

Correlations (liquide de Fermi)

Thierry Klein

thierry.klein@neel.cnrs.fr - 04 76 88 90 64

10 Cours

1. Du gaz au liquide de Fermi

Rappels sur le gaz de Fermi

Le problème à N-corps (rappels, champ moyen)

Liquide de Fermi, notion de quasi-particules (excitations)

2. Fonction de Green

Définition, densité spectrale et self-énergie

(une introduction aux) Diagrammes de Feynmann

Au delà du liquide de Fermi

Et partie **transport** (Julia Meyer)

Equation de Boltzmann. **Réponse linéaire.**

Transport cohérent (Landauer-Büttike, effet Hall quantique).

Localisation faible. Effet Kondo

Chap.1

Du Gaz au Liquide de Fermi

1. Rappels sur les gaz quantiques

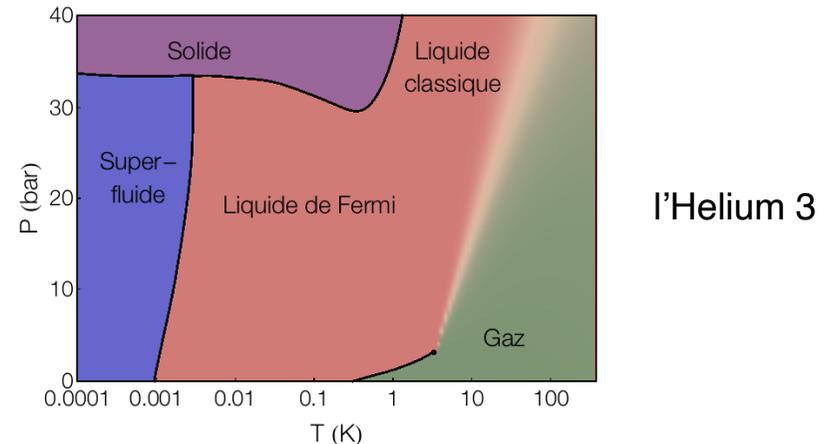
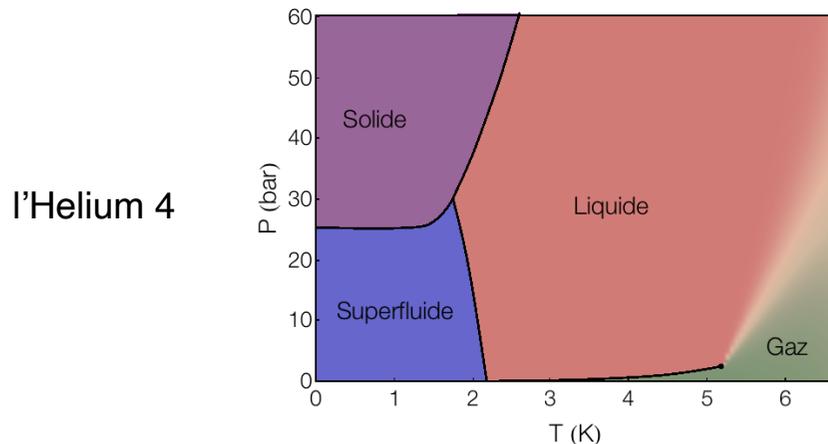
On ne s'intéressera ici qu'aux systèmes **fermioniques** pour lesquels les effets **quantiques** liées au principe de **Pauli** sont importants. Ils sont caractérisés par l'existence

$$\text{d'une énergie de Fermi } E_F \sim \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m} \sim \frac{h^2}{2ma^2} = k_B T_F \gg \frac{3}{2} k_B T$$

C'est le cas des électrons dans les métaux qui ont une **masse faible et une forte densité** (la distance inter-atomique $a \approx 0.3 \text{ nm}$) et pour lesquels $E_F \sim 10 \text{ eV}$. Ils ne peuvent donc **pas** être traité par une approche classique ou, de façon équivalente,

$$\text{la longueur thermique (de Broglie) } \lambda_T = \frac{h}{\sqrt{3k_B m T}} \sim 10 \text{ nm (à 300K) est } \gg a$$

Remarque : c'est également le cas de l'Helium 3 liquide (pour lequel $T_F \sim 1 \text{ K}$). Les autres liquides solidifient avant que les effets quantiques ne soient observables.



pour des électrons **libres** : $-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \Phi = E\Phi \rightarrow \Phi_k = (1/\sqrt{V})e^{ikx}$ et $E = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$

et dans le **solide** on a, pour commencer : $H = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} - \sum_{R_i} \frac{Ze^2}{|r - R_i|}$

On peut alors montrer que $\Phi_k = u_k(x)e^{ikx}$ où $u_k(x + R_i) = u_k(x)$: **théorème de Bloch**

Par exemple $u_k(x) = \sum_{R_i} \phi_{at}(x - R_i)e^{-ik(x-R_i)}$ dans une approche **liaisons fortes**.

le terme e^{ikx} traduit le déplacement « presque » libre de l'électron et $u_k(x)$ les modulations de la densité électronique dans le solide (due à la présence des ions).

« L'impulsion » k définit entièrement la particule (électron ou trou) mais ce vecteur d'onde n'est **pas** sa quantité de mouvement ($\vec{p} \neq \hbar\vec{k}$), Il s'agit *simplement* d'un vecteur du réseau réciproque.

qui permet de définir sa **vitesse** : $v(k) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial E(k)}{\partial k}$

et sa **masse effective** : $\frac{1}{m^*} = \frac{1}{\hbar^2} \frac{\partial^2 E}{\partial k^2}$

Dans le formalisme de la **seconde quantification**, on introduit les **opérateurs création** $c_{i\sigma}^+$ (ou annihilation $c_{i\sigma}$) d'une particule sur le site i , et en notant t l'intégrale de saut : $H = \sum_{i \neq j, \sigma, \sigma'} t c_{i\sigma}^+ c_{j, \sigma'}$

En introduisant $c_{\vec{k}\sigma}^+ = \sum_i c_{i,\sigma}^+ e^{-i\vec{k}\vec{R}_i}$, où $c_{\vec{k},\sigma}^+$ est l'opérateur **création de l'état** $|\vec{k}\rangle = c_{\vec{k},\sigma}^+ |0\rangle$

on a : $H = \sum_{\vec{k},\sigma} \epsilon_{\vec{k}} n_{\vec{k},\sigma}$ avec $n_{\vec{k},\sigma} = c_{\vec{k},\sigma}^+ c_{\vec{k},\sigma}$ (et $\sum_{\vec{k}} n_{\vec{k},\sigma} |\Psi\rangle = N |\Psi\rangle$)

H est donc **diagonal** sur la base des $|\vec{k}\rangle$

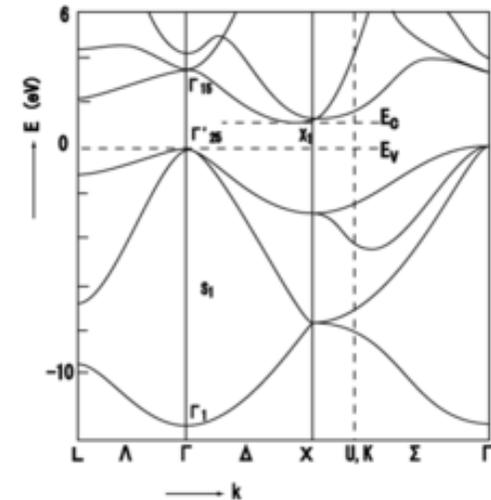
et $\epsilon_{\vec{k}} = \sum_{\vec{\Delta}} t e^{-i\vec{k}\vec{\Delta}}$ est la **relation de dispersion** correspondante (structure de bande)

où $\vec{\Delta}$ est le vecteur reliant les premiers voisins

La fonction d'onde globale $|\Psi\rangle = \prod_{\vec{k}} c_{\vec{k},\sigma}^+ |0\rangle$

mais on n'explicita pas (ou rarement) cette fonction d'onde

Les N particules sont ici **indépendantes** et à $T=0$, elles occupent les états $|\vec{k}\rangle$ jusqu'au **niveau de Fermi** définissant ainsi la **surface de Fermi**.



Les différentes propriétés

(électroniques, thermodynamiques, magnétiques,... = observables)

$$\sigma_0 = e^2 D \times g(E_F)$$

$$C = \pi^2 k_B^2 T / 3 \times g(E_F)$$

$$\chi_{\text{Pauli}} = \mu_B^2 \times g(E_F)$$

....

sont toutes déterminées par la **densité d'états** $g(E_F)$:

Ce résultat reste vrai même en incluant les interactions mais....

la nature même de l'électron est remise en question*...

Dans un solide un électron n'est *plus* juste une particule de charge e ,
masse m_e , spin 1/2 qui peut être caractérisé par son vecteur d'onde k !

L'objectif de ce cours est d'en appréhender un peu mieux la nature.

* c'était déjà un peu le cas pour les électrons indépendants dont la masse n'est plus celle de l'électron libre

2. Le problème à N-corps (rappels, champ moyen)

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

termes à 1 corps : énergie cinétique,
interactions e/ions $f_{\lambda, \lambda'} = \langle \phi_\lambda | f | \phi_{\lambda'} \rangle$

termes à 2 corps : interactions e/e
fonctions d'onde deviennent elles-même
des **opérateurs** : **seconde quantification**
et si $v(\vec{r}, \vec{r}') = v(\vec{r} - \vec{r}')$

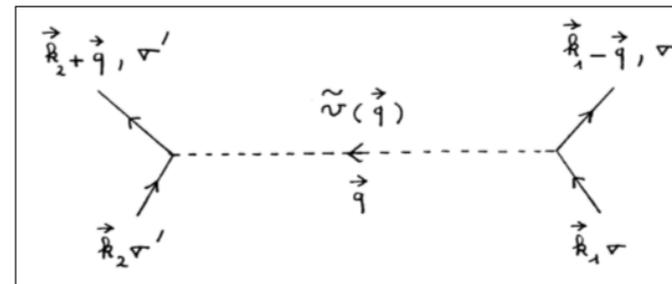
(dans la base des ondes planes) :

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

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



Le traitement exact (exhaustif) des corrélations est généralement impossible.

Dans le cadre d'une approche **champ moyen**, ce potentiel peut s'écrire

$$\bar{v}_{el}(\vec{r}) = \int d^3r' v(\vec{r} - \vec{r}') \sum_{\lambda'\sigma' \neq \lambda\sigma} \frac{\bar{n}_{\lambda'\sigma'} |\varphi_{\lambda'}(\vec{r}')|^2}{\rho(r')}$$

↓
↓
↓

Potentiel Coulombien
 occupation moyen de l'état à 1 particule $\varphi_{\lambda'} = \mathbf{Fermi-Dirac}$
densité (de charge) due aux autres électrons

H redevient un Hamiltonien à 1 corps, soumis à

l'interaction « moyenne » des autres particules (de densité $\rho(r')$). On a ici l'essence même de la seconde quantification car la fonction d'onde $\varphi_{\lambda'}(r')$ devient un opérateur

Les φ_{λ} pourraient alors être déterminées de façon « autocohérente » en résolvant :

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla_r^2}{2m} - \sum_{R_i} \frac{Ze^2}{|r - R_i|} + \int d^3r' v(\vec{r} - \vec{r}') \sum_{\lambda'\sigma' \neq \lambda\sigma} \bar{n}_{\lambda'\sigma'} |\varphi_{\lambda'}(\vec{r}')|^2 \right] \varphi_{\lambda} = E_i \varphi_{\lambda}$$

↓
↓

interaction e/ions $v_{ion}(r)$
terme de Hartree $\bar{v}_{el}(r)$

Mais en s'arrêtant là, on ne prend pas en compte le caractère fermionique de la fonction d'onde à N-particules qui doit être **antisymétrique** par permutation (indiscernabilité)

Ceci donne lieu à un second terme = **échange** et (toujours en champ moyen) :

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

↓
terme de Fock

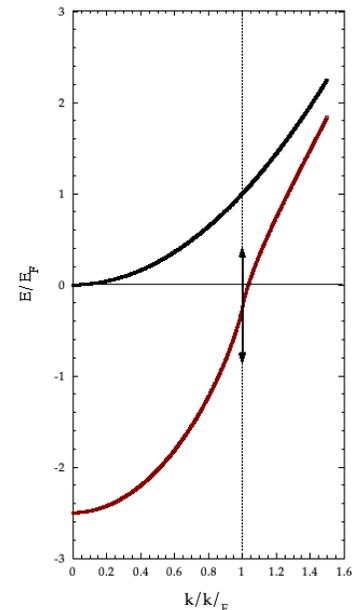
On peut alors résoudre (voir seconde quantification) le problème dans le cadre du modèle du Jellium supposant une répartition **homogène** des charges et pour lequel $v_{ion}(r) + \bar{v}_{el}(r) \approx 0$.

Dans quel cas, les ondes planes **restent les états propres** à 1 particule et

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2}{(2\pi)^3 \epsilon_0} \int_0^{k_F} \frac{d^3k'}{|\vec{k} - \vec{k}'|^2} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \frac{e^2}{2\pi^2 \epsilon_0} k_F F(k/k_F)$$

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

(un peu de...) calcul intégral donne $F(X) = \frac{1}{2} + \frac{1-X^2}{4X} \text{Ln} \left| \frac{1+X}{1-X} \right|$ avec $F(1)=0.5$



Remarque : on peut calculer

$$E_{\text{totale}} = N \left\{ \frac{3 \hbar^2 k_F^2}{10 m} - \frac{3 e^2 k_F}{16 \pi^2 \epsilon_0} \right\} = N \left\{ \frac{2.21}{\pi_0^2} - \frac{0.916}{\pi_0} \right\} \text{ Rydberg}$$

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

E_{tot}/N peut s'exprimer en fonction de la **densité** électronique $\rho = N/V = k_F^3/3\pi^2$

$$E_{\text{tot}}/V = \rho(a\rho^{2/3} - b\rho^{1/3}) = T_0(\rho) + E_{xc}(\rho) \text{ avec } a = 3^{5/3}\pi^{4/3}\hbar^2/10m \text{ et } b = e^2/8\pi\epsilon_0$$

Ce résultat est en fait **général** : **théorème de Hohenberg-Kohn-Sham** et l'énergie (par unité de volume) ne dépend que de la **densité** électronique même lorsque celle-ci n'est pas constante (au delà de l'approche électron-libre)

$$\begin{aligned} E_V[\rho] &= T_0[\rho] + \int d\mathbf{r} V(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}) + \frac{e^2}{8\pi\epsilon_0} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r})\rho(\mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} + E_{xc}[\rho] \\ &= T_0[\rho] + \int d\mathbf{r} [V(\mathbf{r}) + \frac{1}{2}V_H[\rho](\mathbf{r})] \rho(\mathbf{r}) + E_{xc}[\rho]. \end{aligned}$$

La densité électronique $\rho(\mathbf{r}) = 2 \sum_{\lambda=1}^{N/2} |\Psi_\lambda|^2$ sera celle qui minimise l'énergie

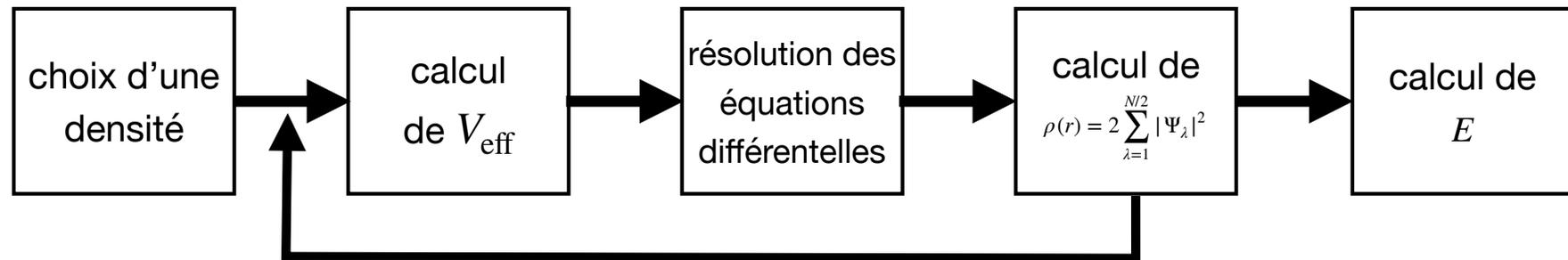
($E - \mu N$ pour l'ensemble grand canonique) soit* :

$$\boxed{\frac{\delta T_0[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} + V(\mathbf{r}) + V_H[\rho](\mathbf{r}) + \frac{\delta E_{xc}[\rho]}{\delta \rho(\mathbf{r})} - \mu = 0.} \quad \text{avec} \quad T_0[\rho] = 2 \sum_{\lambda=1}^{N/2} \langle \psi_\lambda | -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} | \psi_\lambda \rangle.$$

$V_{\text{eff}}(r)$ * le facteur 1/2 a « disparu » car le terme d'Hartree est proportionnel à ρ^2

En 1965, Kohn et Sham proposent alors de traiter le problème *comme* des électrons sans interaction en supposant que Ψ_λ vérifient

$$\left[-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right] \psi_\lambda(\mathbf{r}) = \varepsilon_\lambda \psi_\lambda(\mathbf{r})$$



La difficulté consiste évidemment à faire le *bon* choix pour $E_{xc}(\rho)$.

Les différentes méthodes de résolution numérique (appelées **Density Functional Theory**) sont basées ce choix

Une approximation souvent utilisée, dite **Local Density Approximation**, consiste à conserver une fonctionnelle du type $E_{\text{ex}} \propto -\rho^{2/3}$ (ou une forme équivalente ne dépendant que de ρ et pas de ces dérivées). L'approximation de Thomas-Fermi néglige le terme d'échange.

(voir TP numérique).

3. Liquide de Fermi, notion de quasi-particules

La variété des comportements observés découle directement des **interactions** (supraconductivité, ordres magnétiques complexes, transition métal-isolant, etc...).

Néanmoins, connaître de façon exacte la nature du **fondamental** (i.e. la fonction d'onde à N particules qui le décrit) est généralement **impossible** ! (c'est une combinaison linéaire de déterminants de Slater...). Comme on devrait a priori pouvoir calculer les éléments de matrice $\langle \Phi_\alpha | O | \Phi_\beta \rangle$ des observables associées aux propriétés des solides, on semble donc dans une impasse...

Mais les propriétés thermodynamiques (à basse température) et les coefficients de réponse du système (susceptibilité, transport,...) à une perturbation extérieure (température, onde électromagnétique, pression,...) découlent en fait **du spectre des excitations de basse énergie**. Et pour décrire ces excitations il s'avère qu'il n'est pas (forcément) nécessaire de connaître de façon précise le fondamental.

Par exemple, pour décrire les excitations d'un cristal, les *phonons* ($\omega = vq$ pour $q \rightarrow 0$), il n'a pas été nécessaire de connaître précisément la structure de ce cristal....

La nature de la fonction d'onde* est donc souvent délaissée au profit du calcul direct du **spectre des excitations et des fonctions de réponse** qui en découlent. Une méthode efficace pour calculer les fonctions de réponse (susceptibilité, conductivité) est la **théorie de la réponse linéaire** qui sera vue dans la seconde partie du cours.

Nous nous concentrerons ici sur le calcul du spectre des excitations.

L'idée, introduite initialement par le physicien russe Lev **Landau**, est que - même si les interactions sont fortes - on **conserve une surface de Fermi** dans l'espace des impulsions et les excitations de basse énergie (proche du niveau de Fermi) peuvent alors être décrites comme des excitations « à un électron » mais *habillées* par les interactions : on parle alors de **quasi-particules**, formant un **liquide de Fermi**.

* Dans certains cas comme par exemple la supraconductivité (fonction d'onde BCS) ou l'effet Hall quantique (fonctions d'onde de Laughlin) une réflexion sur la nature même de cette fonction d'onde a été décisive.

Ces excitations peuvent être *gapées* (il faut fournir une énergie minimale pour exciter le système) ou pas. Dans quel cas, proche du niveau de Fermi : $\epsilon_k = A + \alpha k^z + \dots$ (où est appelé exposant de scaling dynamique).

Par exemple, dans le cas **des interactions magnétiques entre spins localisés**, l'échange peut par exemple se ré-écrire sous la forme d'un Hamiltonien du type

$$\sum J \vec{S}_i \vec{S}_j \text{ (Heisenberg).}$$

Si $J < 0$ (couplage **ferromagnétique**), l'état fondamental correspond *simplement* à un alignement de tous les spins, mais si $J > 0$ (**antiferromagnétique**) l'état $\prod |S_i^Z = (-1)^i S >$ (état de Neel) ne correspond au fondamental que si seuls les termes $S_i^z S_j^z$ sont pertinents (ou dominant) l'Hamiltonien (modèle d'Ising).

Dans le cas contraire, cet état est beaucoup plus complexe et peut être ordonné ou non (liquide de spin etc...). **VOIR cours sur les ETATS QUANTIQUES de la matière.** Néanmoins si un ordre existe, les excitations sont bien connues, même si l'état fondamental ne l'est pas : il s'agit d'*ondes de spin appelées magnons* (voir aussi les modes de Goldstone en TRANSITIONS DE PHASES).

Et dans ce cas vous verrez que $z = 1$ pour le coupage AF et $z = 2$ pour le ferromagnétisme.

L'idée de Landau est de continuer à travailler dans l'espace réciproque mais la différence essentielle est, qu'en l'absence d'interaction, l'état excité est un **état propre** de H et il est donc **stationnaire** MAIS ce n'est **plus le cas** en présence des interactions.

L'excitation du système à N-corps n'est plus un électron défini par son impulsion k ... et les états $|k\rangle$ auront un **temps de vie**.

Pour caractériser cette évolution, on peut calculer :

$$\left(\langle \Psi_0 | e^{iHt/\hbar} c_k \right) \left(e^{-iHt/\hbar} c_k^+ | \Psi_0 \rangle \right) \text{ où } | \Psi_0 \rangle \text{ est l'état fondamental}$$

création de l'excitation à t=0

évolution de l'excitation avec t

produit scalaire avec l'état correspondant à une excitation créée en t (et non plus 0)

En adoptant la notion d'Heisenberg (la dépendance en t est « mise » dans les opérateurs et non plus dans la fonction d'onde) :

$$\langle \Psi_0 | e^{iHt/\hbar} c_k e^{-iHt/\hbar} c_k^+ | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | c_k(t) c_k^+(0) | \Psi_0 \rangle \theta(t) = i\hbar G(k, t)$$

(pour $t > 0$) est appelée **fonction de Green**.

Remarque : Si H est un Hamiltonien d'interaction avec un **champ** extérieur $F(r, t)$.

On peut écrire $H = - \sum_i \int A_i(r) F_i(r) dr$ où A est l'observable qui représente le couplage du système au champ. Au premier ordre :

$$\langle A_i(t) \rangle = \sum_j \int \chi_{ij}(r, t, r', t') F_j(r', t') dr' dt' \text{ et vous verrez que}$$

$$\chi_{ij}(r, t, r', t') = \frac{i}{\hbar} \langle [A_i(r, t), A_j(r', t')] \rangle \theta(t - t')$$

est la **susceptibilité** χ_{ij}

qui est donc dans ce cas la moyenne (d'un commutateur *retardé*) traduisant cette fois les **corrélations** entre $A_i(r, t)$ et $A_j(r', t')$

(voir **réponse linéaire**)

Chap.2

Fonction de Green

1. Définition, densité spectrale et self-énergie

Dans notre cas, on introduit l'opérateur « ordre chronologique »

T tel que $T(A(t)B(0)) = A(t)B(0)$ si $t > 0$ et $T(A(t)B(0)) = -B(0)A(t)$ si $t \leq 0$

et on défini :

$$\begin{aligned} G(k, t) &= -\frac{i}{\hbar} [\langle \Psi_0 | (c_k(t)c_k^+(0)) | \Psi_0 \rangle \theta(t) - \langle \Psi_0 | c_k^+(0)(c_k(t)) | \Psi_0 \rangle \theta(-t)] \\ &= -\frac{i}{\hbar} \langle \Psi_0 | T(c_k(t)c_k^+(0)) | \Psi_0 \rangle \end{aligned}$$

où on peut alors créer soit des « quasi-trous » sous le potentiel chimique au temps négatif
soit des quasi-particules au dessus de μ au temps positif.

Pour commencer, remarquons que

$$i\hbar G(k, 0^+) = \langle \Phi_0 | c_k(0^+)c_k^+(0) | \Phi_0 \rangle = 1 - f_k$$

$$i\hbar G(k, 0^-) = - \langle \Phi_0 | c_k^+(0^-)c_k(0) | \Phi_0 \rangle = -f_k$$

où le taux d'occupation $f_k = 1$ pour $k \leq k_F$ et $f_k = 0$ si $k > k_F$ à $\mathbf{T}=0$

La **fonction de Green*** est donc **discontinue** en $t = 0$ ($i\hbar \Delta G(k, 0) = 1$)

* Les fonctions de Green ont été introduites en **1828** par le Physicien anglais George Green en tant que solution des équations différentielles du type $\mathcal{D}G(x) = \delta(x)$ où \mathcal{D} est un opérateur différentiel linéaire.

$$\text{On a également : } -i\hbar \sum_{k,\sigma} G(k,0^-) = N$$

$$\text{La transformée de Fourier : } G(k, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(k, t) e^{i\omega t} dt$$

et on appelle **fonction spectrale** (c'est une **grandeur mesurable...**) $A(k, \omega)$ définie par :

$$G(k, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A(k, \omega') d(\hbar\omega')}{\hbar(\omega - \omega') + i\eta \text{sign}(\omega)} \quad \text{avec } \eta \rightarrow 0$$

Dans le cas des **électrons libres**, l'évolution temporelle d'une excitation élémentaire (quasi-électron ou quasi-trou) se « limite » à **l'acquisition d'une phase**

(car les excitations sont des états propres) et :

$$i\hbar G(k, t) = e^{-i(\epsilon_k^0 - \mu)t/\hbar} \langle \Psi_0 | c_k c_k^+ | \Psi_0 \rangle$$

$$\text{avec } \langle \Psi_0 | c_k c_k^+ | \Psi_0 \rangle = 1 \text{ et en utilisant } \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(\omega - \omega_0)t} \theta(t) dt = \frac{i}{\omega - \omega_0 + i\eta}.$$

$$\text{on trouve : } G(k, \omega) = \frac{1}{\hbar\omega - (\epsilon_k^0 - \mu) + i\eta \text{sign}(\epsilon_k^0 - \mu)}$$

$$\text{Soit } A(k, \omega) = \delta(\hbar\omega - (\epsilon_0(k) - \mu))$$

traduisant le fait que tout le *poids* de l'excitation se trouve intégralement en $\epsilon_k^0 - \mu$.

En présence des interactions, on peut alors utiliser la relation de fermeture sur les états propres ($|m\rangle \neq |k\rangle$) de H pour $\mathbf{N}+1$ particules (et $|m'\rangle$ pour $\mathbf{N}-1$ particules) pour ré-écrire :

$$G_{\mathbf{k}}(t) = \begin{cases} -\frac{i}{\hbar} \sum_m \langle \psi_0 | e^{i\mathcal{H}t/\hbar} a_{\mathbf{k}} e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} | m \rangle \langle m | a_{\mathbf{k}}^\dagger | \psi_0 \rangle & t > 0 \\ \frac{i}{\hbar} \sum_{m'} \langle \psi_0 | a_{\mathbf{k}}^\dagger | m' \rangle \langle m' | e^{i\mathcal{H}t/\hbar} a_{\mathbf{k}} e^{-i\mathcal{H}t/\hbar} | \psi_0 \rangle & t \leq 0. \end{cases} = \begin{cases} -\frac{i}{\hbar} \sum_m |\langle m | a_{\mathbf{k}}^\dagger | \psi_0 \rangle|^2 e^{i(E_0^{\mathbf{N}} - E_m^{\mathbf{N}+1})t/\hbar} & t > 0 \\ \frac{i}{\hbar} \sum_{m'} |\langle m' | a_{\mathbf{k}} | \psi_0 \rangle|^2 e^{i(E_{m'}^{\mathbf{N}-1} - E_0^{\mathbf{N}})t/\hbar} & t \leq 0. \end{cases}$$

$e^{-i\omega_m t}$ avec $\omega_m > 0$
 $e^{-i\omega_{m'} t}$ avec $\omega_{m'} < 0$

ou les E_i^j sont maintenant les vraies énergies... mais inconnues !

On peut alors écrire $G_{\mathbf{k}}(t) = -\frac{i}{\hbar} [\theta(t) \int_{-\infty}^{\infty} \rho^+(k, \omega') e^{-i\omega' t} d\omega' - \theta(-t) \int_{-\infty}^{\infty} \rho^-(k, \omega') e^{-i\omega' t} d\omega']$ avec

$$\text{avec } \rho^+(k, \omega) = \sum_m |\langle m | a_{\mathbf{k}}^\dagger | \Psi_0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_m) \text{ et } \rho^-(k, \omega) = \sum_{m'} |\langle m' | a_{\mathbf{k}} | \Psi_0 \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{m'})$$

et donc $A(k, \omega) = \rho^+(k, \omega) + \rho^-(k, \omega)$

remarque : on a

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} A(\mathbf{k}, \varepsilon) d\varepsilon &= \sum_m |\langle m | a_{\mathbf{k}}^\dagger | \psi_0 \rangle|^2 + \sum_{m'} |\langle m' | a_{\mathbf{k}} | \psi_0 \rangle|^2 \\ &= \sum_m \langle \psi_0 | a_{\mathbf{k}} | m \rangle \langle m | a_{\mathbf{k}}^\dagger | \psi_0 \rangle + \sum_{m'} \langle \psi_0 | a_{\mathbf{k}}^\dagger | m' \rangle \langle m' | a_{\mathbf{k}} | \psi_0 \rangle \\ &= \langle \psi_0 | a_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}}^\dagger + a_{\mathbf{k}}^\dagger a_{\mathbf{k}} | \psi_0 \rangle = \langle \psi_0 | \psi_0 \rangle = 1. \end{aligned}$$

Remarque : Sans interaction, $|m\rangle = a_q^+ |\Phi_0\rangle$, $E_m^{N+1} = \epsilon_q^0$, $E_m^{N+1} - E_0^N = \epsilon_q^0 - \mu$

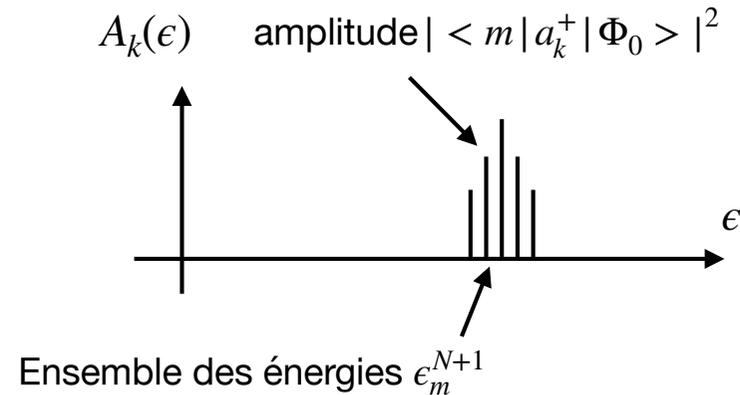
donc $\rho^+(k, \epsilon) = \sum_{q>q_F} |\langle \Psi_0 | a_q a_k^+ | \Psi_0 \rangle|^2 \delta(\epsilon - (\epsilon_q^0 - \mu)) = (1 - f_k) \delta(\epsilon - (\epsilon_k^0 - \mu))$

et $\rho^-(k, \epsilon) = f_k \delta(\epsilon - (\epsilon_k^0 - \mu))$. On retrouve bien $A(k, \epsilon) = \delta(\epsilon - (\epsilon_k^0 - \mu))$

et pour nos particules en interaction

mais que vaut

$$|\langle m | a_k^+ | \Phi_0 \rangle|^2 ?$$



Comme on l'a vu, la différence fondamentale pour des particules en interaction est que les états k se sont plus des états propres : il sont donc *étalés* autour de $\epsilon_k = \mu + \langle \epsilon_m \rangle$ sur une largeur $\hbar\Gamma_k$ correspondant au **temps de vie fini** $\tau_k = 1/\Gamma_k$.

On peut finalement *affiner* cette description en tenant compte du fait que seule une fraction Z_k (dite cohérente) des excitations correspondent à ces états (le reste des excitations - incohérentes - diffuse très rapidement) en écrivant :

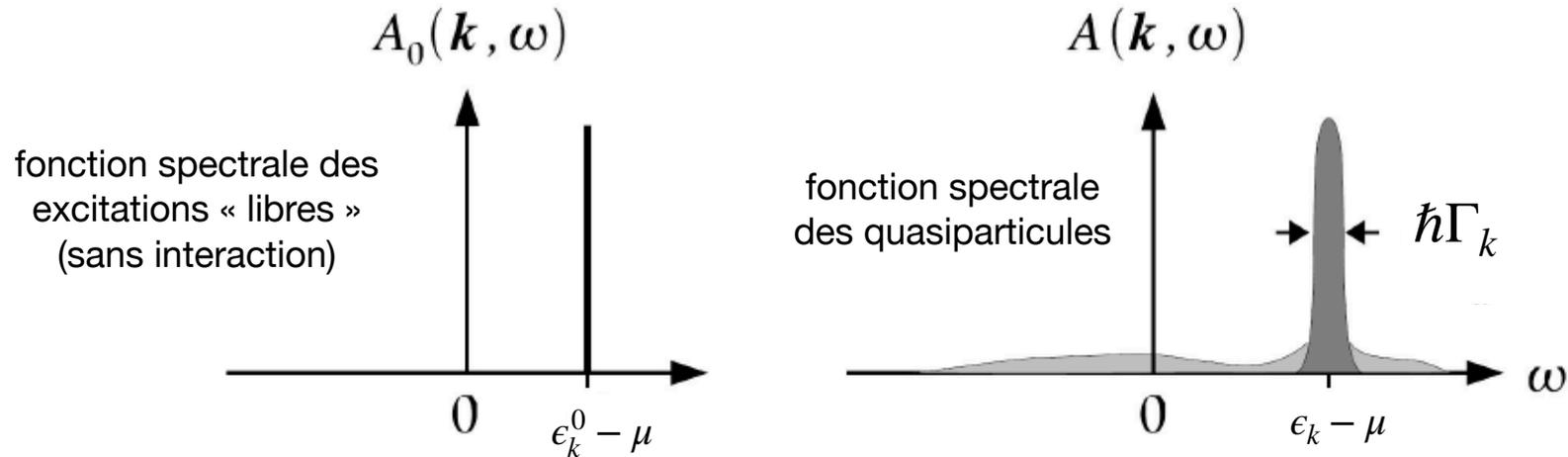
$$G(k, t) = Z_k e^{-i(\epsilon_k - \mu)t/\hbar} e^{-\Gamma_k t} + G_{\text{inc}}(t)$$

Soit : $G(k, \omega) = \frac{Z_k}{\hbar\omega - (\epsilon_k - \mu) + i\hbar\Gamma_k} + G_{\text{inc}}(\omega)$

et on peut montrer pr ailleurs que : $A(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(k, \omega) \text{Sign}(\omega)$

donc $A(k, \omega) \sim \frac{1}{\pi} \frac{\hbar\Gamma_k}{(\hbar\omega - (\epsilon_k - \mu))^2 + (\hbar\Gamma_k)^2} + A_{\text{inc}}$

Le poids spectral devient donc une **Lorentzienne** en présence des interactions.



Si les excitations : $\epsilon_k = \mu + \hbar^2 k_F(k - k_F)/m^*$ où $m^* \neq m_b$ (m_b étant la masse de bande).

on peut calculer le temps vie en utilisant la **règle d'or de Fermi** :

$$T_k = \frac{2\pi t}{\hbar} \sum_{k', q} |V(q)|^2 f_k (1 - f_{k+q}) (1 - f_{k'-q}) f_{k'} \delta(E(\vec{k} + \vec{q}) + E(\vec{k}' - \vec{q}) - E(\vec{k}) - E(\vec{k}'))$$

↓
conservation de l'énergie

après un calcul (un peu fastidieux mais sans réelle difficulté, cf cours de J.Meyer) :

pour simplifier, on pose $\vec{k} = k_{\parallel} \hat{q} + \vec{k}_{\perp}$

$\Theta(-\epsilon_{\vec{k}}) \leadsto k_{\parallel}^2 + k_{\perp}^2 < k_F^2$
 projection de \vec{k} sur \hat{q} composante de \vec{k} perpendiculaire à \hat{q}

$\Theta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}}) \leadsto (k_{\parallel}-q)^2 + k_{\perp}^2 > k_F^2$

$$\delta(\epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}})$$

$$= \frac{2u}{\hbar^2} \delta(k_{\parallel}^2 + k_{\perp}^2 - ((k_{\parallel}-q)^2 + k_{\perp}^2) + \frac{2u}{\hbar^2} (\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}))$$

$$= \frac{2u}{\hbar^2} \delta(2k_{\parallel}q - q^2 + \frac{2u}{\hbar^2} (\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}))$$

$$\int \frac{q^3 k}{(2\pi)^3} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \int dk_{\parallel} 2\pi \int k_{\perp} dk_{\perp}$$

donc

$$\int \frac{q^3 k}{(2\pi)^3} \Theta(-\epsilon_{\vec{k}}) \Theta(\epsilon_{\vec{k}-\vec{q}}) \delta(\epsilon_{\vec{k}} + \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk_{\parallel} \frac{2u}{\hbar^2} \delta(2k_{\parallel}q - q^2 + \frac{2u}{\hbar^2} (\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}))$$

$$\times \int \frac{k_{\perp} dk_{\perp}}{\sqrt{k_F^2 - (k_{\parallel}-q)^2}}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \int dk_{\parallel} \frac{2u}{\hbar^2} \frac{1}{2q} \delta(k_{\parallel} - \frac{q}{2} + \frac{u}{\hbar^2 q} (\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}))$$

$$\times \frac{1}{2} \left[k_F^2 - k_{\parallel}^2 - (k_F^2 - (k_{\parallel}-q)^2) \right]$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{u}{\hbar^2} \times \frac{u}{\hbar^2 q} (\epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{u}{\hbar^2} \frac{1}{2q} (k^2 - (\vec{k}+\vec{q})^2) = -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{u}{2\hbar^2} (2k \cos \theta + q)$$

où θ est l'angle entre \vec{k} et \vec{q}

donc

$$1/\tau_{\vec{k}} = \frac{4\pi}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^3} \int q^2 dq |V(q)|^2$$

$$\times \int \sin \theta d\theta \Theta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}) \left[-\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{u}{2\hbar^2} (2k \cos \theta + q) \right]$$

on note $(\vec{k}+\vec{q})^2 < k^2$
 $(\vec{k}+\vec{q})^2 > k_F^2$

$$\leadsto k_F^2 < k^2 + 2kq \cos \theta + q^2 < k^2$$

$$\frac{1}{2kq} (k_F^2 - k^2 - q^2) < \cos \theta < -\frac{q}{2k}$$

donc

$$\int \sin \theta d\theta \Theta(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}) \left[-\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{u}{2\hbar^2} (2k \cos \theta + q) \right]$$

$$= -\frac{1}{(2\pi)^2} \frac{u}{2\hbar^2} \int \frac{d \cos \theta}{\frac{1}{2kq} (k_F^2 - k^2 - q^2)} (2k \cos \theta + q)$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{u}{2\hbar^2} \left[k \cos^2 \theta + q \cos \theta \right]_{-\frac{1}{2kq} (k_F^2 - k^2 - q^2)}^{-q/(2k)}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{u}{2\hbar^2} \left\{ \frac{1}{4kq} (k_F^2 - k^2 - q^2)^2 - \frac{q^2}{4k} + \frac{1}{2k} (k_F^2 - k^2 - q^2) + \frac{q^2}{2k} \right\}$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{u}{2\hbar^2} \frac{1}{4kq^2} (k_F^2 - k^2)^2$$

$$= \frac{1}{(2\pi)^2} \frac{u}{2\hbar^2} \frac{1}{4kq^2} \frac{4u^2}{\hbar^4} \epsilon_{\vec{k}}^2$$

et

$$1/\tau_{\vec{k}} = \frac{4\pi}{\hbar} \frac{1}{(2\pi)^3} \frac{u}{(2\pi)^2} \frac{u}{2\hbar^2} \frac{1}{4k} \frac{u^2}{\hbar^4} \epsilon_{\vec{k}}^2$$

$$\propto \int dq |V(q)|^2$$

on trouve que $\tau_k \propto 1/\epsilon_k^2$ i.e.

$$\epsilon_k \propto k - k_F \text{ et } \hbar\Gamma_k \propto (k - k_F)^2 \ll \epsilon_k \text{ pour } k \rightarrow k_F$$

C'est un point **fondamental** du liquide Fermi qui montre que

les quasi-particules sont *bien définies*

et *ressemblent* de plus en plus à de *vraies* particules lorsqu'on se rapproche de la surface de Fermi, validant ainsi la vision proposée par Landau.

Dyson propose (nous en verrons la légitimité plus tard) d'écrire :

$$G(k, \omega)^{-1} = G_0(k, \omega)^{-1} - \Sigma(k, \omega)$$

où $\Sigma(k, \omega)$ est appelée **self énergie**

et $G_0(k, \omega)$ est la fonction de Green (connue) en l'absence d'interaction.

Soit

$$G_0(k, \omega) = G(k, \omega) - \Sigma(k, \omega)G(k, \omega)G_0(k, \omega) \text{ où}$$

$$G(k, \omega) = G_0(k, \omega)(1 + \Sigma(k, \omega)G(k, \omega))$$

$$= G_0(k, \omega)(1 + \Sigma(k, \omega)G_0(k, \omega)(1 + \Sigma(k, \omega)G(k, \omega)))$$

$$= G_0(k, \omega)(1 + \Sigma(k, \omega)G_0(k, \omega) + \Sigma^2(k, \omega)G_0^2(k, \omega)(1 + \Sigma(k, \omega)G(k, \omega)))$$

$$= G_0(k, \omega)(1 + \Sigma_n(\Sigma(k, \omega)G_0(k, \omega))^n)$$

= équation de Dyson

Les énergies des excitations ϵ_k sont alors donnés par (**pôles** de G) :

$$\hbar\omega = \epsilon_k - \mu = \epsilon_k^0 - \mu - \text{Re}\Sigma(k, \epsilon_k - \mu)$$

Et, en particulier, la surface de Fermi est définie par :

$$\epsilon_k^0 - \mu - \text{Re}\Sigma(k_F, 0) = 0$$

et le temps de vie par : $\Gamma_k = 1/\tau_k \sim -Z_k \text{Im}\Sigma/\hbar$

La forme de la surface de Fermi est (a priori) modifiée* par les interactions mais son **volume** (nombre d'états) est **conservé**
= théorème de Luttinger.

Remarque : dans le cadre du modèle du jellium, la surface de Fermi reste sphérique car la périodicité du potentiel n'est pas explicitement prise en compte, k_F est inchangé

$((4/3)\pi k_F^3 = N)$ et le temps de vie est infini.

* elle pourra être obtenue avec une bonne approximation en DFT

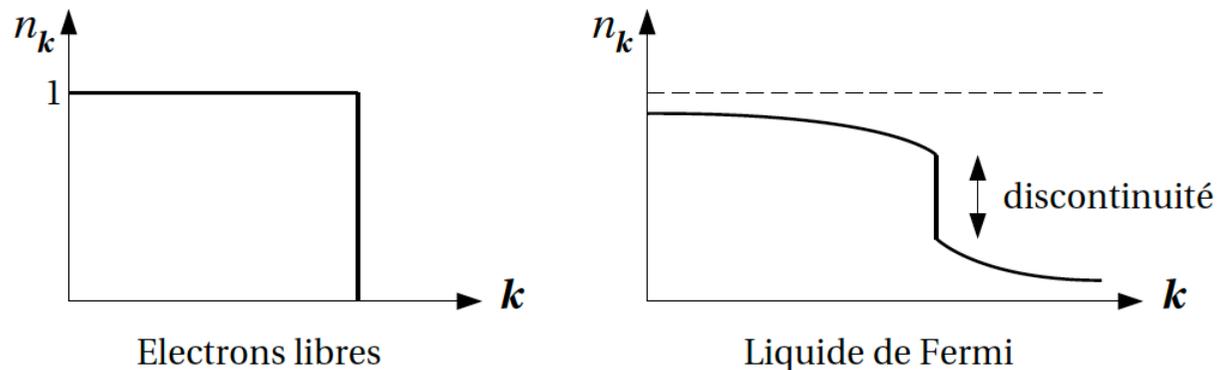
En négligeant (à ce stade) Σ'' et en écrivant que :

$$\begin{aligned} [\hbar\omega - (\epsilon_k - \mu)]/Z_k &= \hbar\omega - (\epsilon_k^0 - \mu) - \Sigma'(k, \omega) \\ &\sim \hbar\omega - ((\epsilon_k^0 - \mu) + \Sigma'(k, \omega_k)) - [\partial\Sigma'/\partial\omega(k, \omega_k)](\omega - \omega_k) + \dots \\ &\sim \hbar\omega - (\epsilon_k - \mu) - [\partial\Sigma'/\partial\hbar\omega(k, \omega_k)](\hbar\omega - (\epsilon_k - \mu)) + \dots \end{aligned}$$

on montre que le poids spectral : $\frac{1}{Z_k} \sim 1 - \frac{\partial\Sigma'}{\partial\hbar\omega}(k, \omega_k)$

et *physiquement parlant* on retrouve ici le fait qu'une partie du poids spectral se retrouve dans les excitations incohérentes.

Cela se traduit par une **discontinuité finie** (on a bien une surface de Fermi) de la fonction de distribution (à $T=0$) mais de taille $Z_k \leq 1$



Par ailleurs
$$\frac{\partial \epsilon(k)}{\partial k} = \frac{\partial \epsilon_0(k)}{\partial k} + \frac{\partial \Sigma'}{\partial k} + \frac{\partial \omega}{\partial k} \frac{\partial \Sigma'}{\partial \omega}$$

soit dans l'approximation parabolique (excitations linéaires en k) :

$$\frac{\hbar^2 k}{m^*} = \frac{\hbar^2 k}{m_b} - \frac{\partial \Sigma'}{\partial k} - \frac{\hbar k}{m^*} \cdot \frac{\partial \Sigma'}{\partial \omega} \quad \text{i.e.} \quad \frac{1}{Z_k m^*} = \frac{1}{m_b} - \frac{\partial \Sigma'}{\partial k} \cdot \frac{1}{\hbar^2 k}$$

et au niveau de Fermi :

$$m^* = \frac{m_b}{Z_{k_F} [1 + (\partial \Sigma' / \partial k(k_F, 0)) \cdot (m_b / \hbar^2 k_F)]}$$

Cette masse **effective** renormalisée par les corrélations peut être très faible (dans le cas du modèle du Jellium $m^* \rightarrow 0$) ou au contraire très grande, pouvant atteindre plusieurs centaines de fois m_b dans les composés appelés alors *fermions lourds*.

La self-énergie est donc réellement la « **carte d'identité** » des excitations en présence des interactions. Il s'agit donc d'essayer de la calculer...

2. (une introduction aux) Diagrammes de Feynmann

En fait le calcul de $G(k, t)$ semble impossible car on ne connaît pas $|\Phi_0\rangle$ mais l'idée est alors de considérer que les interactions (H_c) sont « enclenchées progressivement » à partir de l'Hamiltonien H_0 dont on connaît le fondamental et de *découper* l'intégration de l'équation différentielle de G (voir TD).

On peut montrer que l'on peut alors écrire

$$\langle \Psi_0 | T\{a_k(t)a_k^\dagger(0)\} | \Psi_0 \rangle = \frac{\sum_{n=1}^{\infty} (-i/\hbar)^n (1/n!) \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots dt_n \langle \Psi_0^{H_0} | T\{H_c(t_1) \dots H_c(t_n) a_k(t) a_k^\dagger(0)\} | \Psi_0^{H_0} \rangle}{\sum_{n=1}^{\infty} (-i/\hbar)^n (1/n!) \int_{-\infty}^{+\infty} dt_1 \dots dt_n \langle \Psi_0^{H_0} | T\{H_c(t_1) \dots H_c(t_n)\} | \Psi_0^{H_0} \rangle}$$

↑ **inconnu...**
↑ **connu !**

A l'ordre 1 pour notre terme d'interaction il s'agira de calculer des termes du type :

$$V(\mathbf{q}) \langle \psi_0^{\mathcal{H}_0} | a_{\mathbf{k}_1 + \mathbf{q}, \sigma_1}^\dagger(t_1) a_{\mathbf{k}_2 - \mathbf{q}, \sigma_2}^\dagger(t_1) a_{\mathbf{k}_2 \sigma_2}(t_1) a_{\mathbf{k}_1 \sigma_1}(t_1) a_{\mathbf{k} \sigma}(t) a_{\mathbf{k} \sigma}^\dagger(0) | \psi_0^{\mathcal{H}_0} \rangle.$$

que l'on peut calculer à l'aide du **théorème de Wick** (exact pour un Hamiltonien quadratique)

$$\langle A_1 A_2 \dots A_n \rangle = \sum_{\text{permutations}} (-1)^{\text{permutation}} \langle A_{i_1} A_{i_2} \rangle \langle A_{i_3} A_{i_4} \rangle \dots$$

Dans notre cas on aura 6 permutations comme, par exemple,

$$\langle \Psi_0^{H_0} | a_{k_2 \sigma_2}(t_1) a_{k \sigma}^+(0) | \Psi_0^{H_0} \rangle \times \langle \Psi_0^{H_0} | a_{k_2 - q \sigma_2}^+(t_1) a_{k \sigma}(t) | \Psi_0^{H_0} \rangle \times \langle \Psi_0^{H_0} | a_{k_1 + q \sigma_1}(t_1) a_{k_1 \sigma_1}^+(t_1) | \Psi_0^{H_0} \rangle$$

et comme on doit conserver le spin et l'impulsion dans chacun des processus :

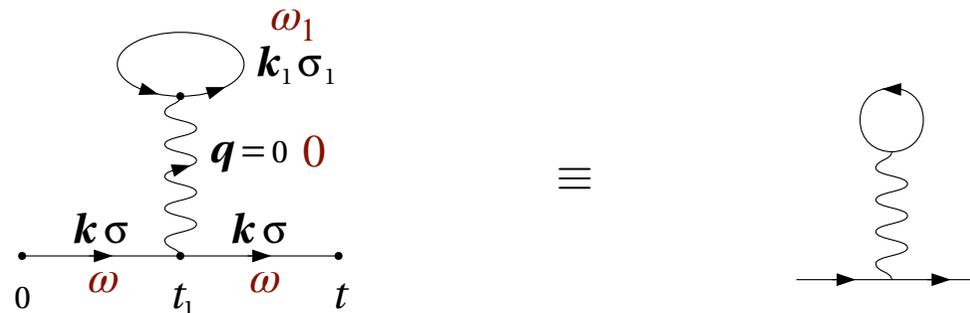
$$= \delta_{k_2 k} \delta_{\sigma_2 \sigma} G_0(k, t_1) \times \delta_{q 0} G_0(k, t - t_1) \times G_0(k_1, \delta t_1)$$

on doit avoir $q=0$ \uparrow \uparrow tous les k_1 sont possibles

Feynmann propose de schématiser tous les processus de relaxation (i.e. tous les k_1, q) par des **diagrammes**.

Pour ce terme on aura par exemple :

En privilégiant une approche sur les fréquences (conservation énergie)

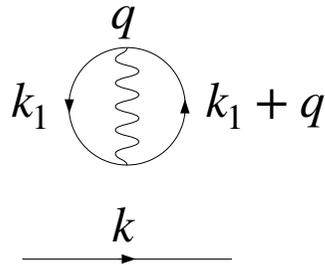


qui *dit* donc ici que la relaxation de l'état $k \xrightarrow{k \sigma}$ se fait (dans ce cas) par

le couplage (ici l'interaction électrostatique \sim) à $q = 0$

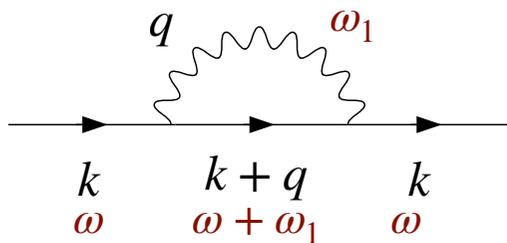
avec l'ensemble des autres électrons (tous les \vec{k}_1) \bigcirc .

Le processus 1 revient à : $-\delta_{k_2, k_1+q} G_0(k_1 + q, \delta t_1) \times \delta_{k_2-q, k_1} G_0(k_1, \delta t_1) \times G_0(k, t)$



il ne relie pas une ligne (quasi-particule) entrante et une ligne sortante : il est dit *non connexe* et (on peut le démontrer...) il est alors **non pertinentes** (tout comme le processus 3)

Enfin il reste le processus 2 : $+\delta_{k_2, k_1+q} G_0(k_1 + q, \delta t_1) \times \delta_{k_2-q, k} G_0(k, t - t_1) \times \delta_{k_1, k} G_0(k, t_1)$



$$i\hbar^1 G(\omega, k) = \sum_q \int \frac{d\nu}{2\pi} V(q) i\hbar G_0(k, \omega) i\hbar G_0(k+q, \omega+\nu) i\hbar G_0(k, \omega)$$

$$\text{soit } {}^1G(k\omega) = - [G_0(k, \omega)]^2 \sum_q V(q) f_{k+q}$$

(sans surprise) c'est le **terme de Fock** de l'interaction !

A l'ordre 1 cette méthode diagrammatique n'est donc *que* l'approximation d'Hartree-Fock que l'on connaissait déjà !

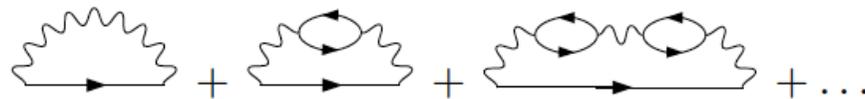
$$i\hbar^1 G(k, t) = \text{diagram 1} + \text{diagram 2}$$

Le terme de Hartree fait apparaître $V(0)$ qui est infini !

De même dans le terme de Fock on a une singularité à E_F avec une vitesse infinie...

Le premier problème est *partiellement* résolu dans l'approche jellium car ce terme est exactement compensé par l'interaction électrons/ions mais ce n'est toutefois pas satisfaisant...

Le « truc » est que dans les diagrammes, il existe des termes



i.e. $\longrightarrow \times \left(\text{wavy} + \text{wavy-loop} + \text{wavy-two-loops} + \dots \right)$

$$= \left(1 + \text{wavy-loop} + \text{wavy-loop}^2 + \dots \right) \times \text{wavy}$$

$$= \frac{\text{wavy}}{1 - \text{wavy-loop}}$$

dont le dénominateur traduit l'**écranage** de l'interaction Coulombienne

et $V(q) \rightarrow V_{\text{eff}} = \frac{V(q)}{1 + V(q)\pi(q, \omega)} = \frac{V(q)}{\epsilon(q, \omega)}$ où $\epsilon(q, \omega)$ est la **constante diélectrique**

Le calcul exact de $\pi(q, \omega)$ n'est pas simple car en fait $\pi(q, \omega)$ n'est pas simplement $-\text{loop}$ mais il peut contenir d'autres termes (comme par exemple loop etc...)

L'approximation consistant à prendre $\pi = \pi_0 = -\text{loop}(k_1, k_1+q)$ est appelée

« random phase approximation » (RPA) : **VOIR TD**

Et dans ce cas on peut calculer :
$$i\hbar\pi_0 = \iint \frac{d\omega_1}{2\pi} \frac{d^3k_1}{(2\pi)^3} i\hbar G_0(k_1, \omega_1) i\hbar G_0(k_1 + q, \omega + \omega_1)$$

Le calcul de cette intégrale conduit à une expression assez compliquée (mais calculable) de la constante diélectrique $\epsilon(q, \omega) = 1 + V(q)\pi_0(q, \omega)$ que l'on n'explicitera pas ici (fonction de **Lindhard**).

La partie **imaginaire** de de cette expression est à l'origine du **temps de vie** (en RPA).

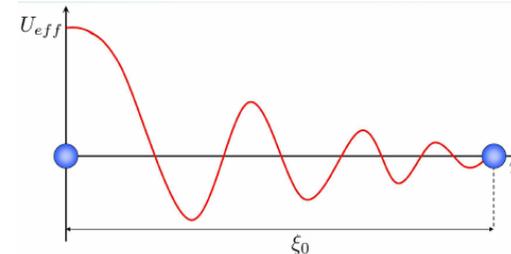
A haute fréquence, $\epsilon(q \ll k_F, \omega) \sim 1 - (\omega_p/\omega)^2$ et on retrouve ici le résultat déjà vu en électromagnétisme où ω_p est la **fréquence plasma***.

A l'opposée, **pour $\omega \rightarrow 0$** , $\pi_0(q, 0) = g(E_F)F(q/2k_F)$ et pour $q \ll 2k_F$, $F(0) = 1$ et $\epsilon(q, 0) = 1 + k_{TF}^2/q^2$ où le vecteur d'onde de **Thomas-Fermi** est égal à $k_{TF}^2 = e^2 g(E_F)/\epsilon_0$.

Dans l'espace réel, cela revient à remplacer le potentiel en $1/r$ par un potentiel **écranté** (dit de Yukawa) $\propto e^{-k_{TF}r}/r$

Remarque 1 : pour des valeurs quelconques de q on trouve $V_{\text{eff}}^{\text{RPA}}(r) \propto \frac{\sin 2k_{\text{F}}r - 2k_{\text{F}}r \cos 2k_{\text{F}}r}{r^3}$.

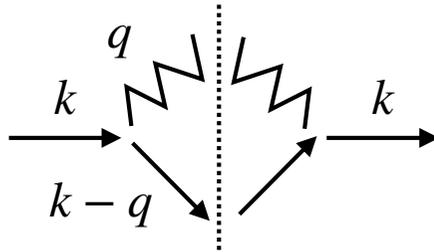
Le potentiel effectif est donc oscillant !...
(**oscillations de Friedel**)



* les modes d'oscillation de la densité électronique pour $\epsilon(q, \omega) = 0$ sont appelés *plasmons*

Remarque 2 : l'interaction entre électrons peut également être écrantée par les (phonons).

A l'ordre 1 l'interaction e/phonon est nulle (car $\langle b_q \rangle = \langle b^+ \rangle = 0$ à $T = 0$) mais à l'ordre 2 :



$$\text{et } i\hbar\Sigma(k, \omega) = \sum_q \int \frac{d\nu}{2\pi} g_q^2 G_0(k-q, \omega-\nu) D_0(q, \nu)$$

fonction Green des phonons

$$\frac{1}{\omega - \omega(q) + i\eta} + \frac{1}{\omega + \omega(q) - i\eta}$$

$$\frac{1}{\hbar\omega - (\epsilon_{k-q} - \mu) + i\eta \text{sign}(\epsilon_{k-q} - \mu)}$$

théorème des résidus $\Rightarrow \sum_q g_q^2 \left[\frac{\theta(\epsilon_{k-q} - \mu)}{\hbar\omega - (\epsilon_{k-q} - \mu - \hbar\omega(q)) + i\eta} + \frac{\theta(\mu - \epsilon_{k-q})}{\hbar\omega - (\epsilon_{k-q} - \mu - \hbar\omega(q)) - i\eta} \right]$

Et on a déjà vu (seconde quantification) que l'interaction électron-**phonon**-électron conduit ainsi à un *renormalisation* de la constante diélectrique, qui peut alors devenir **négative**.

Ce changement de signe est à l'origine du couplage attractif entre électrons conduisant à la formation de paires de Cooper (mécanisme BCS)

$$H_{\text{el-ph-el}}(q, \omega) = \sum_{k,q} \left[\frac{e^2}{\epsilon_0 \Omega q^2} \right] \times \left[-\frac{2(Ze)^2 / \epsilon_0 \Omega M}{\omega(q)^2} \right] c_{k-q}^\dagger c_{-k+q}^\dagger c_{-k} c_k$$

« fréquence plasma » des ions

répulsion Coulombienne constante diélectrique **négative** \Rightarrow supraconductivité

Et pour aller plus loin, il « suffit » alors de calculer les ordres supérieurs en écrivant que :

$$i\hbar G(\omega, k) = \text{---} + \text{---} \begin{array}{c} \circlearrowleft \\ \text{---} \end{array} + \text{---} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \text{---} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \text{---} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \text{---} \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \dots$$

et en notant $\Sigma(k, \omega)/(i\hbar) = \begin{array}{c} \circlearrowleft \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \\ \text{---} \end{array} + \dots$

puis en regroupant les termes on a :

$$G(\omega, k) = \frac{[1 + (\text{---} \Sigma) + (\text{---} \Sigma)^2 + (\text{---} \Sigma)^3 + \dots]}{\text{---}} = \frac{G^0}{1 - G^0 \Sigma} = \frac{1}{\frac{1}{G^0} - \Sigma}$$

série géométrique

on retrouve bien l'équation de Dyson...

Remarque : en se limitant à $\Sigma(k, \omega)/(i\hbar) = \begin{array}{c} \circlearrowleft \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \text{---} \\ \text{---} \end{array}$ (Hartree-Fock donc)

La self-énergie reste **réelle**. C'est *normal* car on a vu que dans cette approche les états k restent de états propres : le temps de vie est infini.

Ce sont les termes de second ordre qui contiennent une partie imaginaire et sont donc à l'origine l'existence d'un **temps de vie fini**.

Et encore plus loin,

on peut calculer la fonction de Green à température **non nulle**...

il s'agit de faire la moyenne thermique (statistique*) : $\mathcal{G} = \text{Tr}(e^{-\beta H} G) / \text{Tr}(e^{-\beta H})$ avec $\beta = 1/k_B T$

En remarquant l'équivalence $e^{-\beta H} \leftrightarrow e^{-(it/\hbar)H}$

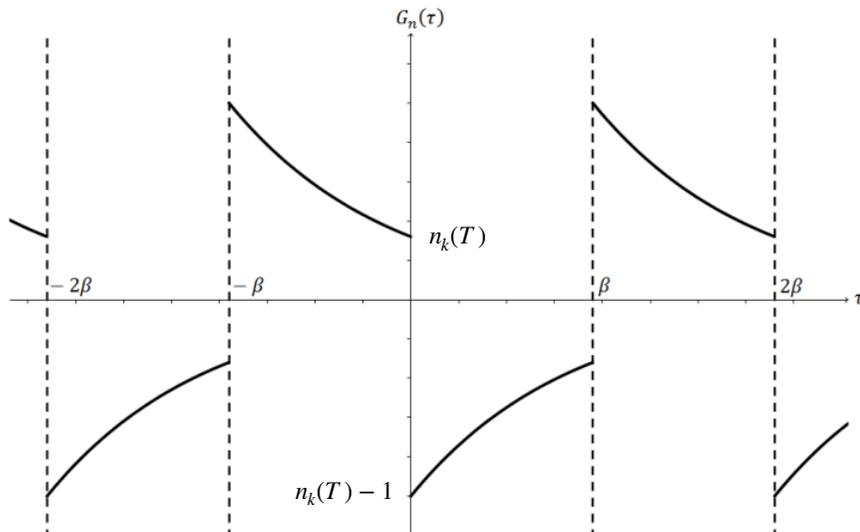
on peut introduire un **temps imaginaire** $\tau \leftrightarrow it/\hbar$ (formalisme de **Matsubara**)

et écrire $\mathcal{G}(k, \tau) = \text{Tr}(e^{-\beta H} T_\tau \{c_k(\tau) c_k^\dagger(0)\}) / \text{Tr}(e^{-\beta H})$ avec $c_k(\tau) = e^{H\tau} c_k e^{-H\tau}$

On a toujours : $\mathcal{G}(k, \tau = 0^-) - \mathcal{G}(k, \tau = 0^+) = 1$ avec $\mathcal{G}(k, \tau = 0^-) = n_k(T) =$ distribution FD

Mais en utilisant l'invariance cyclique** de la trace on a

: $\mathcal{G}(\tau + \beta) = -\mathcal{G}(\tau)$ (pour des fermions)



* en ensemble grand canonique $H \leftrightarrow H - \mu N$

$$\begin{aligned}
 ** \quad \text{Tr}[\dots] &= \text{Tr} \left[e^{-\beta H'} e^{H'(\tau+\beta)} c_k e^{-H'(\tau+\beta)} c_k^\dagger(0) \right] \\
 &= \text{Tr} \left[e^{\tau H'} c_k e^{-\tau H'} e^{-\beta H'} c_k^\dagger(0) \right] \\
 &= \text{Tr} \left[e^{-\beta H'} c_k^\dagger(0) c_k(\tau) \right] \\
 &= \text{Tr} \left[-e^{-\beta H'} T_\tau c_k(\tau) c_k^\dagger(0) \right]
 \end{aligned}$$

Dans une transformée de Fourier on se retrouvera avec $e^{i\omega(\tau+\beta)} = -e^{i\omega\tau}$ et seules les fréquences $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$ seront pertinentes* : **fréquences de Matsubara**

On est donc amené à **redéfinir** les TF :

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} \rightarrow \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_m \tau},$$

$$\int d\omega e^{-i\omega t} \rightarrow \frac{1}{\beta} \sum_{i\omega_m} e^{-i\omega_m \tau}.$$

La représentation spectrale de \mathcal{G} devient : $\mathcal{G}(k, i\omega_n) = \frac{1}{Z} \sum_{a,b} \frac{|\langle a | c_k | b \rangle|^2 (e^{-\beta E_b} - e^{-\beta E_a})}{i\hbar\omega_n - (E_b - E_a)}$

et la densité spectrale : $\mathcal{A}(k, \omega) = \frac{1}{Z} \sum_{a,b} |\langle a | c_k | b \rangle|^2 (e^{-\beta E_b} - e^{-\beta E_a}) \delta(\omega - (E_b - E_a))$

En présence des interactions, l'équation de Dyson reste valable et on peut toujours utiliser la méthode diagrammatique pour calculer la self-énergie à $T \neq 0$.

En particulier, on a toujours : $\Sigma^H = 2 \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} n_q V(0) = \frac{N}{V} V(0),$

mais n_q est désormais la fonction de distribution $\Sigma^F = - \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} n_q V(\mathbf{k} - \mathbf{q}).$

Nous n'irons pas plus loin ici mais vous verrez que cette approche trouve toute son utilité dans le calcul des coefficients de réponse.

* ces fréquences de Matsubara sont les pôles de la *fonction de distribution* $1/(e^{\beta z} + 1)$

3. Au delà du modèle du liquide de Fermi

En résumé :

Les interactions jouent un rôle fondamental dans les propriétés physiques des solides (on pourrait, s'il ne fallait n'en citer qu'une, citer l'échange dans la cohésion des métaux) mais déterminer la fonction d'onde du système à N-corps est (généralement) impossible !

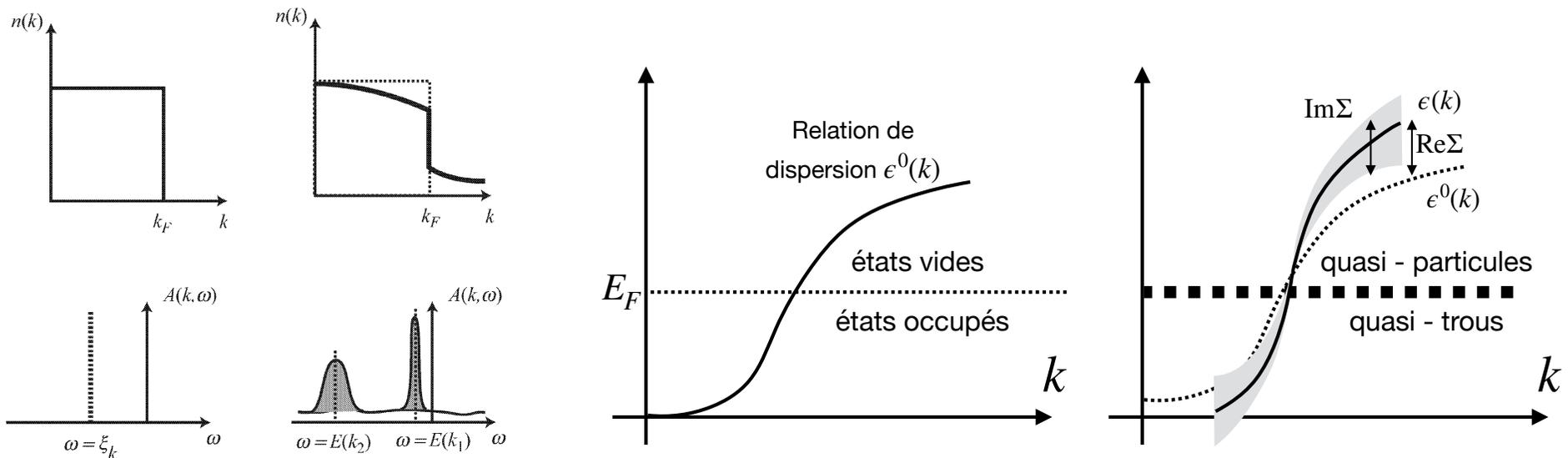
Les approches de type **champ moyen** permettent de se ramener à un Hamiltonien *effectif* à **un corps** (donc diagonalisation dans l'espace des k). Elles ne donnent (a priori) qu'une description (très) simplifiée des interactions mais permettent néanmoins de prédire (souvent) de façon étonnément bonne les propriétés des solides. Les méthodes numériques s'appuient sur le fait que l'énergie est une fonctionnelle de la densité électronique (DFT) et sont alors un outil efficace pour calculer les relations de dispersion moyennant toutefois un *choix judicieux* du terme d'échange (LDA, GW,...).

La notion de **liquide de Fermi** permet de dépasser cette approche champ moyen en se concentrant sur le **spectre des excitations** dont découlent les propriétés du système.

En l'absence d'interaction, les excitations sont des particules individuelles ayant un moment k bien défini et leur fonction spectrale sont alors

$$A(k, \omega) = \delta(\hbar\omega - (\epsilon^0(k) - \mu)).$$

Elles sont caractérisées par une discontinuité (de 1) de la fonction de distribution à $T=0$ définissant la surface de Fermi. Dans le liquide de Fermi, on **conserve une surface de Fermi** (la fonction de distribution reste discontinue mais de taille $Z_k < 1$) et les excitations (**quasi-particules**) peuvent alors être vues comme des particules *habillées d'excitations secondaires* (particule-trou). Leur temps de vie ($\tau_k = 1/\Gamma_k$) est **fini** mais reste long ($\hbar\Gamma_k \ll \epsilon_k$).



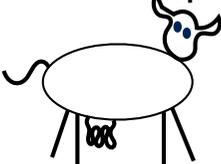
Proche du niveau de Fermi, $\epsilon_k \sim \mu + \hbar^2 k_F k / m^*$ ($z = 1$) et les excitations sont (avant tout) caractérisées par la **renormalisation de la masse** de la quasi-particule (qui peut atteindre plusieurs 100aines dans le cas des Fermions dits lourds).

L'évolution temporelle de l'état k (puisque ce n'est plus un état propre) peut être décrit par la fonction de Green (en énergie) : $G(k, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A(k, \omega') d(\omega')}{\hbar(\omega - \omega') + i\eta \text{sign}(\omega')}$ (ou \mathcal{G} pour $T \neq 0$)

Et la « carte d'identité » des interactions est alors la **self-énergie**, définie par l'équation de Dyson : $G(k, \omega)^{-1} = G_0(k, \omega)^{-1} - \Sigma(k, \omega)$.

Cette self-énergie (qui permet de remonter à m^*) peut a priori être calculée grâce à la méthode *diagrammatique* introduite par Feynmann. Mais la difficulté est que le nombre de diagrammes (d'ordres) est infini !

Néanmoins tous les processus ne sont heureusement pas essentiels...

Pour savoir que  est une vache je n'ai pas besoin de dessiner

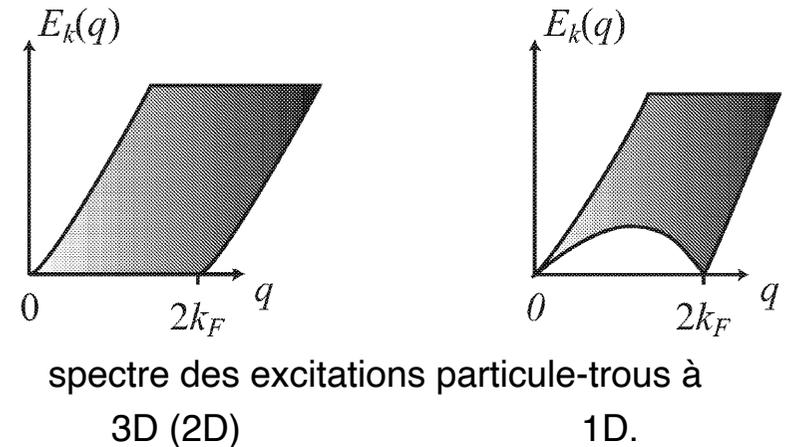


Le « truc » est de trouver les processus pertinents !

L'existence du liquide de Fermi consiste donc à *habiller* un état k par les états k voisins par le biais excitations (quasi-électron)-(quasi-trous).

Il *requiert* donc avant tout l'existence d'un grand nombre d'états k au voisinage de k_F i.e. l'existence d'une **surface** de Fermi

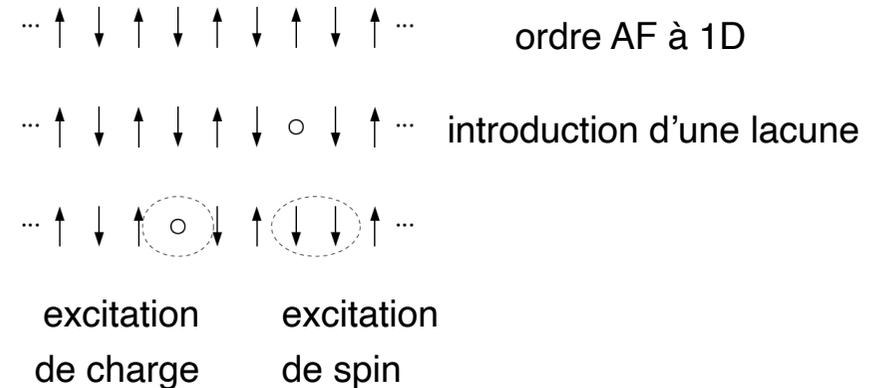
Ce n'est **pas** le cas des système 1D pour lesquels cette « surface » se limite à 2 points !
 Ce non-liquide de Fermi, est alors appelé liquide de **Tomonaga-Luttinger**. Nous ne le développerons pas ici mais il n'existe pas d'excitation élémentaire du type quasi-particule mais ce liquide se caractérise par la *collectivisation* des degrés de libertés.



La discontinuité de la la fonction de distribution devient :

$$n(E) = E(E_F) + A |E - E_F|^\eta \text{sign}(E - E_F) \text{ où } \eta \text{ est un coefficient non universel}$$

De plus on aura une **séparation spin-charge** appelée *fractionalisation* c.à .d. la propagation indépendante des excitations magnétiques (spinons) et de charges (holons),



Dans le cas du couplage AF, des états non-liquide de Fermi donc des excitations plus *exotiques* sont également possibles (liées à des effets de frustration) conduisant à la (re-)fractionalisation du spin* dans des « sous-particules » plus complexes (**Fermions de Majorana** dans le cadre du modèle de Kitaev).

Ces effets seront développés dans le cours sur les « états quantiques ».

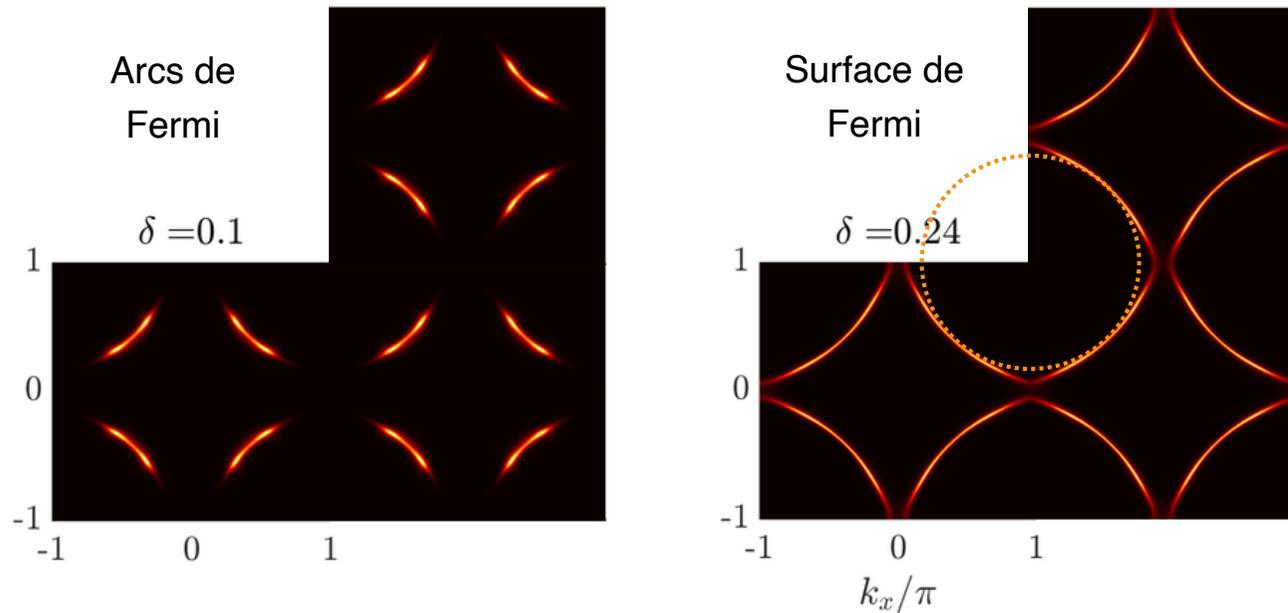
Enfin, comme on l'a vu en seconde quantification (TD) la discontinuité de la fonction de distribution au niveau de Fermi disparaît également dans l'état supraconducteur et le condensat BCS n'est donc pas un liquide Fermi. Les excitations (gappées) sont dans ce cas la **superposition** quantique (combinaison linéaire) d'électrons et de trous.

Ces excitations sont appelés **quasiparticules de Bogoliubov**.

(voir également le cours sur les « états quantiques ».)

* la (re-)fractionalisation de la charge est également possible donnant par exemple lieu à l'effet Hall fractionnaire

Citons enfin que certains supraconducteurs non conventionnels sont également caractérisés par une disparition partielle de la surface de Fermi ($Z_k \rightarrow 0$ sur une partie de cette surface) et il ne subsiste donc que des **arcs de Fermi** pour certains dopage



La nature de l'état fondamental est dans ce cas toujours totalement inconnue et le non-liquide de Fermi est généralement qualifié de **métal étrange** (notamment du fait de la dépendance en température linéaire de la résistivité, appelée limite Plankienne). On peut également noter la phase appelée *pseudo-gap* tout aussi mystérieuse...

