TD n^{o}4 : Fonction de réponse et relation de Kramers-Kronig

Rappel : Soit $B(t)$ une quantité physique caractérisant la dynamique d'un système (il peut s'agir de la moyenne d'une observable quantique). Une perturbation est introduite sous la forme d'une "force" $f(t)$ extérieure se couplant à une autre observable A ; l'évolution de $B(t)$ peut être linéarisée :

$$B_f(t) = B_{f=0}(t) + \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t'\, \chi_{BA}(t-t') f(t') + O(f^2) \tag{1}$$

$\chi_{BA}(t)$ est la fonction de réponse impulsionnelle.

1 Oscillateur harmonique classique

1/ Oscillateur non amorti.– Un oscillateur harmonique forcé est décrit par $\ddot{x} + \omega_0^2 x = \frac{1}{m} f(t)$. Montrer que la fonction de réponse $\chi(t)$ de x à la force f est la fonction de Green de l'équation différentielle. Vérifier que la solution causale est $\chi(t) = \theta(t)\frac{\sin\omega_0 t}{m\omega_0}$. Calculer sa transformée de Fourier $\widetilde{\chi}(\omega)$ (à cette fin il est nécessaire d'introduire dans l'intégrale un régulateur $\mathrm{e}^{-\epsilon t}$ avec $\epsilon \to 0^+$). Tracer $\widetilde{\chi}(\omega)$.

2/ Oscillateur amorti.– On considère un oscillateur harmonique amorti, soumis à une force extérieure $f(t)$:

$$\ddot{x} + \frac{2}{\tau}\dot{x} + \omega_0^2 x = \frac{1}{m} f(t) \tag{2}$$

Calculer la transformée de Fourier $\widetilde{\chi}(\omega)$ de la fonction de réponse impulsionnelle. Représenter les pôles $\omega_\pm$ dans le plan complexe. Interpréter physiquement la position des pôles dans le plan complexe. Tracer $\mathrm{Re}\,\widetilde{\chi}(\omega)$ et $\mathrm{Im}\,\widetilde{\chi}(\omega)$ dans le régime de faible amortissement. Revenir sur la première question et interpréter physiquement le régulateur $\epsilon \to 0^+$.

3/ Oscillateur anharmonique.– On considère un oscillateur anharmonique classique décrit par l'équation du mouvement $\ddot{x} = F(x)$ où $F(x)$ dérive d'un potentiel confinant (par exemple $V(x) = \frac{1}{2}\omega^2 x^2 + \frac{1}{4}\lambda x^4$). Écrire l'équation différentielle satisfaite par la fonction de réponse décrivant la situation où l'oscillateur est forcé $\ddot{x} - F(x) = f(t)$. Discuter les différences avec la situation de l'oscillateur harmonique.

2 Relations de Kramers-Kronig

Soit $\chi(\omega)$ la transformée de Fourier d'une fonction de réponse causale, supposée de carré sommable : $\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega\, |\chi(\omega)|^2 < \infty$. On rappelle les relations de Kramers-Kronig :

$$\mathrm{Re}\,\chi(\omega) = \frac{1}{\pi} {\int\!\!\!\!\!\!-}_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega'\, \frac{\mathrm{Im}\,\chi(\omega')}{\omega' - \omega} \tag{3}$$

$$\mathrm{Im}\,\chi(\omega) = -\frac{1}{\pi} {\int\!\!\!\!\!\!-}_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega'\, \frac{\mathrm{Re}\,\chi(\omega')}{\omega' - \omega} \tag{4}$$

où on rappelle une définition de la partie principale $\mathcal{P}\frac{1}{x}$:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, f(x)\, \mathcal{P}\frac{1}{x} \equiv {\int\!\!\!\!\!\!-}_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, \frac{f(x)}{x} = \lim_{\epsilon \to 0^+} \left(\int_{-\infty}^{-\epsilon} + \int_{+\epsilon}^{+\infty} \right) \mathrm{d}x\, \frac{f(x)}{x} \tag{5}$$

1/ On donne $\operatorname{Im}\chi(\omega) = -\frac{1}{1+\omega^2}$. Déduire $\operatorname{Re}\chi(\omega)$ puis $\chi(\omega)$ (afin de calculer la transformée de Hilbert de $\operatorname{Im}\chi(\omega)$, on intégrera $f(z) = \frac{1}{(z-\omega)(1+z^2)}$ dans le plan complexe sur un contour fermé approprié).

2/ Même question pour $\operatorname{Im}\chi(\omega) = \frac{\gamma\omega}{(\omega_0^2-\omega^2)^2+\gamma^2\omega^2}$.

3 Obstacle en mouvement dans un superfluide

Nous étudions le problème du mouvement d'un obstacle dans un superfluide. La phase condensée de Bose est décrite par l'équation (de champ moyen) de Gross-Pitaevskii pour la fonction d'onde du condensat[1] $\psi(x,t)$

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\psi(x,t) = -\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x,t) + \left[U(x,t) + \epsilon(|\psi(x,t)|^2)\right]\psi(x,t) \tag{6}$$

où $\epsilon(|\psi|^2)$ décrit l'interaction entre bosons. ($\hbar = 1$). Nous traitons le problème en dimension $d = 1$ pour simplifier[2]. À l'équilibre $\psi_{\text{equil}}(x,t) = \sqrt{n_0}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu t}$ où la densité n_0 est reliée au potentiel chimique par $\mu = \epsilon(n_0)$. Nous nous intéressons aux faibles excitations

$$\psi(x,t) = \left[\sqrt{n_0} + \varphi(x,t)\right]\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mu t} \quad \text{avec } |\varphi| \ll \sqrt{n_0}\,. \tag{7}$$

On a donc $n(x,t) = n_0 + \delta n(x,t) \simeq n_0 + 2\sqrt{n_0}\,\operatorname{Re}[\varphi(x,t)]$.

A. Compressibilité

La réponse de la densité est reliée à la perturbation $U(x,t)$ via la compressibilité (en Fourier) $\delta\tilde{n}(q,\omega) = \tilde{\chi}(q,\omega)\,\tilde{U}(q,\omega)$.

1. Une petite perturbation $U(x,t)$ introduit une fluctuation $\varphi(x,t)$ autour de l'équilibre. Nous étudions la réponse $\varphi(x,t)$ à l'ordre le plus bas dans la perturbation. Vérifier que $\varphi(x,t)$ obéit à l'équation d'onde :

$$\mathrm{i}\partial_t\varphi = -\frac{1}{2m}\partial_x^2\varphi + \lambda\,(\varphi + \varphi^*) + \sqrt{n_0}\,U \tag{8}$$

   Donner l'expression du paramètre λ en terme de la vitesse du son c.

2. Résoudre ce système d'équations et déduire $\delta\tilde{n}(q,\omega) = \sqrt{n_0}[\tilde{\varphi}(q,\omega)+\tilde{\varphi}(-q,-\omega)^*]$. (Notons que $U \in \mathbb{R} \Rightarrow \tilde{U}(-q,-\omega)^* = \tilde{U}(q,\omega)$; le champ φ étant complexe il n'y a pas de propriété équivalente). Montrer que la fonction de réponse a la forme

$$\tilde{\chi}(q,\omega) = \frac{n_0}{m}\,\frac{q^2}{\omega^2 - \omega_B^2(q)} \tag{9}$$

   où l'on donnera l'expression du spectre de Bogoliubov $\omega_B(q)$.

3. Tracer le spectre de Bogoliubov. Discuter les limites de petit q et de grand q.

4. Discuter physiquement la structure de la fonction de réponse.

5. Comment modifier l'équation (9) pour satisfaire le principe de causalité ?

[1] Normalisé selon $\int \mathrm{d}x\,|\psi(x,t)|^2 = N$, où N est le nombre de bosons.

[2] Rappelons toutefois que la condensation de Bose n'existe pas en $d = 1$. Considérer $d > 1$ ne changerait pas fondamentalement notre analyse.

B. Analyse de la réponse du fluide

1. On considère un obstacle en mouvement, induisant la perturbation $U(x,t) = f(x - Vt)$ avec $V > 0$, où $f(x)$ est une fonction positive, rapidement décroissante, localisée autour de $x = 0$. La transformée de Fourier correspondante est $\tilde{U}(q,\omega) = 2\pi\delta(\omega - qV)\,\tilde{f}(q)$ où $\tilde{f}(q)$ est la TF de $f(x)$. Montrer que les fluctuations de densité sont de la forme $\delta n(x,t) = \Phi(x - Vt)$ où $\Phi = K * f$. Exprimer[3] $K(x)$ comme une intégrale.

2. **Cas $V < c$.–** Calculer explicitement $K(x)$. Donner une expression approchée du profil de densité $\delta n(x,t)$ en supposant que la fonction K est “étroite” comparativement au profil de $U(x,t)$. Dessiner l'allure de $n(x,t)$.

3. **Cas $V > c$.–** Calculer $K(x)$. Tracer l'allure de $n(x,t)$. Commenter.

4. Que laissent penser ces observations sur la dissipation dans les deux cas ?

4 Système à deux niveaux couplé à un système macroscopique

Considérons un système à deux niveaux (un atome, un spin, une boîte à paires de Cooper,...) couplé à un système macroscopique (supposé à l'équilibre thermodynamique) :

$$H = -\frac{\omega_0}{2}\,\sigma_z + H_{\mathrm{int}} + H_{\text{syst. macro.}} \tag{10}$$

la matrice de Pauli agit dans la base $\{|\,g\,\rangle, |\,e\,\rangle\}$. Nous notons $\{|\,\Phi_n\,\rangle\}$ une base d'états pour le système macroscopique. L'interaction entre les deux systèmes est choisie de la forme :

$$H_{\mathrm{int}} = -\sigma_x\, X \tag{11}$$

où X est une observable du système macroscopique.

1/ Calculer l'opérateur $\sigma_x(t)$ en représentation d'interaction (on introduira $\sigma_\pm \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sigma_x \pm \mathrm{i}\sigma_y$). En déduire l'élément de matrice de transition $\langle\, e\,|\sigma_x(t)|\,g\,\rangle$.

2/ On rappelle que l'opérateur d'évolution est

$$\mathcal{U}(t) = T\exp -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}\tau\, V_I(\tau) \tag{12}$$

où T est le produit chronologique. La perturbation en représentation d'interaction est $V_I(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t/\hbar} H_{\mathrm{int}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t/\hbar}$. Nous choisissons la condition initiale $|\,\psi(0)\,\rangle = |\,g\,\rangle \otimes |\,\Phi_n\,\rangle$. Calculer la probabilité de transition entre états du système à deux niveaux $|\,g\,\rangle \to |\,e\,\rangle$,

$$\mathcal{P}_{\mathrm{abs}}^{(\Phi_n)}(t) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sum_m \left|(\langle\, e\,| \otimes \langle\, \Phi_m\,|)|\,\psi(t)\,\rangle\right|^2\ , \tag{13}$$

à l'ordre le plus bas en H_{int}.

3/ On suppose le système macroscopique à l'équilibre thermodynamique. Montrer que le taux d'absorption

$$\Gamma_{\mathrm{abs}} = \sum_n P_n\, \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}_{\mathrm{abs}}^{(\Phi_n)}(t)}{\mathrm{d}t} \tag{14}$$

où P_n sont les poids statistiques, est relié à la transformée de Fourier de la fonction de corrélation non symétrisée $C_{XX}(t) = \langle X(t)X(0)\rangle$.

[3] En simplifiant, faire attention à $(x + \mathrm{i}0^+)^2 = x^2 + \mathrm{i}0^+\,\mathrm{sign}(x)$.

4/ Donner une relation similaire pour le taux d'émission Γ_{em} (taux de probabilité pour la transition $|\,e\,\rangle \to |\,g\,\rangle$). Commenter le sens de la relation de bilan détaillé

$$\widetilde{C}_{XX}(-\omega) = \widetilde{C}_{XX}(\omega)\,\mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega} \tag{15}$$

Cette discussion est inspirée d'un cours de Benoît Douçot et de l'article R. J. Schoelkopf, A. A. Clerk, S. M. Girvin, K. W. Lehnert and M. H. Devoret, *Qubits as spectrometers of quantum noise*, contribution to "Quantum Noise" (Yu. V. Nazarov and Ya. M. Blanter, eds.) (2002), preprint cond-mat/0210247.

5 Application du théorème de Wiener-Khintchine

On souhaite calculer la fonction de corrélation de la vitesse $C_{vv}(\tau)$ pour le processus décrit par l'équation de Langevin

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}v(t) = -\int \mathrm{d}t'\,\gamma(t-t')v(t') + F(t) \tag{16}$$

où $F(t)$ est la force de Langevin (un processus stationnaire corrélé à courte portée). La fonction $\gamma(t)$ décrit la friction avec un effet de mémoire.

1/ Montrer que

$$C_{vv}(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\frac{\widetilde{C}_{FF}(\omega)}{|\tilde{\gamma}(\omega)-\mathrm{i}\omega|^2}\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega\tau} \tag{17}$$

Par la suite on considère le cas où $\gamma(t) = \gamma\,\delta(t)$.

2/ Retrouver le résultat pour le mouvement brownien correspondant au choix $C_{FF}(\tau) = 2D\gamma^2\delta(\tau)$.

3/ On considère maintenant une force de Langevin corrélée $C_{FF}(t) = 2D\gamma^2\frac{1}{2\tau_c}\mathrm{e}^{-|t|/\tau_c}$ sur un temps $\tau_c \ll 1/\gamma$. Montrer que

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}{(\omega^2+a^2)(\omega^2+b^2)} = \frac{1}{2(b^2-a^2)}\left(\frac{1}{a}\mathrm{e}^{-a|t|}-\frac{1}{b}\mathrm{e}^{-b|t|}\right) \tag{18}$$

et en déduire $C_{vv}(t)$ dont on analysera soigneusement les comportements limites.

Question supplémentaire : L'hypothèse que $\gamma(t) = \gamma\,\delta(t)$ est-elle justifiée dans ce cas ? Si $\gamma(t)$ est de largeur τ_R, par un argument physique, donner la hiérarchie des trois temps caractérisant le problème : $1/\gamma$, τ_R et τ_c. Montrer que le calcul de la question ne serait pas affecté.

6 Coefficient de diffusion, mobilité, conductivité

On considère une particule dont la dynamique (classique) est gouvernée par une équation de Langevin. On suppose que les corrélations de la vitesse sont à courte portée.

1/ *Coefficient de diffusion.–* Justifier la relation :

$$D = \int_0^\infty \mathrm{d}t\,\langle v(t)\,v(0)\rangle \tag{19}$$

2/ *Mobilité.–* La particule est soumise à une force extérieure $F_{\mathrm{ext}}(t)$. On écrit $\langle v(t)\rangle_{F_{\mathrm{ext}}} = \langle v(t)\rangle_0 + \int \mathrm{d}t\,\chi(t-t')\,F_{\mathrm{ext}}(t')$. Identifier la fonction de réponse. La mobilité est définie comme $\mu \overset{\mathrm{def}}{=} \widetilde{\chi}(\omega=0)$, autrement dit $\langle v\rangle_{\omega=0} = \mu\,F_{\mathrm{ext}}$

3/ *Théorème fluctuation-dissipation (du premier type).–* En utilisant l'expression classique de la fonction de réponse $\chi_{BA}(t)$, qui sera démontrée plus tard dans le cours,

$$\chi_{BA}^{\mathrm{class}}(t) = -\theta(t)\,\beta\,\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle B(t)\,A\rangle\,, \tag{20}$$

où $\beta = 1/k_BT$. Déduire la relation entre D et μ.

4/ *Conductivité.–* Préciser la relation entre la conductivité σ et la mobilité.

7 Transport de particules browniennes (à supprimer ?)

On considère une particule de masse m. La dynamique de la particule est décrite par l'équation de Langevin :

$$\begin{aligned} \dot{x} &= v && (21) \\ m\dot{v} &= -\gamma\, v + F(t) && (22) \end{aligned}$$

On choisit $x(0) = 0$ et $v(0) = 0$. La force de Langevin $F(t)$ est nulle en moyenne et corrélée selon $\langle F(t)F(t')\rangle = \Gamma\delta(t-t')$.

1/ Justifier que $\Gamma \propto k_B T$.

2/ Par la suite on s'intéresse à la limite de forte friction. Autrement dit nous considérons la physique des temps $t \gg \tau \stackrel{\text{def}}{=} m/\gamma$.

3/ Justifier que les deux équations peuvent être ramenées à l'équation de Langevin

$$\dot{x} = \frac{1}{\gamma} F(t) \qquad (23)$$

Exprimer la constante de diffusion D.

4/ On ajoute une force extérieur déterministe $F_{\text{ext}}(t)$. Montrer que la fonction de réponse impulsionnelle est donnée par : $R(t) = \frac{1}{\gamma}\,\theta(t)$. En déduire $\tilde{R}(\omega)$.

5/ Mobilité.– Si la force extérieure est de nature électrique, $F_{\text{ext}}(t) = q\mathcal{E}(t)$, calculer la mobilité μ définie par $\langle v\rangle = \mu\mathcal{E}$.

6/ Conductivité à basse fréquence.– On considère une densité n de particules browniennes. La densité de courant est donnée par $j = nq\,\langle v\rangle$. Relier la conductivité $\sigma(\omega)$ à $\tilde{R}(\omega)$. Montrer qu'on retrouve la conductivité de Drude.

7/ À cause de l'approximation de la question **2**, le résultat de la question **6** n'est valable que dans la limite des basses fréquences $\omega\tau \ll 1$. En revenant aux équations pour v et x, donner l'expression de la conductivité.

8/ En introduisant un champ magnétique, calculer les conductivités σ_{xx} et σ_{xy} à fréquence nulle.