maximally crossed diagrams.<sup>15</sup> As expected, we find that the angular width and amplitude of the coherent  $n$ th-order contribution vary respectively as  $1/n^{1/2}$  and  $1/n^{3/2}$ . It is worth noting that in recent experiments (see Fig. 2), the coherent albedo still varies for angles about 10 times smaller than the total measured cone aperture. This shows that in such experiments, the light explores the medium along paths of length larger than about one hundred mean free paths.

So far, we have considered the case of scalar waves. However, the importance of light polarization has been demonstrated in recent experiments.<sup>6-8</sup> When the analyzed polarization is parallel to the incident one

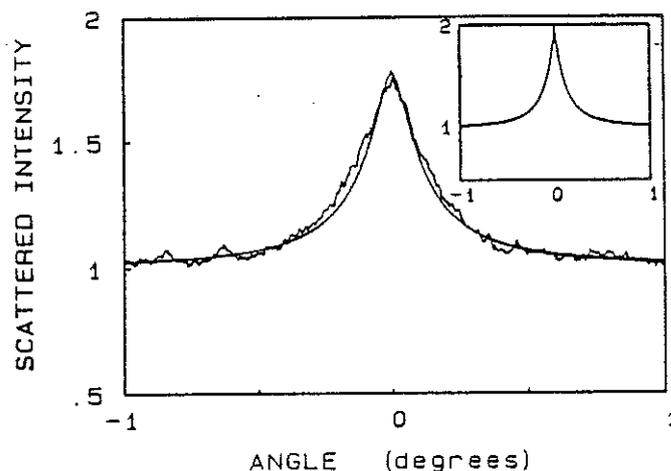


FIG. 2. Comparison between experimental and theoretical line shapes for the coherent backscattering. The experimental recording is taken from Ref. 8 [Fig. 3(a)]. The inset represents the bare theoretical curve taken from Eq. (5) with  $\lambda = 0.515 \mu\text{m}$  and  $l^* = 19 \mu\text{m}$ . The full line is the theoretical prediction obtained by the convolution of this previous curve and the instrumental profile.

(parallel configuration), the backscattered intensity for  $\theta = 0$  is about 1.7 times larger than the incoherent intensity (see Fig. 2). On the other hand, the enhancement factor in the crossed configuration is about 1.3. This difference can be understood from the form of the amplitude Rayleigh scattered by an individual center. It is proportional to  $(\mathbf{k} \times \mathbf{P}_0) \times \mathbf{k} \equiv \mathbf{M}(\mathbf{k}) \cdot \mathbf{P}_0$ , where  $\mathbf{P}_0$  is the incident polarization,  $\mathbf{k}$  the emergent wave vector, and  $\mathbf{M}(\mathbf{k})$  a  $3 \times 3$  symmetric matrix. Thus, for the  $n$ -scattering sequence  $(\mathbf{k}_i, \mathbf{k}_1, \dots, \mathbf{k}_{n-1}, \mathbf{k}_f)$  the emergent polarization state is  $\mathbf{P}_n = [\mathbf{k}_f \times (\mathbf{M}_n \cdot \mathbf{P}_i)] \times \mathbf{k}_f$ , where  $\mathbf{P}_i$  is the incident polarization and  $\mathbf{M}_n$  is the ordered product  $\prod_{j=1}^{n-1} \mathbf{M}(\mathbf{k}_{n-j})$ , while its time-reversed counterpart is  $\mathbf{P}'_n = [\mathbf{k}_f \times (\mathbf{M}'_n \cdot \mathbf{P}_i)] \times \mathbf{k}_f$ . Since the  $\mathbf{M}(\mathbf{k})$ 's are symmetric,  $\mathbf{M}'_n$  is the transpose of  $\mathbf{M}_n$ . Let us denote by  $P_{n\parallel}$  and  $P_{n\perp}$  the components of  $P_n$  respectively parallel and perpendicular to  $\mathbf{P}_i$ . We have  $P_{n\parallel} = P'_{n\parallel}$ , so that, in the parallel configuration, the coherence is totally maintained for any loop and the expected enhancement is, as previously noticed,<sup>7,8</sup> a factor 2. Furthermore, because we expect the large-distance behavior of the intensity in any polarization state to be diffusive, the line shape at small angles should be similar to that given by (5). The case of perpendicular polarization is different. Except for  $n = 2$ ,  $P_{n\perp}$  differs from  $P'_{n\perp}$  and one must determine the coherence ratio,

$C(n) = \langle P_{nL} P'_{nL} \rangle / \langle P_{nL}^2 \rangle$ , averaged over all the  $n$ -scattering sequences, in order to estimate the enhancement factor at  $\theta=0$ . Within the assumption of uniform distribution for the successive  $k_j$ 's, which for isotropic scattering should be true in the limit of large  $n$ , we can derive linear recurrence equations involving the different averages  $\langle M_{nij} M_{nkl} \rangle$ . Their solution leads to an exponential decay

$$C(n) = \frac{1}{2} [(0.7)^{n-1} - (0.5)^{n-1}] / [1 - (0.7)^{n-1}].$$

Finally, we estimate the desired enhancement factor for crossed polarization to be about 1.5 by summing over  $n$  the scalar  $n$ -scattering contribution weighted by  $C(n)$ . We thus understand the existence of a partial coherent effect in the crossed configuration (the difference between 1.3 and 1.5 is likely due to the various approximations in our calculation).

In the present analysis, we have presented physical arguments to explain the observed coherent back-scattering peak in the albedo of disordered media. This peak is the last coherence effect which survives in the presence of complete disorder. It is built up by constructive interferences in the random walk of light, the same phenomenon responsible for the weak localization of electrons in bulk impure metals. On the other hand, the particular peak line shape, valid for two and three dimensions, is specific to the presence of an interface and could not be obtained from bulk considerations. It results from the addition of all contributions of  $n$ th-order multiple scattering, and the triangular singularity at  $\theta=0$  can be reached only in the limit of  $n$  going to infinity. Any process which introduces a limitation in the order  $n$  of the multiple scattering or in other words in the total length of the random paths will round the peak. Finite-size confinement, absorption of light, or modulation of the light intensity are good candidates for these rounding processes.<sup>15</sup> Furthermore, since the peak line shape gives direct information on the transport of light in a random medium, an extension of this analysis towards non-Euclidean random walks is of great interest and will be reported in a forthcoming publication.<sup>15</sup> These considerations show the interest in this kind of experiment and analysis for the characterization of random media.

It is a pleasure to thank G. Maret for fruitful discussions.

<sup>1</sup>B. L. Al'tshuler, A. G. Aronov, D. E. Khmel'nitskii, and A. I. Larkin, in *Quantum Theory of Solids*, edited by I. M. Lifshits (Mir, Moscow, 1982), pp. 130-237.

<sup>2</sup>G. Bergmann, *Phys. Rep.* **107**, 1 (1984).

<sup>3</sup>L. P. Gorkov, A. I. Larkin, and D. E. Khmel'nitskii, *Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **30**, 248 (1979) [*JETP Lett.* **30**, 228 (1979)].

<sup>4</sup>J. L. Langer and T. Neal, *Phys. Rev. Lett.* **16**, 984 (1966).

<sup>5</sup>D. A. de Wolf, *IEEE Trans. Antennas Propag.* **19**, 254 (1971); Y. Kuga, L. Tsang, and A. Ishimaru, *J. Opt. Soc. Am. A* **2**, 616 (1985).

<sup>6</sup>Y. Kuga and A. Ishimaru, *J. Opt. Soc. Am. A* **8**, 831 (1984).

<sup>7</sup>M. P. van Albada and A. Lagendijk, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2692 (1985).

<sup>8</sup>P. E. Wolf and G. Maret, *Phys. Rev. Lett.* **55**, 2696 (1985).

<sup>9</sup>L. Tsang and A. Ishimaru, *J. Opt. Soc. Am. A* **8**, 836 (1984).

<sup>10</sup>A. A. Golubentsev, *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **86**, 47 (1984) [*Sov. Phys. JETP* **59**, 26 (1984)].

<sup>11</sup>E. Akkermans and R. Maynard, *J. Phys. (Paris), Lett.* **46**, L-1045 (1985).

<sup>12</sup>E. Akkermans and R. Maynard, *Phys. Rev. B* **32**, 7850 (1985).

<sup>13</sup>B. Davison and J. B. Sykes, *Neutron Transport Theory* (Oxford Univ. Press, New York, 1957); A. Ishimaru, *Wave Propagation and Scattering in Random Media* (Academic, New York, 1978), Vol. 1.

<sup>14</sup>We neglect the weak-localization correction to the diffusion constant, which is allowed for  $\lambda/l$  small enough.

<sup>15</sup>E. Akkermans, G. Maret, R. Maynard, and P. E. Wolf, to be published.

<sup>16</sup> $l^*$  is determined to be  $19 \mu\text{m}$  by division of the experimental scattering mean free path  $2.8 \mu\text{m}$  by the calculated average of  $1 - \cos\omega$ , where  $\omega$  is the scattering angle for a single latex sphere.  $\lambda = 0.515 \mu\text{m}$  is the value of the wavelength in air, which accounts for the refraction at the water-air interface.

<sup>17</sup>However, in two dimensions, the bulk low critical dimensionality, one should also renormalize the diffusion constant, taking into account the presence of the interface.

<sup>18</sup>This dependence must not be confused with that of the recurrence probability in a three-dimensional bulk.

C O N C L U S I O N



Nous avons, dans cette thèse, étendu le concept de localisation faible au problème de la propagation des ondes en milieu désordonné. Dans ce cadre, nous avons montré que le phénomène de localisation est beaucoup plus général que son application aux systèmes électroniques ne le laisserait croire. C'est un effet caractéristique de la diffusion multiple d'une onde sur une distribution aléatoire de centres diffuseurs. Il est donc indépendant des caractéristiques de l'onde (statistique, dispersion, ...) et de celles du désordre (nature des sections efficaces) dans la mesure où le problème reste linéaire et la diffusion multiple élastique.

Nous avons, de plus, montré l'importance de la dimensionalité d'espace. Si les milieux unidimensionnels ne supportent que des modes localisés (qui résultent de très fortes interférences), conduisant à un comportement singulier des coefficients de transport (oscillations, imprédictibilité des valeurs moyennes), par contre à trois dimensions plusieurs régimes sont atteints. Nous nous sommes, quant à nous, focalisé sur la première correction associée au mécanisme d'interférence découlant de la dernière symétrie existante : l'invariance dans le renversement du temps. Nous avons alors montré comment celle-ci, combinée à la diffusion multiple, introduisait une anisotropie dans les sections efficaces de transport et de là une irréversibilité dans la mesure où, partant de collisions isotropes, on peut aboutir à un système macroscopique pour lequel toute l'intensité incidente se trouve réfléchié et aucune énergie transmise. C'est là la situation extrême correspondant à la transition de localisation pour laquelle nous avons étudié le comportement critique. Loin de la transition, nous avons prédit et analysé cette anisotropie dans le cas de la lumière se propageant dans un milieu semi-infini. La preuve expérimentale qui en a été donnée et la concordance obtenue avec les résultats théoriques établissent cet effet sur des bases solides.

Enfin, l'originalité de notre approche réside peut-être plus dans le champ des possibilités qu'elle offre, dû à la pureté du phénomène étudié. Dans le régime perturbatif, où seul l'effet cohérent est pertinent, elle permet une caractérisation optique de milieux désordonnés plus précise que celles généralement employées où justement la diffusion multiple constitue un obstacle. Elle permettrait de plus une étude de la transition de localisation pure, qui se trouve masquée dans les systèmes électroniques par l'extrême importance que prennent les interactions coulombiennes. Notre approche avec des ondes classiques, et plus particulièrement la lumière, constitue une possibilité intéressante pour tester précisément la validité de la conjecture de la bande des quatre. De plus, on devrait pouvoir sceller le sort du cas  $d = 2$ , où l'existence d'importantes fluctuations analogues à celles observées à  $d = 1$  peut remettre en question l'hypothèse d'échelle et peut amener à prendre en compte d'autres moments dans la procédure de renormalisation.

Enfin, l'existence d'effets anharmoniques s'ajoutant à la localisation faible des phonons semble être une voie prometteuse dans la caractérisation des anomalies de basse température constatées dans les verres. Sa concrétisation passe néanmoins par une analyse soignée du diagramme de phase désordre-interaction qui nécessite d'aller au-delà de simples développements de perturbation.

Finalement, ne doutons pas que les aspects fascinants de la physique des systèmes désordonnés ne constituent à l'avenir une source constante de surprises.

20

21

22

23



AKKERMANS Eric

Sujet : PROPAGATION D'ONDES EN MILIEU DESORDONNE

Résumé :

Cette thèse présente une étude théorique de quelques phénomènes de la matière condensée liés à la propagation d'ondes en milieu désordonné. Ceux-ci font intervenir deux quantités clés : La phase de l'onde et la dimensionalité de l'espace où elle se propage.

Dans le cas des systèmes uni- et bidimensionnels, les ondes subissant des collisions multiples élastiques interfèrent fortement et conduisent à des modes propres exponentiellement localisés. Nous avons étudié leur structure sur un modèle particulier de potentiel incommensurable et caractérisé plus généralement le transport des phonons et des électrons dans les systèmes unidimensionnels désordonnés. La conductance de ces systèmes fait apparaître un comportement universel à basse température et des "fluctuations géantes" à plus haute température. Celles-ci révèlent l'extrême sensibilité des coefficients de transport macroscopiques à la distribution microscopique du désordre.

En dimensions 2 et 3, nous avons mis en évidence pour les phonons un régime de localisation faible. Celui-ci, combiné aux effets d'anharmonicité, prédit l'existence d'un seuil en température pour lequel le libre parcours moyen des phonons décroît fortement tandis que la densité d'états diverge. Un tel comportement est réminiscent des propriétés anormales des verres à basse température.

Finalement, nous avons obtenu d'une façon générale la localisation faible des ondes à partir d'une théorie de diffusion multiple cohérente. Ceci conduit à prédire une augmentation de la section efficace différentielle dans la direction de rétrodiffusion qui se manifeste par une correction à la constante de diffusion et par une valeur deux fois plus grande de l'intensité réfléchie dans un cône d'ouverture  $\lambda/\lambda$  autour de la direction d'incidence. Ce phénomène confirmé expérimentalement est analysé de façon détaillée et conduit à une expression analytique de la forme de raie ainsi qu'à la prédiction d'effets liés à l'absorption, à la fréquence et au caractère fractal de certains milieux désordonnés.

Mots clés : Localisation d'Anderson - Propagation d'ondes - Transport dans les systèmes désordonnés - Effets d'interférence - Fluctuations géantes - Système incommensurable - Phonons - Anharmonicité - Verres - Diffusion multiple de la lumière - Renormalisation - Marche aléatoire dans un milieu semi-infini.

