

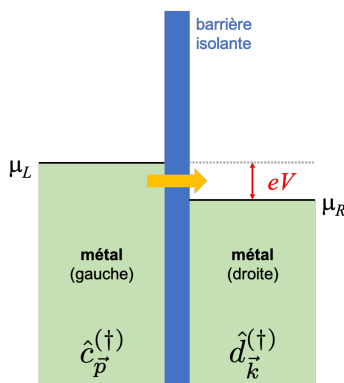
TD 3 – 18 décembre 2023

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 (→).

1 Courant tunnel entre deux métaux – 2nde 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.

Au **TD 1**, nous avons étudié les propriétés des 2 réservoirs découplés. En particulier, nous avons déterminé les fonctions de Green

$$\mathcal{G}_L(\vec{p}, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_{\vec{p}}^L + i\eta \text{sign}(|\vec{p}| - p_F^L)},$$

$$\mathcal{G}_R(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega - \xi_{\vec{k}}^R + i\eta \text{sign}(|\vec{k}| - k_F^R)}.$$

En outre, nous avons démontré que le courant tunnel prend la forme $I(t) = -e\langle \dot{N}_L(t) \rangle$ avec

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

1.1 2ème partie : Courant et réponse linéaire (SUITE)

Pour évaluer $\langle \dot{N}_L(t) \rangle$, nous allons utiliser la représentation d'interaction avec $H_0 = H_L + H_R$ et $V = H_T$.

14. → Démontrer l'expression suivante en réponse linéaire :

$$\langle \dot{N}_L(t) \rangle = -i \int_{-\infty}^t dt' \langle [\dot{N}_L^{(I)}(t), H_T^{(I)}(t')] \rangle_0 + \mathcal{O}(V^2).$$

Solution: Les “interactions” apparaissent dans la dépendance en temps de $N_L(t)$ sous la forme

$$\dot{N}_L(t) = S^\dagger(t, -\infty) \dot{N}_L^{(I)}(-\infty) S(t, -\infty) \quad \text{avec} \quad S(t, -\infty) = T \exp\left[-i \int_{-\infty}^t dt' H_T^{(I)}(t')\right].$$

Un développement jusqu'au premier ordre donne

$$\begin{aligned} \dot{N}_L(t) &= \dot{N}_L^{(I)}(t) + i \int_{-\infty}^t dt' H_T^{(I)}(t') \dot{N}_L^{(I)}(t) - i \dot{N}_L^{(I)}(t) \int_{-\infty}^t dt' H_T^{(I)}(t') + \mathcal{O}(V^2) \\ &= \dot{N}_L^{(I)}(t) - i \int_{-\infty}^t dt' [\dot{N}_L^{(I)}(t), H_T^{(I)}(t')] + \mathcal{O}(V^2). \end{aligned}$$

La moyenne $\langle \dot{N}_L^{(I)}(t) \rangle_0$ est nulle parce que H_0 conserve le nombre de particules dans le métal de gauche. Donc

$$\langle \dot{N}_L(t) \rangle = -i \int_{-\infty}^t dt' \langle [\dot{N}_L^{(I)}(t), H_T^{(I)}(t')] \rangle_0 + \mathcal{O}(V^2).$$

15. → Expliquer pourquoi, en représentation d'interaction, on peut écrire

$$\hat{X}(t) = e^{iK_0 t} e^{i(\mu_L N_L + \mu_R N_R)t} \hat{X} e^{-i(\mu_L N_L + \mu_R N_R)t} e^{-iK_0 t}$$

avec $K_0 = K_L + K_R$.

Solution: La dépendance en temps est donnée par

$$\hat{X}(t) = e^{iH_0 t} \hat{X} e^{-iH_0 t} = e^{iK_0 t + i(\mu_L N_L + \mu_R N_R)t} \hat{X} e^{-iK_0 t - i(\mu_L N_L + \mu_R N_R)t}.$$

Comme N_L et N_R commutent avec K_0 , on obtient la formule indiquée.

16. → Démontrer

$$e^{i(\mu_L N_L + \mu_R N_R)t} \hat{d}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{p}} e^{-i(\mu_L N_L + \mu_R N_R)t} = e^{-ieVt} \hat{d}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{p}}.$$

Solution:

$$\begin{aligned} e^{i(\mu_L N_L + \mu_R N_R)t} \hat{d}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{p}} e^{-i(\mu_L N_L + \mu_R N_R)t} &= e^{i\mu_R N_R t} \hat{d}_{\vec{k}}^\dagger e^{-i\mu_R N_R t} e^{i\mu_L N_L t} \hat{c}_{\vec{p}} e^{-i\mu_L N_L t} \\ &= e^{i\mu_R t} \hat{d}_{\vec{k}}^\dagger e^{-i\mu_L t} \hat{c}_{\vec{p}} = e^{-ieVt} \hat{d}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{p}}. \end{aligned}$$

En utilisant les résultats obtenues jusqu'ici, on peut écrire

$$\begin{aligned} I(t) = e \int_{-\infty}^t dt' \left\langle \left[\sum_{\vec{k}, \vec{p}} \left(t_{\vec{k}\vec{p}} e^{-ieVt} \hat{d}_{\vec{k}}^\dagger(t) \hat{c}_{\vec{p}}(t) - t_{\vec{k}\vec{p}}^* e^{ieVt} \hat{c}_{\vec{p}}^\dagger(t) \hat{d}_{\vec{k}}(t) \right), \right. \right. \\ \left. \left. \sum_{\vec{k}', \vec{p}'} \left(t_{\vec{k}'\vec{p}'} e^{-ieVt'} \hat{d}_{\vec{k}'}^\dagger(t') \hat{c}_{\vec{p}'}(t') + t_{\vec{k}'\vec{p}'}^* e^{ieVt'} \hat{c}_{\vec{p}'}^\dagger(t') \hat{d}_{\vec{k}'}(t') \right) \right] \right\rangle_0. \end{aligned}$$

17. → Expliquer comment cette formule peut être réduite à

$$\begin{aligned} I(t) = e \int_{-\infty}^t dt' e^{ieV(t'-t)} \left\langle \left[\sum_{\vec{k}, \vec{p}} t_{\vec{k}\vec{p}} \hat{d}_{\vec{k}}^\dagger(t) \hat{c}_{\vec{p}}(t), \sum_{\vec{k}', \vec{p}'} t_{\vec{k}'\vec{p}'}^* \hat{c}_{\vec{p}'}^\dagger(t') \hat{d}_{\vec{k}'}(t') \right] \right\rangle_0 \\ - e \int_{-\infty}^t dt' e^{-ieV(t'-t)} \left\langle \left[\sum_{\vec{k}, \vec{p}} t_{\vec{k}\vec{p}}^* \hat{c}_{\vec{p}}^\dagger(t) \hat{d}_{\vec{k}}(t), \sum_{\vec{k}', \vec{p}'} t_{\vec{k}'\vec{p}'} \hat{d}_{\vec{k}'}^\dagger(t') \hat{c}_{\vec{p}'}(t') \right] \right\rangle_0. \end{aligned}$$

Solution: Les termes qui ne contiennent pas le même nombre d'opérateurs de création et d'annihilation pour chacun des deux métaux sont nuls en moyenne.

On peut montrer que l'intégrand dépend de $t - t'$ seulement. Par conséquent, le courant ne dépend pas du temps. Avec un changement de variable, il peut être écrit sous la forme

$$I = e \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-ieVt} \left\langle \left[\mathcal{A}(t), \mathcal{A}^\dagger(0) \right] \right\rangle_0$$

avec

$$\mathcal{A}(t) = \sum_{\vec{k}, \vec{p}} t_{\vec{k}\vec{p}} \hat{d}_{\vec{k}}^\dagger(t) \hat{c}_{\vec{p}}(t).$$

18. → Définir des fonctions de corrélation retardées $U_R(t)$ et avancées $U_A(t)$ tel que

$$I(t) = ie \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-ieVt} U_R(t) - \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-ieVt} U_A(t) \right\}.$$

Solution: On peut écrire

$$\begin{aligned} I = ie \left(\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-ieVt} (-i)\theta(t) \left\langle \left[\mathcal{A}(t), \mathcal{A}^\dagger(0) \right] \right\rangle_0 \right. \\ \left. - \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-ieVt} i\theta(-t) \left\langle \left[\mathcal{A}(t), \mathcal{A}^\dagger(0) \right] \right\rangle_0 \right). \end{aligned}$$

Donc

$$U_R(t) = -i\theta(t)\langle [\mathcal{A}(t), \mathcal{A}^\dagger(0)] \rangle_0, \quad U_A(t) = i\theta(-t)\langle [\mathcal{A}(t), \mathcal{A}^\dagger(0)] \rangle_0.$$

En utilisant les propriétés des fonctions retardées et avancées, on conclut que

$$I = -2e\mathfrak{S}[U_R(-eV)].$$

1.1.1 La fonction de corrélation

La fonction de corrélation ordonnée en temps correspondante est donnée par

$$\mathcal{U}(t) = -i \sum_{\vec{k}, \vec{p}; \vec{k}', \vec{p}'} t_{\vec{k}\vec{p}} t_{\vec{k}'\vec{p}'}^* \langle T \hat{d}_{\vec{k}}^\dagger(t) \hat{c}_{\vec{p}}(t) \hat{c}_{\vec{p}'}^\dagger(0) \hat{d}_{\vec{k}'}(0) \rangle.$$

19. → Utiliser le théorème de Wick et les propriétés des fonctions de Green des deux métaux pour obtenir

$$\mathcal{U}(t) = -i \sum_{\vec{k}, \vec{p}} |t_{\vec{k}\vec{p}}|^2 G_L(\vec{p}, t) G_R(\vec{k}, -t).$$

Solution:

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(t) &= -i \sum_{\vec{k}, \vec{p}; \vec{k}', \vec{p}'} t_{\vec{k}\vec{p}} t_{\vec{k}'\vec{p}'}^* \langle T \hat{d}_{\vec{k}}^\dagger(t) \hat{c}_{\vec{p}}(t) \hat{c}_{\vec{p}'}^\dagger(0) \hat{d}_{\vec{k}'}(0) \rangle \\ &= i \sum_{\vec{k}, \vec{p}; \vec{k}', \vec{p}'} t_{\vec{k}\vec{p}} t_{\vec{k}'\vec{p}'}^* \langle T \hat{c}_{\vec{p}}(t) \hat{c}_{\vec{p}'}^\dagger(0) \rangle \langle T \hat{d}_{\vec{k}'}(0) \hat{d}_{\vec{k}}^\dagger(t) \rangle \\ &= -i \sum_{\vec{k}, \vec{p}; \vec{k}', \vec{p}'} t_{\vec{k}\vec{p}} t_{\vec{k}'\vec{p}'}^* G_L(\vec{p}, t) \delta_{\vec{p}, \vec{p}'} G_R(\vec{k}, -t) \delta_{\vec{k}, \vec{k}'} \\ &= -i \sum_{\vec{k}, \vec{p}} |t_{\vec{k}\vec{p}}|^2 G_L(\vec{p}, t) G_R(\vec{k}, -t). \end{aligned}$$

En utilisant les expressions pour les fonctions de Green, on trouve

$$\mathcal{U}(t) = i \sum_{\vec{k}, \vec{p}} |t_{\vec{k}\vec{p}}|^2 e^{-i(\xi_{\vec{p}}^L - \xi_{\vec{k}}^R)t} \left\{ \theta(t) \theta(|\vec{p}| - p_F^L) \theta(k_F^R - |\vec{k}|) + \theta(-t) \theta(p_F^L - |\vec{p}|) \theta(|\vec{k}| - k_F^R) \right\}.$$

20. → Démontrer

$$\begin{aligned} \mathcal{U}(\omega) &= \sum_{\vec{k}, \vec{p}} |t_{\vec{k}\vec{p}}|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - (\xi_{\vec{p}}^L - \xi_{\vec{k}}^R) - i\eta} \theta(p_F^L - |\vec{p}|) \theta(|\vec{k}| - k_F^R) \right. \\ &\quad \left. - \frac{1}{\omega - (\xi_{\vec{p}}^L - \xi_{\vec{k}}^R) + i\eta} \theta(|\vec{p}| - p_F^L) \theta(k_F^R - |\vec{k}|) \right\}. \end{aligned}$$

Solution: La transformée de Fourier de $\mathcal{U}(t)$ est donnée par

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t - |\eta|t} \mathcal{U}(t) \\
&= i \sum_{\vec{k}, \vec{p}} |t_{\vec{k}\vec{p}}|^2 \left\{ \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t - |\eta|t} e^{-i(\xi_{\vec{p}}^L - \xi_{\vec{k}}^R)t} \theta(t) \theta(|\vec{p}| - p_F^L) \theta(k_F^R - |\vec{k}|) \right. \\
&\quad \left. + \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t - |\eta|t} e^{-i(\xi_{\vec{p}}^L - \xi_{\vec{k}}^R)t} \theta(-t) \theta(p_F^L - |\vec{p}|) \theta(|\vec{k}| - k_F^R) \right\} \\
&= i \sum_{\vec{k}, \vec{p}} |t_{\vec{k}\vec{p}}|^2 \left\{ \frac{-1}{i\omega - \eta - i(\xi_{\vec{p}}^L - \xi_{\vec{k}}^R)} \theta(|\vec{p}| - p_F^L) \theta(k_F^R - |\vec{k}|) \right. \\
&\quad \left. + \frac{1}{i\omega + \eta - i(\xi_{\vec{p}}^L - \xi_{\vec{k}}^R)} \theta(p_F^L - |\vec{p}|) \theta(|\vec{k}| - k_F^R) \right\} \\
&= - \sum_{\vec{k}, \vec{p}} |t_{\vec{k}\vec{p}}|^2 \left\{ \frac{1}{\omega - (\xi_{\vec{p}}^L - \xi_{\vec{k}}^R) + i\eta} \theta(|\vec{p}| - p_F^L) \theta(k_F^R - |\vec{k}|) \right. \\
&\quad \left. - \frac{1}{\omega - (\xi_{\vec{p}}^L - \xi_{\vec{k}}^R) - i\eta} \theta(p_F^L - |\vec{p}|) \theta(|\vec{k}| - k_F^R) \right\},
\end{aligned}$$

ce qui est le résultat indiqué.

21. → Utiliser les relations entre les fonctions de Green ordonnées en temps et les fonctions de Green retardées / avancées pour déterminer $U_R(\omega)$.

Solution: Avec $U_R(\omega) = \mathcal{U}(\omega + i\delta)$, on obtient

$$\begin{aligned}
\mathcal{U}(\omega) &= \sum_{\vec{k}, \vec{p}} |t_{\vec{k}\vec{p}}|^2 \frac{1}{\omega - (\xi_{\vec{p}}^L - \xi_{\vec{k}}^R) + i\delta} \\
&\quad \left\{ \theta(p_F^L - |\vec{p}|) \theta(|\vec{k}| - k_F^R) - \theta(|\vec{p}| - p_F^L) \theta(k_F^R - |\vec{k}|) \right\}.
\end{aligned}$$

1.1.2 Le courant tunnel

Maintenant nous avons tout ce qu'il faut pour calculer le courant tunnel à travers la barrière isolante.

22. Utiliser les résultats ci-dessus et $\lim_{\delta \rightarrow 0^+} \Im[1/(x + i\delta)] = -\pi\delta(x)$ pour démontrer

$$I = 2\pi e \sum_{\vec{k}, \vec{p}} |t_{\vec{k}\vec{p}}|^2 \left[\theta(p_F^L - |\vec{p}|) \theta(|\vec{k}| - k_F^R) - \theta(|\vec{p}| - p_F^L) \theta(k_F^R - |\vec{k}|) \right] \delta(eV - \xi_{\vec{k}}^R + \xi_{\vec{p}}^L).$$

Solution: Selon l'énoncé, le courant est donné par $I = -2e\Im[U_R(-eV)]$. Avec les

résultats des questions précédentes, on trouve

$$\begin{aligned}
 I &= -2e\Im [\mathcal{U}(-eV + i\delta)] \\
 &= -2e\Im \left[\sum_{\vec{k}, \vec{p}} |t_{\vec{k}\vec{p}}|^2 \frac{1}{-eV - (\xi_{\vec{p}}^L - \xi_{\vec{k}}^R) + i\delta} \right. \\
 &\quad \left. \left\{ \theta(p_F^L - |\vec{p}|) \theta(|\vec{k}| - k_F^R) - \theta(|\vec{p}| - p_F^L) \theta(k_F^R - |\vec{k}|) \right\} \right] \\
 &= 2\pi e \sum_{\vec{k}, \vec{p}} |t_{\vec{k}\vec{p}}|^2 \left[\theta(p_F^L - |\vec{p}|) \theta(|\vec{k}| - k_F^R) - \theta(|\vec{p}| - p_F^L) \theta(k_F^R - |\vec{k}|) \right] \delta(eV - \xi_{\vec{k}}^R + \xi_{\vec{p}}^L).
 \end{aligned}$$

23. → Par la suite, on supposera $t_{\vec{k}\vec{p}} \equiv t$. Transformer les sommes sur \vec{p} et \vec{k} dans des intégrales sur $\xi_{\vec{p}}^L$ et $\xi_{\vec{k}}^R$.

Solution:

$$\begin{aligned}
 I &= 2\pi e |t|^2 L^6 \int_{-\mu_L}^{\infty} d\xi_L \nu(\mu_L + \xi_L) \int_{-\mu_R}^{\infty} d\xi_R \nu(\mu_R + \xi_R) \\
 &\quad [\theta(-\xi_L) \theta(\xi_R) - \theta(\xi_L) \theta(-\xi_R)] \delta(eV - \xi_R + \xi_L)
 \end{aligned}$$

24. Utiliser la distribution de Dirac pour évaluer l'intégrale sur ξ_R et démontrer que, pour $V > 0$,

$$I(t) = 2\pi e |t|^2 L^6 \int_{-eV}^0 d\xi_L \nu(\mu_L + \xi_L) \nu(\mu_R + \xi_L + eV)$$

Solution:

$$\begin{aligned}
 I &= 2\pi e |t|^2 L^6 \int_{-\mu_L}^{\infty} d\xi_L \nu(\mu_L + \xi_L) \nu(\mu_R + \xi_L + eV) \\
 &\quad [\theta(-\xi_L) \theta(\xi_L + eV) - \theta(\xi_L) \theta(-\xi_L - eV)] \\
 &= 2\pi e |t|^2 L^6 \left[\int_{-eV}^0 d\xi_L \nu(\mu_L + \xi_L) \nu(\mu_R + \xi_L + eV) \theta(V) \right. \\
 &\quad \left. - \int_0^{-eV} d\xi_L \nu(\mu_L + \xi_L) \nu(\mu_R + \xi_L + eV) \theta(-V) \right].
 \end{aligned}$$

Pour $V > 0$ seulement le premier terme est non-nul ce qui donne le résultat indiqué.

25. → Approximer les densités d'états par leur valeurs au niveau de Fermi et trouver le résultat final pour le courant.

Solution: En prenant $\nu(\mu_L + \xi_L) \approx \nu(\mu_L) = \nu_L$ et $\nu(\mu_R + \xi_L + eV) \approx \nu(\mu_R) = \nu_R$, on obtient

$$I = 2\pi e |t|^2 \nu_L \nu_R L^6 \int_{-eV}^0 d\xi_L = 2\pi e^2 V |t|^2 \frac{1}{L^6} \nu_L \nu_R.$$

26. Discuter le résultat.

Solution: Seulement les électrons avec énergies entre μ_R et μ_L participent au courant. Le courant est donc proportionnel à $\mu_L - \mu_R = eV$. Le courant est aussi proportionnel à $|t|^2$ ce qui correspond à une probabilité de passer d'un côté à l'autre par effet tunnel. Finalement les densités d'états déterminent le nombre d'états qui contribuent au courant.