M2 Matière Quantique — Julia Meyer (julia.meyer@univ-grenoble-alpes.fr)
Corrélations & Transport

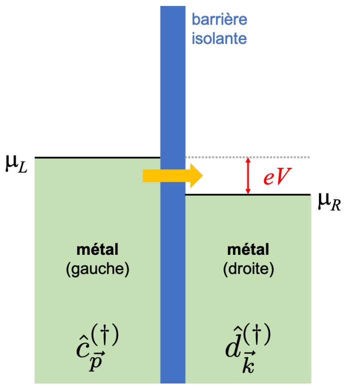
TD 1 – 21 novembre 2022

N'hésitez pas à me poser des questions (voir adresse email ci-dessus).

Les questions qui peuvent être abordées sans avoir résolu les questions précédentes sont marquées par une flêche ($\rightarrow$).

1 Courant tunnel entre deux métaux – 1ère partie

Dans cette exercice, nous allons considérer le courant entre deux métaux séparés par une barrière isolante (voir schéma ci-dessous). Les électrons peuvent passer d'un côté à l'autre via l'effet tunnel. Nous négligeons le spin des électrons. La température du système est $T = 0$.



L'Hamiltonien qui décrit le système peut être écrit sous la forme

$$H = H_L + H_R + H_T,$$

où H_L décrit le métal de gauche (L = left), H_R décrit le métal de droite (R = right) et H_T décrit le couplage tunnel entre les deux. L'Hamiltonien tunnel H_T est donné par

$$H_T = \sum_{\vec{k},\vec{p}} t_{\vec{k}\vec{p}}\, \hat{d}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{p}} + h.c..$$

Nous utilisons des notations où $\hbar = 1$. Ici $\hat{c}_{\vec{p}}$ ($\hat{c}_{\vec{p}}^\dagger$) sont des opérateurs d'annihilation (création) d'un électron avec quantité de mouvement $\vec{p}$ dans le métal de gauche et $\hat{d}_{\vec{k}}$ ($\hat{d}_{\vec{k}}^\dagger$) sont des opérateurs d'annihilation (création) d'un électron avec quantité de mouvement $\vec{k}$ dans le métal de droite. Les opérateurs $\hat{c}_{\vec{p}}^{(\dagger)}$ et $\hat{d}_{\vec{k}}^{(\dagger)}$ anticommutent. $t_{\vec{k}\vec{p}}$ est l'amplitude tunnel pour passer d'un état avec quantité de mouvement $\vec{p}$ à gauche à un état avec quantité de mouvement $\vec{k}$ à droite. $h.c.$ dénote le conjugué hermitien des termes écrits.

1.1 1ère partie : Eléments de base du calcul.

1. $\rightarrow$ Donner l'expression complète de H_T. Quelle est la dimension de $t_{\vec{k}\vec{p}}$?

Solution:
$$H_T = \sum_{\vec{k},\vec{p}} \left(t_{\vec{k}\vec{p}}\, \hat{d}^\dagger_{\vec{k}}\, \hat{c}_{\vec{p}} + t^*_{\vec{k}\vec{p}}\, \hat{c}^\dagger_{\vec{p}}\, \hat{d}_{\vec{k}} \right).$$

$t_{\vec{k}\vec{p}}$ est une énergie.

Les électrons de conduction dans chaque métal sont considérés comme des particules libres. Le métal de gauche est au potentiel chimique μ_L tandis que le métal de droite est au potentiel chimique μ_R. La différence de potentiel chimique est maintenu en appliquant une tension $eV = \mu_L - \mu_R$.

2. → Donner les expressions pour $K_X = H_X - \mu_X N_X$ pour $X = L, R$, où N_X est le nombre d'électrons de conduction dans le métal X.

Solution:
$$\begin{aligned} K_L &= \sum_{\vec{p}} \left(\frac{p^2}{2m} - \mu_L \right) \hat{c}^\dagger_{\vec{p}} \hat{c}_{\vec{p}} \equiv \sum_{\vec{p}} \xi^L_{\vec{p}} \hat{c}^\dagger_{\vec{p}} \hat{c}_{\vec{p}}, \\ K_R &= \sum_{\vec{k}} \left(\frac{k^2}{2m} - \mu_R \right) \hat{d}^\dagger_{\vec{k}} \hat{d}_{\vec{k}} \equiv \sum_{\vec{k}} \xi^R_{\vec{k}} \hat{d}^\dagger_{\vec{k}} \hat{d}_{\vec{k}}. \end{aligned}$$

1.1.1 Système découplé

Dans un premier temps, nous allons considérer le système découplé, $H_T = 0$. Dans ce cas, les deux métaux peuvent être considérés individuellement. Nous allons étudier le métal de gauche décrit par K_L en détail. (Utiliser K_L plutôt que H_L correspond à mesurer l'énergie par rapport au potentiel chimique. En cours, nous avons utilisé la notation $\tilde{H}_L$ au lieu de K_L.)

3. → Décrire l'état fondamental du métal de gauche.

Solution: L'état fondamental correspond à une mer de Fermi : tous les états avec énergie $E_{\vec{p}} < E^L_F = \mu_L$ sont remplis et tous les états avec énergie $E_{\vec{p}} > E^L_F = \mu_L$ sont vides.

4. Obtenir le commutateur $[K_L, \hat{c}_{\vec{p}}]$.

Solution:
$$\begin{aligned} [\sum_{\vec{p}'} \xi^L_{\vec{p}'} \hat{c}^\dagger_{\vec{p}'}\, \hat{c}_{\vec{p}'}, \hat{c}_{\vec{p}}] &= \sum_{\vec{p}'} \xi^L_{\vec{p}'} \left(\hat{c}^\dagger_{\vec{p}'}\, \hat{c}_{\vec{p}'}\, \hat{c}_{\vec{p}} - \hat{c}_{\vec{p}}\, \hat{c}^\dagger_{\vec{p}'}\, \hat{c}_{\vec{p}'} \right) \\ &= \sum_{\vec{p}'} \xi^L_{\vec{p}'} \left(-\hat{c}^\dagger_{\vec{p}'}\, \hat{c}_{\vec{p}}\, \hat{c}_{\vec{p}'} - \left(\{\hat{c}_{\vec{p}}, \hat{c}^\dagger_{\vec{p}'}\} - \hat{c}^\dagger_{\vec{p}'}\, \hat{c}_{\vec{p}} \right) \hat{c}_{\vec{p}'} \right) \\ &= -\sum_{\vec{p}'} \xi^L_{\vec{p}'} \delta_{\vec{p},\vec{p}'} \hat{c}_{\vec{p}'} = -\xi^L_{\vec{p}} \hat{c}_{\vec{p}}. \end{aligned}$$

5. Montrer que la dépendance en temps des opérateurs $\hat{c}_{\vec{p}}$ en représentation de Heisenberg et donnée par

$$\hat{c}_{\vec{p}}(t) = \hat{c}_{\vec{p}}\, e^{-i\xi^L_{\vec{p}} t}$$

avec $\xi^L_{\vec{p}} = \vec{p}^2/(2m) - \mu_L$.

Solution: L'équation de mouvement est donnée par

$$\frac{d}{dt}\hat{c}_{\vec{p}} = i[K_L, \hat{c}_{\vec{p}}] = -i\xi^L_{\vec{p}}\hat{c}_{\vec{p}}.$$

Ce qui mène directement au résultat indiqué.

6. $\rightarrow$ Donner la dépendance en temps des opérateurs $\hat{c}^\dagger_{\vec{p}}$ en représentation de Heisenberg.

Solution:

$$\hat{c}^\dagger_{\vec{p}}(t) = \hat{c}^\dagger_{\vec{p}}\, e^{i\xi^L_{\vec{p}} t}$$

7. Calculer la fonction de Green

$$\mathcal{G}_L(\vec{p}, t) = -i\langle T\hat{c}_{\vec{p}}(t)\hat{c}^\dagger_{\vec{p}}(0)\rangle.$$

Solution: Avec la dépendance en temps déterminée ci-dessus, on a

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_L(\vec{p}, t) &= -i\langle T\hat{c}_{\vec{p}}(t)\hat{c}^\dagger_{\vec{p}}(0)\rangle \\
&= -ie^{-i\xi^L_{\vec{p}} t}\left\{\theta(t)\langle\hat{c}_{\vec{p}}\hat{c}^\dagger_{\vec{p}}\rangle - \theta(-t)\langle\hat{c}^\dagger_{\vec{p}}\hat{c}_{\vec{p}}\rangle\right\} \\
&= -ie^{-i\xi^L_{\vec{p}} t}\left\{\theta(t)\theta(|\vec{p}| - p^L_F) - \theta(-t)\theta(p^L_F - |\vec{p}|)\right\}.
\end{aligned}$$

8. Prendre la transformée de Fourier pour obtenir $\mathcal{G}_L(\vec{p}, \omega)$. (En cours, nous avons utilisé la notation $\tilde{\mathcal{G}}$ pour indiquer qu'il s'agit de la TF. Souvent le tilde est omis – l'argument ω suffit pour identifier la TF.)

Solution: Pour pouvoir prendre la transformée de Fourier, il faut introduire un facteur de convergence $e^{-\eta|t|}$ avec $\eta \to 0^+$. Donc

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}_L(\vec{p}, \omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt\; e^{i\omega t - \eta|t|}\mathcal{G}_L(\vec{p}, t) \\
&= -i\int_{-\infty}^{\infty} dt\; e^{i\omega t - \eta|t|}e^{-i\xi^L_{\vec{p}} t}\left\{\theta(t)\theta(|\vec{p}| - p^L_F) - \theta(-t)\theta(p^L_F - |\vec{p}|)\right\} \\
&= -i\left\{\theta(|\vec{p}| - p^L_F)\int_0^{\infty} dt\; e^{i\omega t - \eta t - i\xi^L_{\vec{p}} t} - \theta(p^L_F - |\vec{p}|)\int_{-\infty}^{0} dt\; e^{i\omega t + \eta t - i\xi^L_{\vec{p}} t}\right\} \\
&= -i\left\{\theta(|\vec{p}| - p^L_F)\frac{-1}{i\omega - \eta - i\xi^L_{\vec{p}}} - \theta(p^L_F - |\vec{p}|)\frac{1}{i\omega + \eta - i\xi^L_{\vec{p}}}\right\} \\
&= \theta(|\vec{p}| - p^L_F)\frac{1}{\omega + i\eta - \xi^L_{\vec{p}}} + \theta(p^L_F - |\vec{p}|)\frac{1}{\omega - i\eta - \xi^L_{\vec{p}}} \\
&= \frac{1}{\omega - \xi^L_{\vec{p}} + i\eta\,\mathrm{sign}(|\vec{p}| - p^L_F)}.
\end{aligned}$$

9. $\rightarrow$ Faire un schéma pour indiquer la position des pôles de $\mathcal{G}_L(\vec{p},\omega)$ dans le plan complexe.

Solution: Pour $|\vec{p}| > p_F^L$ ($\xi_{\vec{p}}^L > 0$) les pôles sont en dessous de l'axe réelle et pour $|\vec{p}| < p_F^L$ ($\xi_{\vec{p}}^L < 0$) les pôles sont au dessus de l'axe réelle.

10. $\rightarrow$ Déterminer la quantité de mouvement de Fermi p_F^L en fonction de la masse m des électrons et du potentiel chimique.

Solution:

$$E_F^L = \frac{(p_F^L)^2}{2m} = \mu_L.$$

Donc $p_F^L = \sqrt{2m\mu_L}$.

11. $\rightarrow$ Démontrer la relation

$$\frac{1}{L^d}\sum_{\vec{p}}\cdots \approx \nu_d^L(E_F^L)\int_{-\infty}^{\infty} d\xi_{\vec{p}}^L \int \frac{d\Omega_{\vec{p}}}{S_d}\cdots,$$

en donnant la définition de $\nu_d^L(E)$ et $\xi_{\vec{p}}^L$ et en spécifiant les approximations faites ainsi que leur justification, c.a.d., les conditions requises pour la fonction à intégrer. Ici $d\Omega_{\vec{p}}$ est l'angle solide élémentaire et S_d est l'aire d'une hypersphère en d dimensions.

Solution: D'abord en prend la limite continue,

$$\frac{1}{L^d}\sum_{\vec{p}}\cdots = \int \frac{d^dp}{(2\pi)^d}\cdots = \frac{S_d}{(2\pi)^d}\int dp\, p^{d-1}\int \frac{d\Omega_{\vec{p}}}{S_d}\cdots.$$

Avec $\xi_{\vec{p}}^L = p^2/(2m) - E_F$, on obtient

$$\begin{aligned}\frac{1}{L^d}\sum_{\vec{p}}\cdots &= \frac{S_d}{(2\pi)^d}\int_{-\mu_L}^{\infty} d\xi_{\vec{p}}^L \left(\frac{d\xi_{\vec{p}}^L}{dp}\right)^{-1} [2m(\mu_L+\xi_{\vec{p}}^L)]^{(d-1)/2}\int \frac{d\Omega_{\vec{p}}}{S_d}\cdots \\ &\equiv \int_{-\mu_L}^{\infty} d\xi_{\vec{p}}^L\, \nu_d(\mu_L+\xi_{\vec{p}}^L)\int \frac{d\Omega_{\vec{p}}}{S_d}\cdots.\end{aligned}$$

Donc la densité d'états par spin est donnée par

$$\nu_d^L(E_{\vec{p}}) = \frac{S_d}{(2\pi)^d}\left(\frac{dE_{\vec{p}}^L}{dp}\right)^{-1}[2mE_{\vec{p}}^L]^{(d-1)/2}$$

avec $E_{\vec{p}}^L = p^2/(2m)$.
Si μ_L est la plus grande échelle d'énergie et l'intégrale est dominée par des valeurs $\xi_{\vec{p}} \sim 0$ (en particulier, elle doit converger assez rapidement en $\xi_{\vec{p}} \rightarrow -\infty$, on peut approximer

$$\frac{1}{L^d}\sum_{\vec{p}}\cdots = \nu_d^L(\mu_L)\int_{-\infty}^{\infty} d\xi_{\vec{p}}^L\int \frac{d\Omega_{\vec{p}}}{S_d}\cdots.$$

12. Calculer la densité d'états $\nu_d^L(E)$ en $d = 1, 2, 3$ dimensions. (Par la suite, on supposera qu'il s'agit d'un système en $d = 3$.)

> **Solution:** L'aire d'une hypersphère en $d = 1, 2, 3$ dimensions est donnée par $S_1 = 2$, $S_2 = 2\pi$ et $S_3 = 4\pi$.Avec $\left(\frac{dE^L_{\vec{p}}}{dp}\right)^{-1} = \left(\frac{p}{m}\right)^{-1} = \frac{m}{\sqrt{2mE^L_{\vec{p}}}}$, on obtient
>
> $$\nu_d^L(E) = \begin{cases} \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{m}{2E}} & d = 1, \\ \frac{m}{2\pi} & d = 2, \\ \frac{1}{\pi^2} m^{3/2}\sqrt{\frac{E}{2}} & d = 3. \end{cases}$$

Les calculs pour le métal de droite sont analogues.

1.2 2ème partie : Courant et réponse linéaire

Nous considérons maintenant le système complet décrit par H. Le courant tunnel peut être exprimer come le taux de changement du nombre N_L d'électrons de conduction dans le métal de gauche,

$$I(t) = -e\langle \dot{N}_L(t)\rangle.$$

12. $\rightarrow$ Argumenter pourquoi $[H, N_L] = [H_T, N_L]$.

> **Solution:** *(1 point)* N_L commute avec H_L et H_R. Donc $[H, N_L] = [H_T, N_L]$.

13. $\rightarrow$ Démontrer

$$\dot{N}_L = i \sum_{\vec{k},\vec{p}} \left(t_{\vec{k}\vec{p}}\, \hat{d}^\dagger_{\vec{k}}\, \hat{c}_{\vec{p}} - t^*_{\vec{k}\vec{p}}\, \hat{c}^\dagger_{\vec{p}} \hat{d}_{\vec{k}} \right).$$

> **Solution:** *(4 points)* L'équation du mouvement est donnée par $\dot{N}_L = i[H, N_L]$. Avec le résultat de la question précédente, on trouve
>
> $$\begin{aligned} \frac{d}{dt} N_L &= i[H_T, N_L] = i \sum_{\vec{k},\vec{p};\vec{p}'} [t_{\vec{k}\vec{p}}\, \hat{d}^\dagger_{\vec{k}}\, \hat{c}_{\vec{p}} + t^*_{\vec{k}\vec{p}}\, \hat{c}^\dagger_{\vec{p}} \hat{d}_{\vec{k}}\, , \hat{c}^\dagger_{\vec{p}'}\, \hat{c}_{\vec{p}'}] \\ &= i \sum_{\vec{k},\vec{p};\vec{p}'} \left(t_{\vec{k}\vec{p}}\, \hat{d}^\dagger_{\vec{k}} [\hat{c}_{\vec{p}}\, , \hat{c}^\dagger_{\vec{p}'}\, \hat{c}_{\vec{p}'}] + t^*_{\vec{k}\vec{p}} [\hat{c}^\dagger_{\vec{p}}\, , \hat{c}^\dagger_{\vec{p}'}\, \hat{c}_{\vec{p}'}] \hat{d}_{\vec{k}} \right) \\ &= i \sum_{\vec{k},\vec{p}} \left(t_{\vec{k}\vec{p}}\, \hat{d}^\dagger_{\vec{k}}\, \hat{c}_{\vec{p}} - t^*_{\vec{k}\vec{p}}\, \hat{c}^\dagger_{\vec{p}} \hat{d}_{\vec{k}} \right). \end{aligned}$$

Pour évaluer $\langle \dot{N}_L(t)\rangle$, nous allons utiliser la représentation d'interaction avec $H_0 = H_L + H_R$ et $V = H_T$. Ce sera traité en TD 2, où on calculera le courant tunnel en réponse linéaire.

2 Fonction de Green des phonons

En cours, nous avons considéré la fonction de Green des électrons en absence d'interactions. Ici nous allons aborder le cas des phonons, c'est-à-dire, des vibrations du réseau cristallin. Les déplacements des atomes de leurs positions d'équilibre, $\vec{r}_i = \vec{r}_i^{\,\text{eq}} + \vec{u}_i$, sont décrites par l'Hamiltonien suivant :

$$H = \sum_i \frac{1}{2M}\dot{\vec{u}}_i^2 + \frac{1}{2}\sum_{i,j} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j),$$

où le premier terme décrit l'énergie cinétique et le deuxième terme l'énergie potentielle due aux interactions entre atomes. Pour des petits déplacements, on peut utiliser une approximation harmonique, $V(x) \approx V(x^{\text{eq}}) + \frac{1}{2}V"(x^{\text{eq}})(x - x^{\text{eq}})^2$. Dans la limite continue et après transformation de Fourier, on obtient

$$H = \sum_{\vec{q}} \left\{ \frac{1}{2M}\Pi_{\vec{q}}\Pi_{-\vec{q}} + \frac{1}{2}M\omega_{\vec{q}}^2\phi_{\vec{q}}\phi_{-\vec{q}} \right\}.$$

Ici $\phi_{\vec{q}}$ est le champ décrivant les déplacements tandis que $\Pi_{\vec{q}}$ est la densité de quantité de mouvement conjuguée. Pour obtenir une description quantique, on impose le commutateur

$$[\phi_{\vec{q}}, \Pi_{\vec{q}'}] = i\hbar\delta_{\vec{q},\vec{q}'}.$$

La pulsation $\omega_{\vec{q}} = \omega_{-\vec{q}} > 0$ est déterminée par $V"(x^{\text{eq}})$. Pour chaque valeur de $\vec{q}$, cela correspond donc à un oscillateur harmonique.

1. $\rightarrow$ On introduit les opérateurs

$$\begin{aligned} b_{\vec{q}} &= \sqrt{\frac{M\omega_{\vec{q}}}{2\hbar}}\left(\phi_{\vec{q}} + \frac{i}{M\omega_{\vec{q}}}\Pi_{-\vec{q}}\right), \\ b_{\vec{q}}^\dagger &= \sqrt{\frac{M\omega_{\vec{q}}}{2\hbar}}\left(\phi_{-\vec{q}} - \frac{i}{M\omega_{\vec{q}}}\Pi_{\vec{q}}\right). \end{aligned}$$

Utiliser les relations de commutation pour montrer qu'il s'agit d'opérateurs d'annihilation et de création bosoniques.

Solution: On trouve

$$\begin{aligned} \left[b_{\vec{q}}, b_{\vec{q}'}^\dagger\right] &= \frac{M}{2\hbar}\sqrt{\omega_{\vec{q}}\omega_{\vec{q}'}}\left[\phi_{\vec{q}} + \frac{i}{M\omega_{\vec{q}}}\Pi_{-\vec{q}}\ ,\ \phi_{-\vec{q}'} - \frac{i}{M\omega_{\vec{q}'}}\Pi_{\vec{q}'}\right] \\ &= \frac{1}{2\hbar}\left\{-i\sqrt{\frac{\omega_{\vec{q}}}{\omega_{\vec{q}'}}}\left[\phi_{\vec{q}}\ ,\ \Pi_{\vec{q}'}\right] + i\sqrt{\frac{\omega_{\vec{q}'}}{\omega_{\vec{q}}}}\left[\Pi_{-\vec{q}}\ ,\ \phi_{-\vec{q}'}\right]\right\} \\ &= \frac{1}{2\hbar}\left\{-i\sqrt{\frac{\omega_{\vec{q}}}{\omega_{\vec{q}'}}}i\hbar\delta_{\vec{q},\vec{q}'} + i\sqrt{\frac{\omega_{\vec{q}'}}{\omega_{\vec{q}}}}(-i\hbar\delta_{\vec{q},\vec{q}'})\right\} = \delta_{\vec{q},\vec{q}'}, \\ \left[b_{\vec{q}}, b_{\vec{q}'}\right] &= \frac{M}{2\hbar}\sqrt{\omega_{\vec{q}}\omega_{\vec{q}'}}\left[\phi_{\vec{q}} + \frac{i}{M\omega_{\vec{q}}}\Pi_{-\vec{q}}\ ,\ \phi_{\vec{q}'} + \frac{i}{M\omega_{\vec{q}'}}\Pi_{-\vec{q}'}\right] = 0, \\ \left[b_{\vec{q}}^\dagger, b_{\vec{q}'}^\dagger\right] &= \frac{M}{2\hbar}\sqrt{\omega_{\vec{q}}\omega_{\vec{q}'}}\left[\phi_{-\vec{q}} - \frac{i}{M\omega_{\vec{q}}}\Pi_{\vec{q}}\ ,\ \phi_{-\vec{q}'} - \frac{i}{M\omega_{\vec{q}'}}\Pi_{\vec{q}'}\right] = 0. \end{aligned}$$

2. $\rightarrow$ Montrer que l'Hamiltonien peut s'écrire sous la forme

$$H = \sum_{\vec{q}} \hbar\omega_{\vec{q}}\left(b_{\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}} + \frac{1}{2}\right).$$

Solution: Avec

$$\phi_{\vec q} = \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec q}}}\left(b_{\vec q} + b^\dagger_{-\vec q}\right), \qquad \Pi_{\vec q} = i\sqrt{\frac{\hbar M\omega_{\vec q}}{2}}\left(b^\dagger_{\vec q} - b_{-\vec q}\right),$$

on obtient

$$\begin{aligned}
\Pi_{\vec q}\Pi_{-\vec q} &= -\frac{\hbar M\omega_{\vec q}}{2}\left(b^\dagger_{\vec q} - b_{-\vec q}\right)\left(b^\dagger_{-\vec q} - b_{\vec q}\right)\\
&= -\frac{\hbar M\omega_{\vec q}}{2}\left(b^\dagger_{\vec q}b^\dagger_{-\vec q} - b_{-\vec q}b^\dagger_{-\vec q} - b^\dagger_{\vec q}b_{\vec q} + b_{-\vec q}b_{\vec q}\right),\\
\phi_{\vec q}\phi_{-\vec q} &= \frac{\hbar}{2M\omega_{\vec q}}\left(b_{\vec q} + b^\dagger_{-\vec q}\right)\left(b_{-\vec q} + b^\dagger_{\vec q}\right)\\
&= \frac{\hbar}{2M\omega_{\vec q}}\left(b_{\vec q}b_{-\vec q} + b^\dagger_{-\vec q}b_{-\vec q} + b_{\vec q}b^\dagger_{\vec q} + b^\dagger_{-\vec q}b^\dagger_{\vec q}\right).
\end{aligned}$$

Donc

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{4}\sum_{\vec q}\hbar\omega_{\vec q}\left\{-b^\dagger_{\vec q}b^\dagger_{-\vec q} + b_{-\vec q}b^\dagger_{-\vec q} + b^\dagger_{\vec q}b_{\vec q} - b_{-\vec q}b_{\vec q} + b_{\vec q}b_{-\vec q} + b^\dagger_{-\vec q}b_{-\vec q} + b_{\vec q}b^\dagger_{\vec q} + b^\dagger_{-\vec q}b^\dagger_{\vec q}\right\}\\
&= \frac{1}{4}\sum_{\vec q}\hbar\omega_{\vec q}\left\{b_{-\vec q}b^\dagger_{-\vec q} + b^\dagger_{\vec q}b_{\vec q} + b^\dagger_{-\vec q}b_{-\vec q} + b_{\vec q}b^\dagger_{\vec q}\right\} = \sum_{\vec q}\hbar\omega_{\vec q}\left\{b^\dagger_{\vec q}b_{\vec q} + \frac{1}{2}\right\}.
\end{aligned}$$

A noter : $\phi^\dagger_{\vec q} = \phi_{-\vec q}$ et $\Pi^\dagger_{\vec q} = \Pi_{-\vec q}$.
En commençant par $H = \sum_{\vec q}\hbar\omega_{\vec q}\left(b^\dagger_{\vec q}b_{\vec q} + \frac{1}{2}\right)$, on trouve

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{\vec q}\hbar\omega_{\vec q}\left(\left(\sqrt{\frac{M\omega_{\vec q}}{2\hbar}}\left(\phi_{-\vec q} - \frac{i}{M\omega_{\vec q}}\Pi_{\vec q}\right)\right)\left(\sqrt{\frac{M\omega_{\vec q}}{2\hbar}}\left(\phi_{\vec q} + \frac{i}{M\omega_{\vec q}}\Pi_{-\vec q}\right)\right) + \frac{1}{2}\right)\\
&= \sum_{\vec q}\frac{1}{2}M\omega^2_{\vec q}\left(\phi_{-\vec q}\phi_{\vec q} + \frac{i}{M\omega_{\vec q}}\phi_{-\vec q}\Pi_{-\vec q} - \frac{i}{M\omega_{\vec q}}\Pi_{\vec q}\phi_{\vec q} + \frac{1}{M^2\omega^2_{\vec q}}\Pi_{\vec q}\Pi_{-\vec q} + \frac{\hbar}{M\omega_{\vec q}}\right)\\
&= \sum_{\vec q}\left(\frac{1}{2}M\omega^2_{\vec q}\phi_{\vec q}\phi_{-\vec q} + \frac{1}{2M}\Pi_{\vec q}\Pi_{-\vec q} + \frac{\omega_{\vec q}}{2}\left(i\phi_{\vec q}\Pi_{\vec q} - i\Pi_{\vec q}\phi_{\vec q} + \hbar\right)\right)\\
&= \sum_{\vec q}\left(\frac{1}{2}M\omega^2_{\vec q}\phi_{\vec q}\phi_{-\vec q} + \frac{1}{2M}\Pi_{\vec q}\Pi_{-\vec q}\right)
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé $i[\phi_{\vec q}, \Pi_{\vec q}] = -\hbar$.

3. → Déterminer $b_{\vec q}(t)$ et $b^\dagger_{\vec q}(t)$ (représentation de Heisenberg).

Solution: Avec $b_{\vec q}(t) = e^{iHt/\hbar}b_{\vec q}e^{-iHt/\hbar}$, on obtient

$$\begin{aligned}
\frac{\partial}{\partial t}b_{\vec q}(t) &= \frac{i}{\hbar}He^{iHt/\hbar}b_{\vec q}e^{-iHt/\hbar} + e^{iHt/\hbar}b_{\vec q}e^{-iHt/\hbar}\left(-\frac{i}{\hbar}H\right)\\
&= \frac{i}{\hbar}Hb_{\vec q}(t) - \frac{i}{\hbar}b_{\vec q}(t)H = -\frac{i}{\hbar}[b_{\vec q}(t), H].
\end{aligned}$$

En outre,

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}b_{\vec{q}} \;=\; [b_{\vec{q}},H]=\sum_{\vec{q}'}\hbar\omega_{\vec{q}'}[b_{\vec{q}}\,,\;b^\dagger_{\vec{q}'}b_{\vec{q}'}]=\hbar\omega_{\vec{q}}b_{\vec{q}}.$$

Donc on obtient $b_{\vec{q}}(t)=e^{-i\omega_{\vec{q}}t}b_{\vec{q}}$. Similairement, $b^\dagger_{\vec{q}}(t)=e^{i\omega_{\vec{q}}t}b^\dagger_{\vec{q}}$.

4. La fonction de Green ordonnée en temps est définie comme

$$D(\vec{q},t-t')=-i\langle\phi|TB_{\vec{q}}(t)B_{-\vec{q}}(t')|\phi\rangle,$$

où $B_{\vec{q}}=b_{\vec{q}}+b^\dagger_{-\vec{q}}\propto\phi_{\vec{q}}$. Vérifier que $B_{-\vec{q}}=B^\dagger_{\vec{q}}$.

Solution:

$$B^\dagger_{\vec{q}}=b^\dagger_{\vec{q}}+b_{-\vec{q}}=b_{-\vec{q}}+b^\dagger_{\vec{q}}=B_{-\vec{q}}$$

5. Calculer $D(\vec{q},t-t')$. (On note que l'état fondamental est le vide.)

Solution: La fonction de Green ordonnée en temps donnée ci-dessus peut être définie sous la forme habituelle

$$\begin{aligned}D(\vec{q},\vec{q}';t-t') &= -i\langle\phi|TB_{\vec{q}}(t)B^\dagger_{\vec{q}'}(t')|\phi\rangle=-i\langle\phi|TB_{\vec{q}}(t)B_{-\vec{q}'}(t')|\phi\rangle\\ &= -i\langle\phi|TB_{\vec{q}}(t)B_{-\vec{q}}(t')|\phi\rangle\delta_{\vec{q},\vec{q}'}\equiv D(\vec{q},t-t')\delta_{\vec{q},\vec{q}'}.\end{aligned}$$

D'après la question précédente, $B_{\vec{q}}(t)=e^{-i\omega_{\vec{q}}t}b_{\vec{q}}+e^{i\omega_{\vec{q}}t}b^\dagger_{-\vec{q}}$. Donc

$$\begin{aligned}D(\vec{q},t-t') &= -i\Big\{\theta(t-t')\langle\phi|\left(e^{-i\omega_{\vec{q}}t}b_{\vec{q}}+e^{i\omega_{\vec{q}}t}b^\dagger_{-\vec{q}})\right)\left(e^{-i\omega_{\vec{q}}t'}b_{-\vec{q}}+e^{i\omega_{\vec{q}}t'}b^\dagger_{\vec{q}}\right)|\phi\rangle\\ &\quad+\theta(t'-t)\langle\phi|\left(e^{-i\omega_{\vec{q}}t'}b_{\vec{-}q}+e^{i\omega_{\vec{q}}t'}b^\dagger_{\vec{q}}\right)\left(e^{-i\omega_{\vec{q}}t}b_{\vec{q}}+e^{i\omega_{\vec{q}}t}b^\dagger_{-\vec{q}}\right)|\phi\rangle\Big\}\\ &= -i\Big\{\theta(t-t')e^{-i\omega_{\vec{q}}(t-t')}\langle\phi|b_{\vec{q}}b^\dagger_{\vec{q}}|\phi\rangle+\theta(t'-t)e^{i\omega_{\vec{q}}(t-t')}\langle\phi|b_{-\vec{q}}b^\dagger_{-\vec{q}}|\phi\rangle\Big\}\\ &= -i\Big\{\theta(t-t')e^{-i\omega_{\vec{q}}(t-t')}+\theta(t'-t)e^{i\omega_{\vec{q}}(t-t')}\Big\}.\end{aligned}$$

6. Déterminer $D(\vec{q},\omega)$.

Solution: Avec le résultat de la question précédente, on trouve

$$\begin{aligned}D(\vec{q},\omega) &= \int d(t-t')\,e^{i\omega(t-t')}D(\vec{q},t-t')\\ &= -i\Big\{\int_0^\infty d(t-t')\,e^{(i\omega-i\omega_{\vec{q}}-\eta)(t-t')}+\int_{-\infty}^0 d(t-t')\,e^{(i\omega+i\omega_{\vec{q}}+\eta)(t-t')}\Big\}\\ &= -i\Big\{-\frac{1}{i\omega-i\omega_{\vec{q}}-\eta}+\frac{1}{i\omega+i\omega_{\vec{q}}+\eta}\Big\}=\frac{2\omega_{\vec{q}}}{(\omega-\omega_{\vec{q}}+i\eta)(\omega+\omega_{\vec{q}}-i\eta)}\\ &= \frac{2\omega_{\vec{q}}}{\omega^2-\omega_{\vec{q}}^2+i\eta}.\end{aligned}$$

La régularisation des intégrales a été faite de la même façon que pour les électrons. Dans la dernière ligne, on a remplacé $2i\eta\omega_q$ par $i\eta$ parce qu $\omega_q > 0$ et négligé des termes d'ordre η^2.