TD n°5 : Réponse linéaire

1 Oscillateur harmonique quantique

Nous étudions la dynamique d'un oscillateur harmonique quantique dont l'hamiltonien est $H_0 = \frac{p^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$, soumis à une perturbation $H_{\mathrm{pert}}(t) = -x\, f(t)$.

1/ Calculer l'opérateur d'annihilation en représentation d'interaction $a(t)$.

2/ Calculer la fonction de corrélation $C(t) \equiv C_{xx}(t) = \langle x(t)x\rangle$ où $\langle\cdots\rangle$ est la moyenne canonique. Analyser les limites classiques ($k_B T \gg \hbar\omega_0$) et de température nulle.

3/ Vérifier la relation de bilan détaillée $\widetilde{C}(-\omega) = \widetilde{C}(\omega)\mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega}$. Calculer la fonction de corrélation symétrisée $S(t) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{2}\langle\{x(t), x\}\rangle$.

4/ Calculer la fonction spectrale $\xi(t) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \frac{1}{2\hbar}\langle[x(t), x]\rangle$ et la fonction de réponse $\chi(t) \equiv \chi_{xx}(t)$. Ces résultats dépendent-ils de la moyenne $\langle\cdots\rangle$? Calculer $\widetilde{\chi}(\omega)$ et $\widetilde{\xi}(\omega)$.

5/ Calculer la fonction de corrélation canonique de Kubo $K(t) \equiv K_{xx}(t) = \frac{1}{\beta}\int_0^\beta \mathrm{d}\lambda\, \langle x(-\mathrm{i}\hbar\lambda)x(t)\rangle$. Retrouver la relation avec la fonction de réponse.

6/ Vérifier que le résultat de la question **4** coïncide avec le résultat classique. Pour comprendre cela : donner les équations du mouvement pour les opérateurs $x_H(t)$ et $p_H(t)$ en représentation de Heisenberg. En déduire que la réponse de l'oscillateur à la force extérieure est purement linéaire.

7/ Vérifier que les fonctions de corrélation satisfont le théorème fluctuation-dissipation.

2 Conductivité d'un gaz d'electrons libres

Nous appliquons un champ électrique homogène et cherchons la réponse du courant à une perturbation $H_{\mathrm{pert}}(t) = -e\,\vec{\mathcal{E}}(t)\cdot\vec{r}$ ($\vec{r}$ est la position d'un électron). Après moyenne spatiale la densité de courant moyen est $\vec{j} = \frac{e}{V}\vec{v}$ où $\vec{v}$ est l'opérateur vitesse. La conductivité (à $q = 0$) est définie par $\langle j_i(t)\rangle_{\mathcal{E}} = \int \mathrm{d}t'\, \sigma_{ij}(t - t')\mathcal{E}_j(t')$ (avec sommation implicite sur les indices répétés).

1/ Calculer explicitement la conductivité $\sigma_{ij}^{(1\,e^-)}(t)$ pour un seul électron.

2/ En déduire la conductivité du gaz d'electrons libres.

3/ Préciser sa TF $\widetilde{\sigma}_{ij}(\omega)$. Interpréter physiquement le comportement à $\omega \to 0$.

4/ Règle de somme.– Donner $\sigma_{ij}(t = 0)$ pour le gaz d'électrons puis $\int \mathrm{d}\omega\, \tilde{\sigma}_{ij}(\omega)$.

3 Fonction de réponse d'un système de particules identiques

$\{|\,\varphi_\alpha\,\rangle\}$ désigne une base d'états propres de l'hamiltonien h pour une particule. L'hamiltonien des N électrons $H = \sum_{i=1}^N h^{(i)}$ agit dans l'espace de Hilbert $\mathcal{H}_N = \mathcal{H}_1^{\otimes N}$. On note a_α et $a_\alpha^\dagger$ les opérateurs d'annihilation et de création agissant dans l'espace de Fock $\mathcal{F} = \bigoplus_{N=0}^\infty \mathcal{H}_N$ et satisfaisant $\{a_\alpha, a_\beta^\dagger\} = \delta_{\alpha,\beta}$ pour des fermions et $[a_\alpha, a_\beta^\dagger] = \delta_{\alpha,\beta}$ pour des bosons. Soient Q et P

deux observables, sommes d'opérateurs à un corps : $Q = \sum_i q^{(i)}$ et $P = \sum_i p^{(i)}$. On rappelle que Q peut s'exprimer à l'aide des opérateurs d'annihilation et de création

$$Q = \sum_{\alpha,\beta} q_{\alpha\beta}\, a_\alpha^\dagger\, a_\beta \tag{1}$$

où $q_{\alpha\beta} \stackrel{\text{def}}{=} \langle\, \varphi_\alpha\, | q |\, \varphi_\beta\, \rangle$.

On introduit la moyenne grand-canonique :

$$\langle \cdots \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{Tr}\,\{\rho \cdots\} \qquad \text{avec } \rho = \frac{1}{\mathcal{Z}} \mathrm{e}^{-\beta(H-\mu N)} \tag{2}$$

où $\mathrm{Tr}\,\{\cdots\}$ est une trace dans $\mathcal{F}$. N est le nombre de particules.

1/ Calculer $\langle a_\alpha^\dagger\, a_\beta\rangle$. On introduira la notation $f_\alpha \equiv f(\epsilon_\alpha) = \frac{1}{\mathrm{e}^{\beta(\epsilon_\alpha-\mu)}\pm 1}$ où $h|\, \varphi_\alpha\, \rangle = \epsilon_\alpha |\, \varphi_\alpha\, \rangle$.

2/ Vérifier que

$$\begin{aligned} [AB, CD] &= A[B,C]D + [A,C]BD + CA[B,D] + C[A,D]B && (3)\\ [AB, CD] &= A\{B,C\}D - \{A,C\}BD + CA\{B,D\} - C\{A,D\}B && (4) \end{aligned}$$

et appliquer la relation au calcul de $[a_\alpha^\dagger\, a_\beta, a_\mu^\dagger\, a_\nu]$.

3/ Montrer que, pour des bosons comme pour des fermions,

$$\boxed{\langle [P,Q]\rangle = \mathrm{Tr}\,\{\rho\,[P,Q]\} = \mathrm{tr}\,\{f(h)[p,q]\}} \tag{5}$$

où $\mathrm{tr}\{\cdots\}$ est une trace dans l'espace de Hilbert d'une particule $\mathcal{H}_1$.

4/ On pourra vérifier que $\langle PQ\rangle \neq \mathrm{tr}\{f(h)pq\}$.

5/ Déduire la représentation spectrale de la fonction de réponse $\widetilde{\chi}_{PQ}(\omega)$ en terme des éléments de matrice des opérateurs à un corps $q_{\alpha\beta}$ et $p_{\alpha\beta}$.

4 Fonction de réponse densité-densité d'un gaz de fermions libres

L'opérateur densité de particules est noté $\hat{n}(r)$ et ses composantes de Fourier $\hat{n}_q$ (j'abandonne les flêches sur le vecteurs). On travaillera dans une boîte de volume fini V. On applique un potentiel scalaire $V_{\mathrm{ext}}(r,t)$.

1/ La fonction de réponse densité-densité $\chi(r,t;r',0)$ est définie par

$$\langle \hat{n}(r,t)\rangle_{V_{\mathrm{ext}}} = \overbrace{n}^{\text{densité moyenne}} + \int \mathrm{d}r'\mathrm{d}t'\, \chi(r,t;r',t')\, V_{\mathrm{ext}}(r',t') + \cdots \tag{6}$$

Exprimer $\hat{H}_{\mathrm{pert}}(t)$ en fonction de $\hat{n}_q$. En déduire l'expression de $\int \mathrm{d}(r-r')\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q(r-r')}\, \chi(r,t;r',0)$ en terme de l'opérateur densité $\hat{n}_q$.

2/ On considère un gaz de fermions libres. Les ondes planes sont $\varphi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{V}}\mathrm{e}^{\mathrm{i}kr}$. L'opérateur densité d'un fermion est $\hat{n}(r) = \delta(r-\hat{r})$. Calculer les éléments de matrice $\langle\, \varphi_k\, |\hat{n}_q|\, \varphi_{k'}\, \rangle$.

3/ Finalement montrer que $\widetilde{\chi}(q,\omega) = \int \mathrm{d}(r-r')\, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}q(r-r')} \int \mathrm{d}t\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega t}\, \chi(r,t;r',0)$ se décompose sur les états à une particule comme :

$$\widetilde{\chi}(q,\omega) = \frac{1}{V}\sum_k \frac{f_k - f_{k+q}}{\hbar\omega + \epsilon_k - \epsilon_{k+q} + \mathrm{i}0^+} \tag{7}$$

où $f_k \equiv f(\epsilon_k)$ est la distribution de Fermi-Dirac.

4/ *Le cas statique* $\omega = 0$.– Calculer $\widetilde{\chi}(q \ll k_F, 0)$. Interpréter physiquement le résultat.

5 Effet Hall

Nous étudions la conductivité d'un gaz d'électrons se mouvant dans un plan[1] xOy soumis à un champ magnétique perpendiculaire homogène (figure 1).

A/ Hamiltonien de Landau.– La dynamique d'**une** particule de charge e (supposée sans spin pour simplifier) est décrite par l'Hamiltonien :

$$\hat{H}_L = \frac{1}{2} m \hat{\vec{v}}^2 = \frac{1}{2m}\left[\hat{\vec{p}} - e\vec{A}(\hat{\vec{r}})\right]^2 \tag{8}$$

où le potentiel vecteur décrit un champ magnétique **uniforme** : $\mathrm{rot}\vec{A} = \partial_x A_y - \partial_y A_x = B$.

1. Donner la dimension[2] de $\omega_c \stackrel{\text{def}}{=} \frac{eB}{m}$.
   A.N. : calculer $\hbar\omega_c$ (en eV) pour $B = 1$ T. Convertir cette énergie en Kelvin.
2. Montrer que $[\hat{v}_x, \hat{v}_y] = \mathrm{i}\frac{\hbar\omega_c}{m}$.
3. On introduit $\hat{v}_a(t) \stackrel{\text{def}}{=} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_L t/\hbar}\,\hat{v}_a\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_L t/\hbar}$ où $a \in \{x,\, y\}$. Donner les équations du mouvement de Heisenberg $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{v}_x(t) = ?$ et $\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\hat{v}_y(t) = ?$

B/ Conductivité pour un électron.– Nous introduisons un champ électrique homogène, décrit par la perturbation $\hat{H}_{\text{pert}}(t) = -e\mathcal{E}(t)\hat{x}$. L'invariance par translation du problème nous permet de considérer la densité de courant *moyennée* spatialement $\hat{\jmath}_y \stackrel{\text{def}}{=} \int \frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\text{Surf}}\hat{\jmath}_y(\vec{r}) = \frac{e}{\text{Surf}}\hat{v}_y$. La conductivité relie le champ électrique extérieur à la densité de courant :

$$\langle \hat{\jmath}_a(t) \rangle_{\mathcal{E}} = \int \mathrm{d}t' \sum_b \sigma_{ab}(t-t')\,\mathcal{E}_b(t') + O(\mathcal{E}^2) \tag{9}$$

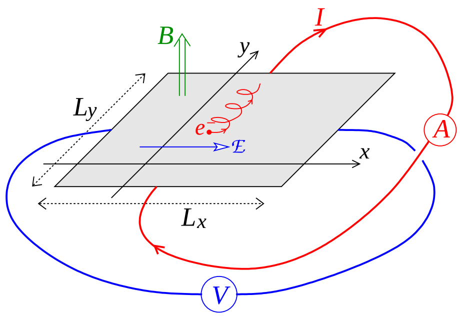
1. Exprimer $\sigma_{xx}(t)$ et $\sigma_{yx}(t)$ sous la forme de deux corrélateurs du problème à l'équilibre.
2. On écrit $\sigma_{xx}(t) = \frac{e^2}{\hbar\text{Surf}}\theta(t)\,X(t)$ et $\sigma_{yx}(t) = \frac{e^2}{\hbar\text{Surf}}\theta(t)\,Y(t)$. Calculer $\dot{X}(t)$ et $\dot{Y}(t)$. Préciser la valeur de $X(0)$ et $Y(0)$.
3. On introduit $Z(t) \stackrel{\text{def}}{=} X(t) + \mathrm{i}Y(t)$. Montrer que $Z(t) = \frac{\hbar}{m}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_c t}$. Déduire l'expression de $\sigma_{xx}(t)$ et $\sigma_{yx}(t)$. Expliquer physiquement la dépendance temporelle de ce résultat.

C/ Conductivité du gaz d'électrons.– Nous considérons maintenant un gaz de N électrons (les interactions entre électrons ne sont pas considérées).

1. Comment interprétez-vous que le résultat pour $\sigma_{ab}^{(1\text{ élec.})}(t)$ soit indépendant de la moyenne statistique/quantique ? Déduire la conductivité du gaz de N électrons (on note $n = N/\text{Surf}$ la densité surfacique moyenne d'électrons).
2. Calculer $\Sigma(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\sigma}_{xx}(\omega) + \mathrm{i}\tilde{\sigma}_{yx}(\omega)$. Commenter la structure analytique. Déduire la conductivité Hall du gaz $\sigma_H \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\sigma}_{xy}(\omega = 0) = -\tilde{\sigma}_{yx}(\omega = 0)$ (pour $B \neq 0$).
3. On rappelle que le spectre de Landau de l'Hamiltonien (8) est $E_n = \hbar\omega_c(n + 1/2)$, $n \in \mathbb{N}$ où chaque niveau de Landau est dégénéré $N_{LL} = \frac{eB\text{Surf}}{h}$ fois, où $h = 2\pi\hbar$. Exprimer la conductivité Hall en fonction du facteur de remplissage $\nu \stackrel{\text{def}}{=} \frac{N}{N_{LL}}$.
4. Relier la résistance Hall $R_H = V/I$ (V et I sont définis sur la figure 1 à la conductivité Hall. Donner la valeur numérique de h/e^2 en kΩ. Commenter la courbe expérimentale de la figure 1.

---

1. Il s'agit des électrons piégés à une interface de semiconducteurs GaAs/Ga$\text{Al}_x\text{As}_{1-x}$, par exemple.
2. Ne pas confondre "dimension" et "unité".



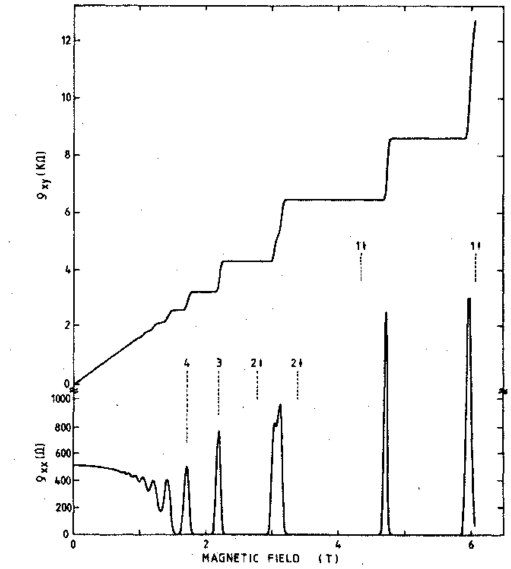


FIG. 14. Experimental curves for the Hall resistance $R_H = \rho_{xy}$ and the resistivity $\rho_{xx} \sim R_x$ of a heterostructure as a function of the magnetic field at a fixed carrier density corresponding to a gate voltage $V_g = 0$ V. The temperature is about 8 mK.

FIGURE 1 – À GAUCHE : *Gaz d'électrons bidimensionnel soumis à un champ magnétique perpendiculaire homogène et à un champ électrique longitudinal.* À DROITE : *Résistivité Hall et longitundinale d'un gaz d'électrons bidimensionnel.*

D/ Épilogue.– Le calcul que nous venons de faire, qui a montré que $\rho_{yx} \propto B$, ne permet pas d'expliquer la quantification mise en évidence expérimentalement. Pour cela nous devons invoquer la présence de désordre (impuretés, défauts structurels) expliquant la *localisation* d'une partie des états quantiques, et donc leur non-participation au transport électronique. L'effet remarquable est que, même si seule une fraction des N_{LL} états d'un niveau de Landau participe au transport, la contribution *totale* des N_{LL} états à la conductivité Hall est insensible à la présence du désordre. Pour davantage d'informations, on pourra aller lire la conférence Nobel de K. von Klitzing : `http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1985/klitzing-lecture.html`