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 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

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} v(t) = -\int \mathrm{d}t'\, \gamma(t-t') v(t') + F(t) \tag{2}$$

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

$$C_{vv}(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \frac{\widetilde{C}_{FF}(\omega)}{|\tilde{\gamma}(\omega) - \mathrm{i}\omega|^2} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega\tau} \tag{3}$$

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

$$\int_{\mathbb{R}} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \frac{\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t}}{(\omega^2+a^2)(\omega^2+b^2)} = \frac{1}{2(b^2-a^2)} \left(\frac{1}{a}\mathrm{e}^{-a|t|} - \frac{1}{b}\mathrm{e}^{-b|t|} \right) \tag{4}$$

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.

2 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 $f(t)$:

$$\ddot{x} + \frac{2}{\tau}\dot{x} + \omega_0^2 x = \frac{1}{m} f(t) \tag{5}$$

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.

3 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 :

$$D = \int_0^{\infty} \mathrm{d}t\, \langle v(t)\, v(0) \rangle \tag{6}$$

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 $\mu \stackrel{\mathrm{def}}{=} \widetilde{\chi}(\omega = 0)$, 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,

$$\chi_{BA}^{\mathrm{class}}(t) = -\theta(t)\, \beta\, \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} \langle B(t)\, A \rangle\,, \tag{7}$$

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

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

4 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 :

$$\mathrm{Re}\,\chi(\omega) = \frac{1}{\pi} ⨍_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega'\, \frac{\mathrm{Im}\,\chi(\omega')}{\omega' - \omega} \tag{8}$$

$$\mathrm{Im}\,\chi(\omega) = -\frac{1}{\pi} ⨍_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega'\, \frac{\mathrm{Re}\,\chi(\omega')}{\omega' - \omega} \tag{9}$$

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

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, f(x)\, \mathcal{P}\frac{1}{x} \equiv ⨍_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x\, \frac{f(x)}{x} = \lim_{\epsilon \to 0^+} \left(\int_{-\infty}^{-\epsilon} + \int_{+\epsilon}^{+\infty} \right) \mathrm{d}x\, \frac{f(x)}{x} \tag{10}$$

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

5 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) :

$$H = -\frac{\omega_0}{2}\,\sigma_z + H_{\mathrm{int}} + H_{\text{syst. macro.}} \tag{11}$$

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 :

$$H_{\mathrm{int}} = -\sigma_x\, X \tag{12}$$

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

$$\mathcal{U}(t) = T\exp -\frac{\mathrm{i}}{\hbar}\int_0^t \mathrm{d}\tau\, V_I(\tau) \tag{13}$$

où T est le produit chronologique. La perturbation en représentation d'interaction est $V_I(t) = \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t} H_{\mathrm{int}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t}$. 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 $|\,g\,\rangle \to |\,e\,\rangle$,

$$\mathcal{P}^{(n)}_{\mathrm{abs}}(t) \stackrel{\mathrm{def}}{=} \sum_m |(\langle\, e\,| \otimes \langle\, \Phi_m\,|)|\,\psi(t)\,\rangle|^2 \ , \tag{14}$$

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

$$\Gamma_{\mathrm{abs}} = \sum_n P_n \frac{\mathrm{d}\mathcal{P}^{(n)}_{\mathrm{abs}}(t)}{\mathrm{d}t} \tag{15}$$

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

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

$$\widetilde{C}_{XX}(-\omega) = \widetilde{C}_{XX}(\omega)\,\mathrm{e}^{-\beta\hbar\omega} \tag{16}$$

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.

6 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 :

$$\begin{aligned} \dot{x} &= v && (17) \\ m\dot{v} &= -\gamma\, v + F(t) && (18) \end{aligned}$$

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

$$\dot{x} = \frac{1}{\gamma} F(t) \qquad (19)$$

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.