Physique statistique hors équilibre - examen

Mercredi 05 janvier 2011

Rédiger cette partie sur une copie **SÉPARÉE**.

Sujet : **Formule de Kubo dans un anneau**

Introduction : Nous étudions le transport électrique dans un anneau métallique mésoscopique, une question discutée dans un article de Nandini Trivedi & Dana A. Browne, "*Mesoscopic ring in a magnetic field : reactive and dissipative response*", Phys. Rev. B **38**, 9581 (1988). Les auteures montrent que la topologie non triviale du système est à l'origine de termes supplémentaires dans la conductivité, par rapport au résultat obtenu pour un fil infini.

A. Équation de Schrödinger dans un anneau et courant permanent (~ 2)

On considère un électron dans un anneau de périmètre L, supposé **unidimensionnel** pour simplifier, traversé par un flux magnétique ϕ. L'hamiltonien est

$$\hat{H}_\phi = \frac{1}{2m_e}(\hat{p} - eA)^2 + V(\hat{x}) \,, \tag{1}$$

où l'opérateur agit sur les fonctions périodiques définies sur $[0, L]$ [i.e. t.q. $\psi(0) = \psi(L)$ et $\psi'(0) = \psi'(L)$]. Le potentiel vecteur dans l'anneau peut être choisi **uniforme** $A = \phi/L$.

1/ Théorème de Feynman-Hellmann (cas particulier)**.–** L'opérateur densité de courant électrique (moyenné spatialement) est $\hat{j} = \frac{e}{L}\hat{v}$, où $\hat{v} = \frac{\hat{p}-eA}{m_e}$ est l'opérateur vitesse. Soit $|\,\varphi_\alpha\,\rangle$ un **état propre** de $\hat{H}_\phi$, d'énergie $\epsilon_\alpha(\phi)$. Montrer que le courant permanent moyen est donné par

$$\boxed{j_\alpha(\phi) \stackrel{\text{def}}{=} \langle\,\varphi_\alpha\,|\hat{j}|\,\varphi_\alpha\,\rangle = -\frac{\partial\epsilon_\alpha(\phi)}{\partial\phi}} \tag{2}$$

2/ Pouvez-vous justifier (brièvement) que le problème est périodique en fonction du flux, i.e. que la physique est inchangée si $\phi \to \phi + \phi_0$. **Appl. Num. :** Donner la valeur du quantum de flux $\phi_0 = h/e$ en Gauss.μm^2 (1 T=10 000 Gauss). Quelle variation du champ magnétique δB correspondrait à une variation du flux $\delta\phi = \phi_0$ pour un anneau de périmètre $L = 5\,\mu$m ?

L'existence du courant permanent est un effet **cohérent** ayant pour origine la phase Aharonov-Bohm de la fonction d'onde. Dans la pratique la cohérence est limitée par les interactions avec l'environnement. On s'attend alors à une suppression (exponentielle) de $j_{\text{perm}} = \sum_\alpha f_\alpha j_\alpha$ si L excède la *longueur de cohérence de phase* L_φ (dans un cas typique $L_\varphi \sim 1\,\mu$m à $T = 1\,$K). C'est pourquoi l'anneau doit être *mésoscopique*.

B. Conductivité (~ 4)

Nous supposons que l'anneau est soumis à un champ électrique uniforme $\mathcal{E}(t)$ (en plus du flux ϕ). Nous choisissons la jauge telle que les potentiels scalaire et vecteur soient respectivement $\phi_{\text{ext}} = 0$ et $A_{\text{ext}}(t) = -\int^t \mathrm{d}t'\,\mathcal{E}(t')$. L'hamiltonien de perturbation est donc de la forme

$$\hat{H}_{\text{pert}}(t) = -e\hat{v}\,A_{\text{ext}}(t) \quad \text{avec} \quad \hat{v} = \frac{1}{m_e}\left[\hat{p} - eA\right] \quad (\text{et } A = \phi/L)\,. \tag{3}$$

L'opérateur de densité de courant contient maintenant deux contributions : $\hat{\mathcal{J}} = \frac{e}{L}\left[\hat{v} - \frac{e}{m_e}A_{\text{ext}}(t)\right] = \hat{j} - \frac{e^2}{m_e L}A_{\text{ext}}(t)$.

1/ Réponse de $\hat{v}$ (Question de cours).– La réponse de l'opérateur vitesse est donnée par

$$\langle \hat{v}(t) \rangle_{A_\text{ext}} = \langle \hat{v} \rangle + e \int \mathrm{d}t'\, K(t-t') A_\text{ext}(t') + O(A_\text{ext}^2) \,. \tag{4}$$

a/ Donner l'expression de $K(t)$.
b/ Montrer que la réponse fréquentielle d'un gaz d'électrons en contact avec un thermostat/réservoir est

$$\widetilde{K}(\omega) = -\sum_{\alpha,\beta} (f_\alpha - f_\beta) \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\hbar\omega + \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta + \mathrm{i}0^+} \quad \text{où} \quad v_{\alpha\beta} \stackrel{\text{def}}{=} \langle\, \varphi_\alpha \,|\hat{v}|\, \varphi_\beta \,\rangle \,. \tag{5}$$

$\widetilde{K}(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \int \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t} K(t)$ et $f_\alpha \equiv f(\epsilon_\alpha)$ est la distribution de Fermi/Dirac.

Indication (rappel) : Soit $\hat{A}$ et $\hat{B}$ deux opérateurs à N corps, sommes d'opérateurs à un corps $\hat{A} = \sum_i \hat{a}^{(i)}$ et $\hat{B} = \sum_i \hat{b}^{(i)}$. On rappelle qu'à l'équilibre thermodynamique, la moyenne du commutateur peut s'exprimer à l'aide du spectre des états individuels $\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = \mathrm{tr}\{ f(\hat{h}) [\hat{a}, \hat{b}] \} = \sum_{\alpha,\beta} (f_\alpha - f_\beta) (\hat{a})_{\alpha\beta} (\hat{b})_{\beta\alpha}$ où f_α est la distribution de Bose/Einstein ou de Fermi/Dirac.

2/ Conductivité.– La conductivité caractérise la réponse de la densité de courant au champ électrique

$$\langle \hat{\mathcal{J}}(t) \rangle_{A_\text{ext}} = \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle + \int \mathrm{d}t'\, \sigma(t-t') \mathcal{E}(t') + O(\mathcal{E}^2) \,. \tag{6}$$

Montrer que

$$\widetilde{\sigma}(\omega) = \frac{\mathrm{i}}{\omega} \frac{e^2}{L} \left[\frac{1}{m_e} \sum_\alpha f_\alpha - \widetilde{K}(\omega) \right] \,. \tag{7}$$

C. Règle de somme-f dans un anneau (~ 4)

On peut montrer (cela n'est pas demandé) que [1] $\sum_\beta \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta} + \frac{1}{2m_e} = \frac{L^2}{2e^2} \frac{\partial^2 \epsilon_\alpha}{\partial \phi^2}$.

1/ Déduire la règle de somme-f dans l'anneau

$$\frac{1}{m_e} \sum_\alpha f_\alpha + \sum_{\alpha,\beta} (f_\alpha - f_\beta) \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta} = -\frac{L^2}{e^2} \sum_\alpha f_\alpha \frac{\partial j_\alpha}{\partial \phi} \,, \tag{8}$$

où $j_\alpha(\phi)$ est le courant permanent associé à l'état individuel (dans un fil infini $j_\alpha \to 0$).

2/ Montrer que la conductivité peut se mettre finalement sous la forme

$$\boxed{\widetilde{\sigma}(\omega) = \frac{e^2}{L} \frac{\widetilde{K}(\omega) - \widetilde{K}(0)}{\mathrm{i}\omega} + \frac{L}{\mathrm{i}\omega} \frac{\partial j_\text{perm}}{\partial \phi} + \frac{L}{\mathrm{i}\omega} \sum_\alpha f'_\alpha\, j_\alpha^2} \quad \text{où} \quad j_\text{perm} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_\alpha f_\alpha\, j_\alpha \,. \tag{9}$$

Cette expression respecte-t-elle le principe de causalité ?

3/ Quel terme de la conductivité caractérise la dissipation ? Que devient le troisième terme à $T = 0\,\mathrm{K}$? Donner une interprétation physique du deuxième terme.

Indication : Si on applique un flux variant très lentement au cours du temps, $\phi \to \phi + \delta\phi_\omega \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}$ avec $\omega \to 0$, on pourrait utiliser l'approximation adiabatique.

---

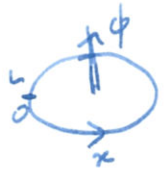
1. Pour cela on considère $H_{\phi+\delta\phi}$ l'hamiltonien obtenu pour un flux $\phi + \delta\phi$. On écrit $H_{\phi+\delta\phi} = H_\phi + W$ puis on explicite le développement perturbatif des énergies $\epsilon_\alpha(\phi + \delta\phi) = \epsilon_\alpha(\phi) + \delta\phi\, \partial_\phi \epsilon_\alpha(\phi) + \frac{1}{2} \delta\phi^2\, \partial_\phi^2 \epsilon_\alpha(\phi) + \cdots$

Ch. Texier

5 Janvier 2011 — Examen de physique statistique

Formule de Kubo dans un anneau

A. Courant permanent



$$\hat{H}_\phi = \frac{1}{2m_e}\left(\hat{p} - eA\right)^2 + V(\hat{x})$$

$$A = \frac{\phi}{L} \quad \Rightarrow \quad \oint dx\, A = \phi \text{ ok}$$

spectre de $\hat{H}_\phi$: ϵ_α, $|\varphi_\alpha\rangle$

opérateur de courant moyen : $\hat{J} = \frac{e}{L}\hat{v}$ $\quad \left(\equiv e\int\frac{dx}{L}\ \frac{\hat{v}|x\rangle\langle x| + |x\rangle\langle x|\hat{v}}{2}\right)$

1/ Th. de Feynman–Hellmann (appliqué au courant permanent)

$\epsilon_\alpha(\phi)$ et $|\varphi_\alpha(\phi)\rangle$ sont des fcts du flux ϕ

Le spectre est discret (volume fini)

$\Rightarrow \langle\varphi_\alpha|\varphi_\beta\rangle = \delta_{\alpha\beta}$ reste vrai $\forall\phi$

$$\frac{\partial}{\partial\phi}\epsilon_\alpha(\phi) = \frac{\partial}{\partial\phi}\langle\varphi_\alpha|\hat{H}_\phi|\varphi_\alpha\rangle = \langle\varphi_\alpha|\underbrace{\frac{\partial\hat{H}_\phi}{\partial\phi}}_{-\frac{e}{m_e}\frac{1}{L}(\hat{p}-eA)}|\varphi_\alpha\rangle + \overbrace{\epsilon_\alpha\underbrace{\frac{\partial}{\partial\phi}\langle\varphi_\alpha|\varphi_\alpha\rangle}_{=0}}^{\frac{\partial\langle\varphi_\alpha|}{\partial\phi}\hat{H}_\phi|\varphi_\alpha\rangle + \langle\varphi_\alpha|\hat{H}_\phi\frac{\partial|\varphi_\alpha\rangle}{\partial\phi}}$$

$$= -\frac{e}{L}\langle\varphi_\alpha|\hat{v}|\varphi_\alpha\rangle \quad \text{CQFD.} \qquad \boxed{J_\alpha(\phi) = -\frac{\partial\epsilon_\alpha(\phi)}{\partial\phi}}$$

ϕ = variable conjuguée du courant

2/ éq. de Schrödinger :

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi = -\frac{1}{2m_e}\left(\frac{\partial}{\partial x} - ieA\right)^2\psi + V(x)\psi$$

avec $\psi(0) = \psi(L)$ et $\psi'(0) = \psi'(L)$

formellement on peut éliminer le flux en changeant les c.a.l.

$$\psi = e^{ieAx}\,\tilde{\psi} \qquad \text{(transf. de jauge)}$$

$\tilde{\psi}$ obéit à $\quad i\frac{\partial\tilde{\psi}}{\partial t} = -\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\tilde{\psi} + V\tilde{\psi}$

avec $\tilde{\psi}(L) = \underbrace{e^{ieAL}}_{e^{ie\phi}\,\equiv\, e^{2i\pi\phi/\phi_0}}\tilde{\psi}(0)$ où $\phi_0 = \frac{h}{e}$

les c.a.l. sont périodiques en ϕ, de période ϕ_0

$\phi_0 = \frac{h}{e} = \frac{6{,}3\times10^{-34}}{1{,}6\cdot10^{-19}} \simeq 4\cdot10^{-15}\,m^2.T \simeq 40$ Gauss.μm^2

si $L = 5\mu m \Rightarrow \phi = \frac{BL^2}{4\pi}$

$\delta B = \frac{4\pi\phi_0}{L^2} \simeq \frac{12}{25}\times 40 \simeq 20$ Gauss

B. Conductivité

champs électrique $\mathcal{E}(t) \to \begin{cases} \cancel{V}_{ext}=0 \\ A_{ext}(t) = -\int^t dt'\, \mathcal{E}(t') \end{cases}$

$$H_{pert}(t) = -e\hat{v} A_{ext}(t) \quad \text{où} \quad \hat{v} = \frac{\hat{p}-eA}{m_e}$$

$$\hat{J} = \frac{\hat{p}-e(A+A_{ext})}{m_e} \times \frac{e}{L} = \hat{j} - \frac{e^2}{m_e L} A_{ext}$$

1/ réponse de $\hat{v}$: $\langle \hat{v}(t)\rangle_{A_{ext}} = \underbrace{\langle \hat{v}\rangle}_{\neq 0} + e\int dt'\, K(t-t')\, A_{ext}(t') + O(A_{ext}^2)$

$$H_{pert}(t) = -e\hat{v} A_{ext}(t)$$

$$\Rightarrow \boxed{K(t) = \frac{i}{\hbar}\theta(t)\langle[\hat{v}(t),\hat{v}]\rangle} \quad \text{(cours)}$$

b/ $\langle \ldots \rangle$ est la moyenne grand canonique.

$$\Downarrow$$

$$K(t) = \frac{i}{\hbar}\theta(t)\sum_{\alpha,\beta} \underbrace{(f_\alpha - f_\beta)}_{\text{Fermi-Dirac}} |v_{\alpha\beta}|^2 e^{i\frac{\epsilon_\alpha-\epsilon_\beta}{\hbar}t}$$

Fourier $\Downarrow$

$$\boxed{\tilde{K}(\omega) = -\sum_{\alpha,\beta}(f_\alpha - f_\beta)\frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\hbar\omega + \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta + i0^+}}$$

2/ Conductivité

$$\langle \hat{J}(t)\rangle = \langle \hat{J}\rangle + \int dt'\, \sigma(t-t')\,\mathcal{E}(t') + O(\mathcal{E}^2)$$

ce terme donne déjà une contribution d'ordre 1 à la moyenne

$$\hat{J} = \hat{j} - \frac{e^2}{m_e}\underbrace{\frac{1}{L}}_{\hookrightarrow \text{ densité moyenne pour } 1e^-} A_{ext}(t)$$

$$\frac{1}{L} = \int \frac{dx}{L} |x\rangle\langle x|$$

en grand canonique ce terme nous donne (en moyenne) $-\frac{e^2}{m_e}\frac{1}{L}\underbrace{\sum_\alpha f_\alpha}_{\#\, d'e^-} A_{ext}(t)$

$$\langle \hat{J}(t)\rangle = \langle \hat{j}(t)\rangle - \frac{e^2}{m_e L} A_{ext}(t)\sum_\alpha f_\alpha$$

réponse d'ordre 1 calculée à la question précédente

$$= \langle \hat{j}\rangle + \int dt' \left[-\frac{e^2}{m_e L}\sum_\alpha f_\alpha\, \delta(t-t') + \frac{e}{L} e K(t-t')\right] A_{ext}(t') + \ldots$$

en Fourier

$$\int dt\, e^{i\omega t}\langle \hat{J}(t)\rangle = 2\pi\delta(\omega)\langle \hat{j}\rangle + \frac{e^2}{L}\left[\tilde{K}(\omega) - \frac{1}{m_e}\sum_\alpha f_\alpha\right]\underbrace{\tilde{A}_{ext}(\omega)}_{\frac{\mathcal{E}(\omega)}{+i\omega}} + \ldots$$

$$\Downarrow$$

$$\boxed{\tilde{\sigma}(\omega) = \frac{i}{\omega}\frac{e^2}{L}\left[\frac{1}{m_e}\sum_\alpha f_\alpha - \tilde{K}(\omega)\right]}$$

C. Règle de somme-f

symétrisation de la somme

1/ $$\sum_\beta \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\epsilon_\alpha-\epsilon_\beta} + \frac{1}{2m_e} = \frac{L^2}{2e^2}\frac{\partial^2\epsilon_\alpha}{\partial\phi^2} \xrightarrow{\sum_\alpha} \underbrace{\sum_{\alpha,\beta}(f_\alpha-f_\beta)\frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\epsilon_\alpha-\epsilon_\beta}}_{-\tilde{K}(0)} + \frac{1}{m_e}\sum_\alpha f_\alpha = -\frac{L^2}{e^2}\sum_\alpha \frac{\partial j_\alpha}{\partial\phi} f_\alpha$$

2/ $$\tilde\sigma(\omega) = \frac{i}{\omega}\frac{e^2}{L}\left[\tilde K(0)-\tilde K(\omega)\right] + \frac{i}{\omega}\frac{e^2}{L}(-)\frac{L^2}{e^2}\sum_\alpha \underbrace{f_\alpha\frac{\partial j_\alpha}{\partial\phi}}_{\frac{\partial(f_\alpha j_\alpha)}{\partial\phi} - j_\alpha \overbrace{\frac{\partial f_\alpha}{\partial\phi}}^{-j_\alpha f'_\alpha}}$$

$$\Rightarrow \boxed{\tilde\sigma(\omega) = \frac{e^2}{L}\frac{\tilde K(\omega)-\tilde K(0)}{i\omega} + \frac{L}{i\omega}\frac{\partial j_{perm}}{\partial\phi} + \frac{L}{i\omega}\sum_\alpha f'_\alpha j_\alpha^2}$$

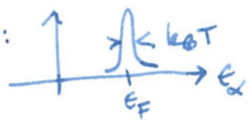
Causalité : le premier terme ne présente pas de pôle en $\omega=0$ et les pôles de $\tilde K(\omega)$ sont dans le plan complexe inférieur. OK

Les termes 2 et 3 sont $\propto \frac{1}{\omega}$ (on a oublié la causalité en l'intégrant). $\Rightarrow$ il faut faire $\omega \to \omega + i0$

3/ Dissipation : $\mathrm{Im}\,K$ i.e. $\mathrm{Re}\,\tilde\sigma(\omega) = \frac{e^2}{L}\frac{\mathrm{Im}\,\tilde K(\omega)}{\omega}$ est la partie dissipative de la conductivité

les termes venant du courant permanent sont non dissipatifs.

$-f'_\alpha$:



à $T=0$ le dernier terme est nul (sauf si ϵ_F coïncide avec un ϵ_α)

Le second terme peut être obtenu par une approx. adiabatique.

$\phi = $ cste $\Rightarrow$ courant $j_{perm}(\phi) = \sum_\alpha f_\alpha j_\alpha$

si $\phi \to \phi + \delta\phi_\omega e^{-i\omega t}$ avec $\omega \to 0$

$$j_{perm}(\phi + \delta\phi_\omega e^{-i\omega t}) \simeq j_{perm}(\phi) + \underbrace{\overbrace{\frac{\partial j_{perm}}{\partial\phi}}^{\sum_\alpha \frac{\partial(f_\alpha j_\alpha)}{\partial\phi}}\delta\phi_\omega e^{-i\omega t}}$$

$$\Downarrow$$

$$\underbrace{\frac{L}{i\omega}\frac{\partial j_{perm}}{\partial\phi}}_{\text{contribution à la partie réactive de } \tilde\sigma(\omega)}\mathcal{E}_\omega e^{-i\omega t}$$

$$\delta\phi_\omega = L\,\delta A_\omega = L\frac{\mathcal{E}_\omega}{i\omega}$$

modulation du flux $\longrightarrow$ champ électrique

Rq : Le courant permanent est un effet quantique (dû à la phase de la fonction d'onde)

En pratique la cohérence de phase est limitée à 99 µm.

Si $L \gg 99$ µm les contributions ~~du~~ courant permanent disparaissent.