

## TD 2 – 20 novembre 2023

*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 flèche ( $\rightarrow$ ).

### 1 Oscillateur harmonique classique et fonctions de Green

Nous considérons un oscillateur harmonique forcé avec l'équation du mouvement

$$\ddot{x}(t) + 2\alpha\dot{x}(t) + \omega_0^2 x(t) = f(t).$$

Ici  $\omega_0, \alpha > 0$  et le forçage  $f(t)$  est arbitraire.

Nous allons utiliser la méthode des fonctions de Green pour résoudre cette équation.

1. Ecrire l'équation différentielle pour la fonction de Green  $G(t - t')$ .
2. Démontrer que la transformée de Fourier de la fonction de Green  $\tilde{G}(\omega)$  est donnée par

$$\tilde{G}(\omega) = \frac{1}{-\omega^2 - 2i\alpha\omega + \omega_0^2}.$$

3. Prendre la transformée de Fourier inverse pour obtenir  $G(t - t')$  en utilisant le théorème des résidus.
4. Démontrer que

$$x(t) = \int_0^\infty dt' G(t - t') f(t')$$

est une solution de l'équation différentielle avec condition initiale  $x(0) = 0$  et  $\dot{x}(0) = 0$  pour un forçage arbitraire.

### 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 :

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

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  $V''(x^{eq})$ . Pour chaque valeur de  $\vec{q}$ , cela correspond donc à un oscillateur harmonique.

1. → On introduit les opérateurs

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

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

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

2. → Montrer que l'Hamiltonien peut s'écrire sous la forme

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

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

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

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

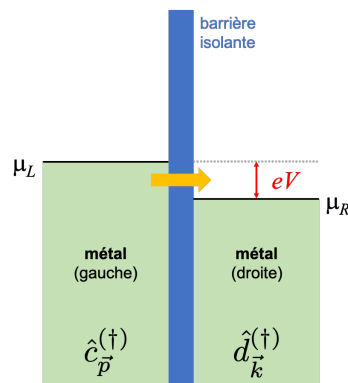
où  $B_{\vec{q}} = b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^\dagger \propto \phi_{\vec{q}}$ . Vérifier que  $B_{-\vec{q}} = B_{\vec{q}}^\dagger$ .

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

6. Déterminer  $D(\vec{q}, \omega)$ .

### 3 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 ( $L = \text{left}$ ),  $H_R$  décrit le métal de droite ( $R = \text{right}$ ) 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  $\hat{d}_{\vec{k}}^\dagger$  anticommulent.  $t_{\vec{k}\vec{p}}$  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.

### 3.1 1ère partie : Eléments de base du calcul.

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

Les électrons de conduction dans chaque métal sont considérés comme des particules libres. Le métal de gauche est au potentiel chimique  $\mu_L$  tandis que le métal de droite est au potentiel chimique  $\mu_R$ . 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  $X$ .

#### 3.1.1 Système découplé

**Cette partie est un rappel des bases : on la discutera en TD seulement s'il y a des questions.**

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.
4. Obtenir le commutateur  $[K_L, \hat{c}_{\vec{p}}]$ .
5. Montrer que la dépendance en temps des opérateurs  $\hat{c}_{\vec{p}}$  en représentation de Heisenberg est donnée par

$$\hat{c}_{\vec{p}}(t) = \hat{c}_{\vec{p}} e^{-i\xi_{\vec{p}}^L t}$$

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

6. → Donner la dépendance en temps des opérateurs  $\hat{c}_{\vec{p}}^\dagger$  en représentation de Heisenberg.
7. Calculer la fonction de Green

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

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  $\omega$  suffit pour identifier la TF.)
9. Faire un schéma pour indiquer la position des pôles de  $\mathcal{G}_L(\vec{p}, \omega)$  dans le plan complexe.
10. → Déterminer la quantité de mouvement de Fermi  $p_F^L$  en fonction de la masse  $m$  des électrons et du potentiel chimique.

Les calculs pour le métal de droite sont analogues.

### 3.2 2ème partie : Courant et réponse linéaire

Nous considérons maintenant le système complet décrit par  $H$ . Le courant tunnel peut être exprimé comme 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. → Argumenter pourquoi  $[H, N_L] = [H_T, N_L]$ .

13. → Démontrer

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

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 3, où on calculera le courant tunnel en réponse linéaire.