

# PHY6505: Physique de la matière condensée

## Cours 9 Améliorations des approximation

François Schiettekatte  
Université de Montréal  
Automne 2009

1

## Approximations

### ■ Temps de relaxation

- Drude: collision à chaque  $\tau$

- Cours 6:  $g(t) = f(t) - \int_{-\infty}^t dt' P(t,t') \frac{d}{dt'} f(t')$

valeur initiale    correction: dist. des collisions dans le temps

- Mais la distribution redevient-elle  $g_0$  après une collision?

### ■ Électrons indépendant

- Interaction cachée dans le potentiel
- Conséquences, comment faire mieux

2

## Temps de relaxation

- L'approximation donne de bons résultats si  $\tau$  n'en fait pas partie

- Exemples

- effet Hall,  $R_{H \rightarrow \infty} \propto T \ll \tau$

- Wiedemann-Franz

- Fonctionne car  $\tau$  n'apparaît pas, mais aussi parce que l'énergie est conservée dans les collision

- On peut spécifier  $\tau_n$  pour chaque bande mais peut-on aller plus loin?

3

## Sources de collisions ?

- Impuretés & Défauts

- Rompent la périodicité du réseau
- Indépendants de  $T$

- Vibrations thermiques

- Ions hors de leur position statique
- Augmentent avec  $T$

- Interaction  $e^- - e^-$

- (prochaine partie)

4

## Probabilité de diffusion



- Probabilité qu'un électron avec  $\vec{k}$  soit diffusé dans un intervalle  $d\vec{k}'$  autour de  $\vec{k}'$  pendant le temps  $dt$ :

$$W_{\vec{k},\vec{k}'} \frac{dt d\vec{k}'}{2\pi^3}$$

- L'intégrale sur  $d\vec{k}'$  est la probabilité durant  $dt$ :  $\frac{1}{\tau(\vec{k})}$
- À cause du principe d'exclusion de Pauli, la probabilité dépend du taux d'inoccupation:  $1 - g(\vec{k}')$ 
  - Il faut que l'état d'arrivée  $\vec{k}'$  soit disponible

$$\frac{1}{\tau(\vec{k})} = \int \frac{d\vec{k}'}{2\pi^3} W_{\vec{k},\vec{k}'} (1 - g(\vec{k}'))$$

tableau... 5

## Changement de $g(t)$ dû aux collisions et équation de Boltzmann

## Équation de Boltzmann

- $\frac{\partial g}{\partial t} + \vec{v} \cdot \frac{\partial g}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \cdot \frac{1}{\hbar} \frac{\partial g}{\partial \vec{k}} = \left( \frac{\partial g}{\partial t} \right)_{coll}$

- Équation différentielle ordinaire si

$$\left( \frac{dg}{dt} \right)_{coll} = - \frac{g(\vec{k}) - g_0(\vec{k})}{\tau(\vec{k})}$$

indep. de  $f$

- La solution de l'équation de Boltzmann dépend de la forme de  $W$

7

## Diffusion sur les impuretés

- Faible concentration
  - Interaction sur une impureté à la fois
  - N'influencent pas les niveaux d'énergie et le piégeage

8

## Diffusion sur les impuretés

- On peut obtenir grâce à la règle d'or de la théorie des perturbations que
  - $W_{\vec{k},\vec{k}'} = \frac{2\pi}{\hbar} n_i \delta(\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{k}')) \left| \langle \vec{k} | U_i | \vec{k}' \rangle \right|^2$
  - $U_i$ : interaction d'un  $e^-$  sur une impureté
  - conservation de  $\varepsilon$
  - Indépendant de  $g$ 
    - dans l'approximation des  $e^-$  indépendants
    - $\tau$  dépend de  $g$  par les états vides dans le calcul de  $\tau$
  - $W_{\vec{k},\vec{k}'} = W_{\vec{k}',\vec{k}}$  car  $U_i$  est hermitique:  $\langle \vec{k} | U_i | \vec{k}' \rangle = \langle \vec{k}' | U_i | \vec{k} \rangle^*$
- $\Rightarrow \left( \frac{dg}{dt} \right)_{coll} = \int \frac{d\vec{k}'}{2\pi^3} W_{\vec{k},\vec{k}'} [g(\vec{k}) - g(\vec{k}')]_{-}$

9

## Loi de Wiedemann-Franz

- Prévaut si  $\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k}')$  (collisions élastiques)
- Pour cela, il faut que  $\int d\vec{k}' W_{\vec{k},\vec{k}'} \varepsilon(\vec{k}') g(\vec{k}') = \varepsilon(\vec{k}) \int d\vec{k}' W_{\vec{k},\vec{k}'} g(\vec{k}')$
- Satisfait puisque  $W_{\vec{k},\vec{k}'} = 0$  si  $\varepsilon(\vec{k}) \neq \varepsilon(\vec{k}')$
- En fait, il faut que  $|\varepsilon(\vec{k}) - \varepsilon(\vec{k}')| \ll k_B T$
- Règle de Matthiessen:  $W = W_1 + W_2 \Rightarrow \frac{1}{\tau} = \frac{1}{\tau_1} + \frac{1}{\tau_2}$
- Matériaux isotropes:
  - Si  $\varepsilon(\vec{k}) = \varepsilon(k) \Rightarrow \vec{k} = k$   
on peut montrer que  $\frac{1}{\tau(k)} = \int \frac{dk'}{2\pi^3} W_{\vec{k},\vec{k}'} \overbrace{\left( \frac{1 - \cos\theta}{2} \right)}^{=1 - \cos\theta = \frac{\theta^2}{2}}$
  - $\tau$  est une moyenne sur plusieurs processus
  - Contribution à  $\tau$  plus grande des collisions à grand angle ( $\theta$  grand), i.e. coll. qui changent drastiquement la trajectoire

10

## $e^-$ indépendants

- Au tableau
  - Équation de Schrödinger
  - Approximation de Hartree
  - Équation de Hartree-Fock

11

## $e^-$ indépendants

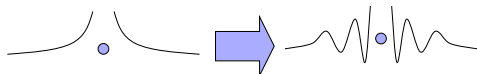
- Écrantage
    - Soit une charge externe entourée d' $e^-$ , comment le potentiel sera-t-il affecté?
- $$-\nabla^2 \phi(\vec{r}) = 4\pi \rho(\vec{r}), \quad \rho(\vec{r}) = \rho^{ext} + \rho^{scr}$$
- Écrantage de Thomas-Fermi
    - On suppose que  $\phi(\vec{r})$  varie assez lentement pour que l'énergie ne dépende que du potentiel local (bon si  $k, \varepsilon$  grand)
    - On peut alors montrer que
- $$\phi(\vec{r}) = \frac{q}{r} e^{-k_0 r}, \quad k_0^2 = \frac{4}{\pi} \frac{k_F}{a_0} \Rightarrow k_0 \sim k_F \sim \frac{1}{a_0}$$

12

## Écrantage

### ■ Lindhard

- Pas d'approximation semi-classique
- Utilise la variation de la densité au 1<sup>er</sup> ordre
- $\phi(\vec{r}) \sim \frac{1}{r^3} \cos k_F r$
- Un peu plus de structure dans le nuage d'e<sup>-</sup>



- oscillations de Friedel

13

## Écrantage de l'approx. Hartree-Fock

- S'il y a écrantage pour les ions, il y a écrantage pour les e<sup>-</sup> !

- Les électrons environnant un e<sup>-</sup> réagissent à sa présence de manière à écranter sa charge

- Terme en  $\frac{1}{(\vec{k} - \vec{k}')^2} \in (\vec{k} - \vec{k}')$

$$\varepsilon(\vec{q}) = 1 - \frac{4\pi}{q^2} \chi(\vec{q}), \quad \chi(\vec{q}) = e^2 \left( \frac{mk_F}{\pi^2 \hbar^2} \right) F(q/2k_F)$$

- Élimine la divergence de  $\bar{v}(\vec{k}) = \frac{1}{\hbar} \frac{\partial \varepsilon}{\partial \vec{k}}$  à  $k = k_F$
- Effet qui aurait dû être pris en compte par l'équation de Schrödinger mais « lavé » par approx. Hartree-Fock

14

## DFT

- L'écrantage doit être pris en compte

- On calcule

- Échange
- Corrélation: résultat de l'échange
- Local Density Approximation (LDA)
  - On calcule l'écrantage selon  $\rho(\vec{r})$  locale
  - Un peu comme Thomas-Fermi
- Generalized Gradient Approximation (GGA)
  - On considère aussi  $\nabla \rho(\vec{r})$
  - Un peu comme Lindhard

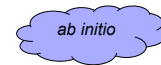
15

## DFT

- Équation de Kohn-Sham avec écrantage: LDA

$$n(\vec{r}) = \sum_{i=1}^N |\psi_i(\vec{r})|^2 \quad \text{On calcule la densité à partir de fonctions d'onde de } N \text{ e}^-$$

$$T[n] = \sum_{i=1}^N \frac{\hbar^2}{2m} (\nabla \psi_i)^2 \quad \text{Énergie cinétique}$$



$$-\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 \psi_i + \left[ U(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \frac{e^2 n(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} + \frac{\partial \varepsilon_{ech}}{\partial n} \right] \psi_i(\vec{r}) = \varepsilon_i(\vec{r})$$

$$\frac{\partial \varepsilon_{ech}}{\partial n} = \left( \frac{3}{\pi} n(\vec{r}) \right)^{1/3} \quad \text{Terme d'échange choisi pour donner les bonnes propriétés considérant un gaz d'électrons uniforme}$$

GGA: on ajoute des correction en  $\nabla n$

16

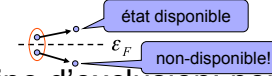
## Liquide de Fermi

- À cause de l'interaction e<sup>-</sup>-e<sup>-</sup>, on ne peut plus dire que les électrons ont l'énergie supposée par l'approx. e<sup>-</sup> indépendant
  - Tous les électrons sont affectés
  - Les niveaux d'énergie ne sont plus stationnaires

17

## Liquide de Fermi

- Interactions e<sup>-</sup>-e<sup>-</sup> en principe fréquentes mais



- Principe d'exclusion: peu de niveaux disponibles

- Les possibilités se limitent à une couche d'états près de  $\epsilon_F$
- T=0: taux d'interaction  $1/\tau \propto (\epsilon_i - \epsilon_F)^2 \Rightarrow \tau \rightarrow \infty$
- T>0: Taux d'interaction  $1/\tau \propto (k_B T)^2$  selon nombre de niveau départ arrivé dans  $k_B T$ 
  - $\tau \sim 10^4$  fois plus grand que autres processus

18

## Liquide de Fermi

- Quasi-particules

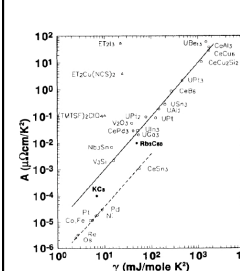
- « Excitation » combinant tous les électrons influencés
  - Toutes les reconfigurations (e.g. écrantage) sont incluses dans la quasi-particule
- Imaginez qu'on « allume » subitement l'interaction
  - On peut établir une correspondance 1 à 1 des nouveaux états à partir des états sans interaction
- Comportement pas trop éloigné des e<sup>-</sup> indépendants

19

## Liquide de Fermi

- ...Quasi-particules

- p/r aux e<sup>-</sup>, corrections:



$$\epsilon_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}}^0 + \sum_{\vec{k}'} u_{\vec{k},\vec{k}'} \delta f_{\vec{k}'}, \quad \delta f_{\vec{k}'} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\vec{k}'} - \mu)} + 1} - f_{\vec{k}'}^0$$

$$\frac{m^*}{m} = 1 + D(\epsilon_F) \int_{-1}^1 d(\cos \theta) u_{\vec{k},\vec{k}'} \cos \theta$$

Intégrale pondérée sur les interactions; correction à la masse p.é. vue comme un "backflow" de fermions dû aux interactions

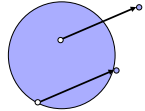
$$C_V = \left( \frac{\pi}{3N} \right)^{2/3} \frac{m^*}{\hbar} T : \text{mesure de la masse effective}$$

$$\rho \propto 1/\tau \propto (k_B T)^2 \Rightarrow \rho = \rho_{imp/def} + AT^2$$

20

# Liquide de Luttinger: e<sup>-</sup> en 1D avec interactions

2D/3D: excitation de même  $q$   
peuvent avoir  $\epsilon$  très différent



1D: excitations de même  $q$  ont la même  $\epsilon$

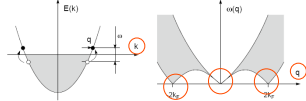
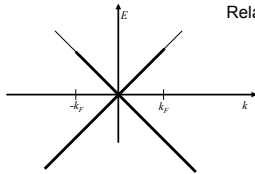


FIGURE 1. Particle-hole excitations in 1D (left). The spectrum of allowed excitation has no low-energy states with  $0 \leq |q| \leq 2k_F$ . Source: [babbage.sissa.it/PS\\_cache/cond-mat/pdf/0005/0005114v1.pdf](http://babbage.sissa.it/PS_cache/cond-mat/pdf/0005/0005114v1.pdf)

Excitations de faible énergie possible à 0 et  $2k_F$   
Relation de dispersion ~linéaire près de  $k_F$



$$\omega = \left( v_F \pm \frac{g_4}{2\pi} \right) (\eta k - k_F), \quad \eta = \text{sgn}(k - k_F)$$

ou  $\omega_{\rho,\sigma} = v_{\rho,\sigma} |q|, \quad \sigma : \text{spin}$

# Liquide de Luttinger

□ Densité des excitations:  $\rho_{\eta,\sigma}(q) = \sum_k c_{\eta,k+q,\sigma}^\dagger c_{\eta,k,\sigma}$

□ Or, cet opérateur commute

$$[\rho_{\eta,\sigma}(-q), \rho_{\eta',\sigma'}(q')] = \delta_{\eta\eta'} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{qq'} \frac{pqL}{2\pi} \Rightarrow \text{bosons}$$

□ On écrit comme opérateurs bosoniques

$$b_{+,q,\sigma}^\dagger = \sqrt{\frac{2\pi}{Lq}} \sum_k c_{+,k+q,\sigma}^\dagger c_{+,k,\sigma}, \quad b_{-,q,\sigma}^\dagger = \sqrt{\frac{2\pi}{Lq}} \sum_k c_{-,k,\sigma}^\dagger c_{-,k+q,\sigma}$$

□ Hamiltonien

$$H = \sum_{q>0,\sigma,\eta=\pm 1} \left( v_F q \delta_{\sigma\sigma'} b_{\eta\sigma}^\dagger b_{\eta\sigma'} + \frac{qg_2}{4\pi} (b_{\eta\sigma}^\dagger b_{-\eta\sigma'}^\dagger + b_{\eta\sigma} b_{-\eta\sigma'}) + \frac{qg_4}{4\pi} b_{\eta\sigma}^\dagger b_{\eta\sigma'} \right)$$

Interaction entre excitations allant  
dans la même direction en direction opposée

# Liquide de Luttinger

□ On peut réécrire l'hamiltonien en définissant

$$b_{\eta c}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (b_{\eta\uparrow}^\dagger + b_{\eta\downarrow}^\dagger) \quad \text{charge}$$

$$b_{\eta s}^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (b_{\eta\uparrow}^\dagger - b_{\eta\downarrow}^\dagger) \quad \text{spin}$$

□ Hamiltonien

$$H = \sum_{q>0,\eta=\pm 1} \left( v_F q (b_{\eta c}^\dagger b_{\eta c} + b_{\eta s}^\dagger b_{\eta s}) + \frac{qg_2}{4\pi} (b_{\eta c}^\dagger b_{-\eta c}^\dagger + b_{\eta c} b_{-\eta c}) + \frac{qg_4}{4\pi} b_{\eta c}^\dagger b_{\eta c} \right)$$

□ Diagonalisation par rotation de Bogoliubov

$$H = \sum_{q>0,\eta=\pm 1} q \sqrt{\left( v_F + \frac{g_4}{2\pi} \right)^2 - \left( \frac{g_2}{2\pi} \right)^2} \left( \alpha_{\eta c}^\dagger \alpha_{\eta c} + \frac{1}{2} \right) + q v_F \alpha_{\eta s}^\dagger \alpha_{\eta s}$$

nouvelle base = mélange de  $b, b^\dagger$   
↑  
vitesse des charges (affectée par interactions) vitesse des spins!!!

# Liquide de Luttinger

■ ou plus simplement  $H = \sum_{\nu=\rho,\sigma} \sum_q v_\nu |q| (b_{\nu,q}^\dagger b_{\nu,q} + 1/2)$

■ avec  $v_\rho \neq v_\sigma$

■ Interactions entraîne séparation charge-spin

□ holon, spinon

■ Lectures conseillées: Johannes Voit

□ A brief introduction to Luttinger liquids

■ [babbage.sissa.it/PS\\_cache/cond-mat/pdf/0005/0005114v1.pdf](http://babbage.sissa.it/PS_cache/cond-mat/pdf/0005/0005114v1.pdf)

□ One-dimensional Fermi liquids

■ [arxiv.org/PS\\_cache/cond-mat/pdf/9510/9510014v1.pdf](http://arxiv.org/PS_cache/cond-mat/pdf/9510/9510014v1.pdf)