

TD n°3 : Approximation semiclassique et effet tunnel – Étude des singularités de Lifshitz par la méthode des répliques

1 Effet tunnel dans la limite semiclassique

1/ Préliminaires : fonctions de Green de l'équation de Schrödinger.– Nous considérons une particule dont la dynamique est décrite par l'hamiltonien $H = \frac{1}{2m}p^2 + V(q)$. Le propagateur (fonction de Green de l'équation de Schrödinger) $K(q, t | q_0, 0) = -\frac{i}{\hbar}\theta(t)\langle q | e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t} | q_0 \rangle$ peut être relié à la fonction de Green retardée de l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$G^R(q, q_0; E) = \int_{\mathbb{R}} dt e^{\frac{i}{\hbar}Et} K(q, t | q_0, 0) \quad (1)$$

En écrivant $K(q, t | q_0, 0)$ comme une intégrale de chemin, montrer que

$$G^R(q, q_0; E) \underset{\hbar \rightarrow 0}{\sim} \exp \pm \frac{i}{\hbar} \int_{q_0}^q dq' \pi(q') \quad \begin{cases} + & \text{si } q > q_0 \\ - & \text{si } q < q_0 \end{cases}, \quad \text{avec } \pi(q) \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{2m[E - V(q)]} \quad (2)$$

2/ Application : effet tunnel à travers une barrière.– On considère le potentiel défini sur \mathbb{R}^+ :

$$V(q) = \frac{1}{2}a q^2 - \frac{1}{8}b q^4 \quad \text{avec } a, b \in \mathbb{R}^+ \quad (3)$$

Calculer $G^R(q_s, 0; E \rightarrow 0)$ dans la limite $\hbar \rightarrow 0$, où q_s est le point de sortie de la barrière.

2 Méthode des répliques – Singularités de Lifshitz de la DoS

Densité d'états.– Nous étudions les propriétés spectrales d'un Hamiltonien de Schrödinger unidimensionnel avec potentiel aléatoire (nous faisons $\hbar = 2m = 1$) :

$$H = -\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \quad (4)$$

agissant sur des fonctions définies sur l'intervalle $[-L/2, +L/2]$ et satisfaisant des conditions de Dirichlet $\phi(-L/2) = \phi(+L/2) = 0$. À chaque réalisation du potentiel est associé un spectre de valeurs propres $\{E_n\}$ dont la distribution est caractérisée par la *densité d'états*

$$\rho(E) \stackrel{\text{def}}{=} \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \sum_n \delta(E - E_n) = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L} \int_{-L/2}^{+L/2} dx \langle x | \delta(E - H) | x \rangle \quad (5)$$

L'intégrale de chemin va nous permettre d'en analyser le comportement de basse énergie, $E \rightarrow -\infty$.

1/ Densité d'états et fonction de Green.– Nous introduisons

$$G^R(x, x'; E) \stackrel{\text{def}}{=} \langle x | \frac{1}{E^* - H} | x' \rangle \quad \text{avec } E^* = E + i0^+ \quad (6)$$

Supposant le problème invariant par translation, vérifier que $\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im } G^R(x, x; E)$.

2/ Nous considérons la situation où le potentiel $V(x)$ est un bruit blanc gaussien, *i.e.* il est distribué selon la mesure

$$P[V]\mathcal{D}V(x) \propto \mathcal{D}V(x) \exp -\frac{1}{2w} \int dx V(x)^2. \quad (7)$$

Nous notons $\overline{\cdots}$ la moyenne associée à cette mesure.

a) Calculer la fonctionnelle caractéristique du potentiel : $\mathcal{G}[b] \stackrel{\text{def}}{=} \overline{\exp \int dx V(x)b(x)}$.

b) Analyse dimensionnelle.– Donner la dimension de w .

c) On peut écrire la densité d'états comme $\rho(E) = w^a f(w^b E)$ où $f(x)$ est sans dimension. En utilisant l'analyse dimensionnelle, préciser les valeurs de a et b . À l'aide d'arguments physiques, discuter $\rho(E \rightarrow \pm\infty)$. Comment $\rho(0)$ dépend-t-il du désordre ?

3/ Méthode des répliques.– Une des difficultés du calcul de $\overline{G^R(x, x; E)}$ tient à ce que la variable aléatoire (le potentiel) apparaît au dénominateur. Pour contourner ce problème nous utilisons la méthode des répliques dont l'essence se comprend comme suit. Soit $A \in \mathbb{C}$ avec $\text{Re}(A) \geq 0$:

$$\frac{1}{n} \int_{\mathbb{R}^n} d\vec{\phi} \vec{\phi}^2 e^{-\frac{1}{2}A\vec{\phi}^2} = \frac{1}{A} \left(\frac{2\pi}{A} \right)^{n/2} \quad (8)$$

Si on admet qu'il est licite de prolonger ce résultat pour des n réels, on peut écrire :

$$\frac{1}{A} = \lim_{n \rightarrow 0^+} \frac{1}{n} \int_{\mathbb{R}^n} d\vec{\phi} \vec{\phi}^2 e^{-\frac{1}{2}A\vec{\phi}^2} \quad (9)$$

L'intérêt de ce "truc" est qu'il est en général plus facile de calculer $\overline{e^{-pA}}$ que $\overline{1/A}$. Nous allons appliquer cette idée au calcul de $\overline{G^R(x, x; E)}$.

a) Soit \mathcal{O}_x un opérateur agissant sur des fonctions $\phi(x)$. Exprimer (formellement)

$$\int \mathcal{D}\phi(x) e^{-\frac{1}{2} \int dx \phi(x) \mathcal{O}_x \phi(x)} \quad \text{et} \quad \int \mathcal{D}\phi(x) \phi(x) \phi(x') e^{-\frac{1}{2} \int dx \phi(x) \mathcal{O}_x \phi(x)} \quad (10)$$

Que devient l'intégrale si le champ est "répliqué" n fois $\phi(x) \rightarrow \vec{\phi}(x)$? Exprimer

$$\frac{1}{n} \int \mathcal{D}\vec{\phi}(x) \vec{\phi}(x) \cdot \vec{\phi}(x') e^{-\frac{1}{2} \int dx \vec{\phi}(x) \mathcal{O}_x \vec{\phi}(x)} \quad (11)$$

Indication : On introduira la notation $\mathcal{O}_x \langle x | \mathcal{O}^{-1} | x' \rangle = \delta(x - x')$.

b) Exprimer $-G^R(x, x'; E)$ comme une intégrale de chemin sur un champ $\vec{\phi}(x)$ à n composantes.

c) Montrer qu'après moyenne sur le potentiel aléatoire on obtient :

$$\overline{G^R(x, x; E)} = - \lim_{n \rightarrow 0^+} \frac{2}{n} \frac{\partial}{\partial E} \int_{\vec{\phi}(-L/2)=\vec{0}}^{\vec{\phi}(+L/2)=\vec{0}} \mathcal{D}\vec{\phi}(x) e^{-S[\vec{\phi}(x)]} \quad (12)$$

$$\text{où } S[\vec{\phi}(x)] = \frac{1}{2} \int_{-L/2}^{+L/2} dx \left[(\partial_x \vec{\phi})^2 - E^* \vec{\phi}^2 - \frac{w}{4} (\vec{\phi}^2)^2 \right] \quad (13)$$

4/ Analyse semiclassique.– On admet que dans la limite $E \rightarrow -\infty$ l'intégrale de chemin est dominée par la contribution des trajectoires classiques *symétriques dans l'espace des répliques* : $\vec{\phi}(x) = \vec{u} \phi(x)$ où \vec{u} est un vecteur unitaire quelconque de \mathbb{R}^n .

a) La densité hamiltonienne associée à l'action S est de la forme $\mathcal{H}(\vec{\pi}, \vec{\phi}) = -\frac{1}{2} \vec{\pi}^2 + \mathcal{V}(\|\vec{\phi}\|)$. Tracer l'énergie potentielle $\mathcal{V}(\|\vec{\phi}\|)$ en fonction de $\|\vec{\phi}\|$ (on oubliera le $i0^+$).

b) Justifier que dans la limite $L \rightarrow \infty$ la trajectoire classique dominant l'intégrale de chemin $\int \mathcal{D}\vec{\phi}(x) e^{-S}$ est la trajectoire d'énergie nulle $\mathcal{H} = 0$ faisant un aller retour entre l'origine $\vec{\phi} = 0$ et point de rebroussement (i.e. un point $\vec{\phi} = \phi_c \vec{u}$ tel que $\mathcal{V}(\phi_c) = 0$).

c) Montrer que l'action d'une telle trajectoire est donnée par

$$S_0 = 2 \int_0^{\phi_c} d\phi \sqrt{2\mathcal{V}(\phi)} \quad (14)$$

Calculer explicitement l'action S_0 .

d) En admettant que l'argument donne le comportement de $\text{Im} \overline{G^R(x, x; E)}$, déduire $\rho(E \rightarrow -\infty)$.

5/ (Facultatif) Modèle de Frisch & Lloyd.— On considère un autre modèle désordonné : $V(x) = \lambda \sum_n \delta(x - x_n)$ où les positions x_n sont décorréelées et distribuées uniformément avec une densité ϱ . On s'intéresse au cas $\lambda > 0$ (i.e. $\text{Spec} \left[-\frac{d^2}{dx^2} + V(x) \right] \subset \mathbb{R}^+$)

a) Rappeler la fonctionnelle caractéristique (TD n°1) $\mathcal{G}[b] \stackrel{\text{def}}{=} \overline{\exp \int dx V(x) b(x)}$.

b) En suivant la même démarche que précédemment montrer qu'on doit calculer (12) pour l'action

$$S[\vec{\phi}(x)] = \frac{1}{2} \int_{-L/2}^{+L/2} dx \left[(\partial_x \vec{\phi})^2 - E^* \vec{\phi}^2 + \varrho \left(1 - e^{-\frac{\lambda}{2} \vec{\phi}^2} \right) \right] \quad (15)$$

c) Vérifier que la limite $\varrho \rightarrow \infty$ et $\lambda \rightarrow 0$ correspond au cas où $V(x)$ est un bruit blanc gaussien.

d) On étudie la limite $\sqrt{E} \ll \varrho \ll \lambda$. Montrer que l'action de la trajectoire classique dominant l'intégrale de chemin pour $E \rightarrow 0^+$ est $S_0 \simeq \pi \varrho / \sqrt{E}$. Déduire $\rho(E \rightarrow -\infty)$.

Annexe :

- Nous considérons la densité lagrangienne $\mathcal{L}(\phi, \dot{\phi}) = \frac{1}{2} \dot{\phi}^2 + \mathcal{V}(\phi)$ en “temps” euclidien (dans le problème, x joue le rôle du “temps” et ϕ de “position”). Le moment conjugué est défini comme : $\pi = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \dot{\phi}}$. La densité hamiltonienne (intégrale première du mouvement), fonction des variables canoniquement conjuguées, est donnée par

$$\mathcal{H}(\pi, \phi) = -\pi \dot{\phi} + \mathcal{L} = -\frac{1}{2} \pi^2 + \mathcal{V}(\phi) \quad (16)$$

- Deux intégrales ¹ : $\int_0^1 dx \sqrt{1-x^2} = \frac{\pi}{4}$ et $\int_0^1 dx x \sqrt{1-x^2} = \frac{1}{3}$

Pour en savoir plus :

- Cette analyse peut être poussée pour obtenir $\rho(E) \forall E$, cf. chapitre X de : C. Itzykson & J.-M. Drouffe, *Théorie statistique des champs*, Vol. 2, Éd. CNRS.
- L'expression exacte de la densité d'états a été obtenue par une autre méthode par B. Halperin dans : *Green's functions for a particle in a one-dimensional random potential*, Phys. Rev. **139** (1965) A104.
- La singularité de Lifshitz pour le modèle d'impuretés localisées en dimension d quelconque a été analysée par la une méthode fonctionnelle par R. Friedberg and J. M. Luttinger dans *Density of electronic energy levels in disordered systems*, Phys. Rev. B **12** (1975) 4460.

¹ données par exemple en les reliant à la fonction β d'Euler $B(\mu, \nu) = \frac{\Gamma(\mu)\Gamma(\nu)}{\Gamma(\mu+\nu)} = \int_0^1 dt t^{\mu-1} (1-t)^{\nu-1}$.