Initiation à la matière quantique (ARTeQ)
16/12/2022

Jacqueline Bloch, jacqueline.bloch@c2n.upsaclay.fr ; Mark Goerbig, goerbig@universite-paris-saclay.fr

Particule soumise à une force extérieure dans un réseau périodique : vitesse anomale.

On s'intéresse au mouvement d'une particule de masse m dans un réseau carré périodique de période a et soumis à une force uniforme dépendant éventuellement du temps F_t et orientée selon axe x.

Nous allons étudier dans quelles conditions il est possible d'observer un flux de particules le long de l'axe y, situation analogue à l'effet Hall quantique.

1 Première équation du mouvement

1. Écrire l'Hamiltonien du système. Pourquoi les états propres de $\hat{H}$ ne peuvent s'écrire sous la forme d'états de Bloch.
2. Le Hamiltonien d'une particule chargée soumise à une force électromagnétique est :

$$\hat{H}_{\text{em}} = \frac{(\vec{p} - q\vec{A})^2}{2m} + q\phi(\vec{r})$$

Il est alors possible de définir une nouvelle jauge par les formules ci-dessous :

$$\vec{A} \to \vec{A}' = \vec{A} - \boldsymbol{\nabla}\chi$$
$$\phi \to \phi' = \phi + \frac{\mathrm{d}\chi}{\mathrm{d}t}$$
$$|\psi\rangle \to |\psi'\rangle = e^{-iq\chi(\hat{\vec{r}})/\hbar}\,|\psi\rangle$$

Montrer, par analogie, que l'on peut faire une transformation de jauge sur $\hat{H}$ pour se ramener à un Hamiltonien périodique $\hat{H}'$. Calculer ce Hamiltonien.

3. À $t = 0$, on prépare le système dans l'état de Bloch d'impulsion q_0. Montrer que $|\psi'(t)\rangle$ reste un état de Bloch de même impulsion quelque soit t.

On peut donc écrire $|\psi'(t)\rangle = e^{i\vec{q}_0\cdot\hat{\vec{r}}}\,|u_t\rangle$ avec $|u_t\rangle$ une fonction d'onde périodique.

4. En déduire que l'état $|\psi(t)\rangle$ est un état de Bloch d'impulsion $q(t)$ où $q(t)$ vérifie $\hbar\frac{\mathrm{d}\vec{q}}{\mathrm{d}t} = \vec{F}_t$. Ceci constitue une première équation du mouvement. Pourquoi parle-t-on d'oscillations de Bloch ?

2 Seconde équation du mouvement : vitesse anomale

Nous allons maintenant calculer la vitesse moyenne de la particule au cours du temps, c'est-à-dire la moyenne de l'opérateur $\hat{v} = \frac{1}{m}\hat{p}$. On prépare à $t = 0$ le système dans la bande fondamentale avec l'impulsion q_0.

5. Montrer que la dynamique de $|u_t\rangle$ est régie par un Hamiltonien $\hat{H}_{\vec{q}}$ avec $\vec{q} = \vec{q}_0 - \frac{\vec{A}_t}{\hbar}$.

Ordre 0 : approximation adiabatique Notons $\left|u_q^{(n)}\right\rangle$ les états propres et $E_q^{(n)}$ les énergies propres du Hamiltonien $\hat{H}_q$.

6. En dérivant par rapport à q l'équation $\left\langle u_q^{(0)}\middle|\hat{H}_q\middle|u_q^{(n)}\right\rangle = E_q^{(n)}\delta_{n0}$, montrer que :

$$\left\langle u_q^{(0)}\middle|\frac{\hbar}{m}(\hat{p}+\hbar q)\middle|u_q^{(n)}\right\rangle + \left(E_q^{(n)} - E_q^{(0)}\right)\left\langle \nabla_q u_q^{(0)}\middle|u_q^{(n)}\right\rangle = \delta_{n0}\boldsymbol{\nabla}_q E_q^{(n)}$$

7. En déduire l'expression de la vitesse dans l'approximation adiabatique.

Ordre suivant : vitesse anomale On admet que le développement à l'ordre 1 de la partie périodique de la fonction d'onde est :

$$|u_t\rangle = \left|u_{q(t)}^{(0)}\right\rangle + i\hbar\sum_{n\neq 0}\left|u_{q(t)}^{(n)}\right\rangle \frac{\left\langle u_{q(t)}^{(n)}\middle|\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\middle|u_{q(t)}^{(0)}\right\rangle}{E_{q(t)}^{(n)} - E_{q(t)}^{(0)}}$$

8. Calculer la vitesse moyenne $\langle v_x\rangle$ selon la direction de la force.
9. Calculer la vitesse moyenne $\langle v_y\rangle$ orthogonale à la direction de la force. L'exprimer en fonction de la courbure de Berry dont l'expression est donnée ci-dessous.

   On appelle cette vitesse la vitesse anomale.

Indication : La courbure de Berry est ici $\vec{\Omega}_q = \Omega_q\vec{e}_z$ avec :

$$\Omega_q = i\left[\left\langle \partial_{q_x}u_{q(t)}^{(0)}\middle|\partial_{q_y}u_{q(t)}^{(0)}\right\rangle - \left\langle \partial_{q_y}u_{q(t)}^{(0)}\middle|\partial_{q_x}u_{q(t)}^{(0)}\right\rangle\right]$$