

Formule de Kubo: Conductivité électrique

Système d'électrons libres dans un champ électromagnétique :

$$\begin{aligned} H(t) &= \int d^3r \left\{ \frac{1}{2m} \psi^\dagger \left(-i\vec{\nabla} - e\vec{A}(\vec{r}, t) \right)^2 \psi - e\phi(\vec{r}, t) \psi^\dagger \psi \right\} \\ &= H_0 + \int d^3r \left\{ i \frac{e}{2m} \psi^\dagger \left(\vec{A}\vec{\nabla} + \vec{\nabla}\vec{A} \right) \psi + \frac{e^2}{2m} \vec{A}^2 \psi^\dagger \psi - e\phi \psi^\dagger \psi \right\} \end{aligned}$$

Opérateur courant :

$$\begin{aligned} \vec{j} &= -\frac{\delta H}{\delta \vec{A}} = -i \frac{e}{2m} \left[\psi^\dagger (\vec{\nabla} \psi) - (\vec{\nabla} \psi^\dagger) \psi \right] - \frac{e^2}{m} \vec{A} \psi^\dagger \psi \\ &= \vec{j}_{\text{para}} + \vec{j}_{\text{dia}} \end{aligned}$$

dans la jauge de London (Coulomb) : $\vec{\nabla} \cdot \vec{A} = 0$

Formule de Kubo: Conductivité électrique

Opérateur courant :

$$\vec{j}_{\text{para}}(\vec{r}, t) = -i \frac{e}{2m} \left\{ \psi^\dagger(\vec{r}, t) (\vec{\nabla} \psi(\vec{r}, t)) - (\vec{\nabla} \psi^\dagger(\vec{r}, t)) \psi(\vec{r}, t) \right\}$$

→ transformée de Fourier : $\vec{j}_{\text{para}}(\vec{q}) = \frac{e}{m} \int d^3p \, \vec{p} a_{\vec{p}-\vec{q}/2}^\dagger a_{\vec{p}+\vec{q}/2}$

(voir TD 3)

Formule de Kubo: Conductivité électrique

Réponse linéaire : $\delta H_{\text{para}}(t) = - \int d^3r \vec{j}_{\text{para}} \cdot \vec{A}$

Chapitre II.3.6 \rightarrow

$$\langle j_{\text{para},\alpha}(\vec{r}, t) \rangle = - \int dt' \int d^3r' \chi^{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') A_{\beta}(\vec{r}', t')$$

avec $\chi_R^{\alpha\beta}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') = -i\theta(t - t') \langle [j_{\text{para},\alpha}(\vec{r}, t), j_{\text{para},\beta}(\vec{r}', t')] \rangle$

transformée de Fourier :

$$\chi_R^{\alpha\beta}(\vec{q}, t - t') = -i\theta(t - t') \langle [j_{\text{para},\alpha}(\vec{q}, t), j_{\text{para},\beta}(-\vec{q}, t')] \rangle$$

(voir TD 3)

Formule de Kubo: Conductivité électrique

$$\chi_R^{\alpha\beta}(\vec{q}, t - t') = -i\theta(t - t')\langle [j_{\text{para},\alpha}(\vec{q}, t), j_{\text{para},\beta}(-\vec{q}, t')] \rangle$$

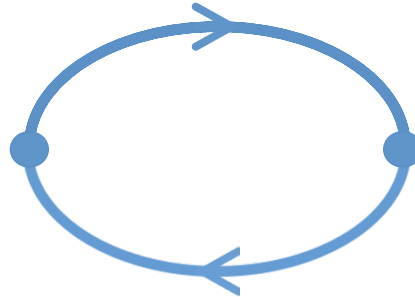
Stratégie :

- calculer $\chi^{\alpha\beta}(\vec{q}, \tau) = -\langle T_\tau j_{\text{para},\alpha}(\vec{q}, \tau) j_{\text{para},\beta}(-\vec{q}, 0) \rangle$
 $\rightarrow \chi^{\alpha\beta}(\vec{q}, i\omega_m)$

- continuation analytique :

$$\chi^{\alpha\beta}(\vec{q}, i\omega_m \rightarrow \omega + i\eta) = \text{TF} \left[\chi_R^{\alpha\beta}(\vec{q}, t - t') \right]$$

Diagramme de Feynman :

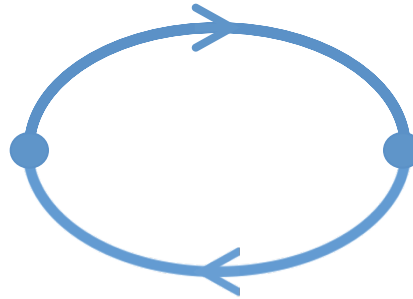


Formule de Kubo: Conductivité électrique

$$\chi^{\alpha\beta}(\vec{q}, \tau) = -\langle T_\tau j_{\text{para},\alpha}(\vec{q}, \tau) j_{\text{para},\beta}(-\vec{q}, 0) \rangle$$

$$\rightarrow \chi^{\alpha\beta}(\vec{q}, i\omega_m)$$

Diagramme de Feynman :



$$\chi^{\alpha\beta}(\vec{q}, \tau) = \frac{e^2}{m^2} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} \frac{d^3p'}{(2\pi)^3} p_\alpha p'_\beta$$

$$(-1) \langle T_\tau a_{\vec{p}'+\vec{q}/2}(0) a_{\vec{p}+\vec{q}/2}^\dagger(\tau) \rangle \langle T_\tau a_{\vec{p}-\vec{q}/2}(\tau) a_{\vec{p}',-\vec{q}/2}^\dagger(0) \rangle$$

$$\chi^{\alpha\beta}(\vec{q}, i\omega_m) = -\frac{e^2}{m^2} \frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} p_\alpha p_\beta$$

$$\mathcal{G}_0(\vec{p} + \vec{q}/2, i\epsilon_n + i\omega_m) \mathcal{G}_0(\vec{p} - \vec{q}/2, i\epsilon_n)$$

Formule de Kubo: Conductivité électrique

$$\chi^{\alpha\beta}(\vec{q}, i\omega_m) = -\frac{e^2}{m^2} \frac{1}{\beta} \sum_n \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} p_\alpha p_\beta \mathcal{G}_0(\vec{p} + \vec{q}/2, i\epsilon_n + i\omega_m) \mathcal{G}_0(\vec{p} - \vec{q}/2, i\epsilon_n)$$

conductivité : $\langle j_{\text{para},\alpha}(\vec{q}, \omega) \rangle = -\chi_R^{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) A_\beta(\vec{q}, \omega)$

$$\langle j_\alpha(\vec{q}, \omega) \rangle = - \left(\chi_R^{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) + \frac{ne^2}{m} \delta_{\alpha\beta} \right) A_\beta(\vec{q}, \omega)$$

avec $\vec{E}(\vec{q}, t) = -\frac{\partial}{\partial t} \vec{A}(\vec{q}, t) \Leftrightarrow \vec{E}(\vec{q}, \omega) = i\omega \vec{A}(\vec{q}, \omega)$,

on obtient

$$\begin{aligned} \langle j_\alpha(\vec{q}, \omega) \rangle &= -\frac{1}{i\omega} \left(\chi^{\alpha\beta}(\vec{q}, i\omega_m \rightarrow \omega + i\eta) + \frac{ne^2}{m} \delta_{\alpha\beta} \right) E_\beta(\vec{q}, \omega) \\ &\equiv \sigma_{\alpha\beta}(\vec{q}, \omega) E_\beta(\vec{q}, \omega) \end{aligned}$$

Formule de Kubo: Conductivité électrique

résultat:

il faut inclure l'effet de désordre !

→ conductivité de Drude :

$$\sigma_{\alpha\beta}(\vec{q} = 0, \omega \rightarrow 0) = \delta_{\alpha\beta} \frac{ne^2}{m} \tau$$