



#### Fonctions localisées à l'échelle du réseau et associées aux bandes d'énergie

Dans la définition  $|w_{n,0}\rangle = \left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} |\psi_{n,q}\rangle \, dq$  le choix de la phase de Particule libre Particule dans un réseau chaque onde de Bloch  $|\psi_{n,q}\rangle \rightarrow e^{i\theta_n(q)}|\psi_{n,q}\rangle$  joue un rôle essentiel  $\ket{w_{n,j}} \propto \int_{-\pi/a}^{\pi/a} e^{-ijaq} \ket{\psi_{n,q}} dq$  $|x\rangle = \int e^{-ixp/\hbar} |p\rangle dp$  $|w_{n,0}
angle \propto \int_{-\pi/a}^{\pi/a} |\psi_{n,q}
angle \, dq$  $|x=0
angle = \int |p
angle dp$ Walter Kohn (1959) Si le potentiel V(x) est pair [V(x) = V(-x)] et si les bandes d'énergie sont disjointes. alors il existe un choix unique de phase tel que : coef. de normalisation :  $\left(\frac{a}{2\pi}\right)^{1/2}$  la fonction de Wannier est réelle • la fonction de Wannier est paire ou impaire vis à vis de x = 0 ou x = a / 2On peut vérifier que la fonction  $w_{n,i}(x)$  se déduit de  $w_{n,0}(x)$  par une translation • la fonction de Wannier décroît exponentiellement vite à l'infini de *j* périodes du réseau :  $w_{n,i}(x) = w_{n,0}(x - ja)$ Propriétés des fonctions de Wannier  $|w_{n,j}\rangle \propto \int_{-\pi/e}^{\pi/a} e^{-ijaq} |\psi_{n,q}\rangle dq$ Transformée de Fourier des fonctions de Wannier **Rappel :** la forme de Bloch  $\psi_{n,q}(x) = e^{ixq}u_{n,q}(x)$  avec  $u_{n,q}(x)$  périodique **Translation :**  $w_{n,j}(x) = w_{n,0}(x - ja)$ permet d'écrire Il suffit de connaître une fonction de Wannier associée à la bande n  $u_{n,q}(x) = \sum_{n,j=1}^{+\infty} C_{n,j}(q) e^{i j 2\pi x/a}$ **Inversion :** connaissant la fonction de Wannier associée à la bande n, on peut  $\psi_{n,q}(x) = \sum_{i=1}^{+\infty} C_{n,j}(q) e^{i x(q+j 2\pi/a)}$ reconstruire toutes les fonctions de Bloch de cette bande peigne d'ondes planes  $\psi_{n,q}(x) \propto \sum_{i=1}^{+\infty} w_{n,0}(x-ja) e^{ijaq}$ Introduisons la transformée de Fourier de la fonction de Wannier associée à la bande n**Orthogonalité :**  $\int w_{n,j}(x) w_{n',j'}(x) dx = \delta_{n,n'} \delta_{j,j'}$  $\tilde{w}_n(\kappa) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} w_{n,0}(x) \ e^{-ix\kappa} \ dx$ orthogonalité interbandes orthogonalité intersites On peut alors montrer :  $C_{n,j}(q) = \frac{1}{\sqrt{a}} \tilde{w}_n(q + 2\pi j/a)$ En particulier  $w_{n,0}(x)$  et  $w_{n,0}(x-a)$  sont orthogonales

Importance du choix de la phase des fonctions de Bloch



## Largeur des bandes permises dans le cas $V_0 \gg E_r$

Pour le potentiel sinusoïdal. l'équation aux valeurs propres pour l'hamiltonien a la structure d'une équation de Mathieu. On dispose de plusieurs résultats analytiques dans la limite  $V_0 \gg E_r$ 

Largeur de la bande fondamentale :  $\frac{W_0}{E_r} \approx \frac{16}{\sqrt{\pi}} \left(\frac{V_0}{E_r}\right)^{3/4} \exp\left[-2\left(\frac{V_0}{E_r}\right)^{1/2}\right]$ 

variation exponentielle par rapport à la racine de la hauteur de la barrière caractéristique de l'effet tunnel



Rappel :  $E_r/h$  est d'ordre quelques kHz à quelques dizaines de kHz

### Eléments de matrice des sauts entre voisins



L'élément de matrice est donné par

$$J_n(j) = \int w_{n,j}^*(x) \,\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)\right) \,w_{n,0}(x) \,dx$$

Quand la profondeur du réseau augmente, la zone de l'espace où  $w_{n,0}(x)$  et  $w_{n,j}(x)$ prennent toutes deux des valeurs significativement différentes de 0 diminue.



## Eléments de matrice des sauts entre voisins



L'élément de matrice est donné par  $J_n(j) = \int w_{n,j}^*(x) \,\left(\frac{\hat{p}^2}{2m} + V(x)\right) \,w_{n,0}(x) \,dx$ 

Quand la profondeur du réseau augmente, la zone de l'espace où  $w_{n,0}(x)$  et  $w_{n,i}(x)$ prennent toutes deux des valeurs significativement différentes de 0 diminue.



### Spectre en énergie pour des potentiels très profonds



Si on néglige complètement les sauts entre voisins et si on linéarise au voisinage du fond des puits :

$$V(x) = V_0 \sin^2(kx) \approx V_0 k^2 x^2$$
 
$$V_0 \gg E_{\rm r}$$

Oscillateur harmonique de pulsation  $\omega$  telle que  $\hbar\omega = 2\sqrt{V_0E_{\rm r}}$ , dont l'état fondamental a pour taille caractéristique  $a_{\rm oh} = (\hbar/m\omega)^{1/2}$  et un spectre en  $(n + 1/2)\hbar\omega$ 

Ce développement a un sens si  $ka_{\rm oh} = \left(E_{\rm r}/V_0\right)^{1/4} \ll 1$ 

Pour fixer les idées, imposons  $\,ka_{
m oh} \leq 1/2\,$  , soit  $\,V_0/E_{
m r} \geq 16$  .

Pour  $V_0 = 16E_r$ , le quantum d'énergie pour l'oscillateur harmonique vaut  $\hbar\omega = 8E_r$  $\longrightarrow$  Etat fondamental à  $4E_r$ , premier état excité à  $12E_r$ 





## Simplification du terme d'interaction pour les liaisons fortes

• On se limite à la bande fondamentale

énergie d'interaction << gap entre la bande fondamentale et la 1<sup>ère</sup> bande excitée  $n_1 = n_2 = n_3 = n_4 = 0$ 

Recouvrement négligeable entre des fonctions de Wannier centrées sur différents sites

 $j_1 = j_2 = j_3 = j_4$ : deux atomes n'interagissent entre eux que s'ils sont sur le même site

L'intégrale restante est la même pour tous les sites j :  $\int w_{0,j}^4(x) \ dx$ 

$$\hat{H}_{\text{int}} \approx \frac{U}{2} \sum_{j} \hat{n}_{j} \left( \hat{n}_{j} - 1 \right)$$
  $U = g \int^{\circ} w_{0,0}^{4}(x) \, dx \approx \frac{g}{\sqrt{2\pi} \, a_{\text{ob}}}$ 

# Interactions dans le modèle de Hubbard

Interactions à courte portée, modélisée par un potentiel de contact (à régulariser)

$$W(\vec{r_1} - \vec{r_2}) = g \ \delta(\vec{r_1} - \vec{r_2})$$
  $g = \frac{4\pi \hbar^2 a_d}{m}$   $a_d$ : longueur de diffusion

Ecriture en seconde quantification (pour des bosons)

$$\hat{H}_{\rm int} = \frac{g}{2} \int \hat{\Psi}^{\dagger}(x) \, \hat{\Psi}^{\dagger}(x) \, \hat{\Psi}(x) \, \hat{\Psi}(x) \, dx \qquad (\text{version 1D})$$

où  $\hat{\Psi}(x)$  est l'opérateur destruction d'une particule au point x, qui s'écrit en fonction des fonctions de Wannier

$$\hat{\Psi}(x) = \sum_{n,j} w_{n,j}(x) \ \hat{b}_{n,j} \qquad \qquad \hat{b}_{n,j} : \text{détruit une particule dans} \\ \text{la fonction de Wannier } w_{n,j}(x)$$

#### On arrive à une expression bien compliquée !!!

$$\hat{H}_{\text{int}} = \frac{g}{2} \sum_{n_1, j_1} \sum_{n_2, j_2} \sum_{n_3, j_3} \sum_{n_4, j_4} \hat{b}^{\dagger}_{n_3, j_3} \hat{b}^{\dagger}_{n_4, j_4} \hat{b}_{n_1, j_1} \hat{b}_{n_2, j_2}$$

$$\times \int w_{n_1, j_1}(x) \ w_{n_2, j_2}(x) \ w_{n_3, j_3}(x) \ w_{n_4, j_4}(x) \ dx$$

### **Energie d'interaction à trois dimensions**

#### A trois dimensions, à partir de

$$(-\vec{r_2}) = g \; \delta(\vec{r_1} - \vec{r_2})$$
  $g = rac{4\pi \hbar^2 a_d}{m}$   $a_d$  : longueur de diffusion

0

 $\hat{H}_{\text{int}}$ 

 $W(\vec{r_1})$ 

$$\approx \frac{U^{(3D)}}{2} \sum_{\vec{j}} \hat{n}_{\vec{j}} \left( \hat{n}_{\vec{j}} - 1 \right) \qquad \qquad \frac{U^{(3D)}}{E_{\rm r}} = \sqrt{\frac{8}{\pi}} k a_d \left( \frac{V_0}{E_{\rm r}} \right)^{3/4}$$

En dehors d'une résonance de diffusion,  $a_d$  est d'ordre nanométrique : pour  $V_0/E_{
m r} pprox 10$  à 30, on trouve  $U^{
m (3D)}/E_{
m r} pprox 0.01$  à 1







$$= \underbrace{B}_{\text{cellule } i}^{J'} \underbrace{A}_{\text{cellule } i}^{J} \underbrace{A}_{\text{cellule } i+1}^{J'}$$

On reporte la forme de Bloch  $|\psi_q\rangle = \sum_j e^{ijaq} \left( \alpha_q |w_{A,j}\rangle + \beta_q |w_{B,j}\rangle \right)$ dans l'hamiltonien  $\hat{H} = -J \sum_j |w_{B,j}\rangle \langle w_{A,j}| - J' \sum_j |w_{A,j+1}\rangle \langle w_{B,j}| + \text{h.c.}$ 

On obtient le même système 2x2 en chaque site du réseau :

 $\hat{\mathcal{H}}(q) \begin{pmatrix} \alpha_q \\ \beta_q \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} \alpha_q \\ \beta_q \end{pmatrix} \qquad \qquad \hat{\mathcal{H}}(q) = - \begin{pmatrix} 0 & J + J'e^{-iaq} \\ J + J'e^{iaq} & 0 \end{pmatrix}$ 

hamiltonien dans l'espace réciproque

Ce modèle de Hubbard à deux sites est équivalent au problème d'un spin ½ dont l'hamiltonien dépend d'un paramètre continu q ( ou  $\vec{q}$  à plusieurs dimensions)

Des propriétés topologiques non triviales peuvent émerger du fait de l'invariance  $q 
ightarrow q + 2\pi/a$ 

# Le super-réseau (suite)

$$= \underbrace{B}^{J'} \underbrace{A}^{J} \underbrace{B}^{J'} \underbrace{A}^{J} \underbrace{B}^{J'} \underbrace{B}$$

#### Les bandes d'énergie pour ce super-réseau : valeurs propres de

$$\hat{\mathcal{H}}(q) = \begin{pmatrix} 0 & -J - J'e^{-iaq} \\ -J - J'e^{iaq} & 0 \end{pmatrix}$$

$$E(q) = \pm \left| J + J'e^{iaq} \right| = \pm \left( J^2 + J'^2 + 2JJ'\cos(aq) \right)^{1/2}$$



# Le super-réseau (suite)



Les bandes d'énergie pour ce super-réseau : valeurs propres de

$$\hat{\mathcal{H}}(q) = \begin{pmatrix} 0 & -J - J'e^{-iaq} \\ -J - J'e^{iaq} & 0 \end{pmatrix}$$
$$E(q) = \pm \left| J + J'e^{iaq} \right| = \pm \left( J^2 + J'^2 + 2JJ'\cos(aq) \right)^{1/2}$$

bandes rouges et bleues :  $J = J_0$ ,  $J' = J_0/2$ bandes noires :  $J = J' = 3J_0/4$ 



### Réalisation expérimentale d'un super-réseau

Fölling et al. 2007 :



Contrôle des intensités et de la phase relative des deux ondes stationnaires à l'emplacement des atomes

#### Manipulation de l'effet tunnel via l'interaction entre deux atomes

Utilisation d'une déformation des puits et de la méthode de dépliement de bande pour mesurer séparément l'occupation des sites A et B :



