

Seconde Quantification

Thierry Klein

thierry.klein@neel.cnrs.fr - 04 76 88 90 64
9-10 Cours + 6-5 TDs (théorie BCS)

1. Fonction d'ondes à N particules

Rappels (fonctions d'ondes, opérateur) : première quantification

Indiscernabilité, dégénérescence d'échange

Fermions/Bosons, déterminants de Slater

Opérateurs création et annihilation

2. Seconde quantification

Hamiltonian d'un ensemble de N particules sans interaction

Opérateurs champ, opérateur densité

Expression des opérateurs usuels en seconde quantification

3. Approximation de Hartree-Fock

Définition, intégrale de Coulomb et d'échange

Approximation champ moyen

4. Interaction electron-phonon

Seconde quantification pour les bosons

Processus de diffusion electron-phonon

interaction effective electron(-phonon-)electron

Chap.1

Fonction d'onde à N particules

La mécanique quantique repose sur la définition d'une **fonction d'onde** complexe = un **vecteur** d'un espace de Hilbert de dimension (in)finie = la connaissance de l'état quantique (à t_0) est **complètement** contenue dans cette fonction d'onde

Densité de probabilité de trouver la particule dans un volume d^3x : $\omega(x) = |\Phi(x)|^2$

La fonction d'onde peut alors être **décomposée** sur une **base** de fonctions d'ondes particulières = **paquet d'ondes** :

$$\rightarrow \Phi(x) = \sum a_k \Phi_k(x)$$

par exemple les **ondes planes** (vecteurs propres de l'opérateur p)

$$\Phi_k(x) \equiv e^{i(kx - \omega t)} \text{ et } \Phi(x) = 1/\sqrt{2\pi} \int \psi(k) \Phi_k(x) dk$$

ou les **fonctions de Dirac** (vecteurs propres de l'opérateur x) :

$$\Phi(x) = \int \Phi(x') \delta(x - x') dx'$$

mais certains états quantiques (spin par exemple) ne peuvent pas être définis à partir d'une fonction $\Phi(x) \Rightarrow$ généralisation de la notation

Notation de Dirac espace des «ket» : $|n\rangle$

$$|\Phi\rangle = \sum \lambda_n |n\rangle \quad |\Phi\rangle = \begin{pmatrix} \lambda_1 \\ \lambda_2 \\ \dots \\ \lambda_n \\ \dots \end{pmatrix} = \text{vecteur «colonne» (de dimension (in)finie)}$$

on définit un espace dual = espace des «bra» : $\langle n|$

$$\sum \lambda_n |n\rangle \rightarrow \sum \lambda_n^* \langle n| = \text{vecteur «ligne» (de même dimension)}$$

Espace de Hilbert $\Rightarrow$ produit scalaire $\langle n|m\rangle$

dans l'espace des positions, on a $\langle \Phi_1 | \Phi_2 \rangle = \int \Phi_1^*(x) \Phi_2(x) dx$

on note $|x_0\rangle \leftrightarrow \delta(x - x_0)$ l'état «particule en x_0 »

alors $\langle x | \Phi \rangle = \Phi(x)$ par exemple $\langle x | p \rangle = 1/\sqrt{2\pi\hbar} e^{ipx/\hbar}$

Remarque : $|\Phi\rangle = \sum \langle \Phi_n | \Phi \rangle |\Phi_n\rangle = (\sum |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n|) |\Phi\rangle$
 donc $\sum |\Phi_n\rangle \langle \Phi_n| = \text{Id}$: relation de fermeture

A toute propriété *observable* (position, énergie,...) est associée un opérateur (A) agissant sur les vecteurs (sous espace) définis en P1

Un opérateur transforme une fonction d'onde (un vecteur) en une autre fonction d'onde (autre vecteur).

en notation de Dirac, A est une **matrice** nxn

$$A = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \dots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \dots & a_{2n} \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ a_{1n} & a_{2n} & \dots & a_{nn} \end{pmatrix}$$

Les opérateurs seront toujours **LINEAIRES** $A[\alpha_1 \Phi_1 + \alpha_2 \Phi_2] = \alpha_1 A[\Phi_1] + \alpha_2 A[\Phi_2]$

Opérateur adjoint : $\langle A\Phi | \Psi \rangle = \langle \Phi | A^\dagger \Psi \rangle$

Opérateur *Hermitique* = auto-adjoint $A = A^\dagger$

$$(A^\dagger)^\dagger = A, (\lambda A)^\dagger = \lambda^* A^\dagger, (A + B)^\dagger = A^\dagger + B^\dagger, (AB)^\dagger = B^\dagger A^\dagger$$

Un opérateur associé à une grandeur physique mesurable est appelé **observable**
il est alors hermitique (valeur propre réelle)

MOYENNE (statistique) de l'observable : $\langle A \rangle = \frac{\int \Phi^*(x) A[\Phi(x)] dx}{\int \Phi^*(x) \Phi(x) dx} = \frac{\langle \Phi | A \Phi \rangle}{\langle \Phi | \Phi \rangle}$

Une mesure de la grandeur physique associée à A ne peut donner qu'une *valeur propre* de A. La moyenne est PARFAITEMENT DEFINIE

$$\Phi = \sum c_n \Phi_n \text{ et } \langle A \rangle = \sum a_n |c_n|^2$$

mais le résultat d'une mesure particulière est probabiliste,

il donnera a_n avec la **probabilité** :

$$|c_n|^2 = | \langle \Phi_n | \Phi \rangle |^2$$

après la mesure, l'état du système est *projeté* dans le sous-espace engendré par le(s) vecteur(s) propre(s) associé(s) à la valeur propre mesurée

$$c_n = \int \Phi_n^*(x) \Phi(x) dx$$

L'évolution temporelle du système est *totalelement déterminée* par l'équation de Schrödinger

$$H\Phi = i\hbar \partial\Phi/\partial t \quad i\hbar \frac{\partial c_n}{\partial t} = \sum_m \langle \Phi_n | H | \Phi_m \rangle c_m$$

$$-\frac{\hbar^2 \Delta}{2m} + V(x) = \text{HAMILTONIEN (énergie totale)}$$

$$\Phi(x, t) = \sum c_n(0) e^{-iE_n t/\hbar} \Phi_n$$

$$x[\Phi(x)] = x \times \Phi(x)$$

$$\hat{p}[\Phi(x)] = \frac{\hbar \vec{\nabla}(\Phi(x))}{i}$$

$$[x, p] = i\hbar$$

Comme toute autre grandeur x et p sont soumis au principe d'incertitude

$$\Delta a = \sqrt{\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2}$$

$$\Delta a \Delta b \geq | \langle [A, B] \rangle | / 2$$

= écart type de la distribution des résultats de la mesure sur un ensemble de N particules identiques (largeur de l'histogramme)

Mécanique classique = espace des phases $\mathbf{E(x,p)}$: la « **première** » **quantification** repose sur l'attribution aux variables physiques (x et p) des **opérateurs**

Si l'espace est fini ($\Delta x \neq 0$) ceci conduit à la (première) quantification de l'énergie et des états propres associés MAIS l'Hamiltonien de départ était lui « classiquement » **continu**.

Mais cela devient *problématique* lorsque l'on a affaire à plusieurs (un grand nombre de) particules car les **interactions** entre ces particules sont elles directement **quantifiées** : **c'est la seconde quantification**

La difficulté provient du fait que pour résoudre les équations de Schrodinger (d'un très grand nombre de particules) afin de déterminer les fonctions d'onde il faut... connaître ces fonctions d'ondes ! La « position » des différentes particules déterminent directement le potentiel d'interaction (pour l'atome d'hydrogène le noyau pouvait être considéré comme fixe).

Chaque particule se déplace dans le « paysage » crée par les autres
= **champ** (quantique).

Attention ce n'est pas ici un nouveau *postulat* de la mécanique quantique mais juste une difficulté naturelle liée à la résolution d'un problème complexe.

Et de plus **l'indiscernabilité** fait que

$$\Phi(r_1, r_2, \dots, r_N) \neq \Phi_1(r_1)\Phi_2(r_2) \dots \Phi_N(r_N)$$

Les particules peuvent «s'échanger » (= **dégénérescence d'échange**) et il convient donc de définir des fonctions d'ondes *globales* à N particules. Ces fonctions d'ondes vont définir le champ de particules et rajouter (ou enlever) une particule va modifier foncièrement ce champ = **excitations**

Les particules élémentaires : *leptons* (non soumis à l'interaction forte) = électrons, muons, neutrinos,... et *quarks* (soumis à toutes les interactions) sont toutes de spin **demi-entier**, on les appelle ces **FERMIONS**

on appelle **BOSONS** les particules de spin **entier** = bosons de jauge
= intermédiaires des interactions fondamentales

(photon = interaction électromagnétique, gluons = interaction forte,
 Z_0, W = interaction faible et... le boson de Higgs)

ou des bosons composites : He4, les électrons d'une paires (de Cooper) dans les supraconducteurs, les excitons....

L'Hamiltonien des N particules (INDISCERNABLES) est invariant par permutation

$$H(r_1, r_2, \dots, r_i, \dots, r_j, \dots, r_N) = H(r_1, r_2, \dots, r_j, \dots, r_i, \dots, r_N)$$

$[H, P_{ij}] = 0$ et la fonction d'onde est donc également un état propre de

l'opérateur permutation P_{ij} :

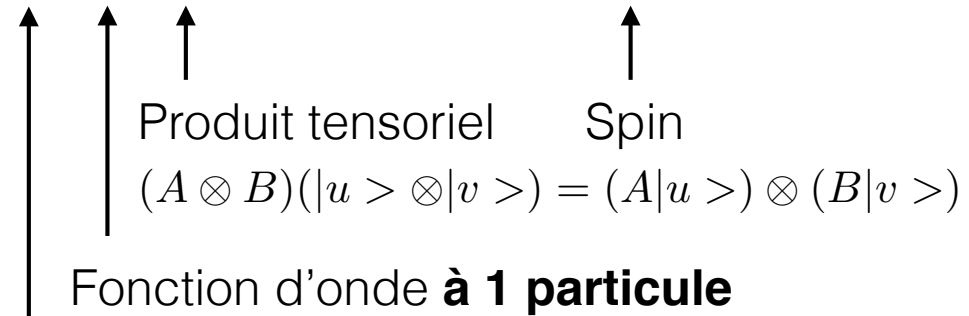
$$P_{ij}\Phi(r_1, r_2, \dots, r_i, \dots, r_j, \dots, r_N) = \lambda\Phi(r_1, r_2, \dots, r_j, \dots, r_i, \dots, r_N) \text{ et } P_{ij}^2 = \text{Id} \text{ donc}$$

$$\lambda^2 = 1, \lambda = \pm 1. \text{ La fonction d'onde est donc}$$

soit **symétrique = bosons** ($\lambda = +1$), soit **antisymétrique = fermions** ($\lambda = -1$)

la fonction d'onde doit être **ANTISYMETRIQUE** soit en spin, soit en orbital

$$|\Phi(r_1, r_2, \dots, r_N, s_1, s_2, \dots, s_N)\rangle_{\pm} = S_{\pm} [|\phi_1 \otimes \phi_2 \otimes \dots \phi_N\rangle \otimes |s_1 \otimes s_2 \otimes \dots s_N\rangle]$$



$$S_+ = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum P_{\pi} \text{ et } S_- = \frac{1}{\sqrt{n!}} \sum (-1)^{\pi} P_{\pi} \text{ où } \pi \text{ est l'ordre de la permutation}$$

Par exemple à 2 particules : $\phi_1(r_1)\phi_2(r_2) - \phi_1(r_2)\phi_2(r_1)$ si $|\text{spin}\rangle$ symétrique ou

$\phi_1(r_1)\phi_2(r_2) + \phi_1(r_2)\phi_2(r_1)$ si $|\text{spin}\rangle$ anti-symétrique et à 3 particules :

$$\begin{array}{cccccc} \phi_1(r_1)\phi_2(r_2)\phi_3(r_3) - \phi_1(r_1)\phi_2(r_3)\phi_3(r_2) - \phi_1(r_2)\phi_2(r_1)\phi_3(r_3) - \phi_1(r_3)\phi_2(r_2)\phi_3(r_1) + \phi_1(r_2)\phi_2(r_3)\phi_3(r_1) + \phi_1(r_3)\phi_2(r_1)\phi_3(r_2) \\ \pi = 0 & \pi = 1 & \pi = 1 & \pi = 1 & \pi = 2 & \pi = 2 \end{array}$$

On ne peut pas mettre deux fermions dans le même état quantique
(= tous nombres quantiques : n,l,m... ET spins identiques).

En effet si $\phi_i = \phi_j$ alors $|\Phi\rangle = 0$

C'est le **principe d'exclusion de Pauli**

Mais pour des bosons c'est bien sur possible $|n,0,\dots,0\rangle = |\phi_0 \otimes \phi_0 \otimes \dots \phi_0\rangle$
 Et, en l'absence d'interaction si ϕ_0 est l'état propre du fondamental à 1 particule, cette condensation (de Bose) permet d'obtenir l'état fondamental du système à N particules.
 Ce n'est si simple en présence d'interactions : voir superfluidité et théorie BCS (TD).

De façon générale pour N particules la fonction d'onde des fermions peut être écrite comme

$$|\Phi_N\rangle = D_{l_1,\dots,l_N}(r_1,\dots,r_N) = \frac{1}{\sqrt{N!}} \begin{vmatrix} \phi_{l_1}(r_1) & \dots & \phi_{l_1}(r_N) \\ \dots & \dots & \dots \\ \phi_{l_N}(r_1) & \dots & \phi_{l_N}(r_N) \end{vmatrix} \quad \text{Déterminant de Slatter}$$

Les $\{l_i\}$ = choix des fonctions d'ondes à une particule
 (généralisable si on rajouter le spin l_i = espace ou spin)

Remarque 1 : les états $\Phi_{l_1 l_2 \dots l_N}$ ainsi construits ne sont pas, en général, des états propres du hamiltonien du système formé par les N fermions, mais ils forment une base complète.

Remarque 2 : deux déterminants de Slater qui ne diffèrent que par l'ordre des N indices $l_1 l_2 \dots l_N$, et donc éventuellement par leurs signes, représentent le même état quantique.

Enfin, *jusqu'à présent* le nombre le nombre de particules était conservé. Mais pour avoir une description d'un système avec un **nombre de particules variable** nous devons passer de la représentation des (x_i, p_i) à un nouveau type de représentation : "la représentation de **nombre d'occupation**" : cet élément est fondamental dans la *seconde quantification*

Mais si on rajoute une $(N+1)^e$ particule avec l'état ϕ_{N+1}

$$|\Phi_{N+1}\rangle \neq |\Phi_N\rangle \otimes |\phi_{N+1}\rangle$$

Mais il s'agit d'ajouter une ligne et une colonne au déterminant car le nouvel état devient « accessible » pour toutes les autres particules du fait de la dégénérescence d'échange

$$|\Phi_{N+1}\rangle = \frac{1}{\sqrt{(N+1)!}} \begin{vmatrix} \phi_1(r_1) & \dots & \phi_1(r_N) \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \phi_N(r_1) & \dots & \phi_N(r_N) \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \phi_1(r_{N+1}) \\ \vdots \\ \phi_N(r_{N+1}) \end{vmatrix}$$

$$\begin{vmatrix} \phi_{N+1}(r_1) & \dots & \phi_{N+1}(r_N) & \phi_{N+1}(r_{N+1}) \end{vmatrix}$$

C'est extrêmement lourd...

Et en plus les « choix » possibles pour les ϕ_i sont (a priori) infinis (mais tous différents) ...

avec $\sum_n \phi_n^*(x) \phi_n(x) = \delta(x - x')$ [relation de fermeture]

On introduit un *nouvel* opérateur : l'**opérateur création** (et annihilation) : $c_i^\dagger$ (c_i)

Pour les fermions : $c_i^\dagger c_j^\dagger = -c_j^\dagger c_i^\dagger$ pour respecter l'antisymétrie

en particulier : $(c_i^\dagger)^2 = (c_i)^2 = 0$ c'est le principe d'exclusion

et de même $c_i c_j + c_j c_i = 0$ si on prend les valeurs conjuguées

et $c_i c_j^\dagger + c_j^\dagger c_i = \delta_{ij}$ pour normer la fonction d'onde
(voir ci-dessous)

La fonction d'onde peut alors s'écrire : $|\Phi_n\rangle = c_{l_1}^\dagger c_{l_2}^\dagger \dots c_{l_n}^\dagger |0\rangle$

ou $|0\rangle$ est l'état du vide avec $c_i |0\rangle = 0$

et les l_i sont les « choix » de l'état à 1 particule pour la particule i :

on rajoute une particule i dans le système **avec** l'état ϕ_{l_i}

(on ne crée pas la particule i **dans** l'état ϕ_{l_i})

$$\text{Par exemple : } c_i^\dagger c_j^\dagger |0\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (\phi_i(x_1)\phi_j(x_2) - \phi_i(x_2)\phi_j(x_1))$$

Pour caractériser chacun des états $\Phi_{l_1 l_2 \dots l_N}$, une fois choisie la base d'états ϕ_l à une particule, il suffit d'indiquer quelles sont les N valeurs distinctes $l_1, l_2, \dots, l_N$ de l'indice l qui ont été choisies pour le construire, les N états à une particule associés à ces N valeurs de l'indice l étant alors occupés de manière indiscernable par les N particules. Et le formalisme de la seconde quantification consiste à représenter l'état $\Phi_{l_1 l_2 \dots l_N}$, antisymétrique par rapport à l'ensemble des N fermions

$$|\Phi_n\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle = \prod_{l=1}^{\infty} (c_l^\dagger)^{n_l} |0\rangle \quad \text{où les } n_l \text{ valent 0 ou 1 (pour des fermions)}$$

On obtient alors tous les états de la base en prenant tous les jeux de $\{n_l\}$ possibles avec $n = \sum_{l=1}^{\infty} n_l$

Cette représentation est bien adaptée aux calculs d'un ensemble (**grand canonique**) pour lequel le nombre de particule **n'est pas fixé**.

Et elle est bien de norme 1....

$$\begin{aligned}
 & \langle 0 | c_n \dots c_2 c_1 c_1^\dagger c_2^\dagger \dots c_n^\dagger | 0 \rangle \\
 &= \langle 0 | c_n \dots c_2 (1 - c_1^\dagger c_1) c_2^\dagger \dots c_n^\dagger | 0 \rangle \\
 &= \langle 0 | c_n \dots c_2 c_2^\dagger \dots c_n^\dagger \rangle - \langle 0 | c_n \dots c_1^\dagger c_1 c_2^\dagger \dots c_n^\dagger | 0 \rangle \\
 &= \langle 0 | c_n \dots c_2 c_2^\dagger \dots c_n^\dagger \rangle - \langle 0 | c_n \dots c_1^\dagger c_2^\dagger \dots c_n^\dagger \underbrace{c_1}_{\rightarrow 1 - c_2^\dagger c_2} | 0 \rangle \\
 &\quad \xrightarrow{\text{on recommence}} \rightarrow \langle 0 | 0 \rangle = 1.
 \end{aligned}$$

$$c_l^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_l, \dots, n_\infty\rangle = (-1)^{\nu_l} \sqrt{1 - n_l} |n_1, n_2, \dots, n_{l+1}, \dots, n_\infty\rangle$$

$$c_l |n_1, n_2, \dots, n_l, \dots, n_\infty\rangle = (-1)^{\nu_l} \sqrt{n_l} |n_1, n_2, \dots, n_{l-1}, \dots, n_\infty\rangle$$

où ν_l est le nombre d'états occupés (= permutation à faire) pour $l' < l$

Cet état est nul si $n_l = 1$ pour les fermions (double occupation impossible)

Remarque: $n_l = 0$ ou 1 seulement $\Rightarrow \sqrt{n_l} = n_l$ et $\sqrt{1 - n_l} = 1 - n_l$, et il y a plusieurs

formulations possibles de l'action des opérateurs $c_l^\dagger$ et c_l sur les états de la base, pour des fermions,

$$\text{En effet: } c_l |n_1, n_2, \dots, n_l, \dots, n_\infty\rangle = (-1)^{\nu_l} \sqrt{n_l} |n_1, n_2, \dots, n_{l-1}, \dots, n_\infty\rangle$$

et donc

$$c_l^\dagger c_l |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle = n_l |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle$$

$$c_l^\dagger c_l |n_1, n_2, \dots, n_l, \dots, n_\infty\rangle = (-1)^{\nu_l} \sqrt{n_l} c_l^\dagger |n_1, n_2, \dots, n_{l-1}, \dots, n_\infty\rangle$$

$$= (-1)^{\nu_l} \sqrt{n_l} (-1)^{\nu_l} \sqrt{1 - (n_l - 1)} |n_1, n_2, \dots, n_l, \dots, n_\infty\rangle$$

$$= n_l |n_1, n_2, \dots, n_l, \dots, n_\infty\rangle, \text{ puisque } \sqrt{n_l(2 - n_l)} = \begin{cases} 0, & \text{si } n_l = 0 \\ 1, & \text{si } n_l = 1 \end{cases} = n_l$$

Les états $|n_1 n_2, \dots n_\infty\rangle$ sont donc des états propres de $c_l^\dagger c_l$ avec la valeur propre 0 ou 1

$c_l^\dagger c_l$ est l'opérateur « **nombre d'occupation** »

et $c_l c_l^\dagger |\dots n_l\rangle = (1 - n_l) |\dots n_l\rangle$, on retrouve bien $c_l c_l^\dagger + c_l^\dagger c_l = 1$

Remarque 1. $(c_l^\dagger c_l)^2 = c_l^\dagger c_l c_l^\dagger c_l = c_l^\dagger (1 - c_l^\dagger c_l) c_l = c_l^\dagger c_l - (c_l^\dagger)^2 (c_l)^2 = c_l^\dagger c_l$

Remarque 2. Si on prend un état quelconque $\Phi = \sum_{\{n_l\}} A_{\{n_l\}} |\{n_l\}\rangle$ alors

$$\langle \Phi | c_l^\dagger c_l | \Phi \rangle = \sum_{\{n_l\}} |A_{\{n_l\}}|^2 \langle \{n_l\} | c_l^\dagger c_l | \{n_l\} \rangle = \sum_{\{n_l\}} |A_{\{n_l\}}|^2 n_l \text{ et}$$

comme n_l vaut 0 ou 1 : $0 \leq \langle \Phi | c_l^\dagger c_l | \Phi \rangle \leq 1 =$ « moyenne »

Remarque 3. Chacun des états est un état propre de l'opérateur

$$\text{« nombre de particules » } \hat{N} = \sum_l c_l^\dagger c_l$$

$$\hat{N} |n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle = \sum_l c_l^\dagger c_l |n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle = \sum_l n_l |n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle = \left(\sum_l n_l \right) |n_1 n_2 \dots n_\infty\rangle$$

cas des bosons :

les opérateurs doivent désormais satisfaire à une règle de commutation afin de rendre la fonction d'onde symétrique

$$[c_i^\dagger, c_j^\dagger] = 0$$

(remarque : les opérateurs sont souvent notés $a_i^\dagger$ et a_i)

et le carré n'est pas (nécessairement) nul

car **le nombre d'occupation peut prendre n'importe quelle valeur** (entière positive ou nulle)

$$c_l^\dagger | \dots n_l \dots \rangle = \sqrt{n_l + 1} | \dots n_l + 1 \dots \rangle \text{ et } c_l | \dots n_l \dots \rangle = \sqrt{n_l} | \dots n_l - 1 \dots \rangle$$

$$\text{on a toujours : } c_l^\dagger c_l | \dots n_l \dots \rangle = n_l | \dots n_l \dots \rangle$$

$$\text{et dans ce cas } c_l c_l^\dagger | \dots n_l \dots \rangle = (1 + n_l) | \dots n_l \dots \rangle$$

$$\text{soit : } c_l c_l^\dagger - c_l^\dagger c_l = 1$$

$$| n_1, \dots, n_l, \dots \rangle = \frac{(c_1^\dagger)^{n_1} \dots (c_l^\dagger)^{n_l} \dots}{(n_1! \dots n_l! \dots)^{1/2}} | 0 \rangle$$

Chap.3

Seconde quantification

U = oscillateur harmonique ($\frac{kx^2}{2}$), potentiel central,...

$$H = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\frac{\sqrt{k m} x^2}{\hbar} - \frac{\hbar \partial^2}{\sqrt{k m} \partial x^2} \right) = \frac{\hbar\omega}{2} \left(\xi^2 - \frac{\partial^2}{\partial \xi^2} \right) \text{ avec } \lambda = \frac{m\omega}{\hbar} \text{ et } \xi = \sqrt{\lambda} x$$

$$\Psi_n = N_n e^{-\lambda x^2/2} H_n(\sqrt{\lambda} x)$$

Polynômes d'Hermite

Relations de récurrence :

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \Psi_n = \sqrt{n+1} \Psi_{n+1}$$

Création $c_n^\dagger$

et

$$\frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \Psi_n = \sqrt{n} \Psi_{n-1}$$

Annihilation c_n

ici bosons donc n quelconque

Principe d'incertitude ($[\xi, p_\xi] \neq 0$)

$$c_n^\dagger c_n |\Psi_n\rangle = n |\Psi_n\rangle$$

$$c_n^\dagger c_n = \frac{1}{2} (\xi^2 - (\partial/\partial \xi)^2 + [\xi, \partial/\partial \xi]) = \frac{1}{2} (\xi^2 - (\partial/\partial \xi)^2 - 1)$$

L'Hamiltonien peut donc se récrire :

$$H = \hbar\omega (c_n^\dagger c_n + 1/2)$$

$$\langle \Psi_n | H | \Psi_n \rangle = \hbar\omega (n + 1/2)$$

Peut-on généraliser cette écriture ?
comment prendre en compte les interactions ?

Remarque : il faudrait in fine vérifier que

$$\langle 0 | c_{\ell_N} \dots c_{\ell_2} c_{\ell_1} G c_{\ell'_1}^+ c_{\ell'_2}^+ \dots c_{\ell'_N}^+ | 0 \rangle = \langle \mathcal{D}_{\ell_1 \ell_2 \dots \ell_N}^{(1, 2, \dots, N)} | G | \mathcal{D}_{\ell'_1 \ell'_2 \dots \ell'_N}^{(1, 2, \dots, N')} \rangle$$

on ne le fera pas...

$$\mathcal{H} = \sum H(x_i, p_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} V(|x_i - x_j|)$$

Il est alors nécessaire d'aller *au delà* des opérateurs c_i et $c_i^\dagger$ et d'introduire les **opérateurs champ** qui permettent de créer (ou annihiler) une particule en **un point** $\vec{r}$ de l'espace (avec un spin $|s\rangle$). La « première quantification » consistait à introduire des opérateurs à partir des coordonnées $\vec{r}$ et $\vec{p}$ de l'espace des phases (classique) et dans cette « seconde » étape on introduit des opérateurs *à partir* des fonctions d'ondes elle même.

$$\Psi^\dagger = \sum_{\lambda} \phi_{\lambda}^*(\vec{r}) c_{\lambda}^\dagger \quad \text{et} \quad \Psi = \sum_{\lambda} \phi_{\lambda}(\vec{r}) c_{\lambda}$$

Et réciproquement (en **projetant** sur les états ϕ_l) on a $c_l^\dagger = \int d^3\vec{r} \phi_l(\vec{r}) \Psi^\dagger(\vec{r})$

$$c_l = \int d^3\vec{r} \phi_l^*(\vec{r}) \Psi(\vec{r})$$

$$[\psi_{\vec{r}}(\vec{r}), \psi_{\vec{r}'}^\dagger(\vec{r}')]_+ = \sum_{\lambda, \lambda'} \varphi_{\lambda}(\vec{r}) \varphi_{\lambda'}^*(\vec{r}') [c_{\lambda\vec{r}}, c_{\lambda'\vec{r}'}^\dagger]_+$$

Et en introduisant la relation de fermeture $\sum_{\lambda} \varphi_{\lambda}(\vec{r}) \varphi_{\lambda}^*(\vec{r}') = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$

on obtient : $[\Psi(\vec{r}), \Psi^\dagger(\vec{r}')]_+ = \delta(\vec{r} - \vec{r}') \delta_{\sigma, \sigma'}$

et $[\Psi(\vec{r}), \Psi(\vec{r}')]_+ = [\Psi^\dagger(\vec{r}), \Psi^\dagger(\vec{r}')]_+ = 0$

Soit maintenant l'opérateur $\Psi^\dagger(\vec{r})\Psi(\vec{r})$

$$|\phi\rangle = |n_1, n_2, \dots, n_\infty\rangle$$

$$\begin{aligned} \langle \phi | \rho | \phi \rangle &= \langle \phi | \sum_{\vec{n}, \vec{n}'} \varphi_{\vec{n}}^* \varphi_{\vec{n}'} c_{\vec{n}}^\dagger c_{\vec{n}'} | \phi \rangle \\ &= \sum_{\vec{n}, \vec{n}'} \varphi_{\vec{n}}^*(\vec{r}) \varphi_{\vec{n}'}(\vec{r}) \underbrace{\langle \phi | c_{\vec{n}}^\dagger c_{\vec{n}'} | \phi \rangle}_{n_n \delta_{\vec{n}, \vec{n}'}} \\ &= \sum_{\vec{n}} |\varphi_{\vec{n}}(\vec{r})|^2 n_n \end{aligned}$$

$$\boxed{\Psi^\dagger(\vec{r})\Psi(\vec{r}) = \rho(\vec{r})} = \text{opérateur densité de particules au point } \vec{r} \text{ (de spin } |s\rangle \text{)}$$

soit $|u\rangle$ une particule en r_0 : $|u\rangle = \Psi^\dagger(r_0)|0\rangle$

$$\begin{aligned} \langle u|\rho|u\rangle &= \langle 0|\Psi(r_0)\Psi^\dagger(r)\Psi(r)\Psi^\dagger(r_0)|0\rangle = \langle 0|\Psi(r_0)\Psi^\dagger(r)(\delta(r-r_0) - \underbrace{\Psi^\dagger(r_0)\Psi(r)}_{=0})|0\rangle \\ &= \langle 0|\Psi(r_0)\Psi^\dagger(r_0)\Psi(r)|0\rangle \delta(r-r_0) = \langle u|u\rangle \delta(r-r_0) \end{aligned}$$

et en intégrant sur tout l'espace

$$\int \rho(\vec{r})d^3r = \sum_{\lambda,\lambda'} c_\lambda^\dagger c_{\lambda'} \int \phi_\lambda^* \phi_{\lambda'} d^3r = \sum_{\lambda} c_\lambda^\dagger c_\lambda = \hat{N}$$

car la base est orthonormée

on retrouve bien le NOMBRE de particules

Expression des opérateurs en seconde quantification

Pour des articles sans interactions, soumises au même **potentiel**, ne dépendant que de r

L'expression *classique* de ce potentiel est $\hat{f} = \sum_i f(\vec{r}_i) = \int f(\vec{r}) \rho(\vec{r}) d^3\vec{r}$

où la densité s'écrit *classiquement* : $\rho(\vec{r}) = \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i)$

et en seconde quantification : $F = \int \Psi^\dagger(\vec{r}) f(\vec{r}) \Psi(\vec{r}) d^3\vec{r} = \sum_{\lambda, \lambda'} c_\lambda^\dagger c_{\lambda'} \int \phi_\lambda^*(\vec{r}) f(\vec{r}) \phi_{\lambda'}(\vec{r}) d^3\vec{r}$

(cette expression est bien sur valable si $f(\vec{r}, \vec{p})$)

$$F = \sum_{\lambda, \lambda', \sigma} f_{\lambda, \lambda'} c_{\lambda, \sigma}^\dagger c_{\lambda', \sigma} \quad \text{avec} \quad f_{\lambda, \lambda'} = \langle \phi_\lambda | f | \phi_{\lambda'} \rangle \quad \left(\begin{array}{l} \text{on retrouve évidemment} \\ \text{l'expression de la page 22} \end{array} \right)$$

et si l'opérateur dépend du spin : $F = \sum_{\sigma, \sigma'} \int \Psi_\sigma^\dagger(\vec{r}) \underset{\uparrow}{\langle \sigma | f(\vec{r}, \vec{p}, \vec{s}) | \sigma' \rangle} \Psi_{\sigma'}(\vec{r}) d^3\vec{r}$

création d'une particule au point r avec un spin σ

et pour l'Hamiltonien

$$\hat{H} = \sum_{n,m} H_{nm} c_m^\dagger c_n$$

avec $H_{mn} = \int \phi_m^* H \phi_n d^3x$

et si les E_i sont les valeurs propres de H_i et $c_i^\dagger$ sont les opérateurs création sur les états propres de H_i .

$$\begin{aligned} &= \sum_i E_i c_i^\dagger c_i \pi_j c_j^\dagger |0\rangle \\ &\quad \text{permutations jusqu'à } i=j \\ &= \sum_i E_i (-1)^{i-1} c_1^\dagger \dots c_{i-1}^\dagger c_{i+1}^\dagger \dots c_N^\dagger |0\rangle \\ &\quad 1 - c_i^\dagger c_i \quad |c_i|0\rangle = 0 \\ &= \sum_i E_i (-1)^{i-1} c_1^\dagger \dots c_{i-1}^\dagger c_{i+1}^\dagger \dots c_N^\dagger |0\rangle \\ &= \sum_i E_i (-1)^{i-1} (-1)^{i-1} c_1^\dagger \dots c_i^\dagger \dots c_N^\dagger |0\rangle \\ &= \sum_i E_i \pi_j c_j^\dagger |0\rangle \end{aligned}$$

On trouve bien $\sum_i E_i c_i^\dagger c_i |\Phi\rangle = (\sum_i E_i) |\Phi\rangle = E |\Phi\rangle$ avec $E = \sum_i E_i$

Donc dans ce cas
$$\hat{H} = \sum_{\text{etats-occupes}} E_i c_i^\dagger c_i$$

et pour une interaction de paires

$$\begin{aligned}
 V &= \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(\vec{r}_i, \vec{r}_j) = \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' v(\vec{r}, \vec{r}') \sum_{i \neq j} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \delta(\vec{r}' - \vec{r}_j) \\
 &= \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' v(\vec{r}, \vec{r}') \left[\sum_{i,j} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \delta(\vec{r}' - \vec{r}_j) - \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \delta(\vec{r}' - \vec{r}_i) \right] \\
 &= \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' v(\vec{r}, \vec{r}') \rho(\vec{r}) [\rho(\vec{r}') - \delta(\vec{r}' - \vec{r})]
 \end{aligned}$$

et si on remplace alors $\rho(\vec{r})$ par $\psi^\dagger(\vec{r})\psi(\vec{r})$

$$\begin{aligned}
 V &= \frac{1}{2} \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' v(\vec{r}, \vec{r}') \left\{ \psi^\dagger(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \psi^\dagger(\vec{r}') \psi(\vec{r}') - \delta(\vec{r}, \vec{r}') \psi^\dagger(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \right\} \\
 &= \frac{1}{2} \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' v(\vec{r}, \vec{r}') \left\{ \psi^\dagger(\vec{r}) \left[\cancel{\delta(\vec{r}, \vec{r}')} - \psi^\dagger(\vec{r}') \psi(\vec{r}') \right] \psi(\vec{r}) - \cancel{\delta(\vec{r}, \vec{r}')} \psi^\dagger(\vec{r}) \psi(\vec{r}) \right\} \\
 &= -\frac{1}{2} \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' v(\vec{r}, \vec{r}') \psi^\dagger(\vec{r}) \psi^\dagger(\vec{r}') \psi(\vec{r}) \psi(\vec{r}') = -\frac{1}{2} \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \psi^\dagger(\vec{r}) \psi^\dagger(\vec{r}') \psi(\vec{r}') \psi(\vec{r}) \\
 &= \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} c_{\lambda_4}^\dagger c_{\lambda_3}^\dagger c_{\lambda_2} c_{\lambda_1} \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \varphi_{\lambda_4}^*(\vec{r}) \varphi_{\lambda_3}^*(\vec{r}') v(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_{\lambda_2}(\vec{r}') \varphi_{\lambda_1}(\vec{r})
 \end{aligned}$$

En écrivant :

$$\begin{aligned}
 \psi_{\vec{r}}(\vec{r}) &= \sum_{\lambda_1} \varphi_{\lambda_1}(\vec{r}) c_{\lambda_1 \vec{r}} \quad , \quad \psi_{\vec{r}'}(\vec{r}') = \sum_{\lambda_2} \varphi_{\lambda_2}(\vec{r}') c_{\lambda_2 \vec{r}'} \\
 \psi_{\vec{r}'}^\dagger(\vec{r}') &= \sum_{\lambda_3} \varphi_{\lambda_3}^*(\vec{r}') c_{\lambda_3 \vec{r}'}^\dagger \quad , \quad \psi_{\vec{r}}^\dagger(\vec{r}) = \sum_{\lambda_4} \varphi_{\lambda_4}^*(\vec{r}) c_{\lambda_4 \vec{r}}^\dagger
 \end{aligned}$$

On trouve finalement

$$F = \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4} V_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} c_{\lambda_4}^\dagger c_{\lambda_3}^\dagger c_{\lambda_2} c_{\lambda_1}$$

$$v_{\lambda_4 \lambda_3 \lambda_2 \lambda_1} = \int d^3 \vec{\pi} \int d^3 \vec{\pi}' \varphi_{\lambda_4}^*(\vec{\pi}) \varphi_{\lambda_3}^*(\vec{\pi}') v(\vec{\pi}, \vec{\pi}') \varphi_{\lambda_2}(\vec{\pi}') \varphi_{\lambda_1}(\vec{\pi})$$

Remarque : l'état de spin est préservé lors des « transfert 1->4 et 2->3
si l'opérateur V ne dépend pas du spin

$$F = \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3, \lambda_4} V_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} c_{\lambda_4, \sigma}^\dagger c_{\lambda_3, \sigma}^\dagger c_{\lambda_2, \sigma} c_{\lambda_1, \sigma}$$

et sinon cela se généralise en

$$F = \frac{1}{2} \sum_{\ell_1 \ell_2 \ell_3 \ell_4} \int_{\ell_4 \ell_3 \ell_2 \ell_1} c_{\ell_4}^+ c_{\ell_3}^+ c_{\ell_2} c_{\ell_1}, \quad \ell_i = (\lambda_i, \sigma_i)$$

$$\int_{\ell_4 \ell_3 \ell_2 \ell_1} = \int d^3 \vec{\pi} \int d^3 \vec{\pi}' \varphi_{\lambda_4}^*(\vec{\pi}) \varphi_{\lambda_3}^*(\vec{\pi}') \langle \sigma_4 \sigma_3' | \int_{\sigma_2 \sigma_1'} \varphi_{\lambda_2}(\vec{\pi}') \varphi_{\lambda_1}(\vec{\pi})$$

Cas particulier pour lequel $v(\vec{r}, \vec{r}') = v(\vec{r} - \vec{r}')$

dans ce cas il est intéressant d'utiliser la base des ondes planes $\phi_k = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$

(où les fonctions de Bloch dans un crystal périodique en sommant alors sur tous les k de la première ZB et l'ensemble des bandes)

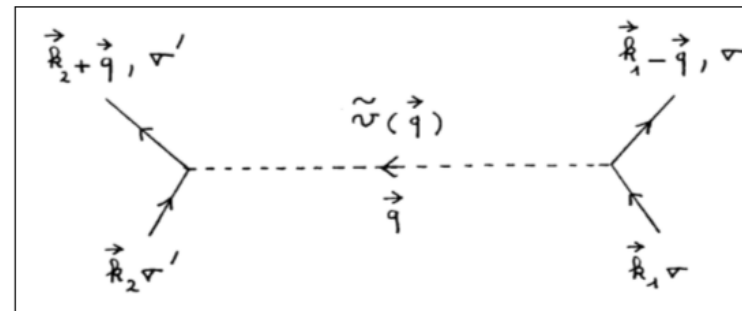
$$v_{k_1 k_2 k_3 k_4} = \frac{1}{\Omega} \int d^3 r'' v(\vec{r}'') e^{i(\vec{k}_3 - \vec{k}_2) \cdot \vec{r}''} \frac{1}{\Omega} \int d^3 r e^{i(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}_3 - \vec{k}_4) \cdot \vec{r}} = \tilde{v}(\vec{k}_3 - \vec{k}_2) \cdot \delta_{\vec{k}_1 + \vec{k}_2, \vec{k}_3 + \vec{k}_4}$$

avec $\vec{r}'' = \vec{r} - \vec{r}'$

↑
Transformée de Fourier
 $\vec{q}$

conservation de l'impulsion

Ce processus peut être vu comme une *collision* au cours de laquelle une impulsion q est transférée d'une particule à l'autre



Pour la répulsion **Coulombienne** $v(\vec{r} - \vec{r}') = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \frac{e^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|}$ et $\tilde{v}(\vec{q}) = \frac{e^2}{\epsilon_0 \Omega q^2}$

Chap.4

Approximation de Hartree Fock

$$\text{Soit } H = \sum_i h(i) + \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \text{ avec } h = -\frac{\hbar^2}{2m} \Delta + V_{\text{ions}}(\vec{r})$$

$$H = \sum_{\lambda' \lambda \sigma} \langle \lambda' | h | \lambda \rangle c_{\lambda' \sigma}^+ c_{\lambda \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\sigma \sigma' \lambda_1 \lambda_2 \lambda_3 \lambda_4} v_{\lambda_4 \lambda_3 \lambda_2 \lambda_1} c_{\lambda_4 \sigma}^+ c_{\lambda_3 \sigma'}^+ c_{\lambda_2 \sigma'} c_{\lambda_1 \sigma}$$

avec :

$$v_{\lambda_4 \lambda_3 \lambda_2 \lambda_1} = \int d^3 r \int d^3 r' \varphi_{\lambda_4}^*(\vec{r}) \varphi_{\lambda_3}^*(\vec{r}') v(\vec{r} - \vec{r}') \varphi_{\lambda_2}(\vec{r}') \varphi_{\lambda_1}(\vec{r})$$

on a déjà vu qu'en l'absence d'interaction, il est facile de diagonaliser H en prenant les états *anti-symétrisés* construits à partir d'une base complète des

états propres (orthonormés) **à 1 particules**

$$|\{n_l\}\rangle = \prod_l (c_l^\dagger)^{n_l} |0\rangle \text{ avec } n_l = 0, 1 \text{ et } \sum_i n_i = N$$

$$\text{d'où } H_0 = \sum_{\sigma, \lambda} \epsilon_\lambda c_{\sigma, \lambda}^\dagger c_{\sigma, \lambda} \text{ et } E_0 = \sum_{\sigma, \lambda} n_l \epsilon_\lambda$$

Mais en présence de ces interactions, H n'est plus (aisément) diagonalisable à partir des états propres à 1 particule **quelconque** et les éléments de matrice anti-diagonaux n'ont a priori aucune raison d'être négligeables

En théorie les nouveaux états propre peuvent toujours s'écrire $|\Psi\rangle = \sum_{\{n_l\}} A_{\{n_l\}} |\{n_l\}\rangle$
mais le calcul est coefficient $A_{\{n_l\}}$ est irréalisable....

L'approximation de Hartree-Fock consiste à supposer qu'il existe une base d'états à une particule (à déterminer...) à partir de laquelle on peut construire une base de Fock

$$|\Psi\rangle = \sum_{\{n_l\}} A_{\{n_l\}} |\{n_l\}\rangle$$

pour laquelle les éléments anti-diagonaux sont **négligeables**
(mais le calcul des coefficient $A_{\{n_l\}}$ reste inextricable)

cela consiste à considérer que les états $|n_l\rangle$ ne se couplent qu'à eux-même

donc que les interactions **ne modifient PAS** les nombres d'occupation n_l de ces états

donc pour les termes à 1 corps $\lambda = \lambda'$

$$\langle \lambda | h | \lambda \rangle c_{\lambda\sigma}^{\dagger} c_{\lambda\sigma}$$

et pour les termes à deux corps $\lambda_4 = \lambda_1, \lambda_3 = \lambda_2$

OU $\lambda_4 = \lambda_2, \lambda_3 = \lambda_1$ (dans ce cas de même spin)

$$\text{et } H = \sum_{\lambda, \sigma} \langle \lambda | h | \lambda \rangle c_{\lambda, \sigma}^{\dagger} c_{\lambda, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \sigma, \sigma'} [v_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_2 \lambda_1} c_{\lambda_1 \sigma}^{\dagger} c_{\lambda_2 \sigma'}^{\dagger} c_{\lambda_2 \sigma'} c_{\lambda_1 \sigma} + v_{\lambda_2 \lambda_1 \lambda_2 \lambda_1} c_{\lambda_2 \sigma}^{\dagger} c_{\lambda_1 \sigma'}^{\dagger} c_{\lambda_2 \sigma} c_{\lambda_1 \sigma'}]$$

$$= \sum_{\lambda, \sigma} \langle \lambda | h | \lambda \rangle c_{\lambda, \sigma}^{\dagger} c_{\lambda, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \sigma, \sigma'} [U_{\lambda_1 \lambda_2} - \delta_{\sigma \sigma'} J_{\lambda_1 \lambda_2}] c_{\lambda_1 \sigma}^{\dagger} c_{\lambda_2 \sigma'}^{\dagger} c_{\lambda_2 \sigma'} c_{\lambda_1 \sigma}$$

on appelle intégrales de Coulomb les intégrales :

$$U_{\lambda_1 \lambda_2} = v_{\lambda_1 \lambda_2 \lambda_2 \lambda_1} = \int d^3 r \int d^3 r' |\varphi_{\lambda_1}(\vec{r})|^2 v(\vec{r} - \vec{r}') |\varphi_{\lambda_2}(\vec{r}')|^2$$

valeur moyenne de l'énergie de répulsion
Coulombienne entre deux distributions

et intégrales d'échanges les intégrales :

$$J_{\lambda_1 \lambda_2} = v_{\lambda_2 \lambda_1 \lambda_2 \lambda_1} = \int d^3 r \int d^3 r' \varphi_{\lambda_2}^*(\vec{r}) \varphi_{\lambda_1}^*(\vec{r}') v(\vec{r} - \vec{r}') \varphi_{\lambda_2}(\vec{r}') \varphi_{\lambda_1}(\vec{r})$$

$$H = \sum_{\lambda, \sigma} \langle \lambda | h | \lambda \rangle c_{\lambda, \sigma}^{\dagger} c_{\lambda, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \sigma, \sigma'} [U_{\lambda_1 \lambda_2} - \delta_{\sigma \sigma'} J_{\lambda_1 \lambda_2}] [c_{\lambda_1 \sigma}^{\dagger} c_{\lambda_1 \sigma} c_{\lambda_2 \sigma'}^{\dagger} c_{\lambda_2 \sigma'} - \delta_{\lambda_1 \lambda_2} c_{\lambda_1 \sigma}^{\dagger} c_{\lambda_1 \sigma}]$$

nul car $U_{\lambda \lambda} = J_{\lambda \lambda}$

donc finalement $H = \sum_{\lambda, \sigma} \langle \lambda | h | \lambda \rangle c_{\lambda, \sigma}^{\dagger} c_{\lambda, \sigma} + \frac{1}{2} \sum_{\lambda_1 \lambda_2 \sigma, \sigma'} [U_{\lambda_1 \lambda_2} - \delta_{\sigma \sigma'} J_{\lambda_1 \lambda_2}] c_{\lambda_1 \sigma}^{\dagger} c_{\lambda_1 \sigma} c_{\lambda_2 \sigma'}^{\dagger} c_{\lambda_2 \sigma'}$

L'intégrale de Coulomb est l'interaction directe entre deux distributions de charges mais le principe d'exclusion de Pauli interdit à deux particules de même spin de se rapprocher et la valeur moyenne de leur répulsion Coulombienne se trouve **diminuer** d'une quantité égale à l'intégrale d'échange

si on note $A'_i = c_i^{\dagger} c_i - \langle c_i^{\dagger} c_i \rangle - A_i - \langle A_i \rangle$ alors

$$A_i A_j = A_i \langle A_j \rangle + \langle A_i \rangle A_j - \langle A_i \rangle \langle A_j \rangle + A'_i A'_j$$

et si les effets de corrélation sont faibles $\langle A - \langle A \rangle A' \rangle \approx \langle A' \rangle \langle A' \rangle = 0$

on peut alors négliger ce quatrième terme et ne conserver que

$$c_{\ell_1}^{\dagger} c_{\ell_1} \langle c_{\ell_2}^{\dagger} c_{\ell_2} \rangle + \langle c_{\ell_1}^{\dagger} c_{\ell_1} \rangle c_{\ell_2}^{\dagger} c_{\ell_2} - \langle c_{\ell_1}^{\dagger} c_{\ell_1} \rangle \langle c_{\ell_2}^{\dagger} c_{\ell_2} \rangle$$

Cette approximation dite de **champs moyen** consiste donc à remplacer les termes à 2 corps par des termes à un corps (comme pour les particules sans interaction) pour une particule se déplaçant dans un champ effectif moyen créé par les autres particules sans le modifier

$$\begin{array}{c}
 c_{\ell_1}^+ c_{\ell_1} \langle c_{\ell_2}^+ c_{\ell_2} \rangle + \langle c_{\ell_1}^+ c_{\ell_1} \rangle c_{\ell_2}^+ c_{\ell_2} - \langle c_{\ell_1}^+ c_{\ell_1} \rangle \langle c_{\ell_2}^+ c_{\ell_2} \rangle \\
 \hline
 \downarrow \qquad \qquad \qquad \downarrow \\
 \qquad \qquad \qquad E_0 = -\frac{1}{2} \sum_{(\lambda_1 \sigma) \neq (\lambda_2 \sigma')} \left(U_{\lambda_1 \lambda_2} - \delta_{\sigma \sigma'} J_{\lambda_1 \lambda_2} \right) \bar{m}_{\lambda_1 \sigma} \bar{m}_{\lambda_2 \sigma'}
 \end{array}$$

valeur moyenne de l'occupation notée $\bar{n}_{\lambda_i}$ (= inconnue du problème)

(statistiquement compris entre 0 et 1 pour les températures non nulles = probabilité d'occupation)

et on peut montrer (... après « un peu » de **physique statistique**)

$$\text{que } \bar{n}_{\lambda\sigma} = \frac{1}{E^{(\epsilon_{\lambda\sigma} - \mu)/kT} + 1} = \text{Fermi-Dirac}$$

Et donc finalement

$$H \simeq E_0 + \sum_{\lambda\sigma} \left\{ \langle \lambda | h | \lambda \rangle + \sum_{\lambda'\sigma' (\neq \lambda\sigma)} \left(U_{\lambda\lambda'} - \delta_{\sigma\sigma'} J_{\lambda\lambda'} \right) \bar{m}_{\lambda'\sigma'} \right\} c_{\lambda\sigma}^+ c_{\lambda\sigma}$$

(le facteur 1/2 a disparu car les deux premier termes ont la même contribution)

et cet Hamiltonien à un corps *diagonalisé* peut se ré-écrire

$$H \approx E_0 + \sum_{\lambda, \sigma} \underbrace{\langle \lambda | h + \bar{v}_{el} + \bar{v}_{ech, \sigma} | \lambda \rangle}_{h_{\text{eff}, \sigma}} c_{\lambda, \sigma}^\dagger c_{\lambda, \sigma}$$

même spin

$h_{\text{eff}, \sigma}$ avec $h_{\text{eff}, \sigma} \varphi_\lambda = \epsilon_{\lambda \sigma} \varphi_\lambda$

où $\bar{v}_{el}(\vec{r}) = \int d^3 r' v(\vec{r} - \vec{r}') \sum_{\lambda' \sigma' \neq \lambda \sigma} \bar{n}_{\lambda' \sigma'} |\varphi_{\lambda'}(\vec{r}')|^2$ = potentiel moyen crée par les électrons occupant les états $\varphi_{\lambda'}$
(avec probabilité d'occupation $\bar{n}_{\lambda'}$)

$$\sum_{\lambda' \sigma' (\neq \lambda \sigma)} \bar{n}_{\lambda' \sigma'} = \int d^3 r \varphi_\lambda^*(\vec{r}) \left\{ \int d^3 r' v(\vec{r} - \vec{r}') \sum_{\lambda' \sigma' (\neq \lambda \sigma)} \bar{n}_{\lambda' \sigma'} |\varphi_{\lambda'}(\vec{r}')|^2 \right\} \varphi_\lambda(\vec{r}) = \langle \lambda | \bar{v}_{el} | \lambda \rangle$$

et $\langle \lambda | \bar{v}_{ech, \sigma} | \lambda \rangle = - \int d^3 r \varphi_\lambda^*(\vec{r}) \left[\sum_{\lambda' \neq \lambda} \bar{n}_{\lambda' \sigma} \varphi_{\lambda'}(\vec{r}) \int d^3 r' \varphi_{\lambda'}^*(\vec{r}') v(\vec{r} - \vec{r}') \varphi_\lambda(\vec{r}') \right]$ est appelé **potentiel d'échange**
opérateur intégral agissant sur $\varphi_\lambda(r')$

l'Hamiltonien effectif $h_{\text{eff}} = h + \bar{v}_{el} + \bar{v}_{ech, \sigma}$ admet donc les états $|\lambda\rangle$ comme état propre avec pour énergie $\epsilon_{\lambda, \sigma}$

et en projetant en un point $\vec{r}$ on a :

$$-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi_\lambda(\vec{r}) + \left\{ v_{\text{ion}}(\vec{r}) + \bar{v}_{el}(\vec{r}) \right\} \varphi_\lambda(\vec{r}) + \langle \vec{r} | \bar{v}_{ech, \sigma} | \varphi_\lambda \rangle = \epsilon_{\lambda \sigma} \varphi_\lambda(\vec{r})$$

et plus explicitement les φ_λ sont donc les états propres de l'ensemble des équations *couplées* :

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi_\lambda(\vec{r}) + \left\{ v_{\text{ion}}(\vec{r}) + v_{\text{el}}(\vec{r}) \right\} \varphi_\lambda(\vec{r}) - \sum_{\lambda' \neq \lambda} \bar{m}_{\lambda'\sigma} \varphi_{\lambda'}(\vec{r}) \right] \int d^3r' \varphi_{\lambda'}^*(\vec{r}') v(\vec{r}-\vec{r}') \varphi_\lambda(\vec{r}') = \epsilon_{\lambda\sigma} \varphi_\lambda(\vec{r})$$

sont appelés **équations de Hartree-Fock** et permettent donc de trouver le spectre $\epsilon_{\lambda\sigma}$

Ces équations ne peuvent être résolues que NUMÉRIQUEMENT par **itérations successives**

par exemple : modèle du Jellium

N électrons dans un volume V

la neutralité assurée par une distribution homogène d'ions de densité $\rho_{\text{ions}} = \frac{N}{\Omega}$

$$V_{\text{ions}}(r) = - \int d^3r' \rho_{\text{ions}} v(r-r') = - \frac{N}{\Omega} \int d^3r' v(r-r')$$

$$\text{et on prend à l'ordre zéro } \varphi_\lambda^0(r) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(i\lambda r)$$

$$\text{d'où } \bar{V}_{el}^0 = \sum_{\lambda'\sigma' \neq \lambda\sigma} \bar{n}_{\lambda'\sigma'} \int d^3r' |\varphi_{\lambda'}^0|^2 v(r-r') = \frac{N-1}{\Omega} \int d^3r' v(r-r')$$

$$\text{et } \lim_{V \rightarrow \infty} [V_{\text{ions}} + \bar{V}_{el}^0] \sim 1/R \rightarrow 0$$

Il reste à résoudre : $-\frac{\hbar^2}{2m} \Delta \varphi_\lambda^1 + \langle r | \bar{v}_{ech(\sigma)}^0 | \varphi_\lambda^1 \rangle = \epsilon_{\lambda(\sigma)} \varphi_\lambda^1$

$$\langle \vec{n} | v_{ech, \sigma}^{(0)} | \varphi_{\vec{k}}^{(1)} \rangle = -\frac{1}{\Omega} \sum_{\vec{k}' (\neq \vec{k})} \bar{n}_{\vec{k}'} e^{i\vec{k}' \cdot \vec{n}} \int_{\Omega} d^3 n' e^{-i\vec{k}' \cdot \vec{n}'} v(\vec{n} - \vec{n}') \varphi_{\vec{k}}^{(1)}(\vec{n}')$$

$$\lambda = k$$

Cette équation admet en fait pour solution $\varphi_{\vec{k}}^{(1)} = \varphi_{\vec{k}}^{(0)} = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} \exp(-\vec{k} \cdot \vec{r})$

en effet $\int d^3 r' e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}'} v(\vec{r} - \vec{r}') e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}'} = e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} \int d^3 r'' v(\vec{r} - \vec{r}'') e^{i\vec{k}' \cdot \vec{r}''} = e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} \tilde{v}(\vec{q})$ avec $\tilde{v}(\vec{q}) = \int d^3 r v(\vec{r}) e^{+i\vec{q} \cdot \vec{r}}$

d'où $\left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \sum_{\vec{k}'} \bar{n}_{\vec{k}'} \tilde{v}(\vec{q}) \right\} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} = \epsilon_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$

Les ondes planes restent des solutions exactes (à tous les ordres)

et

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \sum_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \bar{n}_{\vec{k}'} \tilde{v}(\vec{k}' - \vec{k})$$

où $\tilde{v}$ est la TF du potentiel d'interaction (valable à toutes températures)

A T=0 la sommation se fait sur les **états occupés**

(et on peut oublier la condition $\vec{k}' \neq \vec{k}$ lorsque N et V tendent vers l'infini)

$$\sum_{\vec{k}' \neq \vec{k}} \bar{n}_{\vec{k}'} \tilde{v}(\vec{k}' - \vec{k}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \int d^3k' \tilde{v}(\vec{k}' - \vec{k})$$

Et avec un potentiel en 1/r : $\tilde{v}(\vec{q}) = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} TF(1/r) = \frac{e^2}{\epsilon_0 V q^2}$

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2}{(2\pi)^3 \epsilon_0} \int \frac{d^3k'}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2}{(2\pi)^3 \epsilon_0} k_F F(k/k_F)$$

sur les états occupés à **T=0** (de spin σ)

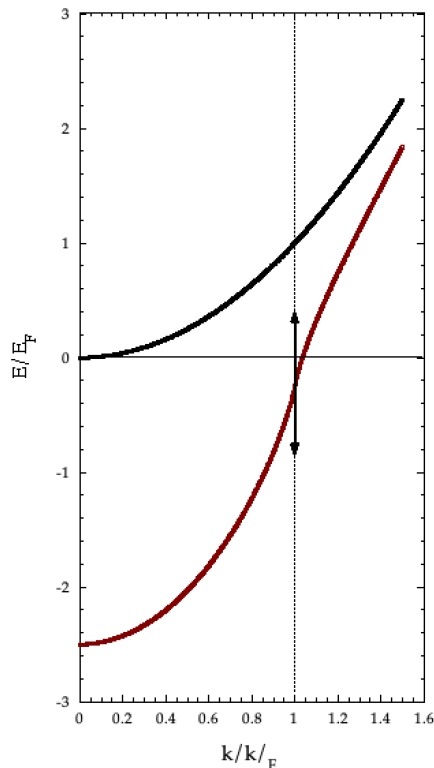
(un peu de...) calcul intégral donne $F(X) = \frac{1}{2} + \frac{1-X^2}{4X} \text{Ln} \left| \frac{1+X}{1-X} \right|$

La nouvelle relation de dispersion (prenant en compte les interactions) a

une caractéristique « pathologique » : $\partial\epsilon/\partial k|_{\epsilon_F} \propto v_F \rightarrow \infty$

Cette singularité rendrait le développement de Sommerfeld non valide
et C/T ne serait pas indépendant de la température (contrairement à l'expérience).

Elle provient de la divergence à q=0 de $TF(1/r) \propto 1/q^2$



mais le potentiel d'interaction est en fait **écranté**
(par la présence des ions et des autres électrons)

le potentiel est alors de la forme $e^{-k_0 r}/r$ et sa TF $\propto \frac{1}{q^2 + k_0^2}$

La divergence en $q=0$ est levée et la vitesse de Fermi n'est en fait modifiée que de qq%

$2\pi/k_0$ est appelée longueur d'onde de **Thomas-Fermi** : $k_0^2 = e^2 g(\epsilon_F)/\epsilon_0$

et en sommant (intégrant $\epsilon(\vec{k})$ sur) les $\vec{k}$ on peut trouver **l'énergie totale**

$$= \sum_V \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} \left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2}{4\pi^2 \epsilon_0} k_F F\left(\frac{k}{k_F}\right) \right\} 4\pi k^2 dk$$

$$E_{\text{totale}} = N \left\{ \frac{3\hbar^2 k_F^2}{10m} - \frac{3e^2 k_F}{16\pi^2 \epsilon_0} \right\} = N \left\{ \frac{2.21}{r_0^2} - \frac{0.916}{r_0} \right\} \text{ Rydberg}$$

où $r_0 = r_e/a_0$ avec $n = 4\pi r_e^3/3 = 3\pi^2/k_F^3$ et a_0 est le rayon de Bohr

Remarque 1: E_{totale} est minimale pour $r_0 = 2.4$ (cohésion des métaux), néanmoins même si la valeur numérique est satisfaisante, elle n'est **pas universelle** (comprise entre 2 et 6 = limite du traitement champ moyen, il faudrait prendre de « vraies » fonctions d'ondes et non pas les ondes planes)

Remarque 2 : On a ici sommer sur les deux sous-bandes et en notant que le niveau de Fermi est le même pour ces deux bandes on trouve

$$k_{F,up} = k_{F,down} \text{ ou } k_{F,up} + k_{F,down} = \frac{me^2}{2\pi^2\epsilon_0\hbar^2}$$

et on peut montrer que la solution de plus basse énergie correspond bien à $k_{F,up} = k_{F,down}$
l'effet fondamental est donc à priori NON MAGNETIQUE

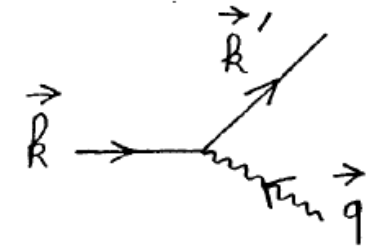
Remarque 3 : L'énergie cinétique ne domine que pour les très fortes concentrations électroniques ($r_0 \ll 2$), ce qui n'est PAS le cas. Les corrélations jouent donc un rôle essentiel en physique du solide moderne, à l'origine des comportements « exotiques » des métaux...
le traitement exact de ces corrélations reste un effet complexe...

Chap.5

Couplage électron-phonon

On cherche à déterminer l'Hamiltonien décrivant le phénomène de **diffusion** d'un électron avec annihilation d'un phonon.

On note $\nu_{\vec{q}}$ le nombre initial de phonon de vecteur d'onde $\vec{q}$



$$U_{e-ph} = \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}} \frac{\langle \vec{k}', \nu_q - 1 | V_{e-ions} | \vec{k}, \nu_q \rangle}{\mathbf{W}} c_{k'}^\dagger c_k \frac{1}{\sqrt{\nu_q}} a_q$$

où on a utilisé la notation a pour l'opérateur annihilation des bosons

$$\text{et } V_{e-ions} = \sum_n u(r - R_n) = \sum_n [u(r - \underbrace{R_n^0}_{\text{position d'équilibre des ions}}) - \underbrace{(R_n - R_n^0)}_{\text{vecteur déplacement } \vec{u}_n (= \text{phonon})} \nabla (u(r - R_n^0))]$$

$$\text{et } \langle \vec{k}', \nu_q - 1 | u(\vec{r} - \vec{R}_n^{(0)}) | \vec{k}, \nu_q \rangle = \langle \vec{k}' | u(\vec{r} - \vec{R}_n^{(0)}) | \vec{k} \rangle \underbrace{\langle \nu_q - 1 | \nu_q \rangle}_{= 0} = 0$$

en séparant les intégrales sur les e et les phonons

$$\text{et en se rappelant que } a_q^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi - \frac{\partial}{\partial \xi} \right) \text{ et } a_q = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi + \frac{\partial}{\partial \xi} \right)$$

$$\text{avec } \lambda_q = \frac{M\omega(q)}{\hbar} \text{ et } \xi = \sqrt{\lambda(q)}x$$

$\vec{e}_{q'}$ polarisation (vecteur unitaire = direction du déplacement)

on obtient la vecteur déplacement :
$$\vec{u}_n = \sqrt{\frac{\hbar}{2M}} \sum_{\vec{q}' \in \text{PZB}} \frac{\vec{e}_{q'}}{\sqrt{\omega(q')}} (a_{q'}^\dagger e^{-i\vec{q}' \cdot \vec{R}_n^0} + a_{q'} e^{i\vec{q}' \cdot \vec{R}_n^0})$$

$\uparrow$
 $\downarrow$ première zone de Brillouin $\downarrow$ phase

le déplacement d'un ions n est la superposition de tous les phonons

et comme : $\langle \nu_{\vec{q}} - 1 | a_{\vec{q}'}^\dagger | \nu_{\vec{q}} \rangle = 0$, $\forall \vec{q}'$, et $\boxed{\langle \nu_{\vec{q}} - 1 | a_{\vec{q}'} | \nu_{\vec{q}} \rangle = \delta_{\vec{q}', \vec{q}} \sqrt{\nu_{\vec{q}}}}$

il nous reste : $\langle \nu_q - 1 | \vec{u}_n | \nu_q' \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2M}} \frac{\vec{e}_q}{\sqrt{\omega(q)}} \sqrt{\nu_q} e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_n^0}$

donc :
$$W = - \sqrt{\frac{\hbar \nu_q}{2M\omega(q)}} \vec{e}_q \cdot \sum_n \langle \vec{k}' | \vec{\nabla} U(\vec{r} - \vec{R}_n^0) | \vec{k} \rangle e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_n^0}$$

et finalement pour des ondes planes

$$\boxed{\langle \vec{k}' | \nabla U(\vec{r} - \vec{R}_m^{(0)}) | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d\vec{r} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} \nabla U(\vec{r} - \vec{R}_m^{(0)})}$$

on a :
$$\langle \vec{k}' | \nabla U(\vec{r} - \vec{R}_m^{(0)}) | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\Omega} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}_m^{(0)}} \int_{\Omega} d\vec{r}' e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}'} \nabla U(\vec{r}')$$

et après une intégration par parties, en tenant compte du fait que $U \rightarrow 0$ pour $\vec{r} \rightarrow \infty$

$$\langle \vec{k}' | \nabla U(\vec{r} - \vec{R}_m^{(0)}) | \vec{k} \rangle = -\frac{i}{\Omega} (\vec{k} - \vec{k}') e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}_m^{(0)}} \int_{\Omega} U(\vec{r}') e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}'} d^3 r'$$

soit en introduisant la transformée de Fourier : $\tilde{U}(\vec{q}) = \frac{1}{\Omega} \int U(\vec{r}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} d^3 r$

$$W = i \sqrt{\frac{\hbar \nu_q}{2M\omega(q)}} \vec{e}_q \cdot (\vec{k} - \vec{k}') \tilde{U}(\vec{k} - \vec{k}') \sum_n e^{i(\vec{q} + \vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}_n^0}$$

facteur de structure du réseau de Bravais

=1 si $\vec{q} + \vec{k} - \vec{k}' = \vec{K}$ (noeud du réseau réciproque), 0 sinon

et $\vec{k}, \vec{k}' \in$ première zone de Brillouin

et donc on obtient finalement

$$U_{\text{e-ph}} = i \sqrt{\frac{\hbar}{2M}} \sum_{\vec{k}, \vec{k}' \in \text{PZB}, \vec{K}} \vec{e}_q \cdot (\vec{k} - \vec{k}') \tilde{U}(\vec{k} - \vec{k}') \frac{c_k^\dagger c_k a_q}{\sqrt{\omega(q)}}$$

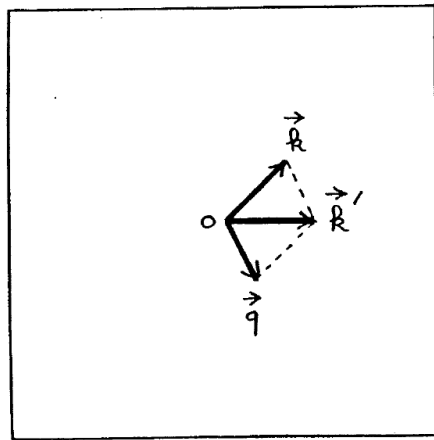
$$\vec{q} + \vec{k} - \vec{k}' = \vec{K}$$

et il faut également prendre en compte le processus faisant intervenir
la **création** d'un phonon
soit finalement

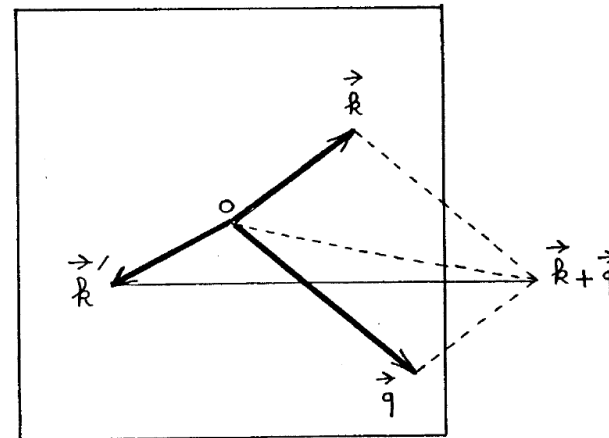
$$U_{\text{e-ph}} = i\sqrt{\frac{\hbar}{2M}} \sum_{\vec{k}, \vec{k}' \in \text{PZB}, \vec{K}} \vec{e}_q \cdot (\vec{k} - \vec{k}') \tilde{U}(\vec{k} - \vec{k}') \frac{c_k^\dagger c_k (a_q + a_{-q}^\dagger)}{\sqrt{\omega(q)}} = \sum_{\vec{k}, \vec{k}' \in \text{PZB}, \vec{K}} g_q c_k^\dagger c_k (a_q + a_{-q}^\dagger)$$

$$\vec{q} + \vec{k} - \vec{k}' = \vec{K}$$

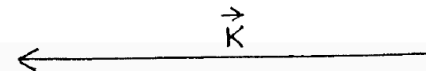
Remarque 1 : $\vec{e}_q \cdot \vec{q} = 0$ pour les modes **transverses** qui ne donnent donc lieu à un couplage e-phonon que pour les processus dit **umklapp** pour lesquels $\vec{K} \neq \vec{0}$



Première zone de Brillouin



Première zone de Brillouin



Remarque 2 : la probabilité de transition de l'état $\vec{k}$ à l'état $\vec{k} + \vec{q}$ est donné par
la règle d'or de Fermi :

$$P_{\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \vec{q}}^{\text{annihilation}} = \frac{2\pi t}{\hbar} | \langle \vec{k} + \vec{q}, \nu_q - 1 | U_{\text{e-ph}} | \vec{k}, \nu_q \rangle |^2 \underbrace{\delta(E(\vec{k} + \vec{q}) - E(\vec{k}) - \hbar\omega(\vec{q}))}_{\text{conservation de l'énergie}}$$

$$= \frac{2\pi t}{\hbar} g_q^2 | \langle \vec{k} + \vec{q} | c_{k+q}^\dagger c_k | \vec{k} \rangle |^2 | \langle \nu_q - 1 | a_q | \nu_q \rangle |^2 \delta(E(\vec{k} + \vec{q}) - E(\vec{k}) - \hbar\omega(\vec{q}))$$

et avec :

$$c_\ell^\dagger | n_1, n_2, \dots, n_\ell, \dots, n_\infty \rangle = (-1)^{\sum_{i=1}^{\ell-1} n_i} \sqrt{1 - n_\ell} | n_1, n_2, \dots, n_{\ell+1}, \dots, n_\infty \rangle$$

$$c_\ell | n_1, n_2, \dots, n_\ell, \dots, n_\infty \rangle = (-1)^{\sum_{i=1}^{\ell-1} n_i} \sqrt{n_\ell} | n_1, n_2, \dots, n_{\ell-1}, \dots, n_\infty \rangle$$

$$P_{\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \vec{q}}^{\text{annihilation}} = \frac{2\pi t}{\hbar} g_q^2 (1 - f_{k+q}) \underset{\uparrow}{f_k} \nu_q \delta(E(\vec{k} + \vec{q}) - E(\vec{k}) - \hbar\omega(\vec{q}))$$

en écrivant que $n_k = f_k$: fonction de distribution de FD pour $T \neq 0$

et de même : $P_{\vec{k} \rightarrow \vec{k} - \vec{q}}^{\text{creation}} = \frac{2\pi t}{\hbar} g_q^2 f_k (1 - f_{k-q}) | \langle \nu_q + 1 | a_q^\dagger | \nu_q \rangle |^2 \delta(E(\vec{k} - \vec{q}) - E(\vec{k}) + \hbar\omega(\vec{q}))$

$$= \frac{2\pi t}{\hbar} g_q^2 f_k (1 - f_{k-q}) (\nu_q + 1) \delta(E(\vec{k} - \vec{q}) - E(\vec{k}) + \hbar\omega(\vec{q}))$$

a T=0 $\nu_q = 0$ donc $P_{\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \vec{q}}^{\text{annihilation}} = 0$

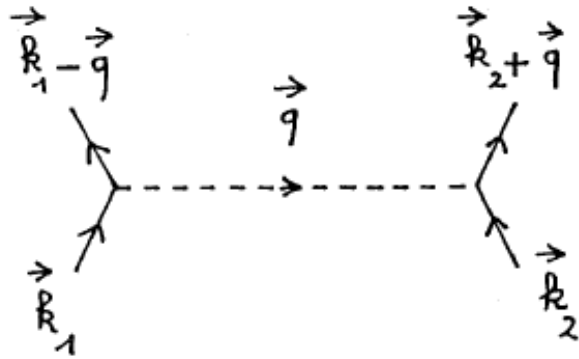
et $P_{\vec{k} \rightarrow \vec{k} - \vec{q}}^{\text{creation}}$ est **également nul** car tous les états sont occupés pour $E < E_F$ et

$$E(\vec{k} - \vec{q}) = E(\vec{k}) - \hbar\omega(\vec{q}) < E(\vec{k}) \text{ donc } f_{k-q} = 1$$

et $P_{\vec{k} \rightarrow \vec{k} + \vec{q}} = 0$ pour T=0

ces termes interviennent dans le calcul du TRANSPORT (voir cours Solide III)

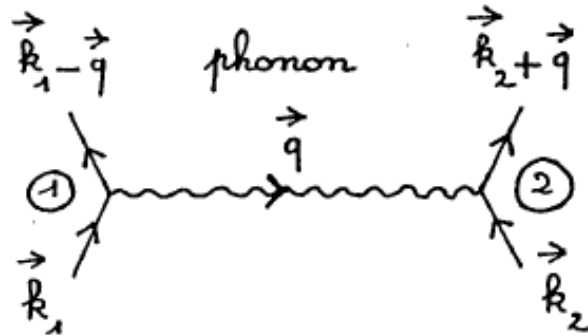
Interactions electron-electron



répulsion Coulombienne **directe** (sans phonon)

$$\langle \vec{k}_2 + \vec{q}, \vec{k}_1 - \vec{q} | \frac{e'^2}{|\vec{r} - \vec{r}'|} | \vec{k}_1, \vec{k}_2 \rangle = \frac{e^2}{\epsilon_0 \Omega q^2} > 0$$

(pour des ondes planes)



et avec échange d'un phonon (**virtuel**)

$$\textcircled{1} g_{\vec{q}} c_{\vec{k}_1 - \vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{k}_1} a_{\vec{q}}^{\dagger}, \textcircled{2} g_{-\vec{q}} c_{\vec{k}_2 + \vec{q}}^{\dagger} c_{\vec{k}_2} a_{\vec{q}}^{\dagger}$$

$$H_{\text{el-ph}} = \sum_{\vec{k}} \sum_{\vec{q}'} g_{\vec{q}'} c_{\vec{k} - \vec{q}'}^{\dagger} c_{\vec{k}} (a_{\vec{q}'}^{\dagger} + a_{-\vec{q}'})$$

tous les phonons possibles
pour chacun des deux processus
(on prend ici $\vec{K} = \vec{0}$)

$$|f\rangle = |\vec{k}_1 - \vec{q}, \vec{k}_2 + \vec{q}, 0_{\vec{q}}\rangle$$

$$|i\rangle = |\vec{k}_1, \vec{k}_2, 0_{\vec{q}}\rangle$$

pas de phonons

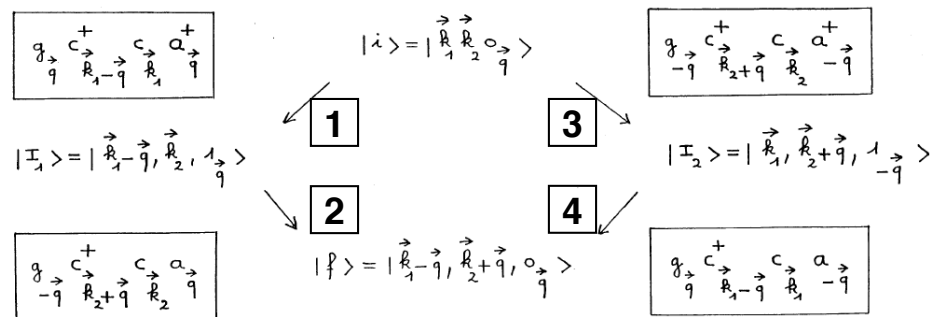
et au premier ordre en perturbation : $\langle f | H_{\text{el-ph}} | i \rangle = 0$

$$\text{car } \langle 0_{\vec{q}} | a_{\vec{q}}^{\dagger} | 0_{\vec{q}} \rangle = \langle 0_{\vec{q}} | a_{-\vec{q}} | 0_{\vec{q}} \rangle = 0$$

et au second ordre en perturbation

$$|i'\rangle = |i\rangle + \sum_I |I\rangle \frac{\langle I|H_{e-ph}|i\rangle}{E_i - E_I} \quad |f'\rangle = |f\rangle + \sum_I |I\rangle \frac{\langle I|H_{e-ph}|f\rangle}{E_f - E_I}$$

$$\langle H_{el-ph}^{(2)} \rangle = \langle i|H_{el-ph}|f'\rangle + \langle f|H_{el-ph}|i'\rangle$$



$$\langle H_{el-ph}^{(2)} \rangle = \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} (2 \sum_{\vec{q}} |g_q|^2 \{ \frac{1}{E(k_1) - (E(k_1 - q) + \hbar\omega(q))} + \frac{1}{E(k_2) - (E(k_2 + q) + \hbar\omega(-q))} \})$$

et en utilisant la conservation de l'énergie $E(k_1) + E(k_2) = E(k_1 - q) + E(k_2 + q)$

$$H_{el-ph}^{(2)} = \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} \sum_{\vec{q}} \frac{4|g_q|^2 \hbar\omega(q)}{(\hbar\omega)^2 - (\hbar\omega(q))^2} c_{k_1-q}^\dagger c_{k_2+q}^\dagger c_{k_2} c_{k_1}$$

où on a écrit $E(k_1) - E(k_1 - q) = E(k_2 + q) - E(k_2) = \hbar\omega \sim 0$

$$\vec{k}_2 = -\vec{k}_1 \in SF$$

soit pour $\hbar\omega \sim 0$ ($\leq \hbar\omega(q)$) et en prenant $\hbar\omega(q) \sim \hbar\omega_D$
on obtient

$$H_{\text{el-ph}}^{(2)} \approx - \sum_{\vec{k}, \vec{q}} \frac{4|g_q|^2}{\hbar\omega_D} c_{k-q}^\dagger c_{-k+q}^\dagger c_{-k} c_k$$

négatif : l'interaction est ATTRACTIVE

en utilisant l'expression de p43 pour g_q pour un potentiel en $1/r$ (+ ondes planes)

on obtient pour des processus normaux (ondes longitudinales, $\vec{q} \cdot \vec{e}_q = q$) $g_q = i \frac{e^2}{\epsilon_0 \Omega q} \sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega(q)}}$

et l'interaction **totale** (Coulombienne + phonon) s'écrit :

fréquence plasma des ions



$$V(\vec{q}, \omega) = \frac{e^2}{\epsilon_0 \Omega q^2} \left\{ 1 + \frac{2e^2 / \epsilon_0 \Omega M}{\omega^2 - \omega(q)^2} \right\} = \frac{e^2}{\epsilon_0 \epsilon_r(\vec{q}, \omega) \Omega q^2}$$



constante diélectrique relative
pouvant être négative = « super-écranage » $\Rightarrow$ supraconductivité