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

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

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

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

2/ Pouvez-vous justifier (brièvement) que le problème est périodique en fonction du flux, i.e. que la physique est inchangée si $\phi \rightarrow \phi + \phi_0$. **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 $L = 5 \mu\text{m}$?

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 $L_\varphi \sim 1 \mu\text{m}$ à $T = 1 \text{ K}$). 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 $A_{\text{ext}}(t) = -\int^t dt' \mathcal{E}(t')$. L'hamiltonien de perturbation est donc de la forme

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

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

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

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

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

$$\tilde{K}(\omega) = - \sum_{\alpha, \beta} (f_\alpha - f_\beta) \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\hbar\omega + \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta + i0^+} \quad \text{où} \quad v_{\alpha\beta} \stackrel{\text{def}}{=} \langle \varphi_\alpha | \hat{v} | \varphi_\beta \rangle. \quad (5)$$

$\tilde{K}(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \int dt e^{i\omega t} K(t)$ 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 $\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = \text{tr}\{f(\hat{h})[\hat{a}, \hat{b}]\} = \sum_{\alpha, \beta} (f_\alpha - f_\beta) (\hat{a})_{\alpha\beta} (\hat{b})_{\beta\alpha}$ 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

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

Montrer que

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

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/ Dédurre la règle de somme- f dans l'anneau

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

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

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

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

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

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

Indication : Si on applique un flux variant très lentement au cours du temps, $\phi \rightarrow \phi + \delta\phi_\omega e^{-i\omega t}$ avec $\omega \rightarrow 0$, 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 $\epsilon_\alpha(\phi + \delta\phi) = \epsilon_\alpha(\phi) + \delta\phi \partial_\phi \epsilon_\alpha(\phi) + \frac{1}{2} \delta\phi^2 \partial_\phi^2 \epsilon_\alpha(\phi) + \dots$