Onde de matière dans un potentiel désordonné à 1D

M2 de physique quantique 2004-2005

Examen de mécanique quantique I

Y. Castin et A. Minguzzi

On considère une particule quantique sans spin de masse m se déplaçant dans un espace à une dimension en présence d'un potentiel extérieur $V(x)$, où x est la coordonnée spatiale de la particule. Ce potentiel est constitué d'une somme de N pics de Dirac d'amplitude commune positive, $g \geq 0$, et de positions deux à deux distinctes x_j, $1 \leq j \leq N$, si bien que

$$V(x) = g \sum_{j=1}^{N} \delta(x - x_j) \tag{1}$$

où δ est la distribution delta de Dirac. Le potentiel $V(x)$ est désordonné en ce sens que les positions x_j des centres diffuseurs sont des variables aléatoires, tirées suivant une certaine distribution de probabilité. On suppose que ces variables aléatoires respectent l'ordre croissant :

$$x_1 < \ldots < x_N. \tag{2}$$

L'objectif du problème est de calculer les éléments de matrice, dans l'espace des positions, de la résolvante $G(z)$ du Hamiltonien, et de s'en servir pour construire des états stationnaires de fonctions d'onde particulièrement intéressantes.

Il est conseillé de traiter les questions et les parties dans leur ordre d'apparition.

1 La résolvante du Hamiltonien libre

Le Hamiltonien de la particule libre à une dimension se réduit à l'énergie cinétique, $H_0 = p^2/2m$. On note $G_0(z) = (z - H_0)^{-1}$ la résolvante du Hamiltonien libre.

a) Dans cette définition de $G_0(z)$, préciser le domaine de variation du nombre complexe z. Quelles sont les singularités de G_0 attendues dans le plan complexe ?

b) On introduit la base continue des états parfaitement localisés $|x\rangle$ dans l'espace des positions. On souhaite calculer $\langle x|G_0(z)|x'\rangle$. Pourquoi peut-on se ramener au calcul de

$$\psi_0(x) \equiv \langle x|G_0(z)|0\rangle, \tag{3}$$

où $|0\rangle$ est l'état parfaitement localisé en l'origine des coordonnées ?

c) Montrer que $\psi_0(x)$ obéit à l'équation différentielle

$$z\,\psi_0(x) + \frac{\hbar^2}{2m}\psi_0''(x) = \delta(x). \tag{4}$$

d) On pose $z = \hbar^2 k_c^2/2m$ et l'on impose que la partie imaginaire de k_c soit positive. Montrer que ceci détermine k_c en fonction de z de façon unique.

e) En résolvant l'équation (4) sur le domaine $x < 0$, et en utilisant une condition aux limites en $x = -\infty$ que l'on précisera, déterminer $\psi_0(x)$ pour $x < 0$ en terme de k_c et à un paramètre inconnu près. Faire de même pour le domaine $x > 0$.

f) En intégrant formellement sur x l'équation (4) sur un intervalle arbitrairement petit autour de $x = 0$, conclure que $\psi_0(x)$ est continue en $x = 0$, mais a une dérivée discontinue :

$$\psi_0'(0^+) - \psi_0'(0^-) = \frac{2m}{\hbar^2}. \tag{5}$$

g) En déduire la valeur explicite de $\psi_0(x)$ pour tout x. On pourra introduire la fonction $|x|$.

h) Sans y passer trop de temps, vérifier sur la formule explicite la présence des singularités attendues à la question 1a.

2 La résolvante du Hamiltonien complet

On considère maintenant le Hamiltonien complet $H = H_0 + V(x)$ où le potentiel $V(x)$ est celui de l'équation (1). On introduit la résolvante du Hamiltonien complet, $G(z) = (z - H)^{-1}$. L'objectif de cette partie est de calculer l'élément de matrice suivant :

$$\psi(x) \equiv \langle x|G(z)|0\rangle \tag{6}$$

en fonction de x. Comme dans la question 1d, on exprime z en fonction de k_c de partie imaginaire positive. Pour simplifier, on suppose que toutes les positions des centres diffuseurs sont différentes de zéro, les s premières positions étant strictement négatives, et les $N-s$ dernières étant strictement positives :

$$\begin{aligned} x_1, \ldots, x_s &< 0 \\ x_{s+1}, \ldots, x_N &> 0. \end{aligned} \tag{7}$$

On va utiliser le formalisme des matrices de passage, qui permet de décrire par une matrice complexe deux par deux les propriétés de diffusion à une énergie donnée d'un centre diffuseur, ou même d'un ensemble de centres diffuseurs en nombre quelconque. On construira donc deux matrices de ce type, l'une pour les s centres à gauche ($x < 0$) et l'autre pour les $N-s$ centres à droite ($x > 0$).

a) Montrer que la fonction $\psi(x)$ est solution de l'équation différentielle

$$k_c^2\,\psi(x) + \psi''(x) = \frac{2m}{\hbar^2}\left[\delta(x) + g\sum_{j=1}^{N} \delta(x-x_j)\,\psi(x_j)\right], \tag{8}$$

avec des conditions aux limites en $x = \pm\infty$ que l'on précisera.

b) Montrer que sur tout intervalle ne contenant aucun centre diffuseur et ne contenant pas $x = 0$, $\psi(x)$ est la somme d'au plus deux fonctions exponentielles. On introduit donc les notations suivantes :

$$\begin{array}{ccl} x \le x_1 & : & \psi(x) = A_0^+ e^{ik_c x} + A_0^- e^{-ik_c x} \\ x_j \le x \le x_{j+1}, j = 1, \ldots, s-1 & : & \psi(x) = A_j^+ e^{ik_c x} + A_j^- e^{-ik_c x} \\ x_s \le x \le 0 & : & \psi(x) = A_s^+ e^{ik_c x} + A_s^- e^{-ik_c x} \\ 0 \le x \le x_{s+1} & : & \psi(x) = B_s^+ e^{ik_c x} + B_s^- e^{-ik_c x} \\ x_j \le x \le x_{j+1}, j = s+1, \ldots, N-1 & : & \psi(x) = B_j^+ e^{ik_c x} + B_j^- e^{-ik_c x} \\ x_N \le x & : & \psi(x) = B_N^+ e^{ik_c x} + B_N^- e^{-ik_c x} \end{array} \tag{9}$$

c) Montrer que $A_0^+ = 0$ et $B_N^- = 0$.

d) En intégrant sur x l'équation différentielle satisfaite par $\psi(x)$ sur un intervalle infiniment petit autour de x_j, $1 \le j \le N$, vérifier que $\psi(x)$ est continue en x_j mais que sa dérivée présente une discontinuité que l'on donnera en fonction de $\psi(x_j)$, m, g et $\hbar$.

e) En déduire que les coefficients d'indice j se déduisent des coefficients d'indice $j-1$, $j = 1, \ldots, N$, par l'action d'une matrice deux par deux, notée P_j et que l'on appelle matrice de passage. Pour $j = 1, \ldots, s$ on a donc

$$\begin{pmatrix} A_j^+ \\ A_j^- \end{pmatrix} = P_j \begin{pmatrix} A_{j-1}^+ \\ A_{j-1}^- \end{pmatrix}, \tag{10}$$

et pour $j = s+1, \ldots, N$, on a

$$\begin{pmatrix} B_j^+ \\ B_j^- \end{pmatrix} = P_j \begin{pmatrix} B_{j-1}^+ \\ B_{j-1}^- \end{pmatrix}. \tag{11}$$

Par un calcul explicite, montrer que

$$P_j = \begin{pmatrix} 1 - i\gamma & -i\gamma\, e^{-2ik_c x_j} \\ i\gamma\, e^{2ik_c x_j} & 1 + i\gamma \end{pmatrix} \tag{12}$$

avec $\gamma = mg/(\hbar^2 k_c)$.

f) Montrer que l'on peut associer à l'ensemble des s premiers centres diffuseurs la matrice de passage de la gauche ($x = -\infty$) vers la droite ($x = +\infty$)

$$\mathcal{A} \equiv P_s \ldots P_1 \tag{13}$$

et à l'ensemble des $N - s$ derniers diffuseurs, la matrice de passage *de la droite vers la gauche*

$$\mathcal{B} \equiv P_{s+1}^{-1} \ldots P_N^{-1}. \tag{14}$$

À l'aide des élements de matrice de $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$, que l'on ne cherchera pas à calculer explicitement, exprimer les coefficients $A_s^{\pm}$ en fonction de A_0^- et les coefficients $B_s^{\pm}$ en fonction de B_N^+.

g) En intégrant l'équation différentielle satisfaite par $\psi(x)$ sur un intervalle infinitésimal autour de $x = 0$, exprimer les coefficients $B_s^{\pm}$ en fonction des coefficients $A_s^{\pm}$ et de m, $\hbar$ et k_c.

h) Déduire des questions précedentes que A_0^- et B_N^+ sont donnés par le système d'équations

$$\begin{pmatrix} \mathcal{B}_{11} & -\mathcal{A}_{12} \\ \mathcal{B}_{21} & -\mathcal{A}_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} B_N^+ \\ A_0^- \end{pmatrix} = \frac{m}{i\hbar^2 k_c} \begin{pmatrix} 1 \\ -1 \end{pmatrix}. \tag{15}$$

i) En résolvant le système linéaire précédent, calculer B_N^+, puis montrer que

$$\psi(x) = \frac{m}{i\hbar^2 k_c} \frac{(\mathcal{B}_{11} e^{ik_c x} + \mathcal{B}_{21} e^{-ik_c x})(\mathcal{A}_{22} + \mathcal{A}_{12})}{\mathcal{B}_{11}\mathcal{A}_{22} - \mathcal{B}_{21}\mathcal{A}_{12}} \tag{16}$$

pour $0 \leq x \leq x_{s+1}$.

3 Calcul d'états stationnaires intéressants

On utilise les résultats de la section 2 pour exhiber des états stationnaires du Hamiltonien complet, dont on note la fonction d'onde $\phi(x)$ et l'énergie E.

a) On rappelle que la constante de couplage g est positive. Expliquer qualitativement pourquoi H ne peut pas admettre d'états liés. Dans la suite, on posera donc $E = \hbar^2 k^2/2m$, où $k > 0$. L'état propre ϕ est-il de carré sommable ? En déduire l'ensemble des valeurs possibles de E.

b) Dans l'argument de la résolvante $G(z)$, on prend $z = E + i\eta$, où η tend vers 0^+. Avec les notations de la section 2, montrer que k_c tend vers k et que $\mathrm{Im}\,\psi(x)$ tend vers la fonction d'onde d'un état propre de H d'énergie E. Dans toute la suite, on identifie k_c à k et l'on prend

$$\phi(x) \equiv \lim_{\eta \to 0^+} \mathrm{Im}\, \langle x|G(E + i\eta)|0\rangle. \tag{17}$$

c) Quel est le courant de probabilité associé à cet état stationnaire $\phi(x)$?

d) On rappelle qu'une matrice deux par deux M appartient au groupe $SU(1, 1)$ si et seulement si elle est de la forme

$$M = \begin{pmatrix} a & b^* \\ b & a^* \end{pmatrix} \tag{18}$$

où a et b sont deux nombres complexes vérifiant $|a|^2 - |b|^2 = 1$. À partir de la formule explicite (12) pour $k_c \to k$, vérifier que chaque matrice de passage P_j appartient au groupe $SU(1, 1)$. Déduire de la structure de groupe que les matrices $\mathcal{A}$ et $\mathcal{B}$ sont aussi dans $SU(1, 1)$.

e) On admet que l'on est dans les conditions d'application du théorème de Furstenberg : si M est le produit d'un grand nombre n de matrices aléatoires appartenant au groupe $SU(1, 1)$, les modules des éléments de matrice de M tendent presque sûrement vers l'infini, et ceci exponentiellement en n. On suppose ici que s et $N - s$ sont du même ordre de grandeur et très supérieurs à un. En déduire qu'en première approximation, on peut supposer que $\mathcal{A}_{11}$ et $\mathcal{A}_{12}$ ont le même module, et que $\mathcal{B}_{11}$ et $\mathcal{B}_{21}$ ont le même module. Les inverses des modules de $\mathcal{B}_{11}$ et de $\mathcal{A}_{22}$ sont donc pris comme infiniment petits du premier ordre, notés symboliquement $O(\epsilon)$.

f) On introduit les notations suivantes :

$$\begin{aligned} \frac{\mathcal{A}_{12}}{\mathcal{A}_{22}} &= \rho\, e^{i\alpha} \\ \frac{\mathcal{B}_{21}}{\mathcal{B}_{11}} &= \sigma e^{i\beta} \end{aligned} \tag{19}$$

où les phases α et β sont des nombres réels, et les modules ρ et σ sont strictement compris entre zéro et un. Justifier le fait que

$$\rho = 1 - O(\epsilon^2) \tag{20}$$

$$\sigma = 1 - O(\epsilon^2). \tag{21}$$

g) À partir de la valeur de B_N^+ obtenue à la question 2i, montrer que $\phi(x)$ est en $O(\epsilon)$ pour $x > x_N$. Il en sera de même pour $x < x_1$. À l'aide de l'équation (16), montrer que $\phi(x)$ est en $O(\epsilon^2)$ pour $0 \le x \le x_{s+1}$.

Indication : on fera un calcul à l'ordre 0 en ϵ *et on utilisera des identités du type* $1 + \exp i\theta = 2\cos(\theta/2)\exp(i\theta/2)$. Il en sera de même pour $x_s \leq x \leq 0$. Faire un schéma qualitatif en échelle logarithmique montrant la dépendance en x de $|\phi(x)|$. Interpréter physiquement le résultat.

h) En considérant le dénominateur de l'équation (16), montrer que les résultats précédents sont incorrects dans le cas $\alpha + \beta = 0$ modulo 2π, identité qui peut être vérifiée pour certaines valeurs de l'énergie E. Montrer dans ce cas que $\phi(0)$ est en $O(1/\epsilon^2)$ alors que $\phi(x)$ pour $x < x_1$ ou $x > x_N$ est en $O(1/\epsilon)$. Faire un schéma qualitatif en échelle logarithmique montrant la nouvelle dépendance en x de $|\phi(x)|$. Interpréter physiquement le résultat.

i) Il a été montré dans la littérature que, dans la limite où le potentiel désordonné s'étend de $x = -\infty$ à $x = +\infty$, tous les états propres du Hamiltonien sont 'localisés', c'est-à-dire de carré sommable (phénomène de localisation d'Anderson). Faire le lien avec les résultats obtenus aux questions précédentes.

j) Effectuons pour terminer un calcul approché de l'exposant donnant la croissance exponentielle en le nombre de diffuseurs s du module de $\mathcal{A}_{11}^{(s)}$, où la notation rend maintenant explicite la dépendance de la matrice $\mathcal{A}$ en s. À partir de la relation de récurrence

$$\mathcal{A}^{(s+1)} = P_{s+1}\mathcal{A}^{(s)} \tag{22}$$

et de l'équation (12) pour $k_c \to k$, démontrer l'identité

$$\ln|\mathcal{A}_{11}^{(s+1)}| = \ln|\mathcal{A}_{11}^{(s)}| + \ln|1 + i\gamma| + \ln|1 - u^{(s)}e^{-2ikx_{s+1}}| \tag{23}$$

où $u^{(s)}$ est un nombre complexe dont on montrera qu'il est de module < 1. On moyenne ensuite cette identité sur toutes les réalisations possibles du désordre. On appelle l la largeur de la distribution de probabilité de la distance entre centres diffuseurs voisins. À quelle condition sur kl peut-on supposer que la phase $2kx_{s+1}$, considérée modulo 2π, ait une distribution de probabilité uniforme ? Dans ce cas, obtenir la loi de croissance exponentielle de $|\mathcal{A}_{11}^{(s)}|$ en utilisant la valeur de l'intégrale suivante :

$$\int_0^{2\pi} d\theta\, \ln|1 - u\, e^{i\theta}| = 0 \tag{24}$$

où u est un nombre complexe de module < 1.