Parcours de Physique Quantique — 12 octobre 2009
Mécanique quantique 2 : Intégrale de chemin

TD n°6 : Équation de Langevin et équation de Fokker-Planck. Distribution des temps de premier passage. Application à l'étude de la localisation d'Anderson en $d = 1$

1 Équation de Fokker-Planck sur $\mathbb{R}^+$

Résoudre l'équation de Fokker-Planck libre (dans les notations de l'annexe $\alpha = 0$ et $\beta = 1$) sur $\mathbb{R}^+$ avec
a/ une condition de réflexion en $x = 0$
b/ une condition d'absorption en $x = 0$.
c/ Discuter la normalisation de $P(x, t|x_0, 0)$ dans les deux cas.

2 Persistence

On cherche à étudier la distribution du temps mis par un mouvement brownien sur $\mathbb{R}^+$ partant de x_0 pour atteindre l'origine $x = 0$ pour la première fois. Pour cela on considère la diffusion sur $\mathbb{R}^+$ avec une condition d'absorption en $x = 0$.

1/ Construire la solution de l'équation de diffusion libre, $(\frac{\partial}{\partial t} - \frac{1}{2}\frac{\partial^2}{\partial x^2})P(x, t|x_0, 0) = \delta(x-x_0)\delta(t)$, qui satisfait la condition $P(x = 0, t|x_0, 0) = 0$.

2/ Comment

$$S_{x_0}(t) = \int_0^\infty \mathrm{d}x\, P(x, t|x_0, 0) \tag{1}$$

est-elle reliée à la distribution $P_{x_0}(T)$ du temps T pour atteindre l'origine pour la première fois ? Calculer $S_{x_0}(t)$. (Utiliser l'annexe).

3/ Déduire l'expression de $P_{x_0}(T)$. Quel résultat le comportement à grand T vous rappelle-t-il ?

3 Loi d'Arrhenius

A. Distribution d'un temps de premier passage

On considère un processus décrit par l'équation différentielle stochastique[1] :

$$\mathrm{d}x(t) = F(x)\,\mathrm{d}t + \sqrt{2D}\,\mathrm{d}W(t) \tag{2}$$

avec $x(0) = x_0$. La force $F(x)$ dérive d'un potentiel $F(x) = -U'(x)$. $W(t)$ est un processus de Wiener. On rappelle que l'équation de Fokker-Planck correspondante est :

$$\partial_t p(x,t|x_0,0) = F_x\, p(x,t|x_0,0) \qquad \text{avec} \qquad F_x \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\partial^2}{\partial x^2} D - \frac{\partial}{\partial x} F(x) \tag{FFPE}$$

$$\partial_t p(x,t|x_0,0) = G_{x_0}\, p(x,t|x_0,0) \qquad \text{avec} \qquad G_x \stackrel{\text{def}}{=} D\frac{\partial^2}{\partial x^2} + F(x)\frac{\partial}{\partial x} \tag{BFPE}$$

On s'intéresse au temps T que met le processus pour atteindre *pour la première fois* $x = b$. Pour cela on impose une condition d'absorption en $x = b$:

$$p(b,t|x_0,0) = p(x,t|b,0) = 0 \tag{3}$$

D'autre part on impose une condition de réflexion en $x = a$:

$$[\partial_x - \frac{1}{D}F(x)]p(x,t|x_0,0)\big|_{x=a} = \partial_{x_0} p(x,t|x_0,0)\big|_{x_0=a} = 0 \tag{4}$$

On note $P_{x_0}(T)$ la distribution du temps T pour une condition initiale $x_0 \in [a,b[$.

1/ Comment $\int_a^b \mathrm{d}x\, p(x,t|x_0,0)$ est-il relié à la distribution $P_{x_0}(T)$?

2/ On note $T_n(x_0)$ le $n$ième moment de T. Déduire de la question précédente que les moments satisfont la relation de récurrence :

$$G_{x_0}\, T_n(x_0) = -n\, T_{n-1}(x_0) \tag{5}$$

3/ Quelles sont les conditions aux limites (en $x_0 = a$ et $x_0 = b$) pour $T_n(x_0)$?

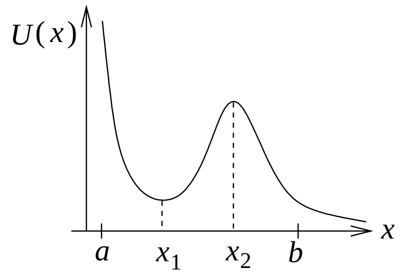
4/ On introduit $\psi_0(x) = \exp -\frac{1}{D}U(x)$. Quel est le sens physique de cette fonction ?

5/ Montrer que les moments satisfont :

$$T_n(x_0) = \frac{n}{D}\int_{x_0}^{b} \frac{\mathrm{d}x}{\psi_0(x)} \int_a^x \mathrm{d}x'\, \psi_0(x')\, T_{n-1}(x') \tag{6}$$

B. Loi d'Arrhenius

On s'intéresse au temps pendant lequel la particule diffusive est piégée par le minimum local du potentiel représenté sur la figure.
On note les dérivées secondes du potentiel : $\delta_1 \stackrel{\text{def}}{=} 1/\sqrt{U''(x_1)}$ et $\delta_2 \stackrel{\text{def}}{=} 1/\sqrt{-U''(x_2)}$. Le choix de la condition initiale n'a pas beaucoup d'importance. Il suffit de considérer que $x_0 < x_2$ et que x_0 ne soit pas trop proche de x_2 (on précisera ce critère).



[1]Dans la limite sur-amortie, la vitesse est proportionnelle à la force.

1/ Montrer que le temps moyen passé dans le puits de potentiel est, dans la limite $D \to 0$:

$$\boxed{\langle T\rangle \equiv T_1(x_0) \simeq 2\pi\,\delta_1\,\delta_2\,\exp\frac{U(x_2)-U(x_1)}{D}} \tag{7}$$

2/ Montrer que la distribution du temps est une loi de Poisson

$$\boxed{P_{x_0}(T) \simeq \frac{1}{\langle T\rangle}\exp-\frac{T}{\langle T\rangle}} \tag{8}$$

4 Singularité de Lifshitz

On considère l'hamiltonien de Schrödinger (avec $\hbar = 2m = 1$)

$$H = -\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x) \tag{9}$$

où $V(x)$ est un potentiel aléatoire distribué selon la mesure gaussienne $\mathcal{D}V\ \exp-\frac{1}{2w}\int \mathrm{d}x\,V(x)^2$.

1/ Rappeler quelles sont les fonctions de corrélation du potentiel.

2/ Avec notre choix d'unités, toute quantité physique a une dimension (longueur)^n. Quelle est la dimension d'une énergie ? Et celle de w ?

3/ Rappeler la densité d'états par unité de longueur pour $V(x) = 0$.

On souhaite étudier la densité d'états de cet hamiltonien. Pour cela on utilise la méthode du comptage des nœuds[2] : si on considère un état d'énergie E décrit par une fonction d'onde $\varphi(x)$, le nombre de nœuds de $\varphi(x)$ est égal au nombre d'états d'énergie inférieure à E. L'idée de la méthode consiste donc à remplacer le problème spectral (Sturm-Liouville), $H\varphi(x) = E\varphi(x)$ avec $\varphi(0) = \varphi(L) = 0$, par un problème de Cauchy : $H\psi(x;E) = E\psi(x;E)$ avec $\psi(0;E) = 0$ et $\psi'(0;E) = 1$ (dans ce cas une solution existe $\forall\ E$). Le comptage des nœuds de $\psi(x;E)$ nous donnera la densité d'états intégrée par unité de volume $N(E)$.

4/ Variable de Ricatti.– Donner l'équation à laquelle obéit la variable $z(x;E) = \psi'(x;E)/\psi(x;E)$. Si z joue le rôle de "position" et x le rôle de "temps", donner une interprétation physique de cette équation.

5/ Densité d'états intégrée.– Le "temps" ℓ mis par z pour aller de $z = +\infty$ à $z = -\infty$ donne l'inverse de $N(E)$. Montrer que pour $V(x) = 0$ on retrouve en effet la densité d'états intégrée $N_0(E)$ du problème libre.

6/ Singularité de basse énergie.– Montrer que dans la limite $E \to -\infty$ la densité d'états intégrée présente une singularité exponentielle[3] (on s'aidera du résultat de l'exercice **2**) :

$$N(E) \simeq \frac{\sqrt{-E}}{\pi}\,\exp-\frac{8(-E)^{3/2}}{3w}\,. \tag{10}$$

[2]Pour les hamiltoniens discrets (de liaison forte) cette approche porte le nom de "méthode de Dyson-Schmidt". On en trouvera une présentation claire et pédagogique dans le livre : J.-M. Luck, *Systèmes désordonnés unidimensionnels*, Aléa Saclay, 1992. On trouvera également une discussion plus générale des singularités de Lifshitz. La version continue de cette méthode porte le nom de "formalisme de phase". Il est développé dans l'ouvrage : I. M. Lifshits, S. A. Gredeskul & L. A. Pastur, *Introduction to the theory of disordered systems*, John Wiley & Sons, 1988 ; ou dans la référence : T. N. Antsygina, L. A. Pastur and V. A. Slyusarev, *Localization of states and kinetic properties of one-dimensional disordered systems*, Sov. J. Low Temp. Phys. **7**(1), 1 (1981).

[3]L'idée sur laquelle repose le présent exercice a été proposée par G. Jona-Lasinio, *Qualitative theory of stochastic differential equations and quantum mechanics of disordered systems*, Helv. Phys. Act. **56**, 61 (1983).

5 Distribution de l'énergie du fondamental

Cet exercice est une suite du précédent. Nous revenons au problème de Sturm-Liouville et souhaitons étudier la distribution de probabilité de l'énergie E_0 du fondamental de l'hamiltonien (9). Nous la notons[4] $\mathcal{P}_0(E) = \langle \delta(E - E_0[V(x)]) \rangle$.

1/ Nous avons introduit le "temps" ℓ mis par la variable de Ricatti pour aller de $z = +\infty$ à $z = -\infty$. On note $P(\ell)$ la densité de probabilité de ce "temps". Montrer que

$$\int_E^\infty \mathrm{d}E' \, \mathcal{P}_0(E') = \int_L^\infty \mathrm{d}\ell \, P(\ell) \tag{11}$$

2/ En utilisant l'image développée dans l'exercice précédent pour étudier la limite de basse énergie $E \to -\infty$, donner l'expression de $P(\ell)$. Déduire $\mathcal{P}_0(E)$.

3/ (*question facultative*) Dans la limite $L \to \infty$, en utilisant l'expression de $N(E)$ trouvée à l'exercice précédent, montrer que $\mathcal{P}_0(E)$ a son maximum en

$$E_0^{\mathrm{typ}} \simeq - \left(\frac{3w}{8} \ln(L w^{1/3}) \right)^{2/3} \tag{12}$$

On peut également montrer que la distribution se met sous la forme $\mathcal{P}_0(E) = \frac{1}{\Delta_0} \, \omega_0 \left(\frac{E - E_0^{\mathrm{typ}}}{\Delta_0} \right)$ avec $\Delta_0 \simeq \frac{w^{2/3}}{2} \left(3 \ln(L w^{1/3}) \right)^{-1/3}$. La distribution de la variable adimensionnée est une loi de Gumbel :

$$\omega_0(x) = \exp\left(x - \mathrm{e}^x \right) \tag{13}$$

[4] On trouvera le calcul de $\mathcal{P}_0(E)$ dans : H. P. McKean, *A Limit Law for the Ground State of Hill's Equation*, J. Stat. Phys. **74**(5/6), 1227 (1994).
La généralisation pour un niveau arbitraire est discutée dans : C. Texier, *Individual energy level distributions for one-dimensional diagonal and off-diagonal disorder*, J. Phys. A : Math. Gen. **33**, 6095 (2000), ou plus succintement dans A. Comtet, J. Desbois, and C. Texier, *Functionals of the Brownian motion, localization and metric graphs*, J. Phys. A : Math. Gen. **38**, R341 (2005).
Une étude similaire pour un modèle différent avait été proposée antérieurement dans : L. N. Grenkova, S. A. Molčanov and J. N. Sudarev, *On the Basic States of One-Dimensional Disordered Structures*, Commun. Math. Phys. **90**, 101 (1983).

6 Localisation d'Anderson

Nous avons vu que la densité d'états d'un hamiltonien désordonné présente une singularité (dite de Lifshitz) à basse énergie. Une conséquence beaucoup plus dramatique de la présence du potentiel désordonné est la localisation des fonctions d'onde. En l'absence de potentiel ($V = 0$) les fonctions d'onde sont des ondes planes délocalisées $\psi(x) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}kx}$. Nous allons montrer qu'en présence de désordre, elles sont amorties exponentiellement sur une échelle λ appelée *longueur de localisation.* À haute énergie on attend un comportement typique $\psi(x) \sim \cos(kx)\,\mathrm{e}^{-|x-x_0|/\lambda}$. Nous allons montrer que les fonctions d'onde présentent en effet ce type de comportement et trouver une expression de la longueur de localisation dans la limite de haute énergie ($\gg$ désordre). Pour cela nous allons suivre la même stratégie que dans l'exercice **3** et considérer le problème de Cauchy (autrement dit nous étudions les propriétés statistiques des solutions de l'équation différentielle $[-\frac{\mathrm{d}^2}{\mathrm{d}x^2} + V(x)]\psi(x) = E\psi(x)$ avec $\psi(0) = 0$ et $\psi'(0) = 1$ qui permettront de construire les fonctions d'onde).

1/ Enveloppe et phase.– Écrire l'équation de Schrödinger sous la forme de deux équations différentielles couplées du premier ordre. Nous procédons au changement de variables :

$$\psi(x) = \mathrm{e}^{\xi(x)} \sin\theta(x) \tag{14}$$

$$\psi'(x) = k\,\mathrm{e}^{\xi(x)} \cos\theta(x) \tag{15}$$

où $E = k^2$. Trouver les deux équations différentielles que satisfont les nouvelles variables $\theta(x)$ et $\xi(x)$.

2/ Quelle est la relation entre la densité d'états et la variable de phase ? Vérifier le résultat dans le cas où $V(x) = 0$.

3/ Longueur de localisation.– Justifier la définition de la longueur de localisation suivante :

$$\frac{1}{\lambda} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}\langle\xi(x)\rangle \tag{16}$$

4/ Limite de haute énergie.– Dans la limite de haute énergie ($E \gg w^{2/3}$), on admet que la phase θ est uniformément distribuée sur $[0, \pi]$. Déduire l'expression de λ (utiliser l'annexe).

Annexe :

- Soit l'équation différentielle stochastique[5] :

$$\mathrm{d}x = \alpha(x)\mathrm{d}t + \beta(x)\,\mathrm{d}W(t) \qquad \text{(Stratonovich)}\ , \tag{17}$$

où $\frac{\mathrm{d}W(t)}{\mathrm{d}t} = \eta(t)$ est un bruit blanc normalisé (*i.e.* $W(t)$ est un processus de Wiener). La distribution $P(x,t) = \langle\delta(x - x(t))\rangle$ obéit à l'équation de Fokker-Planck :

$$\frac{\partial P(x,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\partial}{\partial x}\alpha(x) + \frac{1}{2}\frac{\partial}{\partial x}\beta(x)\frac{\partial}{\partial x}\beta(x)\right) P(x,t) \tag{18}$$

On peut prouver que

$$\langle f(x(t))\,\eta(t)\rangle = \frac{1}{2}\langle\beta(x)\,f'(x)\rangle \tag{19}$$

- Fonction d'erreur :

$$\mathrm{erf}(x) = \frac{2}{\sqrt{\pi}}\int_0^x \mathrm{d}t\,\mathrm{e}^{-t^2} \tag{20}$$

comportement asymptotique :

$$\mathrm{erf}(x) \simeq 1 - \frac{\mathrm{e}^{-x^2}}{\sqrt{\pi}\,x} \qquad \text{pour } x \to \infty \tag{21}$$

[5] Lorsque $\eta(t)$ est un bruit blanc, le fait que le bruit apparaisse multiplié par une fonction du processus conduit à une ambiguïté dans la définition de l'équation différentielle stochastique (cette ambiguïté est liée au choix des corrélations à temps coïncidants entre $\eta(t)$ et $x(t)$). La situation que nous considérons ici correspond à la prescription dite "de Stratonovich", correspondant à la limite bruit blanc d'un bruit régularisé ($\langle\eta(t)\eta(t')\rangle$ fonction symétrique de largeur finie). Ce point est discuté dans l'excellent livre C. W. Gardiner, *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and the natural sciences*, Springer, 1989.