21.10.80

Exemples d'application de la méthode de l'hamiltonien effectif.

But de ce cours

Montrer la richesse de cette méthode en l'illustrant sur de nombreux exemples.

L'accent est mis plus sur les idées physiques que sur le détail des calculs

Plan

① Premier exemple : interaction effective entre électrons d'un métal par échange de phonons (T1 à T13)

② Etude d'un autre problème très analogue au précédent : Potentiel de Yukawa (T14 à T19)

③ Autre exemple : interaction de Ruderman - Kittel entre spins nucléaires dans un métal (T20 à T25)

④ Autre problème très voisin : interaction d'échange indirecte entre ions paramagnétiques dans un métal (T26)

T1

Premier exemple

Attraction effective entre électrons d'un métal par échange de phonons.

Importance de cette attraction effective entre électrons pour la compréhension du phénomène de supraconductivité

Références

C. KITTEL Quantum theory of solids

chapitres 7 et 8
et références in

T2

Interaction électron - ion dans un métal

– Ions fixés à leurs positions d'équilibre $\vec{R}_i^0$

$$H_{\text{électron}} = \frac{\vec{P}^2}{2m} + \sum_i v(\vec{r} - \vec{R}_i^0)$$

Energie cinétique de e Couplage e - ions i

Les ions en $\vec{R}_i^0$ forment un réseau périodique → électron dans un potentiel périodique

"Bandes" d'énergie $H_e |\vec{k}\rangle = \varepsilon_k |\vec{k}\rangle$

– Ions déplacés de leur positions d'équilibre

$\delta\vec{R}_i = \vec{R}_i - \vec{R}_i^0$ écart faible

$$\sum_i v(\vec{r}-\vec{R}_i) = \sum_i v(\vec{r}-\vec{R}_i^0) \underbrace{- \sum_i \delta\vec{R}_i \cdot \vec{\nabla} v(\vec{r}-\vec{R}_i^0)}_{\delta V} + \dots$$

δV : potentiel perturbateur lié aux déplacements des ions. Linéaire en $\delta\vec{R}_i$

Comment les $\delta\vec{R}_i$ évoluent-t-ils ?

Dynamique du réseau - Phonons (T3)

- les ions sont en mouvement. Couplés les uns aux autres. Minimum d'énergie potentielle pour $\vec{R}_i = \vec{R}_i^\circ$

les évolutions des $\delta\vec{R}_i$ ne sont pas indépendantes. Possibilité (approximation harmonique) d'introduire des combinaisons linéaires des $\delta\vec{R}_i$ qui évoluent de manière indépendante

"Modes" collectifs de vibration du réseau

Hamiltonien du réseau : équivalent à celui d'un ensemble d'oscillateurs harmoniques indépendants

$$H_{réseau} = \sum_{\vec{q}} \hbar\,\Omega_{\vec{q}} \left(b^+_{\vec{q}} b_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \right)$$

$b^+_{\vec{q}}$: Op. de création d'un <u>phonon</u> $\vec{q}$, $\Omega_{\vec{q}}$

b_q : Op de destruction " " " "

Phonons : excitations élémentaires du réseau

Interaction électron - phonons (T4)

Les b_q et b^+_q sont des combinaisons linéaires des $\delta\vec{R}_i$ et $\vec{P}_i$ (impulsions)

Réciproquement, on a :

$$\delta\vec{R}_i = \sum_q N_q\, \vec{\varepsilon}_q \left(b_{\vec{q}}\, e^{i\vec{q}.\vec{R}_i^\circ} + b^+_q\, e^{-i\vec{q}.\vec{R}_i^\circ} \right)$$

N_q : coef. de normalisation $\vec{\varepsilon}_q$: polarisation

$$\delta V = -\sum_{\vec{q}} \sum_i N_q\, b_{\vec{q}}\, e^{i\vec{q}.\vec{R}_i^\circ}\, \vec{\varepsilon}_q . \vec{\nabla} v(\vec{r}-\vec{R}_i^\circ) + h.c.$$

δV agit à la fois

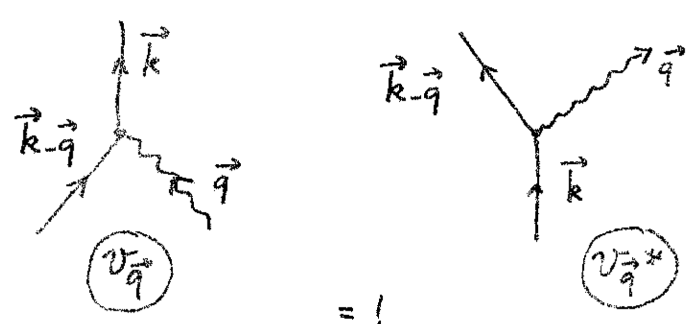
- sur les variables du réseau : changement du nombre de phonons de ± 1.
- sur les variables électroniques ($\vec{r}$ apparaît dans δV).

Conservation du vecteur $\vec{k}$ global liée aux symétries (translations)

Eléments de matrice de δV (T5)

Décrivent des processus où l'électron change d'état, un phonon $\vec{q}$ étant créé ou détruit

Electrons : traits pleins
Phonons : lignes ondulées



$$v_q = -N_q\, \overbrace{\langle 0_{\vec{q}} | b_{\vec{q}} | 1_{\vec{q}} \rangle}^{=1} \times$$
$$\langle \vec{k} | \sum_i e^{i\vec{q}.\vec{R}_i^\circ}\, \vec{\varepsilon}_q . \vec{\nabla} v(\vec{r}-\vec{R}_i^\circ) | \vec{k}-\vec{q} \rangle$$

Ecriture de V en "seconde quantification" (T6)

$$\delta V = \sum_{\vec{k}\vec{q}} \left(v^*_{\vec{q}}\, b^+_{\vec{q}}\, a^+_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}} + v_q\, b_{\vec{q}}\, a^+_{\vec{k}}\, a_{\vec{k}-q} \right)$$

$a^+_{\vec{k}}$: Op. de création d'un électron dans l'état $\vec{k}$

$a_{\vec{k}}$: Op de destruction " " "

δV agit sur les nombres d'occupation des états du système électrons + phonons

Tient compte du principe de Pauli

Relations d'anticommutation

$$[a_\alpha, a_\beta]_+ = [a^+_\alpha, a^+_\beta]_+ = 0 \qquad [a_\alpha, a^+_\beta]_+ = \delta_{\alpha\beta}$$

<u>Hamiltonien du système global</u>

$$H = H_0 + \delta V$$

$$H_0 = \underbrace{\sum_{\vec{k}} E_{\vec{k}}\, a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}}}_{\text{Electrons}} + \underbrace{\sum_{\vec{q}} \hbar\,\Omega_{\vec{q}} \left(b^+_{\vec{q}} b_{\vec{q}} + \frac{1}{2} \right)}_{\text{Phonons}}$$

Opérateurs à 2 corps (T7)
pour 1 système de N particules identiques

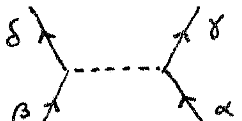
G : opérateur agissant sur 2 particules à la fois

$$G = \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i} g(i,j)$$ ← Somme sur les particules

Eléments de matrice de g

$$\langle\gamma\delta|g|\alpha\beta\rangle = \int d^3r_1\, d^3r_2\; \varphi_\gamma^*(\vec r_1)\,\varphi_\delta^*(\vec r_2)\; g(\vec r_1, \tfrac{\hbar}{i}\vec\nabla_1 ; \vec r_2, \tfrac{\hbar}{i}\vec\nabla_2)\,\varphi_\alpha(\vec r_1)\,\varphi_\beta(\vec r_2)$$

Représentation de $\langle\gamma\delta|g|\alpha\beta\rangle$



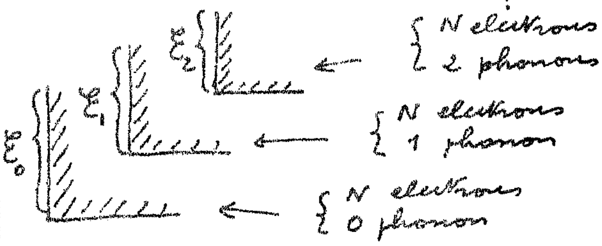
Ecriture de G en seconde quantification

$$G = \frac{1}{2}\sum_\alpha\sum_\beta\sum_\gamma\sum_\delta \langle\gamma\delta|g|\alpha\beta\rangle\, a_\gamma^+ a_\delta^+ a_\beta a_\alpha$$ ← Somme sur les états

a_μ^+ : Op. de création d'une particule dans l'état μ

a_ν : Op. de destruction ———— ν

(T8) Multiplicités non-perturbées du système électrons - phonons



A très basse température ($T \sim 0°K$), seule, la multiplicité $\mathcal{E}_0$ est occupée

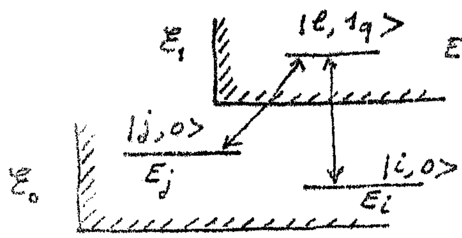
Effet de δV

δV couple $\mathcal{E}_0$ et $\mathcal{E}_1$

L'effet de δV sur $\mathcal{E}_0$ (au 2ème ordre) peut être décrit par un hamiltonien effectif n'agissant que dans $\mathcal{E}_0$

Effet des émissions et réabsorptions virtuelles de phonons décrit par un hamiltonien effectif purement électronique.

Expression de Heff (T9)



$$\langle j,0|H_{eff}|i,0\rangle = \overbrace{\langle j,0|\delta V|i,0\rangle}^{=0} + \frac{1}{2}\sum_l\sum_q \langle j,0|\delta V|l,1_q\rangle\langle l,1_q|\delta V|i,0\rangle\left(\frac{1}{E_i - E_l - \Omega_q} + \frac{1}{E_j - E_l - \Omega_q}\right)$$

$$\langle j,0|\delta V|l,1_q\rangle \leftarrow \sum_{k'} v_q\, b_q\, a_{k'+q}^+ a_{k'} \qquad \langle l,1_q|\delta V|i,0\rangle \leftarrow \sum_k v_q^*\, b_q^+ a_{k-q}^+ a_k$$

$$\langle 0|b_q|1_q\rangle\langle 1_q|b_q^+|0\rangle = 1$$

Pour chaque terme $a_{k-q}^+ a_k$ de la somme sur k, il existe un seul état l pour lequel $\langle l|a_{k-q}^+ a_k|i\rangle \neq 0$. Et on a alors

$$E_i - E_l - \Omega_q = E_k - E_{k-q} - \Omega_q$$

Même raisonnement pour $\langle j|a_{k'+q}^+ a_{k'}|l\rangle$

$$E_i - E_l - \Omega_q = E_{k'+q} - E_{k'} - \Omega_q$$

Expression de Heff en seconde quantification (T-10)

Lorsqu'on fixe $\vec q, \vec k, \vec k'$, les dénominateurs d'énergie ont une valeur bien déterminée qui ne dépend que de $\vec q, \vec k, \vec k'$.

Il n'est donc pas nécessaire de spécifier i et j. La somme sur l fait apparaître une relation de fermeture intermédiaire. Ainsi,

$$H_{eff} = \frac{1}{2}\sum_k\sum_{k'}\sum_q a_{k'+q}^+ a_{k'} a_{k-q}^+ a_k \times |v_q|^2 \left[\frac{1}{E_k - E_{k-q} - \Omega_q} + \frac{1}{E_{k'+q} - E_{k'} - \Omega_q}\right]$$

Mettons tous les a^+ à gauche, tous les a à droite

$$a_{k'} a_{k-q}^+ = -a_{k-q}^+ a_{k'} + \delta_{k-k'-q}$$

D'où l'on tire

$$a_{k'+q}^+ a_{k'} a_{k-q}^+ a_k = a_k^+ a_k\, \delta_{k-k'-q} + a_{k-q}^+ a_{k'+q}^+ a_{k'} a_k$$

T-11

Expression finale pour H_{eff}

$$H_{eff} = H_{eff}^1 + H_{eff}^2$$

$$H_{eff}^1 = \sum_k \sum_q a_k^+ a_k \frac{|v_q|^2}{E_k - E_{k-q} - \Omega_q}$$

Hamiltonien effectif à 1 particule

Pour l'autre terme, on change $\vec{k}$ en $\vec{k}'$ et vice versa, $\vec{q}$ en $-\vec{q}$. On utilise $\Omega_q = \Omega_{-q}$ $\quad |v_q|^2 = |v_{-q}|^2$

On peut alors remplacer le $2^{ème}$ dénominateur d'énergie par $1/(E_{k-q} - E_k - \Omega_q)$ et on obtient finalement

$$H_{eff}^2 = \sum_k \sum_{k'} \sum_q \frac{|v_q|^2 \Omega_q}{(E_k - E_{k-q})^2 - \Omega_q^2} a_{k-q}^+ a_{k'+q}^+ a_{k'} a_k$$

Même forme qu'un opérateur à 2 corps décrivant une interaction entre électrons

T-12

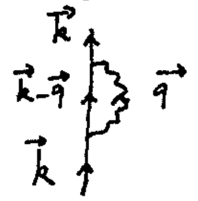
Interprétation physique de H_{eff}^1

III - 4

$$\sum_k E_k a_k^+ a_k + H_{eff}^1 = \sum_k (E_k + \delta E_k) a_k^+ a_k$$

avec $\quad \delta E_k = \sum_q \frac{|v_q|^2}{E_k - E_{k-q} - \Omega_q}$

Modification de l'énergie de l'état électronique $\vec{k}$ due à l'émission et à la réabsorption virtuelles d'un photon par l'électron dans l'état k



Electron "habillé" par un nuage de phonons virtuels

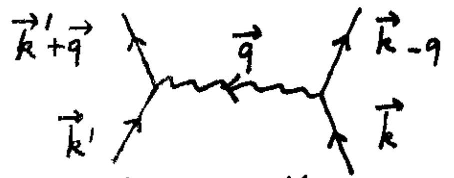
"Polaron"

Propriétés physiques différentes de celles de l'électron "nu".

T-13

Interprétation physique de H_{eff}^2

Interaction effective entre 2 électrons due à l'échange d'un phonon virtuel



Un électron déforme le réseau derrière lui. La déformation ainsi créée interagit avec un $2^{ème}$ électron

Approximations couramment faites

- Ω_q indépendant de q (phonons optiques)
- Les états électroniques qui interviennent sont au voisinage du niveau de Fermi dans une bande d'énergie de largeur faible devant Ω_q. On néglige $(E_k - E_{k-q})^2$ devant Ω_q^2

$$H_{eff} = \sum_{kk'q} - \frac{|v_q|^2}{\Omega_q} a_{k-q}^+ a_{k'+q}^+ a_{k'} a_k$$

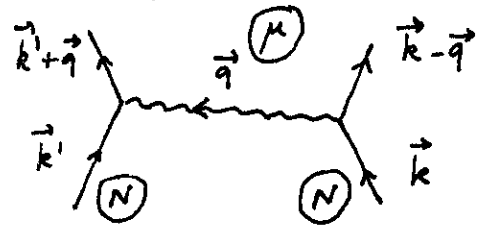
Interaction attractive

T-14

Etude d'un autre problème analogue au précédent

Potentiel de Yukawa

Interaction entre 2 particules (très massives) N par l'intermédiaire de l'échange d'une particule μ



Modèle très schématique pour décrire l'interaction entre 2 nucléons résultant de l'échange de mésons.

T-15

Hamiltonien

Comme plus haut

$$H = H_0 + \delta V$$

$$H_0 = \underbrace{\sum_{k} E_{\vec{k}}\, a^+_{\vec{k}} a_{\vec{k}}}_{\text{Particules } N} + \underbrace{\sum_{q} \hbar\Omega_{\vec{q}}\, b^+_{\vec{q}} b_{\vec{q}}}_{\text{Particules } \mu}$$

Masse au repos M_0 — Masse au repos m_0

Energie relativiste

$$E_{\vec{k}} = \sqrt{M_0^2c^4 + \hbar^2c^2\vec{k}^2} \qquad \hbar\Omega_{\vec{q}} = \sqrt{m_0^2c^4 + \hbar^2c^2\vec{q}^{\,2}}$$

$$\delta V = \sum_{\vec{k},\vec{q}} V_q^*\, b^+_{\vec{q}}\, a^+_{\vec{k}-\vec{q}}\, a_{\vec{k}} + \text{h.c.}$$

Processus élémentaires d'émission ou d'absorption de μ par des N

Dépendance en q de l'amplitude V_q (Se démontre aisément à partir d'arguments relativistes) :

$$V_q \sim \frac{1}{\sqrt{\Omega_q}}$$

T-16

Interaction effective

Un calcul identique en tous points au précédent conduit à

$$H^2_{eff} = \sum_{q\,q'\,k} \frac{|V_q|^2\,\Omega_q}{\left(E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}-\vec{q}}\right)^2 - \Omega_q^2}\, a^+_{k-q}\, a^+_{k'+q}\, a_{k'}\, a_k$$

Hypothèse sur les particules N : elles sont très massives ($M_0 \gg m_0$). Elles ne reculent pratiquement pas quand elles émettent ou absorbent une particule μ

On peut donc valablement négliger $(E_k - E_{k-q})^2$ devant Ω_q^2

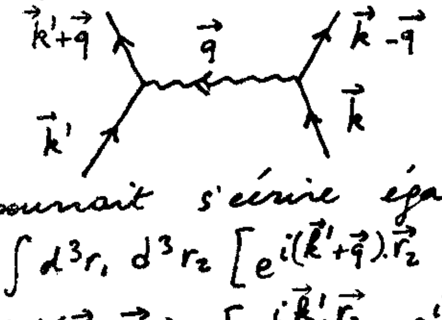
Comme $V_q \sim \frac{1}{\sqrt{\Omega_q}}$, on obtient finalement

$$H^2_{eff} \sim \sum_{k,k',q} -\frac{1}{\Omega_q^2}\, a^+_{\vec{k}-\vec{q}}\, a^+_{\vec{k}'+\vec{q}}\, a_{\vec{k}'}\, a_{\vec{k}}$$

T-17

Peut-on interpréter le résultat précédent en termes d'un potentiel $W(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ ne dépendant que de la position relative des 2 particules ?

Si cela était vrai, l'amplitude $\frac{1}{\Omega_q^2}$ du processus



pourrait s'écrire également

$$\int d^3r_1\, d^3r_2 \left[e^{i(\vec{k}'+\vec{q})\cdot\vec{r}_2}\; e^{i(\vec{k}-\vec{q})\cdot\vec{r}_1}\right]^* W(\vec{r}_1 - \vec{r}_2) \left[e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}_2}\; e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_1}\right]$$

$$\sim \int d^3\rho\; W(\vec{\rho})\; e^{-i\vec{q}\cdot\vec{\rho}}$$

Transformée de Fourier spatiale du potentiel

T-18

Conclusion

L'interaction entre particules N par échange de μ peut être décrite par un potentiel $W(\vec{r})$ donné par la T.F. de

$$\frac{1}{\Omega_q^2} \sim \frac{1}{q^2 + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}}$$

Donc

$$W(r) \sim \int d^3q\; \frac{e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}}}{q^2 + \frac{m_0^2c^2}{\hbar^2}}$$

$$\sim \frac{1}{r}\, e^{-\frac{r}{r_0}}$$

avec $r_0 = \frac{\hbar}{mc}$ — longueur d'onde de Compton de μ

Potentiel de Yukawa de portée r_0 finie

Interprétation en termes de transitions virtuelles

T-19

Limite $m_0 \to 0$

Si $m_0 \to 0$, $r_0 \to \infty$

le potentiel de Yukawa tend, à la limite $m_0 \to 0$, vers un potentiel coulombien en $\frac{1}{r}$

Les forces electromagnétiques, à longue portée, s'interprètent bien comme résultant d'un echange de particules de masse au repos nulle, le photon

T-20

Autre exemple

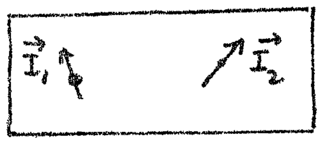
Interaction de Ruderman - Kittel entre spins nucléaires dans un métal

Références

Ruderman Kittel - Phys Rev 96, 99 (1954)
Kittel - Théorie quantique du solide p. 381
Abragam - Principle of nuclear magnetism p. 206

Modèle très simple

Gaz d'electrons libres dans une boite

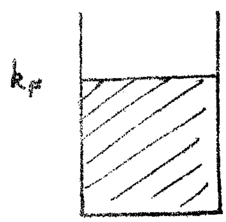


2 Spins nucléaires $\vec{I}_1$ et $\vec{I}_2$ en $\vec{R}_1, \vec{R}_2$, interagissant avec les électrons par une interaction de contact

$$A \sum_{\text{electrons } i} \left[\delta(\vec{R}_1 - \vec{r}_i)\, \vec{I}_1 \cdot \vec{S}_i + \delta(\vec{R}_2 - \vec{r}_i)\, \vec{I}_2 \cdot \vec{S}_i \right]$$

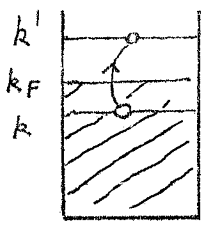
T-21

Excitations élémentaires du gaz d'electrons



Etat fondamental $|0\rangle$

Tous les états k occupés jusqu'au niveau de Fermi k_F



Etat excité $|e\rangle$

Un electron est porté d'un état occupé k vers un état vide k'

Mécanisme du couplage indirect entre les spins nucléaires

l'un des 2 spins excite le gaz d'électrons de $|0\rangle$ à $|e\rangle$, l'autre le fait revenir de $|e\rangle$ à $|0\rangle$

$$H_{eff} = \sum_e \frac{\langle 0|V|e\rangle\langle e|V|0\rangle}{E_0 - E_e}$$

T-22

Expression de Heff

$$H_{eff} = A^2 \sum_{\substack{m_s, m_s' = \pm \\ k' \text{ vides},\ k \text{ occupés}}} \frac{1}{E_k - E_{k'}} \times$$

$$\langle k m_s | \delta(\vec{r} - \vec{R}_1)\, \vec{S}\cdot\vec{I}_1 | k' m_s' \rangle \langle k' m_s' | \delta(\vec{r} - \vec{R}_2)\, \vec{S}\cdot\vec{I}_2 | k\, m_s \rangle$$

$$+ \quad 1 \rightleftarrows 2$$

Expression entièrement calculable car on connait les énergies et les fonctions d'onde

$$\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \sim e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \qquad E_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

Somme sur les états de spin électroniques

$$\sum_{m_s\, m_s'} \langle m_s | \vec{S}\cdot\vec{I}_1 | m_s' \rangle \langle m_s' | \vec{S}\cdot\vec{I}_1 | m_s \rangle$$

$$= \sum_{m_s} \langle m_s | (\vec{S}\cdot\vec{I}_1)(\vec{S}\cdot\vec{I}_2) | m_s \rangle =$$

$$\sum_{a,b = x,y,z} I_{1a} I_{2b} \underbrace{\sum_{m_s} \langle m_s | S_a S_b | m_s \rangle}_{= \delta_{ab} \frac{1}{3} \mathrm{Tr}\, \vec{S}^2 = \frac{1}{2} \delta_{ab}}$$

$$= \frac{1}{2} \vec{I}_1 \cdot \vec{I}_2$$

Interaction scalaire

T-23

Intégrale à calculer

$$\int_0^{k_F} d^3k \int_{k_F}^{\infty} d^3k' \; \frac{e^{i(\vec{k}'-\vec{k})(\vec{R}_1-\vec{R}_2)}}{k^2-k'^2} + \text{c.c.}$$

qui fait apparaitre $F(2k_F R)$

où $R = |\vec{R}_1 - \vec{R}_2|$ et

$$F(x) = \frac{x\cos x - \sin x}{x^4}$$

<u>Finalement</u>, on obtient

$$H_{eff} = C\, F(2k_F R)\; \vec{I}_1 . \vec{I}_2$$

C : constante dépendant de $\hbar$, m, k_F

Interaction scalaire effective entre les 2 spins nucléaires

- à longue portée
  F ne décroit pas exponentiellement mais en $1/R^3$
- présentant des oscillations en fonction de R avec une période de l'ordre de la longueur d'onde de Fermi.

T-24

<u>Interprétation physique</u>

Le spin nucléaire $\vec{I}_1$ "polarise" le gaz d'électrons. Il interagit différemment avec les spins $\vec{s}$ parallèles ou antiparallèles à lui. La polarisation électronique ainsi créée est proportionnelle à $\vec{I}_1$ et réagit sur l'autre spin nucléaire $\vec{I}_2$

Cette interaction indirecte est à longue portée car les électrons sont <u>libres</u>. Ils sont <u>délocalisés</u> dans tout le métal et peuvent transmettre l'information sur de grandes distances, de $\vec{I}_1$ à $\vec{I}_2$.

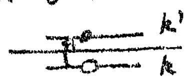
Situation différente dans un isolant. On trouve alors une interaction de portée finie, inversement proportionnelle à la largeur de la bande interdite séparant la bande de conduction de la bande de valence

T-25

<u>Importance des états électroniques très proches de k_F</u>

Ont un poids élevé à cause du dénominateur d'énergie en $\frac{1}{k^2-k'^2}$ dans H_{eff}

k et k' peuvent être très proches de part et d'autre de k_F

k_F 

Il existe des excitations élémentaires du gaz d'électrons d'énergie $k'^2 - k^2$ aussi faible que l'on veut

<u>Conséquences</u>

- Portée infinie
- Oscillations spatiales à la période $\lambda_F = k_F^{-1}$ dans le couplage indirect

T-26

<u>Autre problème très voisin</u>

Ions ayant un paramagnétisme électronique dans un métal (Exemple : métaux du groupe des terres rares - lanthanides)

Interaction indirecte entre 2 ions par l'intermédiaire de l'interaction d'échange de leur couche interne (d ou f), très localisée, avec les électrons de conduction $\longrightarrow$ Interaction d'échange (électronique) indirecte entre ions dont le signe dépend de la distance.

Importance pour la compréhension du magnétisme (structures ferro, antiferromagnétiques)