

**CORRECTION DES ERREURS ET SOLUTIONS DES EXERCICES ET DES  
PROBLÈMES**  
du livre  
**PHYSIQUE DE LA MATIÈRE CONDENSÉE**  
Dunod (2003)

Hung T. Diep

*Laboratoire de Physique Théorique et Modélisation, CNRS-Université de Cergy-Pontoise, UMR 8089  
5, mail Gay-Lussac, Neuville sur Oise, 95031 Cergy-Pontoise Cedex, France*

Les corrigés d'un grand nombre d'exercices et de problèmes sont donnés ci-après. Ce document sera mis à jour régulièrement avec l'ajout des corrigés supplémentaires.

**DATE DE LA MISE A JOUR:** 26 JANVIER 2004 avec l'ajout des solutions des exercices 12.2, 12.3, 12.4, 13.4, 13.7, 15.3, 15.4 et 18.4.

**I. CORRECTION DES ERREURS DU LIVRE**

pp.39-40: dans la démonstration de (3.37), remplacer  $dk_x$  dans l'intégrale par  $dx$ .

p.65: remplacer  $\sqrt{N}$  par  $N$  dans (5.7).

p.67: remplacer dans (5.21)  $V(\vec{r} - \vec{R}_i)$  par  $\exp(i\vec{k} \cdot \vec{R}_i)\phi(\vec{r} - \vec{R}_i)$ .

p.94: la ligne précédant Eq. (7.21) il faut lire  $e^{\beta\hbar\omega_E} \simeq 1 + \beta\hbar\omega_E$ .

p.145: la ligne précédant Eq. (10.60) il faut lire "... $x = l\beta 2JSk^2$  ( $a = 1$ ), on obtient"

p.163: les bornes supérieures des intégrales (11.98) et (11.99) sont  $+\infty$ .

p.170: dans (12.5) et dans la ligne suivante remplacer  $|D$  par  $|D|$ .

p.248: remplacer  $C$  dans (15.32) par  $Z$

p.258: les bornes supérieures des intégrales (16.1) et (16.2) sont  $+\infty$ .

**Erreurs des références:**

Chapitre 10: p. 147, remplacer [18] par [19], [22] par [23],[46]par[51]

Chapitre 13: p. 207, remplacer [19] par [20]

Chapitre 15: p. 245 remplacer [19] par [20], p. 253 remplacer [citeRocco] par [38]

Chapitre 17: p. 288 remplacer [10, 17] par [11, 18], p. 292 remplacer [Cercignani] par [44]

Chapitre 18: les citations dans le texte du chapitre sont à ajouter 5, par exemple à la page 302, on remplace [40] par [45], [41] par [46], etc.

Des **erreurs dans les exercices** 8.2, 8.3, 8.4, 13.3 ont été corrigées dans les énoncés redonnés ci-dessous.

**II. EXERCICES ET PROBLÈMES DU CHAPITRE 8: SYSTÈMES DE SPINS SANS INTERACTION**

**Exercice 8.1** Moments cinétiques, orbital et du spin, d'un électron:

En utilisant la théorie du moment cinétique, calculer les moments cinétiques, orbital et du spin, d'un électron. Quel est le moment cinétique total?

**Guide:** L'état d'un électron dans un atome est défini par 4 nombres quantiques  $n, l, m_l, m_s$  avec  $n = 1, 2, 3, \dots$ ;  $l = 0, 1, 2, \dots, n - 1$ ;  $m_l = -l, -l + 1, \dots, l - 1, l$ ;  $m_s = -s, s$  où  $s = 1/2$ . Le moment cinétique orbital est  $\vec{L}$  dont la valeur propre est  $\hbar m_l$ , le moment cinétique de spin est  $\vec{S}$  dont la valeur propre est  $\hbar m_s$ . Le moment magnétique orbital est  $\vec{M}_l = -\mu_B \vec{L}$ , et le moment magnétique du spin est  $\vec{M}_s = -g\mu_B \vec{S}$  ( $g = 2, 0023 \simeq 2$ , facteur spectroscopique des électrons). Le moment magnétique total d'un électron est  $\vec{M}_t = -\mu_B(\vec{L} + g\vec{S})$ .

**Exercice 8.2 Effet Zeeman**

a) Calculer le moment magnétique par atome de fer, sachant que l'aimantation saturée sous un champ magnétique appliqué est  $1.7 \times 10^6$  A/m et que la densité de masse de fer est  $\rho = 7970$  kg/m<sup>3</sup>. On donne la masse atomique de fer  $M = 56$ .

b) Calculer la séparation  $\Delta E$  des niveaux d'énergie due à l'effet Zeeman du niveau atomique correspondant à la longueur d'onde  $\lambda = 643.8$  nm d'un atome de cadmium. En déduire la variation de fréquence  $\Delta\nu$  du niveau initial.

Application numérique: Calculer  $\Delta E$  et  $\Delta\nu$  pour les champs  $\mu_0 H = 0.5$  T (tesla), 1 T, et 2 T.

**Guide:**

a) Le nombre d'atomes de fer dans 1 m<sup>3</sup>

$$N = \frac{7970 \times 6,025 \times 10^{26}}{56} = 8,58 \times 10^{28} \text{ (le nombre d'Avogadro par kilogramme est } 6,025 \times 10^{26}\text{)}$$

Le moment magnétique de fer est donc

$$M = \frac{1,7 \times 10^6}{8,58 \times 10^{28}} \text{ Am}^2 = 1,98 \times 10^{-23} = 2,49 \times 10^{-29} \text{ JA/m} = 2,14 \mu_B \text{ (magnéton de Bohr } \mu_B = 9,27 \times 10^{-24} \text{ joule/tesla} \\ = 1,16 \times 10^{-29} \text{ JA/m)}.$$

b) L'énergie due à l'effet Zeeman est  $\Delta E = \mu_B B = \mu_B \mu_0 H$  ( $B = \mu_0 H$  champ magnétique). On a  $\Delta E = 0,9273 \times 10^{-23} \mu_0 H$  Joules ( $\mu_0$ , la perméabilité du vide,  $= 1,257 \times 10^{-6}$  H/m).

Pour  $\mu_0 H = 0,5$  tesla,  $\Delta E = 0,464 \times 10^{-23}$  J

Pour  $\mu_0 H = 1$  tesla,  $\Delta E = 0,927 \times 10^{-23}$  J

Pour  $\mu_0 H = 2$  tesla,  $\Delta E = 1,85 \times 10^{-23}$  J.

La variation de fréquence  $\Delta\nu = \nu - \nu_0 = \Delta E/h$ .

### Exercice 8.3 Théorie du diamagnétisme de Langevin

On considère un électron dans un atome. Dans la théorie du diamagnétisme de Langevin, le mouvement de l'électron autour du noyau de l'atome est équivalent au mouvement du moment magnétique  $\vec{m}$  généré par un courant  $i$  qui passe dans un circuit fermé d'aire  $A$ .

a) Ecrire la relation entre  $i$ ,  $m$  et  $A$ .

b) Montrer que le moment magnétique de l'électron s'écrit  $m = evr/2$  où  $e$  est la charge électronique,  $v$  sa vitesse et  $r$  le rayon de son orbite.

c) Montrer qu'un champ magnétique appliqué  $\vec{H}$ , perpendiculaire au plan de l'orbite de l'électron, induit une variation suivante du moment magnétique de l'électron  $\Delta m = -\frac{\mu_0 e^2 r^2 H}{4m_e}$  ( $m_e$ : masse électronique). Commenter sur le signe négatif.

d) Que devient ce résultat si le champ  $\vec{H}$  fait un angle  $\theta$  avec la normale du plan de l'orbite?

e) En déduire la susceptibilité d'un corps de densité de masse  $\rho$  constitué d'atomes de  $Z$  électrons, de masse  $M$ .

Application numérique:  $\rho = 2220$  kg/m<sup>3</sup>,  $e = 1.6 \times 10^{-19}$  C,  $Z = 6$ ,  $r = 0.7 \times 10^{-10}$  m.

**Guide:** La première explication du phénomène diamagnétisme a été donnée par la théorie de Langevin

a)  $m = iA$

b) On a, pour un électron,  $m = eA/\tau$  où  $\tau$  est la période,  $e$  la charge électronique. Avec  $\tau = 2\pi r/v$  ( $r$ : rayon,  $v$ : vitesse) et  $A = \pi r^2$ , on a le moment magnétique orbital de l'électron  $m = evr/2$ .

c) Le changement du flux magnétique par  $\vec{B}$  induit un champ électrique  $E = -\frac{1}{L} \frac{d\phi}{dt} = -\frac{1}{L} \frac{dB A}{dt} = -\frac{A}{L} \frac{dB}{dt}$  ( $L = 2\pi r$ ).

Accélération résultante  $a = \frac{dv}{dt} = \frac{eE}{m_e} = -\frac{er}{2m_e} \frac{dB}{dt} = -\frac{\mu_0 er}{2m_e} \frac{dH}{dt}$ .

Intégrant cette relation, on a  $\int_{v_1}^{v_2} dv = v_2 - v_1 = -\frac{\mu_0 er}{2m_e} H$ .

La variation du moment magnétique de l'électron est donc

$$\Delta m = er(v_2 - v_1)/2 = -\frac{\mu_0 e^2 r^2 H}{4m_e}$$

Le signe négatif montre le caractère diamagnétique.

d) On doit projeter l'orbite de rayon  $r$  sur le plan normal au champ. On a  $R = r \cos \theta$ . On doit remplacer  $r$  par  $r \cos \theta$  dans la formule de  $\Delta m$ . La moyenne pour toutes les directions s'obtient en intégrant sur  $\theta$ . On a

$$\Delta m = -\frac{\mu_0 e^2 H}{4m_e} \int r^2 \cos^2 \theta \sin \theta d\theta \quad (1)$$

$$= -\frac{\mu_0 e^2 r^2 H}{4m_e} \left[ -\frac{\cos^3 \theta}{3} \right]_0^\pi \quad (2)$$

$$= -\frac{\mu_0 e^2 r^2 H}{6m_e} \quad (3)$$

e) S'il y a  $Z$  électrons dans un atome, on a la variation totale du moment magnétique

$\Delta\mathcal{M} = -N \frac{\mu_0 Z e^2 r^2 H}{4m_e}$  où  $N$  est le nombre d'atomes dans une unité de volume,  $N = N_A \rho / M$  ( $N_A$ : nombre d'Avogadro). La susceptibilité est

$$\chi = \Delta\mathcal{M}/H = -N \frac{\mu_0 Z e^2 r^2 H}{4m_e} < 0$$

Note: consulter le paragraphe 8.3 pour un traitement quantique du diamagnétisme atomique.

### Exercice 8.4 Théorie du paramagnétisme de Langevin

On considère un atome ayant un moment magnétique  $\vec{m}$  permanent (cas d'un nombre impair d'électrons). En utilisant les statistiques de Maxwell-Boltzmann, montrer que le moment magnétique résultant d'un corps de  $N$  atomes sous l'effet d'un champ magnétique appliqué  $\vec{H}$  dans une direction arbitraire s'écrit

$$M = Nm\mathcal{L}\left(\frac{\mu_0 m H}{k_B T}\right)$$

où  $\mathcal{L}(x) = \coth(x) - \frac{1}{x}$  (fonction de Langevin). En déduire la susceptibilité dans le cas d'un champ faible.

**Réponse:** Le cas d'un spin discret d'amplitude 1/2 a été étudié au paragraphe 8.2. On étudie ici le cas d'un spin continu (théorie de Langevin).

Théorie de Langevin: la probabilité de Maxwell-Boltzmann pour l'énergie de Zeeman  $E = -\vec{m} \cdot \vec{B}$  est

$$p(E) = C \exp(-\beta E) = \exp(\beta \vec{m} \cdot \vec{B}) \text{ où } C \text{ est une constante déterminée par la normalisation des probabilités.}$$

Dans un matériau isotrope, les moments magnétiques  $\vec{m}$  sont distribués dans toutes les directions. En coordonnées sphériques, le nombre de moments magnétiques pointés dans un volume élémentaire est  $dn = C 2\pi \sin \theta d\theta \exp(\beta m B \cos \theta)$ . Le nombre total de moments magnétiques par unité de volume est  $N = C 2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \exp(\beta m B \cos \theta)$  d'où

$$C = N/2\pi \int_0^\pi \sin \theta d\theta \exp(\beta m B \cos \theta)$$

La composante du moment magnétique résultant suivant l'axe  $z$  (aimantation) est

$$M = \int_0^\pi m \cos \theta dn \tag{4}$$

$$= \frac{Nm \int_0^\pi \cos \theta \sin \theta d\theta \exp(\beta m B \cos \theta)}{\int_0^\pi \sin \theta d\theta \exp(\beta m B \cos \theta)} \tag{5}$$

$$= Nm\mathcal{L}\left(\frac{mB}{k_B T}\right) \tag{6}$$

$$= Nm\mathcal{L}\left(\frac{\mu_0 m H}{k_B T}\right) \tag{7}$$

où on a posé  $x = \cos \theta$  ( $dx = -\sin \theta d\theta$ ) pour intégrer, et où  $\mathcal{L}(y) = \coth(y) - \frac{1}{y}$ .  $\mu_0$ , la perméabilité du vide, est égal à  $1,257 \times 10^{-6}$  H/m. La dernière équation est comparée à (8.22). Pour des champs faibles, le développement limité de la fonction  $\mathcal{L}(y)$  donne  $M = N\mu_0 m^2 H / (3k_B T)$  ce qui donne la loi de Curie  $\chi = M/H = N\mu_0 m^2 / (3k_B T) > 0$  (paramagnétisme).

**Exercice 8.5** Calculer la variation de la bande interdite dans un semi-conducteur sous l'effet de  $\vec{B}$  en supposant la masse effective  $m^*$  égale à la masse au repos.

**Guide:** Sous un champ magnétique fort  $\vec{B}$ , les niveaux d'énergie de Landau sont donnés par (8.51)  $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega_c + \hbar^2 k_z^2 / 2m^*$  où  $\omega_c = eB/m^*$ . Ceci est vrai pour les bandes de conduction (BC) et de valence (BV) avec  $m^* = m_c^*$  (BC) et  $m^* = m_v^*$  (BV). Les BC et BV en l'absence du champ (Fig. 4.6) sont 'éclatées' en niveaux de Landau. La bande interdite initiale, sous l'effet du champ, devient plus large, sa variation est  $\Delta E_g = \hbar e B / 2m_c^* + \hbar e B / 2|m_v^*|$ .

### Exercice 8.6 Phénomène de résonance paramagnétique

On considère un moment magnétique  $\vec{m}$  soumis dans un champ magnétique  $\vec{H}$ .

a) Ecrire l'équation du mouvement de la valeur moyenne  $\langle \vec{m} \rangle$ .

b) On considère le cas où  $\vec{H} = \vec{H}_0 + \vec{H}_1(t)$  où  $\vec{H}_0$  est la composante suivant l'axe  $z$  et  $\vec{H}_1(t)$  la composante dans le plan  $(xy)$  dépendant du temps. On suppose que  $\vec{H}_1(t)$  est un champ alternatif de fréquence  $\omega$ , d'amplitude  $H_1$ . Montrer que la résonance paramagnétique a lieu quand  $H_0 = \omega/\gamma$  où  $\gamma$  (facteur gyromagnétique) =  $g\mu_B$  ( $g$ : facteur de Landé). Commenter.

### III. EXERCICES ET PROBLÈMES DU CHAPITRE 9: FERROMAGNÉTISME: ORIGINE - THÉORIE DU CHAMP MOYEN

#### Exercice 9.1 Amélioration de l'approximation du champ moyen

a) Problème à deux spins:

Soit l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = -2J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - D[(S_1^z)^2 + (S_2^z)^2] - B(S_1^z + S_2^z) \quad (8)$$

où  $J$  (échange) et  $D$  (anisotropie) sont des constantes positives et  $B$  l'amplitude du champ magnétique appliqué parallèlement à  $Oz$ . Trouver les valeurs et vecteurs propres de  $\mathcal{H}$  pour des spins  $1/2$ .

b) Amélioration du champ moyen:

On considère le modèle de Heisenberg:  $\mathcal{H} = -2J \sum_{(i,j)} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ , La première amélioration consiste à traiter l'interaction entre 2 spins de manière exacte et les interactions de cette paire avec les autres spins par l'approximation du champ moyen. Explicitement, on considère deux spins  $\vec{S}_i$  et  $\vec{S}_j$ ; l'hamiltonien de ces deux spins s'écrit

$$\mathcal{H}_{ij} = -2J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 - 2(Z-1)J \langle S^z \rangle (S_i^z + S_j^z) \quad (9)$$

où  $Z$  est la coordination (nombre de premiers voisins). Montrer que la température critique  $T_c$  pour  $S = 1/2$  est donnée par

$$e^{-2J/k_B T_c} + 3 - 2(Z-1)J/k_B T_c = 0 \quad (10)$$

#### Réponse:

a) Guide: On exprime

$$\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = S_1^z S_2^z + (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+)/2$$

Les états de deux spins  $1/2$  sont  $\phi_1 = |1/2, 1/2\rangle$ ,  $\phi_2 = |1/2, -1/2\rangle$ ,  $\phi_3 = |-1/2, 1/2\rangle$ ,  $\phi_4 = |-1/2, -1/2\rangle$ .

Pour calculer  $[S_1^z S_2^z + (S_1^+ S_2^- + S_1^- S_2^+)/2 - D[(S_1^z)^2 + (S_2^z)^2] - B(S_1^z + S_2^z)]|\phi_i\rangle$ , on utilise les relations suivantes

$$S^\pm |jm\rangle = [j(j+1) - m(m \pm 1)]^{1/2} \hbar |j, m \pm 1\rangle \quad (j = 1/2, m = \pm 1/2),$$

$$S^z |m\rangle = \hbar m |m\rangle.$$

On obtient une matrice  $4 \times 4$ . Une simple diagonalisation donne finalement les valeurs propres suivantes

$$E_1 = J/2 - D/2 - B, \quad E_2 = -3J/2 - D/2, \quad E_3 = J/2 - D/2, \quad E_4 = J/2 - D/2 + B \quad (\text{on a pris } \hbar = 1).$$

b) Les états de deux spins voisins en interaction  $\vec{S}_i$  et  $\vec{S}_j$  d'amplitude  $1/2$ , placés dans le champ moyen de  $(Z-1)$  voisins restants, avec leur énergie dans l'ordre croissant, sont

$$\uparrow \uparrow E_1 = -J/2 - 2(Z-1) \langle S^z \rangle$$

$$\uparrow \downarrow + \downarrow \uparrow E_2 = -J/2$$

$$\downarrow \downarrow E_3 = -J/2 + 2(Z-1) \langle S^z \rangle$$

$$\uparrow \downarrow - \downarrow \uparrow E_4 = 3J/2$$

On considère les deux spins comme un superspin dont la composante  $z$  est  $S^z = (S_i^z + S_j^z)/2$  qui est la même que celle des autres spins voisins. On a

$$\langle S^z \rangle = \text{Tr} \frac{1}{2} (S_i^z + S_j^z) \exp(-\beta E) / \text{Tr} \exp(-\beta E)$$

$$\text{Tr} \exp(-\beta E) = \exp(\beta J/2) \exp(\beta X) + \exp(\beta J/2) + \exp(\beta J/2) \exp(-\beta X) + \exp(-\beta 3J/2) \quad \text{avec } X = 2(Z-1) \langle S^z \rangle.$$

$$\text{Tr} \frac{1}{2} (S_i^z + S_j^z) \exp(-\beta E) = \frac{1}{2} \exp(\beta J/2) \exp(\beta X) + 0 - \frac{1}{2} \exp(\beta J/2) \exp(-\beta X) + 0 \quad (11)$$

$$= \exp(\beta J/2) \sinh \beta X \quad (12)$$

d'où

$$\langle S^z \rangle = \frac{\sinh \beta X}{2(\cosh \beta X + \exp(-\beta J) \cosh \beta J)} \quad (13)$$

On voit que  $\langle S^z \rangle = 0$  est une solution de cette équation. Le développement limité en fonction de  $\beta \langle S^z \rangle$  donne

$$2 \langle S^z \rangle \left[ \frac{-3 + 2\beta(Z-1)J - \exp(-2\beta J)}{2} \right] = \beta^2 4(Z-1)^2 J^2 \langle S^z \rangle^3 \quad (14)$$

La solution  $\langle S^z \rangle \neq 0$  est possible si  $-3 + 2\beta(Z-1)J - \exp(-2\beta J) > 0$ .  $k_B T_c = \beta_c^{-1}$  est obtenu par  $-3 + 2\beta_c(Z-1)J - \exp(-2\beta_c J) = 0$ .

### Exercice 9.2 Interaction entre les seconds voisins: théorie du champ moyen

On considère un réseau cubique centré. Chaque site du réseau est occupé par un spin de type Ising dont la valeur est égale à 1 ou -1. L'interaction entre les spins est donnée par l'hamiltonien suivant

$$\mathcal{H} = -J_1 \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - J_2 \sum_{(i,k)} \sigma_i \sigma_k \quad (15)$$

où  $\sigma_i$  est le spin du site  $i$ ,  $J_1 (> 0)$  l'interaction entre deux spins premiers voisins, et  $J_2 (> 0)$  celle entre les spins deuxièmes voisins. Les première et deuxième sommes s'effectuent sur les paires de spins premiers et deuxièmes voisins, respectivement.

- Décrire l'ordre magnétique (arrangement des spins) à température nulle.
- Donner brièvement les hypothèses de la théorie du champ moyen.
- Par un raisonnement qualitatif, montrer que l'interaction entre les deuxièmes voisins,  $J_2$ , augmente la température de transition.
- En utilisant la théorie du champ moyen, calculer la fonction de partition d'un spin à la température  $T$ . En déduire l'équation permettant de calculer  $\langle \sigma \rangle$ , la valeur moyenne d'un spin, à  $T$ .
- Déterminer la température de transition  $T_c$  en fonction de  $J_1$  et  $J_2$ .
- Dans le cas où  $J_2$  est négatif, le résultat de la question précédente reste valable jusqu'à une certaine valeur de  $|J_2|$ . Déterminer cette valeur critique  $J_2^c$ . Au-delà de  $J_2^c$ , l'ordre magnétique déterminé dans la première question reste-il valable? Si non, quel sera le nouvel ordre magnétique à température nulle?

#### Réponse:

- Les spins sont parallèles à  $T = 0$ . Toutes les interactions sont pleinement satisfaites.
- Les hypothèses de la théorie du champ moyen: les spins voisins d'un spin sont remplacés par une valeur moyenne qui sert à calculer la valeur moyenne du spin considéré à  $T$  donnée.
- L'énergie d'un spin à  $T = 0$  est  $E_F = -Z_1 J_1 - Z_2 J_2$  où  $Z_1$  et  $Z_2$  sont les nombres de premiers et seconds voisins. Pour le réseau cubique centré,  $Z_1 = 8$ ,  $Z_2 = 6$ .  $E$  est l'énergie qui ordonne les spins. La température en revanche désordonne les spins. Plus  $J_2$  est grand, plus il est difficile à détruire l'ordre: la température de transition est donc plus élevée.
- Le même calcul que dans le cours en remplaçant  $CJ$  par  $Z_1 J_1 + Z_2 J_2$  dans Eq.(9.8) et Eq.(9.10), on obtient l'équation du champ moyen.
- la température critique s'obtient en substituant  $CJ$  dans Eq.(9.20) par  $Z_1 J_1 + Z_2 J_2$ .
- $J_2 < 0$  ici. Quand  $|J_2| \gg J_1$ , il est clair que l'ordre antiferromagnétique entre les seconds voisins remporte sur l'ordre ferromagnétique entre les premiers voisins: les spins sur les sommets du cube forment un sous-réseau des spins antiparallèles, les spins centraux forment un deuxième sous-réseau des spins antiparallèles indépendant du premier. L'énergie de cet état est  $E_A = Z_2 J_2 = -Z_2 |J_2|$  (l'énergie d'interaction entre premiers voisins est nulle). L'état ferromagnétique a pour l'énergie  $E_F = -Z_1 J_1 - Z_2 J_2 = -Z_1 J_1 + Z_2 |J_2|$  La valeur critique de  $J_2$  s'obtient en égalisant  $E_F$  et  $E_A$ . On a  $|J_2^c| = \frac{Z_1 J_1}{2Z_2}$  ou  $J_2^c = -\frac{Z_1 J_1}{2Z_2}$ . Quand  $J_2 < J_2^c$ , l'ordre est antiferromagnétique sur chacun des sous-réseaux.

## IV. EXERCICES ET PROBLÈMES DU CHAPITRE 10: THÉORIE DES MAGNONS DANS LES FERROMAGNÉTIQUES

**Exercice 10.1** Démontrer (10.63)-(10.65).

**Réponse:** Dans Eq. (10.63), remplacer  $\epsilon_{\vec{k}} \simeq 2JS(ka)^2$  et utiliser Eq. (10.59),

$$\sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} < n_{\vec{k}} \simeq \frac{N}{(2\pi)^2} \int_0^\infty 2JS(ka)^2 \sum_{l=1}^{l=\infty} e^{-l\beta 2JS(ka)^2} k^2 dk \quad (16)$$

Posant  $x = l\beta 2JSk^2$  ( $a = 1$ ) puis intégrant, on obtient Eq. (10.64), puis Eq. (10.65).

### Exercice 10.2 Chaîne de spins de Heisenberg

a) Calculer le spectre des magnons  $\epsilon(k)$  dans le cas d'une chaîne de constante  $a$ , de spins de Heisenberg avec les interactions ferromagnétiques  $J_1$  entre les premiers voisins, et  $J_2$  entre les deuxièmes voisins. Tracer la courbe  $\epsilon(k)$  en fonction de  $k$  dans la première zone de Brillouin (ZB).

b) On suppose que  $J_2$  peut être antiferromagnétique. En utilisant le spectre  $\epsilon(k)$ , montrer que l'instabilité de l'ordre ferromagnétique se produit lorsque  $|J_2|$  dépasse une valeur critique.

**Réponse:**

a)  $\omega = 2J_1SZ(1 - \cos(ka)) + 2J_2SZ(1 - \cos(2ka))$  ( $Z=2$ , le nombre de voisins)

b) Si  $J_2 < 0$ ,  $\omega = 2J_1SZ(1 - \cos(ka)) - 2|J_2|SZ(1 - \cos(2ka))$ . On trace  $\omega$  en fonction de  $k$ . On voit que  $\omega$  est affecté fortement (diminué) par  $J_2$  quand  $k \rightarrow 0$ . Analytiquement, on prend la dérivée de  $\omega$  par rapport à  $k$ , on a  $d\omega/dk = 2J_1SZa \sin(ka) - 4a|J_2|SZ \sin(2ka) = 2SZA[J_1 \sin(ka) - 4|J_2| \sin(ka) \cos(ka)] = 2SZA \sin(ka)[J_1 - 4|J_2| \cos(ka)]$

Cette dérivée devient zéro à  $k = 0$  (mode uniforme) et à  $\cos(ka) = \frac{J_1}{4|J_2|} = -\frac{J_1}{4J_2}$  ( $J_2 < 0$ ). Cette dernière solution, appelée mode 'mou' car sa pente ou sa raideur ('spin stiffness') est nulle, donne un ordre spiral (hélismagnétique, voir chapitre 18). Elle est valable pour  $J_2 < -J_1/4$ .

### Exercice 10.3 Système de spins de Heisenberg en deux dimensions

On considère le modèle de spin de Heisenberg sur un réseau bi-dimensionnel avec une interaction ferromagnétique  $J$  entre les premiers voisins

a) Calculer le spectre des magnons  $\epsilon(\vec{k})$  en fonction de  $\vec{k}$ . Vérifier que  $\epsilon(\vec{k}) \propto k^2$  quand  $\vec{k} \rightarrow 0$ .

b) Ecrire l'expression formelle de l'aimantation  $M$  à la température  $T$ . Montrer que  $M$  n'est pas définie dès que  $T$  n'est pas nulle. Commentaires.

**Réponse:**

a)  $\omega = 2JSZ(1 - \gamma_k)$  où  $Z = 4$  (nombre de premiers voisins pour le réseau carré),  $\gamma_k = (\cos(k_x a) + \cos(k_y a))/2$ .  $\omega \rightarrow 2JS(k a)^2$  quand  $\vec{k} \rightarrow 0$ .

b)  $\langle S^z \rangle = 1/2 - A \int_{ZB} \frac{2\pi k dk}{\exp(\beta\omega) - 1}$  ( $A$ : une constante, consulter Eq. (10.55) et Eq. (10.56)). La contribution la plus importante à l'intégrale vient des petits  $k$  où  $\omega \rightarrow 2JS(k a)^2$ . On a  $\langle S^z \rangle \simeq 1/2 - A \int_{ZB} \frac{2\pi k dk}{1 + \beta JS(k a)^2 - 1} \simeq 1/2 - A \int_{ZB} \frac{2\pi k dk}{\beta JS(k a)^2}$ . Cette intégrale diverge à  $k = 0$ ,  $\langle S^z \rangle$  n'est pas donc défini. L'ordre à longue portée à  $T \neq 0$  n'existe donc pas en 2D (un théorème rigoureux a été démontré par Mermin et Wagner, réf. 19 du livre).

Note: En 3D, on remplace dans l'intégrale  $2\pi k dk$  par  $4\pi k^2 dk$ . L'intégrale ne diverge plus à  $k = 0$ . L'ordre à longue portée à  $T \neq 0$  existe donc en 3D.

### Exercice 10.4 Anisotropie uniaxiale

a) Montrer que si on inclut dans l'hamiltonien de Heisenberg un terme d'anisotropie du type  $-D \sum_i (S_i^z)^2$  où la somme s'effectue sur tous les spins, on obtient le spectre suivant

$$\epsilon_{\vec{k}} = 2ZJS(1 - \gamma_{\vec{k}} + d)$$

où  $d \equiv \frac{D}{2ZJS}$  [voir les autres notations définies dans (10.52)].

b) Est-il possible d'avoir un ordre magnétique à température non nulle dans le cas de deux dimensions ? (voir l'exercice précédent).

**Réponse:**

a) suivre la méthode du cours.

b) oui, car l'intégrale ne diverge plus à  $k = 0$  en présence de  $d$ .

### Exercice 10.5 Interaction dipolaire

On considère un système de spins de Heisenberg. Outre l'interaction ferromagnétique isotrope  $J$  entre les premiers voisins, on inclut l'interaction dipolaire suivant dans l'hamiltonien:

$$\mathcal{H}_d = D \sum_{(i,j)} \left[ \frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{R_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{R}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{R}_{ij})}{R_{ij}^5} \right] \quad (17)$$

où  $D > 0$  est l'amplitude de l'interaction dipolaire,  $\vec{R}_{ij} = \vec{R}_i - \vec{R}_j$  le vecteur de module  $R_{ij}$  liant deux sites  $i$  et  $j$ , et la somme s'effectuant sur toutes les paires de spins (portée infinie).

a) Montrer que pour un système bi-dimensionnel défini dans le plan  $(xy)$  les spins sont parallèles à ce plan dans l'état fondamental.

b) Si le système est un film mince d'épaisseur très petite par rapport à la dimension dans les directions  $x$  et  $y$ , montrer par un raisonnement qualitatif que l'interaction dipolaire favorise encore l'état fondamental parallèle au plan  $(xy)$ .

**Réponse:**

a) On voit que le premier terme dans [...] favorise l'ordre antiferromagnétique ( $D > 0$ ). Il est isotrope dans l'espace (indépendant des orientations des spins par rapport au plan  $xy$ ). Par contre, le second terme favorise l'ordre ferromagnétique, les orientations des spins  $\vec{S}_i$  et  $\vec{S}_j$  dépendent du vecteur  $\vec{R}_{ij}$  qui les connecte. Ce terme est minimum quand  $\vec{S}_i \parallel \vec{S}_j \parallel \vec{R}_{ij}$ . Autrement dit, le second terme est minimum quand les spins sont parallèles au plan  $xy$ . L'ordre ferromagnétique domine grâce au facteur 3 du second terme.

Note: si les spins sont perpendiculaire au plan  $xy$ , le second terme est nul, le premier terme induit un ordre antiferromagnétique entre les spins. Mais l'énergie de cet état est beaucoup plus élevée que celle des spins parallèles au plan  $xy$ .

b) raisonnement très analogue à la question précédente.

## V. EXERCICES ET PROBLÈMES DU CHAPITRE 11: ANTIFERROMAGNÉTISME - FERRIMAGNÉTISME

**Exercice 11.1** Démontrer (11.19)-(11.21).

**Exercice 11.2** Amélioration de l'approximation du champ moyen pour un antiferromagnétique.

**Exercice 11.3** Calculer le champ critique  $H_c$  dans les cas suivants

a) un réseau cubique de spins d'Ising en interaction antiferromagnétique entre les premiers voisins.

b) un réseau carré de spins d'Ising en interaction antiferromagnétique  $J_1$  entre les premiers voisins et ferromagnétique  $J_2$  entre les deuxièmes voisins.

**Réponse:**

a)  $H_c = 6|J|$  ( $J$ : interaction entre deux premiers voisins).

b)  $H_c = 4|J_1| + 4J_2$

**Exercice 11.4** Démontrer que les opérateurs définis par 11.61-11.64 obéissent aux relations de commutation.

**Réponse:** On a

$$[\alpha_{\vec{k}}, \alpha_{\vec{k}'}^\dagger] = [a_{\vec{k}} \cosh \theta_k + b_{\vec{k}}^\dagger \sinh \theta_k, a_{\vec{k}'}^\dagger \cosh \theta_{k'} + b_{\vec{k}'} \sinh \theta_{k'}] \quad (18)$$

$$= \cosh \theta_k \cosh \theta_{k'} [a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^\dagger] + \cosh \theta_k \sinh \theta_{k'} [a_{\vec{k}}, b_{\vec{k}'}^\dagger] \quad (19)$$

$$+ \sinh \theta_k \cosh \theta_{k'} [b_{\vec{k}}^\dagger, a_{\vec{k}'}^\dagger] + \sinh \theta_k \sinh \theta_{k'} [b_{\vec{k}}^\dagger, b_{\vec{k}'}^\dagger] \quad (20)$$

$$= \cosh \theta_k \cosh \theta_{k'} \delta(k, k') + 0 + 0 - \sinh \theta_k \sinh \theta_{k'} \delta(k, k') \quad (21)$$

$$= [\cosh^2 \theta_k - \sinh^2 \theta_k] \delta(k, k') = \delta(k, k') \quad (22)$$

La même démonstration pour les autres relations.

**Exercice 11.5** Montrer que le spectre des magnons (11.108) devient instable quand l'interaction entre les deuxièmes voisins  $\epsilon$  est supérieure à une valeur critique positive.

**Guide:** Le spectre devient instable lorsque la fréquence d'un de ses modes devient 0. Ce mode est appelé 'mode mou'. Numériquement, il faut tracer Eq. (11.108) en fonction de  $\vec{k}$  pour les différentes valeurs de  $\epsilon$  et déterminer sa valeur critique. Analytiquement, on voit que l'interaction  $J_2$  affecte les modes a  $k_x = k_y = k_z = \pi/a$ . Augmenter  $J_2$  fait baisser les fréquences de ces modes. Le mode le plus bas devient zéro quand  $\epsilon = \epsilon_c = \frac{2}{3} \frac{1-|\alpha|}{1+|\alpha|}$

**VI. EXERCICES ET PROBLÈMES DU CHAPITRE 12: ELECTRONS EN INTERACTION :  
APPROXIMATION DE HARTREE-FOCK**

**Exercice 12.1 Théorème de Koopmann**

Soit un système de  $2N$  électrons dont l'hamiltonien s'écrit

$$\mathcal{H}_{2N} = \sum_{i=1}^{2N} \left[ \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) \right] + \frac{1}{2} \sum_{i,j=1}^{2N} \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|}$$

où  $V(\vec{r}_i)$  représente un champ externe.

a) En utilisant la fonction d'onde déterminantale  $\Psi_{2N}$ , calculer l'énergie moyenne  $E_{2N} \equiv \langle \Psi_{2N} | \mathcal{H}_{2N} | \Psi_{2N} \rangle$  de l'état fondamental en fonction de

$$T(i) = \langle \varphi_i(\vec{r}_i) | \left[ \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r}_i) \right] | \varphi_i(\vec{r}_i) \rangle$$

$$K(i, j) = e^2 \langle \varphi_i(\vec{r}_i) \varphi_j(\vec{r}_j) | \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} | \varphi_i(\vec{r}_i) \varphi_j(\vec{r}_j) \rangle$$

$$J(i, j) = e^2 \langle \varphi_i(\vec{r}_i) \varphi_j(\vec{r}_j) | \frac{1}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} | \varphi_i(\vec{r}_j) \varphi_j(\vec{r}_i) \rangle$$

où  $\varphi_i(\vec{r})$  est la fonction d'onde 'individuelle' de l'état  $i$ .

b) Calculer le travail nécessaire  $W$  pour enlever un électron du système ( $W = E_{2N-1} - E_{2N}$ ) en supposant que les états des électrons restants ne sont pas affectés. Montrer que  $W = -\lambda_i$  où  $\lambda_i$  est l'énergie d'un électron donnée par l'équation de Hartree-Fock.

**Réponse:**

a)

$$E_{2N} \equiv \langle \Psi_{2N} | \mathcal{H}_{2N} | \Psi_{2N} \rangle \quad (23)$$

$$= \sum_{i,\sigma} \langle \psi_{i,\sigma}(\vec{r}_i) | \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + V(\vec{r} - i) | \psi_{i,\sigma}(\vec{r}_i) \rangle + \frac{1}{2} \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} \langle \psi_{i,\sigma}(\vec{r}_i) \psi_{j,\sigma'}(\vec{r}_j) | \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} | \psi_{i,\sigma}(\vec{r}_i) \psi_{j,\sigma'}(\vec{r}_j) \rangle \quad (24)$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{i,j,\sigma,\sigma'} \delta(\sigma, \sigma') \langle \psi_{i,\sigma}(\vec{r}_i) \psi_{j,\sigma'}(\vec{r}_j) | \frac{e^2}{|\vec{r}_i - \vec{r}_j|} | \psi_{j,\sigma'}(\vec{r}_i) \psi_{i,\sigma}(\vec{r}_j) \rangle \quad (25)$$

Posons  $\psi_{i,\sigma}(\vec{r}_i) \equiv \varphi_i(\vec{r}) S_\sigma$  où  $S_\sigma$  est la fonction spin (voir Eq.(12.3)). On obtient

$$E_{2N} = 2 \sum_{i=1}^N T(i) + 2 \sum_{i,j=1}^N K(i, j) - \sum_{i,j=1}^N J(i, j) \quad (26)$$

où les facteurs viennent des sommes sur les spins ( $\sum_\sigma 1 = 2$ ,  $\sum_{\sigma,\sigma'} 1 = 4$ ,  $\sum_{\sigma,\sigma'} \delta(\sigma, \sigma') 1 = 2$ ).

Pour un système de  $2N - 1$  électrons, les sommes sur les orbitales  $i$  et  $j$  vont de  $i, j = 1$  à  $i, j = N - 1$  (deux électrons par orbitale donc  $2N - 2$  électrons). La dernière orbitale  $N$  n'est occupée que par un seul électron. Le même calcul donne

$$E_{2N-1} = 2 \sum_{i=1}^{N-1} T(i) + T(N) + 2 \sum_{i,j=1}^{N-1} K(i, j) + 2 \sum_i^{N-1} K(i, N) - \sum_{i,j=1}^{N-1} J(i, j) - \sum_{i=1}^{N-1} J(i, N) \quad (27)$$

La différence d'énergie est

$$E_{2N-1} - E_{2N} = -T(N) - 2 \sum_{i=1}^N K(i, N) + \sum_{i=1}^N J(i, N) \quad (28)$$

Or l'équation de Hartree-Fock donne

$$\epsilon_i = T(i) + 2 \sum_{k=1}^N K(k, i) - \sum_{k=1}^N J(k, i) \quad (29)$$

Prenons  $i = N$ , on en déduit que

$$E_{2N-1} - E_{2N} = -\epsilon_N$$

La quantité  $-\epsilon_N$  est donc l'énergie nécessaire pour enlever l'électron de l'état  $N$  du système (théorème de Koopman).

### Exercice 12.2 Système à deux électrons

a) On considère deux électrons d'un atome de He dans l'état fondamental. Ils occupent l'état 1s. L'interaction entre les électrons à  $\vec{r}$  et  $\vec{r}'$  est de la forme  $V(\vec{r} - \vec{r}') = e^2/|\vec{r} - \vec{r}'|$  ( $e$ : charge électronique). Expliciter la fonction d'onde déterminantale de Slater pour ce système de deux électrons dans l'état fondamental. En négligeant les interactions électron-noyau, donner l'intégrale permettant de calculer l'énergie totale du système en fonction des fonctions d'onde individuelles  $\varphi_{1s}(\vec{r})$ .

b) On considère maintenant deux électrons dans un volume  $\Omega = L^3$  où  $L$  est la dimension linéaire. En utilisant les ondes planes comme fonctions d'onde pour les électrons, montrer que la probabilité de trouver deux électrons de spins opposés ne dépend pas de leur distance relative  $\vec{r} - \vec{r}'$  mais que la probabilité de trouver deux électrons de spins parallèles en dépend.

#### Réponse:

a) La fonction d'onde déterminantale de Slater  $\Psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2)$  pour le système de deux électrons

$$\begin{vmatrix} \psi_{f_1}(q_1) & \psi_{f_1}(q_2) \\ \psi_{f_2}(q_1) & \psi_{f_2}(q_2) \end{vmatrix}$$

où  $\psi_{f_i}(q_i) = \psi_{1s, \sigma_i}(\vec{r}_i, \zeta_i) = \varphi_{1s}(\vec{r}_i) S_{\sigma_i}(\zeta_i)$  [voir Eq.(12.3)].

Pour les deux électrons d'un atome de He dans l'état fondamental, on a  $\sigma_1 = +$  et  $\sigma_2 = -$ .

$S_{\sigma_1}(\uparrow) = 1, S_{\sigma_1}(\downarrow) = 0, S_{\sigma_2}(\uparrow) = 0, S_{\sigma_2}(\downarrow) = 1$ .

On a donc  $\Psi(\vec{r}_1, \sigma_1, \vec{r}_2, \sigma_2) = \varphi_{1s}(\vec{r}_1) S_{\sigma_1}(\uparrow) \varphi_{1s}(\vec{r}_2) S_{\sigma_2}(\downarrow) = \varphi_{1s}(\vec{r}_1) \varphi_{1s}(\vec{r}_2)$

L'hamiltonien des deux électrons est

$$\mathcal{H} = \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

L'énergie du système est donc

$$E = \langle \varphi_{1s}(\vec{r}_1) \varphi_{1s}(\vec{r}_2) | \frac{p_1^2}{2m} + \frac{p_2^2}{2m} + \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | \varphi_{1s}(\vec{r}_1) \varphi_{1s}(\vec{r}_2) \rangle \quad (30)$$

$$= E_1 + E_2 + \langle \varphi_{1s}(\vec{r}_1) \varphi_{1s}(\vec{r}_2) | \frac{e^2}{|\vec{r}_1 - \vec{r}_2|} | \varphi_{1s}(\vec{r}_1) \varphi_{1s}(\vec{r}_2) \rangle \quad (31)$$

où  $E_1 = E_2 =$  énergie cinétique de chacun des électrons. L'intégrale représente l'énergie d'interaction directe. L'interaction d'échange n'existe pas car les spins sont antiparallèles.

b) On reprend le déterminant de Slater de la question précédente avec

$\psi_{f_i}(q_j) = \frac{1}{\sqrt{2}} \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k}_i \cdot \vec{r}_j} S_{\sigma_i}(\zeta_j)$  où le facteur de normalisation a été introduit.

Prenons le cas de deux spins antiparallèles: posons  $\sigma_1 = +, \sigma_2 = -$ , d'où  $S_{\sigma_1}(\uparrow) = 1, S_{\sigma_1}(\downarrow) = 0, S_{\sigma_2}(\downarrow) = 1, S_{\sigma_2}(\uparrow) = 0$ . La fonction d'onde correspondante est

$$\Psi_{\vec{k}_1, \vec{k}_2}(\vec{r}_1, \uparrow, \vec{r}_2, \downarrow) = \frac{1}{2} \frac{1}{\Omega} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2}$$

La probabilité de cet état est

$$P(\uparrow, \downarrow) = \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} |\Psi_{\vec{k}_1, \vec{k}_2}(\vec{r}_1, \uparrow, \vec{r}_2, \downarrow)|^2 = \frac{1}{4} \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} 1 = \frac{1}{4} \frac{N^2}{\Omega^2},$$

indépendante de la distance. La même chose pour  $P(\downarrow, \uparrow)$ . La probabilité de trouver 2 spins antiparallèles est donc

$$2 \times \frac{1}{4} \frac{N^2}{\Omega^2}$$

Dans le cas de deux spins parallèles, on a  $\sigma_1 = +, \sigma_2 = +$ , d'où

$$\Psi_{\vec{k}_1, \vec{k}_2}(\vec{r}_1, \uparrow, \vec{r}_2, \uparrow) = \frac{1}{2} \frac{1}{\Omega} [e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} - e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_2}].$$

On a

$$P(\uparrow, \uparrow) = \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} |\Psi_{\vec{k}_1, \vec{k}_2}(\vec{r}_1, \uparrow, \vec{r}_2, \uparrow)|^2 \quad (32)$$

$$= \frac{1}{4} \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} (e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} - e^{-i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_1} e^{-i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_2}) (e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_2} - e^{i\vec{k}_2 \cdot \vec{r}_1} e^{i\vec{k}_1 \cdot \vec{r}_2}) \quad (33)$$

$$= \frac{1}{4} \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} 2 - \frac{1}{4} \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} [e^{i\vec{k}_1 \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)} e^{-i\vec{k}_2 \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)} + e^{-i\vec{k}_1 \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)} e^{i\vec{k}_2 \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)}] \quad (34)$$

$$= 2 \times \frac{1}{4} \frac{N^2}{\Omega^2} - \frac{1}{4} \frac{1}{\Omega^2} \times 2I^2 \quad (35)$$

où

$$I \equiv \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot (\vec{r}_2 - \vec{r}_1)} \quad (36)$$

$$= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d\vec{k} e^{-i\vec{k}r \cos \theta} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 2\pi \int_0^{k_F} k^2 dk \int_{-1}^1 d(\cos \theta) e^{-ikr \cos \theta} \quad (37)$$

$$= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 2\pi \int_0^{k_F} k^2 dk [e^{ikr} - e^{-ikr}] \frac{1}{ikr} \quad (38)$$

$$= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{r} \int_0^{k_F} k dk \sin kr = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{4\pi}{r} [-k_F \cos k_F r + \int_0^{k_F} \cos kr dk] \quad (39)$$

$$= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \left[ \frac{-k_F \cos k_F r}{r} + \frac{\sin k_F r}{r^2} \right] \quad (40)$$

Sachant que  $N = \sum_{\vec{k}} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{k_F} 4\pi k^2 dk = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \left[ \frac{4\pi k_F^3}{3} \right]$ , l'équation (35) devient

$$P(\uparrow, \uparrow) = 2 \times \frac{1}{4} \frac{N^2}{\Omega^2} \left[ 1 - \frac{1}{N^2} (4\pi)^2 \left[ \frac{-k_F \cos k_F r}{r} + \frac{\sin k_F r}{r^2} \right] \right] \quad (41)$$

$$= \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^6} \left[ \frac{4\pi k_F^3}{3} \right]^2 \left[ 1 - \left[ \frac{3}{4\pi} \right]^2 (4\pi)^2 \left[ \frac{-k_F \cos k_F r + \sin k_F r}{k_F^3 r^3} \right]^2 \right] \quad (42)$$

Quand  $r \rightarrow 0$ ,  $3 \left[ \frac{-k_F \cos k_F r + \sin k_F r}{k_F^3 r^3} \right] \rightarrow 1 - \frac{1}{10} k_F^3 r^2$  (développement limité à l'ordre de  $(k_F r)^5$  de  $\sin k_F r$  et de  $\cos k_F r$ ). On voit que  $P(\uparrow, \uparrow) \rightarrow 0$  quand  $r \rightarrow 0$ . Cette région de petit  $r$  avec un déficit des spins parallèles est appelée le trou de Fermi. On montre dans la figure 1 la fonction  $\left[ 1 - 9 \left[ \frac{-k_F \cos k_F r + \sin k_F r}{k_F^3 r^3} \right]^2 \right]$ .

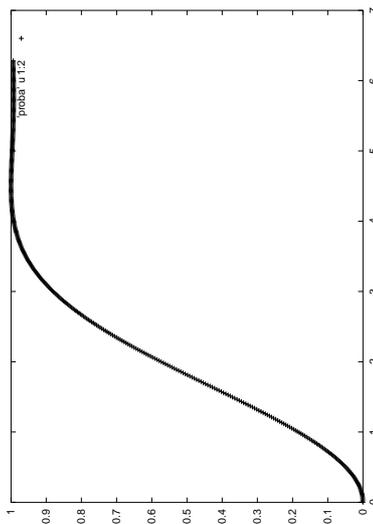


FIG. 1: Probabilité de trouver deux spins parallèles en fonction de leur distance avec  $k_F = 1$ .

### Exercice 12.3

a) Montrer que la densité d'états  $\rho(\epsilon_i)$  d'un électron dans l'approximation de Hartree-Fock calculée en utilisant (12.54) est égale à 0 à  $k_i = k_F$ . Calculer la masse effective  $m^*$  de l'électron.

b) Introduire le facteur d'écrantage  $e^{-\mu r'}$ . Utilisant (12.38), recalculer (12.53). Montrer que

$$\epsilon_i = \frac{\hbar^2 k_i^2}{2m} - \frac{e^2}{2\pi} \left[ \frac{k_F^2 + \mu^2 - k_i^2}{k_i} \ln \frac{(k_F + k_i)^2 + \mu^2}{(k_F - k_i)^2 + \mu^2} + 2k_F + 2\mu \arctan\left(\frac{k_i - k_F}{\mu}\right) \right]$$

$$- \arctan\left(\frac{k_i + k_F}{\mu}\right)] \quad (43)$$

En déduire la masse effective et la densité d'états à  $k_i = k_F$ .

### Exercice 12.4 Molécule d'hydrogène

Soit une molécule d'hydrogène composée des atomes  $A$  et  $B$  ayant respectivement les électrons  $a$  et  $b$ . La distance entre les noyaux est  $R_{AB}$ , celle entre les deux électrons est  $R_{ab}$  etc.

a) Montrer que la séparation de deux niveaux d'énergie de l'état moléculaire s'écrit

$$\Delta E = -2(J' - \alpha^2 Q)/(1 - \alpha^4)$$

où

$$\alpha = \int \varphi_A^*(\vec{r}) \varphi_B(\vec{r}) d\vec{r}$$

$$Q = \int \varphi_A^*(\vec{r}_1) \varphi_B^*(\vec{r}_2) \left( \frac{e^2}{R_{ab}} - \frac{e^2}{R_{Ab}} - \frac{e^2}{R_{Ba}} \right) \varphi_A(\vec{r}_1) \varphi_B(\vec{r}_2) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$$J' = \int \varphi_A^*(\vec{r}_1) \varphi_B^*(\vec{r}_2) \left( \frac{e^2}{R_{ab}} - \frac{e^2}{R_{Ab}} - \frac{e^2}{R_{Ba}} \right) \varphi_A(\vec{r}_2) \varphi_B(\vec{r}_1) d\vec{r}_1 d\vec{r}_2$$

$\varphi_A(\vec{r})$  et  $\varphi_B(\vec{r})$  étant les fonctions d'onde individuelles des électrons des atomes  $A$  et  $B$  dans l'état atomique.

b) Montrer que  $\Delta E = -2J$  où  $J$  est l'interaction d'échange du modèle de Heisenberg  $\mathcal{H} = -2J\vec{S}_a \cdot \vec{S}_b$ ,  $\vec{S}_a$  et  $\vec{S}_b$  étant les spins des électrons.

**Réponse:**

a) La partie spatiale de la fonction d'onde déterminantale normalisée de Slater s'écrit

$$\Psi_{\pm}(\vec{r}_1, \zeta_1, \vec{r}_2, \zeta_2) = \frac{1}{\sqrt{2(1 \pm \alpha^2)}} [\varphi_A(\vec{r}_1) \varphi_B(\vec{r}_2) \pm \varphi_A(\vec{r}_2) \varphi_B(\vec{r}_1)] \quad (44)$$

où les signes positif et négatif correspondent respectivement aux fonctions d'onde spatiales symétrique et anti-symétrique. Comme la fonction d'onde totale (avec la fonction de spin) doit être antisymétrique par rapport à l'échange de deux électrons, on doit multiplier la partie spatiale symétrique par la fonction de spin antisymétrique, et la partie spatiale antisymétrique par la fonction de spin symétrique. Pour deux spins, il y a quatre fonctions de spin:

trois triplet qui sont symétriques

$$|\uparrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2, |\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 + |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2, |\downarrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2$$

et un singulet qui est antisymétrique

$$|\uparrow\rangle_1 |\downarrow\rangle_2 - |\downarrow\rangle_1 |\uparrow\rangle_2.$$

Les énergies de ces états sont

$$E_{\pm} = \frac{1}{2(1 \pm \alpha^2)} \langle \varphi_A(\vec{r}_1) \varphi_B(\vec{r}_2) \pm \varphi_A(\vec{r}_2) \varphi_B(\vec{r}_1) | \mathcal{H} | \varphi_A(\vec{r}_1) \varphi_B(\vec{r}_2) \pm \varphi_A(\vec{r}_2) \varphi_B(\vec{r}_1) \rangle \quad (45)$$

$$= \frac{1}{1 \pm \alpha^2} [\langle \varphi_A(\vec{r}_1) \varphi_B(\vec{r}_2) | \mathcal{H} | \varphi_A(\vec{r}_1) \varphi_B(\vec{r}_2) \rangle \pm \langle \varphi_A(\vec{r}_1) \varphi_B(\vec{r}_2) | \mathcal{H} | \varphi_A(\vec{r}_2) \varphi_B(\vec{r}_1) \rangle] \quad (46)$$

$$= \frac{1}{1 \pm \alpha^2} [Q \pm J'] \quad (47)$$

On en déduit

$$\Delta E = E_+ - E_- = \frac{1}{1 + \alpha^2} [Q + J'] - \frac{1}{1 - \alpha^2} [Q - J'] = -2(J' - \alpha^2 Q)/(1 - \alpha^4) \quad (48)$$

b) L'interaction d'échange de deux spins

$$H = -2J\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2 = -J[(\vec{S}_1 + \vec{S}_2)^2 - \vec{S}_1^2 - \vec{S}_2^2] = -J[S(S+1) - S_1(S_1+1) - S_2(S_2+1)] = -J[S(S+1) - 3/2]$$

car  $S_1 = S_2 = 1/2$ . Dans l'état triplet  $S = 1$  d'où  $E = 1/2$  tandis que dans l'état singulet  $S = 0$ , d'où  $E = -3/2$ .

La différence d'énergie est donc  $2J$ . Egalisant cette différence et  $\Delta E$  ci-dessus, on a

$$J = (J' - \alpha^2 Q)/(1 - \alpha^4)$$

### Exercice 12.5 Fonction diélectrique d'un gaz d'électrons

a) Rappeler les relations suivantes entre susceptibilité et fonction diélectrique:

$$\rho_{ind}(\vec{q}) = \chi(\vec{q}) \varphi(\vec{q}),$$

$$\epsilon(\vec{q}) = \varphi_{ext}(\vec{q}) / \varphi(\vec{q}) = 1 - 4\pi q^{-2} \chi(\vec{q})$$

où  $\varphi = \varphi_{ind} + \varphi_{ext}$ , chaque potentiel étant relié à la densité de charges correspondante par l'équation de Poisson:

$$-\Delta\varphi = 4\pi\rho.$$

b) Dans l'approximation de la réponse linéaire, équivalente à une théorie de perturbation au 1er ordre du gaz libre, montrer que la susceptibilité du gaz d'électrons est donnée par

$$\chi(\vec{q}) = -2e^2(2\pi)^{-3} \int d\vec{k} (f_{\vec{k}-\vec{q}/2} - f_{\vec{k}+\vec{q}/2}) / (E_{\vec{k}-\vec{q}/2} - E_{\vec{k}+\vec{q}/2});$$

$f$  est la distribution de Fermi. En déduire la fonction diélectrique  $\epsilon(\vec{q})$ .

c) A  $T=0$ , montrer qu'on retrouve l'approximation de Thomas-Fermi dans la limite homogène et en négligeant les singularités de  $\chi$  hors de l'origine ( $\vec{q} = 0$ ). En déduire la forme asymptotique ( $r \rightarrow \infty$ ) du potentiel effectif  $\varphi$  créé par l'introduction d'une charge ponctuelle fixe  $Q$  dans le système.

d) En reprenant l'expression exacte (en réponse linéaire) de  $\chi$ , montrer que le potentiel effectif  $\varphi$  dû à la charge  $Q$  a en fait une décroissance algébrique en  $r \rightarrow \infty$  à  $T=0$ .

## VII. EXERCICES ET PROBLÈMES DU CHAPITRE 13: MÉTHODE DE LA SECONDE QUANTIFICATION

**Exercice 13.1** Montrer que  $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{N}] = 0$ .

**Guide:** On utilise les expressions suivantes (voir cours)

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} &= \sum_{\sigma} \int d\vec{r} \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}) H(\vec{r}) \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}) \\ &\quad - \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} \int \int d\vec{r}_1 d\vec{r}_2 \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r}_1) \hat{\Psi}_{\sigma'}^{\dagger}(\vec{r}_2) V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r}_1) \hat{\Psi}_{\sigma'}(\vec{r}_2) \end{aligned} \quad (49)$$

et

$$\hat{N} = \sum_{\beta} \int d\vec{r}_3 \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\vec{r}_3) \hat{\Psi}_{\beta}(\vec{r}_3) \quad (50)$$

pour calculer  $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{N}]$ , on décompose les opérateurs dans les commutateurs comme suit

$[AB, C] = A[B, C] - [C, A]B$  si  $A, B, C$  sont les opérateurs de bosons,

$[AB, C] = A[B, C]_{+} - [A, C]_{+}B$  si  $A, B, C$  sont les opérateurs de fermions.

Pour  $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{N}]$ , il faut décomposer plusieurs fois pour arriver au résultat. Par exemple, pour le terme cinétique de  $\hat{\mathcal{H}}$ , posons

$A = \hat{\Psi}_{\sigma}^{\dagger}(\vec{r})$ ,  $B = H(\vec{r}) \hat{\Psi}_{\sigma}(\vec{r})$ ,  $C = \hat{\Psi}_{\beta}^{\dagger}(\vec{r}_3)$ ,  $D = \hat{\Psi}_{\beta}(\vec{r}_3)$ , on a pour les bosons

$$[AB, CD] = A[B, CD] - [CD, A]B = A[B, C]D - AC[D, B] - C[D, A]B + [A, C]DB$$

Il ne reste plus qu'appliquer les relations de commutation entre  $A, B, C$ , et  $D$  pour arriver au résultat demandé.

**Exercice 13.2** Montrer que  $\hat{\Psi}(\vec{r})\hat{N} = (\hat{N} + 1)\hat{\Psi}(\vec{r})$  pour les cas de bosons et fermions.

**Réponse:**

$$\hat{\Psi}(\vec{r})\hat{N} = \hat{\Psi}(\vec{r}) \int d\vec{r}' \hat{\Psi}^{\dagger}(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}') \quad (51)$$

$$= \int d\vec{r}' [\delta(\vec{r} - \vec{r}') \pm \hat{\Psi}^{\dagger}(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r})] \hat{\Psi}(\vec{r}') \quad (52)$$

$$= \hat{\Psi}(\vec{r}) \pm \int d\vec{r}' \hat{\Psi}^{\dagger}(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}) \hat{\Psi}(\vec{r}') \quad (53)$$

$$= \hat{\Psi}(\vec{r}) + \int d\vec{r}' \hat{\Psi}^{\dagger}(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}') \hat{\Psi}(\vec{r}) \quad (54)$$

$$= (1 + \hat{N})\hat{\Psi}(\vec{r}) \quad (55)$$

où le signe + correspond au cas de bosons et le signe - au cas de fermions.

**Exercice 13.3** Montrer que  $\hat{\Psi}^{\dagger}(\vec{r})|\text{vide}\rangle$  est un état où il y a une particule localisée à  $\vec{r}$ .

**Réponse:** Soit l'opérateur densité  $\rho(\vec{r}) = \hat{\Psi}^+(\vec{r})\hat{\Psi}(\vec{r})$ . On a

$$\rho(\vec{r})\hat{\Psi}^+(\vec{r}')|\text{vide}\rangle = \int d\vec{r}''\hat{\Psi}^+(\vec{r}'')\hat{\Psi}(\vec{r}'')\delta(\vec{r}-\vec{r}'')\hat{\Psi}^+(\vec{r}')|\text{vide}\rangle \quad (56)$$

$$= \int d\vec{r}''\hat{\Psi}^+(\vec{r}'')\delta(\vec{r}-\vec{r}'')[\delta(\vec{r}''-\vec{r}')-\hat{\Psi}^+(\vec{r}')\hat{\Psi}(\vec{r}'')]| \text{vide}\rangle \quad (57)$$

$$= \int d\vec{r}''\hat{\Psi}^+(\vec{r}'')\delta(\vec{r}-\vec{r}'')\delta(\vec{r}''-\vec{r}')|\text{vide}\rangle \quad (58)$$

$$= \delta(\vec{r}-\vec{r}')\hat{\Psi}^+(\vec{r}')|\text{vide}\rangle \quad (59)$$

La dernière ligne signifie que  $\delta(\vec{r}-\vec{r}')$  est la valeur propre de  $\rho(\vec{r})$  avec le vecteur propre  $\hat{\Psi}^+(\vec{r}')|\text{vide}\rangle$ . Il y a donc une particule à  $\vec{r}$  dans l'état  $\hat{\Psi}^+(\vec{r}')|\text{vide}\rangle$ .

**Exercice 13.4** En utilisant l'équation du mouvement  $i\hbar\frac{d\hat{\Psi}(\vec{r})}{dt} = -[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\Psi}(\vec{r})]$  où  $\hat{\mathcal{H}}$  est l'hamiltonien de la seconde quantification d'un système de fermions, montrer qu'on peut obtenir l'équation de Hartree-Fock par la première approximation du second membre de cette équation (linéarisation).

**Guide:** En utilisant la décomposition des chaînes d'opérateurs montrée dans l'exercice 13.1 pour calculer le commutateur  $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\Psi}(\vec{r})]$ , on obtient

$$i\hbar\frac{d\hat{\Psi}(\vec{r}, t)}{dt} = -\frac{p^2}{2m}\hat{\Psi}(\vec{r}, t) + \int d\vec{r}'\hat{\Psi}^+(\vec{r}', t)V(\vec{r}, \vec{r}')\hat{\Psi}(\vec{r}', t)\hat{\Psi}(\vec{r}, t) \quad (60)$$

où  $\hat{\Psi}(\vec{r}, t)$  et  $\hat{\Psi}^+(\vec{r}, t)$  sont les représentations d'interaction de (13.45) et (13.46). On a

$$\hat{\Psi}(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}, \sigma} b_{\vec{k}, \sigma} e^{-i\omega_{\vec{k}} t} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \quad (61)$$

$$\hat{\Psi}^+(\vec{r}, t) = \sum_{\vec{k}, \sigma} b_{\vec{k}, \sigma}^{\dagger} e^{i\omega_{\vec{k}} t} \varphi_{\vec{k}}^{\dagger}(\vec{r}) \quad (62)$$

On remplace ces expressions dans (60), on obtient

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}, \sigma} \hbar\omega_{\vec{k}} b_{\vec{k}, \sigma} e^{-i\omega_{\vec{k}} t} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) &= \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} b_{\vec{k}, \sigma} e^{-i\omega_{\vec{k}} t} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ &+ \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{k}'', \sigma, \sigma', \sigma''} \int d\vec{r}' \varphi_{\vec{k}'}^{\dagger}(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_{\vec{k}''}(\vec{r}') e^{i(\omega_{\vec{k}'} - \omega_{\vec{k}''})t} b_{\vec{k}', \sigma'}^{\dagger} b_{\vec{k}'', \sigma''} b_{\vec{k}, \sigma} e^{-i\omega_{\vec{k}} t} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (63)$$

Dans la première approximation du second membre de l'équation (60), on utilise le découplage suivant dit 'random-phase approximation' (RPA) pour les opérateurs de fermions

$$b_{\vec{k}', \sigma'}^{\dagger} b_{\vec{k}'', \sigma''} b_{\vec{k}, \sigma} \simeq \langle b_{\vec{k}', \sigma'}^{\dagger} b_{\vec{k}'', \sigma''} \rangle b_{\vec{k}, \sigma} - \langle b_{\vec{k}', \sigma'}^{\dagger} b_{\vec{k}, \sigma} \rangle b_{\vec{k}'', \sigma''} \quad (64)$$

où le signe négatif du second terme résulte de la permutation de  $b_{\vec{k}'', \sigma''}$  et  $b_{\vec{k}, \sigma}$ , et  $\langle \dots \rangle$  est la valeur moyenne. Il est à souligner que ce découplage tient compte de l'hypothèse que seuls les termes du type  $\langle b_{\vec{k}', \sigma'}^{\dagger} b_{\vec{k}'', \sigma''} \rangle$  sont non nuls. Dans l'état fondamental,  $\langle b_{\vec{k}', \sigma'}^{\dagger} b_{\vec{k}'', \sigma''} \rangle = n_{\vec{k}', \sigma'} \delta(\vec{k}', \vec{k}'') \delta(\sigma', \sigma'') \Theta(k_F - k')$  etc (voir chapitre 12).

L'équation (63) devient

$$\begin{aligned} \sum_{\vec{k}, \sigma} \hbar\omega_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) b_{\vec{k}, \sigma} e^{-i\omega_{\vec{k}} t} &= \sum_{\vec{k}, \sigma} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} b_{\vec{k}, \sigma} e^{-i\omega_{\vec{k}} t} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) \\ &+ \sum_{\vec{k}, \sigma} \sum_{\vec{k}', \sigma'} \int d\vec{r}' \varphi_{\vec{k}'}^{\dagger}(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}') n_{\vec{k}', \sigma'} \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) b_{\vec{k}, \sigma} e^{-i\omega_{\vec{k}} t} \\ &- \sum_{\vec{k}'', \sigma''} \sum_{\vec{k}', \sigma'} \delta(\sigma', \sigma'') \int d\vec{r}' \varphi_{\vec{k}'}^{\dagger}(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_{\vec{k}}(\vec{r}') n_{\vec{k}', \sigma'} \varphi_{\vec{k}''}(\vec{r}') b_{\vec{k}'', \sigma''} e^{-i\omega_{\vec{k}''} t} \end{aligned} \quad (65)$$

On change les variables muettes  $(\vec{k}'', \sigma'')$  en  $(\vec{k}, \sigma)$  dans le dernier terme, on enlève ensuite les sommes  $\sum_{\vec{k}, \sigma}$  de deux membres, puis on simplifie  $b_{\vec{k}, \sigma} e^{-i\omega_{\vec{k}} t}$ , on obtient

$$\begin{aligned} \hbar\omega_{\vec{k}} \varphi_{\vec{k}, \sigma}(\vec{r}) &= \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \varphi_{\vec{k}, \sigma}(\vec{r}) + \sum_{\vec{k}', \sigma'} \int d\vec{r}' \varphi_{\vec{k}', \sigma'}^+(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_{\vec{k}', \sigma'}(\vec{r}') \varphi_{\vec{k}, \sigma}(\vec{r}) \\ &\quad - \sum_{\vec{k}', \sigma'} \delta(\sigma', \sigma) \int d\vec{r}' \varphi_{\vec{k}', \sigma'}^+(\vec{r}') V(\vec{r}, \vec{r}') \varphi_{\vec{k}, \sigma}(\vec{r}') \varphi_{\vec{k}', \sigma'}(\vec{r}) \end{aligned} \quad (66)$$

où on a remplacé  $n_{\vec{k}', \sigma'} = 1$  (état fondamental) et où on a reporté les indices de spin  $\sigma, \sigma'$  des états  $\vec{k}$  et  $\vec{k}'$  sur les indices des  $\varphi$ . Cette équation est l'équation de Hartree-Fock [voir Eq. (12.25)].

**Exercice 13.5** Montrer que (13.75) diverge à  $q = 0$ .

**Exercice 13.6 Méthode de la seconde quantification pour phonons dans un gaz de bosons condensés**

On considère un gaz de  $N$  bosons en faible interaction, à très basse température au-dessous de la température de Bose (modèle simple pour un gaz de  $He^4$ ). On montre dans ce problème par la méthode de diagonalisation de l'hamiltonien dans la 2e quantification que les phonons peuvent être excités dans ce système. Pour cela, on considère l'hamiltonien suivant:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \\ &\quad + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}'_1, \vec{k}'_2} V(\vec{k}_1 - \vec{k}'_1) a_{\vec{k}_1}^+ a_{-\vec{k}_2}^+ a_{-\vec{k}'_2} a_{\vec{k}'_1} \delta(\vec{k}_1 + \vec{k}_2 - \vec{k}'_1 - \vec{k}'_2) \end{aligned} \quad (67)$$

où  $V(\vec{k}_1 - \vec{k}'_1)$  est la transformée de Fourier de l'interaction entre les bosons,  $\epsilon_{\vec{k}}$  est l'énergie cinétique de l'état  $\vec{k}$ ,  $a$  et  $a^+$  sont les opérateurs annihilation et création. A très basse température  $T$  au-dessous de la température de condensation, un petit nombre  $n$  de particules se trouvent dans un état excité ( $|\vec{k}|$  différent de zéro) et le nombre restant  $N_0$  dans l'état fondamental ( $k = 0$ ). On écrit donc  $N = n + N_0$  avec  $n \ll N$ .

a) Montrer qu'on peut écrire

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \\ &\quad + \frac{1}{2} N_0^2 V(0) + N_0 V(0) \sum_{\vec{k} \neq 0} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + N_0 \sum_{\vec{k} \neq 0} V(\vec{k}) a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \\ &\quad + \frac{1}{2} N_0 \sum_{\vec{k} \neq 0} V(\vec{k}) (a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+) + \text{termes d'ordres supérieurs} \end{aligned} \quad (68)$$

où  $V(\vec{k}) = V(-\vec{k})$  a été utilisé.

Expliquer le sens de chaque terme de (68)

b) Montrer qu'on peut réécrire (68) comme

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2} N^2 V(0) + \frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq 0} H(\vec{k}) \quad (69)$$

où

$$H(\vec{k}) = [\epsilon_{\vec{k}} + NV(\vec{k})] (a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + a_{-\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}) + NV(\vec{k}) (a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+)$$

en négligeant les termes d'ordres supérieurs.

On utilise la transformation suivante pour  $H(\vec{k})$

$$c_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} a_{\vec{k}} - v_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}^+$$

$$c_{\vec{k}}^{\dagger} = u_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^{\dagger} - v_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}$$

où  $u_{\vec{k}}$  et  $v_{\vec{k}}$  sont réels et  $u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2 = 1$ .

c) Montrer que les opérateurs  $c_{\vec{k}}^{\dagger}$  et  $c_{\vec{k}}$  obéissent aux relations de commutation.

d) Déterminer  $u_{\vec{k}}$  et  $v_{\vec{k}}$  pour que (69) soit 'diagonal', c'est-à-dire

$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}} \lambda_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} + \text{constante}$  où le spectre d'énergies de phonon  $\lambda_{\vec{k}}$  est donné par

$$\lambda_{\vec{k}}^2 = [\epsilon_{\vec{k}} + NV(\vec{k})]^2 - (NV(\vec{k}))^2$$

e) Déterminer la vitesse du son à partir de la dernière équation en supposant que  $V(0) > 0$  (interaction répulsive).

f) Quelle est l'énergie de phonon pour de grands  $k$  ?

**Réponse:**

a)

### Exercice 13.7 Théorie de Bardeen-Cooper-Schrieffer de la supraconductivité

On considère un gaz de  $N$  électrons avec l'hamiltonien réduit suivant pour le régime supraconducteur:

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} (c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{\vec{k}} + c_{-\vec{k}}^{\dagger} c_{-\vec{k}}) - V \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} c_{\vec{k}}^{\dagger} c_{-\vec{k}'}^{\dagger} c_{-\vec{k}} c_{\vec{k}} \quad (70)$$

où  $V$  est l'interaction attractive entre les électrons occupant des états au voisinage du niveau de Fermi (cette interaction attractive est due à un couplage avec les phonons),  $\epsilon_{\vec{k}}$  est l'énergie cinétique de l'état  $\vec{k}$  ou  $-\vec{k}$ ,  $c$  et  $c^{\dagger}$  sont les opérateurs annihilation et création. Pour simplifier l'écriture de (70), les spins sont implicitement supposés : l'état  $\vec{k}$  a le spin  $\uparrow$  et l'état  $-\vec{k}$  le spin  $\downarrow$ .

a) Equation du mouvement : Montrer que

$$i\dot{c}_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}} - c_{-\vec{k}}^{\dagger} V \sum_{\vec{k}'} c_{-\vec{k}'} c_{\vec{k}'} \quad (71)$$

$$i\dot{c}_{-\vec{k}}^{\dagger} = -\epsilon_{\vec{k}} c_{-\vec{k}}^{\dagger} - c_{\vec{k}} V \sum_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'}^{\dagger} c_{-\vec{k}'}^{\dagger} \quad (72)$$

( $\hbar = 1$ ).

b) Pour linéariser les équations ci-dessus on remplace les sommes par leurs valeurs moyennes

$$\Delta_{\vec{k}} = V \sum_{\vec{k}'} \langle \phi_N^0 | c_{-\vec{k}'} c_{\vec{k}'} | \phi_{N+2}^0 \rangle$$

et

$\Delta_{\vec{k}}^* = V \sum_{\vec{k}'} \langle \phi_N^0 | c_{\vec{k}'}^{\dagger} c_{-\vec{k}'}^{\dagger} | \phi_{N-2}^0 \rangle$  où  $|\phi_{N+2}^0 \rangle$  est l'état fondamental ayant  $N+2$  particules etc. Montrer alors qu'une solution de la forme  $\exp(-i\omega_{\vec{k}} t)$  conduit à

$$\omega_{\vec{k}} = (\epsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta^2)^{1/2} \quad (73)$$

où  $\Delta^2 = \Delta_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}}^*$  ( $\Delta$  est le 'gap' dans le spectre d'excitations).

c) On utilise la transformation suivante

$$a_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} c_{\vec{k}} - v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}}^{\dagger} \quad (74)$$

$$a_{\vec{k}}^{\dagger} = u_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^{\dagger} - v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}} \quad (75)$$

où  $u_{\vec{k}} = u_{-\vec{k}}$  et  $v_{\vec{k}} = -v_{-\vec{k}}$  (réels) et  $u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2 = 1$ .

• Montrer que les opérateurs  $a_{\vec{k}}$  et  $a_{\vec{k}}^{\dagger}$  obéissent aux relations d'anticommutation.

• Montrer que l'équation (71) avec la somme remplacée par  $\Delta_{\vec{k}}$  conduit à

$$\omega_{\vec{k}}^{-1} u_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}} u_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \quad (76)$$

Mettant cette relation au carré et utilisant (73), montrer que

$$\tan \theta_{\vec{k}} = \Delta_{\vec{k}} / \epsilon_{\vec{k}}$$

où on a posé  $u_{\vec{k}} = \cos(\theta_{\vec{k}}/2)$  et  $v_{\vec{k}} = \sin(\theta_{\vec{k}}/2)$ .

d) Fonction d'onde de l'état fondamental :

- Montrer que l'état fondamental du régime supraconducteur est décrit par

$$\phi^0 = \prod_{\vec{k}} (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^+ c_{-\vec{k}}^+) | \text{vide} \rangle$$

- Montrer que  $\phi^0$  est normalisé.
- Calculer  $\langle \phi^0 | c_{\vec{k}'}^+ c_{\vec{k}'} | \phi^0 \rangle$  et  $\langle \phi^0 | c_{\vec{k}'}^+ c_{-\vec{k}'}^+ c_{-\vec{k}''} c_{\vec{k}''} | \phi^0 \rangle$ . En déduire que l'énergie de l'état fondamental du régime supraconducteur est

$$E_g = - \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \cos \theta_{\vec{k}} - (\Delta^2/V).$$

**Réponse:**

a) On utilise  $i \frac{dc_{\vec{k}}}{dt} = [c_{\vec{k}}, \mathcal{H}]$  avec la décomposition des chaînes d'opérateurs montrée dans l'exercice 13.1, on arrive aux deux équations demandées.

b) On remplace les sommes par  $\Delta_{\vec{k}}$  et  $\Delta_{\vec{k}}^*$  on obtient deux équations couplées. C'est une sorte de l'approximation de Hartree-Fock pour linéariser l'équation du mouvement (voir l'exercice 13.4). Une solution de la forme  $c_{\vec{k}} \propto \exp(-i\omega_{\vec{k}}t)$  conduit à

$$\omega_{\vec{k}} c_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}} c_{\vec{k}} - c_{-\vec{k}}^+ \Delta_{\vec{k}} \quad (77)$$

$$\omega_{\vec{k}} c_{-\vec{k}}^+ = -\epsilon_{\vec{k}} c_{-\vec{k}}^+ - c_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}}^* \quad (78)$$

Une solution non triviale impose (l'équation séculaire)

$$\omega_{\vec{k}} = (\epsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta^2)^{1/2} \quad (79)$$

b)

- On a

$$\begin{aligned} [a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}'}^+]_+ &= [u_{\vec{k}} c_{\vec{k}} - v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}}^+, u_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'}^+ - v_{\vec{k}'} c_{-\vec{k}'}^+]_+ \\ &= u_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} [c_{\vec{k}}, c_{\vec{k}'}^+]_+ + v_{\vec{k}} v_{\vec{k}'} [c_{-\vec{k}}, c_{-\vec{k}'}^+]_+ \\ &= u_{\vec{k}}^2 \delta(\vec{k}, \vec{k}') + v_{\vec{k}}^2 \delta(\vec{k}, \vec{k}') = (u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) \delta(\vec{k}, \vec{k}') = \delta(\vec{k}, \vec{k}') \end{aligned} \quad (80)$$

Les autres relations d'anticommutation s'obtiennent de la même manière.

- De (74)-(75), on a

$$c_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}^+ \quad (81)$$

$$c_{\vec{k}}^+ = u_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ + v_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} \quad (82)$$

$$c_{-\vec{k}} = u_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} - v_{\vec{k}} a_{\vec{k}}^+ \quad (83)$$

$$c_{-\vec{k}}^+ = u_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}^+ - v_{\vec{k}} a_{\vec{k}} \quad (84)$$

On remplace ces relations dans (77), on obtient

$$\omega_{\vec{k}} u_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}} u_{\vec{k}} + \Delta_{\vec{k}} v_{\vec{k}} \quad (85)$$

Mettant cette relation au carré, on obtient

$$\omega_{\vec{k}}^2 u_{\vec{k}}^2 = \epsilon_{\vec{k}}^2 u_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2 v_{\vec{k}}^2 + 2\epsilon_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} = (\epsilon_{\vec{k}}^2 + \Delta_{\vec{k}}^2) u_{\vec{k}}^2$$

où on a utilisé (73) pour la dernière égalité. On en déduit

$$\Delta_{\vec{k}}^2 (u_{\vec{k}}^2 - v_{\vec{k}}^2) = 2\epsilon_{\vec{k}} \Delta_{\vec{k}} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}}.$$

Posons  $u_{\vec{k}} = \cos(\theta_{\vec{k}}/2)$  et  $v_{\vec{k}} = \sin(\theta_{\vec{k}}/2)$ , on a

$$\Delta_{\vec{k}} \cos \theta_{\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}} \sin \theta_{\vec{k}} \text{ d'où}$$

$$\tan \theta_{\vec{k}} = \Delta_{\vec{k}} / \epsilon_{\vec{k}}$$

d)

- On montre que  $\phi^0 = \prod_{\vec{k}} (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^+ c_{-\vec{k}}^+) |vide\rangle$  décrit l'état fondamental: L'état fondamental du régime supraconducteur contient des paires dites de Cooper  $(\vec{k}, -\vec{k})$  au voisinage du niveau de Fermi. Si on considère seulement le sous-espace contenant ces états, on voit que  $\phi^0$  décrit bien ces états grâce aux opérateurs  $c_{\vec{k}}^+$  et  $c_{-\vec{k}}^+$  qui agissent sur  $|vide\rangle$ . Les quantités  $u$  et  $v$  sont pour rendre ces fonctions normalisées. Leur choix respecte le caractère fermionique des opérateurs  $c_{\vec{k}}^+$  et  $c_{-\vec{k}}^+$  comme on le verra ci-après.

- $\langle \phi^0 | \phi^0 \rangle = \prod_{\vec{k}} \langle vide | (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} c_{-\vec{k}}^- c_{\vec{k}}^-) (u_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^+ c_{-\vec{k}}^+) | vide \rangle = \prod_{\vec{k}} (u_{\vec{k}}^2 + v_{\vec{k}}^2) \langle vide | vide \rangle = 1$

car  $\langle vide | c_{-\vec{k}}^- c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}}^+ c_{-\vec{k}}^- | vide \rangle = (1 - n_{\vec{k}})(1 - n_{-\vec{k}}) \langle vide | vide \rangle = \langle vide | vide \rangle$  ( voir Eq. 13.40, ici  $n_{\vec{k}} = n_{-\vec{k}} = 0$  dans le vide),  $\langle vide | c_{\vec{k}}^- c_{-\vec{k}}^- | vide \rangle = 0$ , et  $\langle vide | c_{\vec{k}}^+ c_{-\vec{k}}^+ | vide \rangle = 0$ .

•

$$\langle \phi^0 | c_{\vec{k}'}^+ c_{\vec{k}'} | \phi^0 \rangle = \langle vide | (u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{-\vec{k}'}^- c_{\vec{k}'}^-) c_{\vec{k}'}^+ c_{\vec{k}'} (u_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'}^+ c_{-\vec{k}'}^+) | vide \rangle \prod_{\vec{k} \neq \vec{k}'} \langle \phi^0 | \phi^0 \rangle \quad (86)$$

$$= \langle vide | [u_{\vec{k}'}^2 c_{\vec{k}'}^+ c_{\vec{k}'} + v_{\vec{k}'}^2 c_{-\vec{k}'}^- c_{\vec{k}'}^- c_{\vec{k}'}^+ c_{\vec{k}'} + u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'}^+ c_{\vec{k}'} c_{\vec{k}'}^+ c_{-\vec{k}'}^+ + \dots] | vide \rangle \quad (87)$$

$$= [v_{\vec{k}'}^2] \quad (88)$$

les autres termes dans [...] étant 0. De même manière, on obtient

$$\langle \phi^0 | c_{\vec{k}'}^+ c_{-\vec{k}'}^+ c_{-\vec{k}''}^- c_{\vec{k}''}^- | \phi^0 \rangle = u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} u_{\vec{k}''} v_{\vec{k}''} \quad (89)$$

L'énergie du fondamental est donc

$$E_g = \langle \phi^0 | \mathcal{H} | \phi^0 \rangle = 2 \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} v_{\vec{k}}^2 - V \sum_{\vec{k} \neq \vec{k}'} u_{\vec{k}} v_{\vec{k}} u_{\vec{k}'} v_{\vec{k}'} \quad (90)$$

$$= \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} (1 - \cos \theta_{\vec{k}}) - \frac{V}{4} \sum_{\vec{k} \neq \vec{k}'} \sin \theta_{\vec{k}} \sin \theta_{\vec{k}'} \quad (91)$$

où le facteur 2 dans la première égalité résulte de la somme sur le spin et où on a utilisé les définitions de  $u_{\vec{k}}$  et  $v_{\vec{k}}$ . On en déduit,

$$E_g = - \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \cos \theta_{\vec{k}} - (\Delta^2/V) \quad (92)$$

où on a utilisé les faits suivants: 1)  $\sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} = 0$  car  $\epsilon_{\vec{k}}$  est symétrique par rapport au niveau de Fermi, positif au-dessus, négatif au-dessous de ce niveau, 2) On peut montrer que  $\sum_{\vec{k}} \sin \theta_{\vec{k}} = 2\Delta/V$ .

**Exercice 13.8** On considère l'Hamiltonien suivant représentant l'interaction entre les magnons et les phonons:

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}} \left[ \omega_{\vec{k}}^m a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + \omega_{\vec{k}}^p b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} + V_{\vec{k}} (a_{\vec{k}}^- b_{\vec{k}}^+ + a_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}^-) \right] \quad (93)$$

où  $V_{\vec{k}}$  est la constante de couplage,  $\omega_{\vec{k}}^m$  et  $\omega_{\vec{k}}^p$  sont les pulsations propres de magnon et de phonon respectivement,  $a$  et  $a^+$  sont les opérateurs annihilation et création de magnon, tandis que  $b$  et  $b^+$  sont les opérateurs annihilation et création de phonon.

a) On utilise la transformation suivante

$$\begin{aligned} a_{\vec{k}} &= \cos \theta_{\vec{k}} c_{\vec{k}} + \sin \theta_{\vec{k}} d_{\vec{k}} \\ b_{\vec{k}} &= \cos \theta_{\vec{k}} d_{\vec{k}} - \sin \theta_{\vec{k}} c_{\vec{k}} \end{aligned}$$

où  $\theta_{\vec{k}}$  est réel. Montrer que les opérateurs  $c$ ,  $c^+$  et  $d$ ,  $d^+$  obéissent aux relations de commutations.

b) Montrer que  $\mathcal{H}$  a la forme diagonale en  $c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}}$  et  $d_{\vec{k}}^+ d_{\vec{k}}$  si

$$\tan 2\theta_{\vec{k}} = 2V_{\vec{k}} / (\omega_{\vec{k}}^p - \omega_{\vec{k}}^m)$$

En déduire que lorsque  $\omega_{\vec{k}}^p = \omega_{\vec{k}}^m = \omega$  ('cross-over'),  $\mathcal{H}$  s'écrit

$$\mathcal{H} = \sum_{\vec{k}} \left[ (\omega - V_{\vec{k}}) c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} + (\omega + V_{\vec{k}}) d_{\vec{k}}^+ d_{\vec{k}} \right]$$

Commenter.

## VIII. EXERCICES ET PROBLÈMES DU CHAPITRE 14: SIMULATION MONTE CARLO ET TRANSITION DE PHASE

**Exercice 14.1** Etudier par le groupe de renormalisation le cas d'une chaîne de spins d'Ising avec une interaction ferromagnétique entre les premiers voisins. Montrer qu'il n'y a pas de transition de phase ordre-désordre à température non nulle.

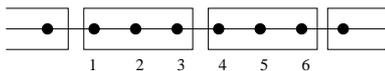
**Réponse:** On considère l'hamiltonien suivant

$$\mathcal{H} = -K \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1} \quad (94)$$

où  $K = J/k_B T$ ,  $J$  étant l'interaction ferromagnétique entre premiers voisins. La fonction de partition est

$$Z = Tr \exp(-\mathcal{H}) \quad (95)$$

Pour étudier cette chaîne de spins, la méthode la plus simple est la décimation. On divise le système en blocs de trois spins, comme le montre la figure 2.



1

FIG. 2: Blocs de 3 spins d'une chaîne de spins d'Ising pour décimation.

On écrit pour deux blocs indiqués les facteurs correspondants dans  $Z$

$$\exp(K\sigma_2\sigma_3) \exp(K\sigma_3\sigma_4) \exp(K\sigma_4\sigma_5) \quad (96)$$

Utilisant l'égalité suivante (qui s'applique parce que  $\sigma_n = \pm 1$ )

$$\exp(K\sigma_2\sigma_3) = \cosh K(1 + x\sigma_2\sigma_3) \text{ où } x = \tanh K,$$

on réécrit (96) comme

$$\cosh^3 K(1 + x\sigma_2\sigma_3)(1 + x\sigma_3\sigma_4)(1 + x\sigma_4\sigma_5) \quad (97)$$

Développant ce produit et faisant la somme sur  $\sigma_3 = \pm 1$  et  $\sigma_4 = \pm 1$  (décimation des spins à la frontière des blocs), on voit que les termes impairs de ces variables sont nuls. Il reste

$$2^2 \cosh^3 K(1 + x^3\sigma_2\sigma_5)$$

On peut poser

$$2^2 \cosh^3 K(1 + x^3\sigma_2\sigma_5) = \exp[K'\sigma_2\sigma_5 + C] \quad (98)$$

où  $C$  est une constante. A part la constante  $C$ , le second membre a la même structure que l'hamiltonien initial avec la nouvelle interaction  $K'$  entre les spins restants  $\sigma_2$  et  $\sigma_5$ . Pour calculer  $K'$  on écrit

$$\exp[K'\sigma_2\sigma_5 + C] = \exp(C) \exp(K'\sigma_2\sigma_5) = \exp(C) \cosh K'(1 + x'\sigma_2\sigma_5)$$

En identifiant ceci avec le premier membre de (98), on a

$$x' = \tanh K' = x^3 \text{ ou } K' = \tanh^{-1}[\tanh^3 K]$$

et

$$\exp(C) \cosh K' = 2^2 \cosh^3 K \quad (99)$$

$$\exp(C) = \frac{2^2 \cosh^3 K}{\cosh K'} \quad (100)$$

$$C = -\ln\left[\frac{\cosh^3 K}{\cosh K'}\right] - 2\ln 2 \quad (101)$$

On renumérote les spins après la première décimation comme suit:  $\sigma'_1 = \sigma_2, \sigma'_2 = \sigma_5, \dots$  (tous les trois anciens spins)

Le nouvel hamiltonien est donc

$$\mathcal{H}' = -K' \sum_n \sigma'_n \sigma'_{n+1} - C \frac{N}{3} \quad (102)$$

où  $N/3$  est le nombre de blocs de 3 spins ( $N$  le nombre initial de spins).

L'équation du groupe de renormalisation est donc

$$K' = \tanh^{-1}[\tanh^3 K] \quad (103)$$

On voit que  $K' = K$  si  $K = 0$  et  $K = \infty$ .

A haute  $T$ ,  $K \rightarrow 0^+$ ,  $\tanh^3 K < 1$ , d'où  $K' \rightarrow 0$  après décimations successives. Le point fixe à  $T = \infty$  ( $K = 0$ ) est donc stable.

A basse  $T$ ,  $K \rightarrow \infty$ ,  $\tanh^3 K \rightarrow 1^-$ , d'où  $K' \rightarrow 0$  après décimations successives ('run away'). Le point fixe à  $T = 0$  ( $K = \infty$ ) est donc instable.

Le diagramme de flot est montré dans la figure 3.

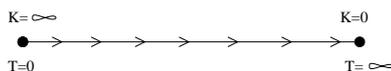


FIG. 3: Diagramme de flot pour une chaîne de spins d'Ising.

A n'importe quel point entre  $K = 0$  et  $K = \infty$ , les itérations successives amènent toujours vers  $K = 0$ . La nature de ces points est la même que celle à  $K = 0$  ( $T = \infty$ ), c'est-à-dire une phase paramagnétique.

**Exercice 14.2** Etudier par la méthode de la matrice de transfert la chaîne de spins d'Ising de l'exercice précédent avec les conditions aux limites périodiques.

**Réponse:** Soit  $N$  le nombre total de spins. L'hamiltonien est donné par

$$\mathcal{H}_0 = -J \sum_{n=1}^{N-1} \sigma_n \sigma_{n+1} - J \sigma_N \sigma_1 \quad (104)$$

le dernier terme exprime les conditions aux limites périodiques. Le spin  $\sigma_i = \pm 1$ . On peut définir les nouvelles variables  $\alpha_n = \sigma_n \sigma_{n+1}$ .  $\alpha_n$  prend les valeurs  $\pm 1$  comme  $\sigma_i$ . On réécrit  $\mathcal{H}$  comme

$$\mathcal{H}_0 = -J \sum_{n=1}^{N-1} \alpha_n - J \alpha_N \quad (105)$$

La fonction de partition est

$$Z = \text{Tr} \exp\left[\beta J \sum_{n=1}^N \alpha_n\right] = \text{Tr} \Pi_{n=1}^N \exp(\beta J \alpha_n) \quad (106)$$

$$= \Pi_{n=1}^N [\exp(\beta J) + \exp(-\beta J)] = [2 \cosh \beta J]^N \quad (107)$$

L'énergie moyenne est calculée par  $E = -\partial \ln Z / \partial \beta$ , et la capacité calorifique par  $C_v = dE/dT = Nk_B \left[ \frac{k_B T}{J} \cosh \frac{J}{k_B T} \right]^{-2}$  (voir Eq.(8.32) et la figure 8.1 du livre, résultat mathématiquement analogue).

En présence d'un champ magnétique  $H$ , le calcul se fait autrement. L'hamiltonien est donné par

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 - H \sum_{n=1}^N \sigma_n \quad (108)$$

avec  $\mathcal{H}_0$  donné par (104). La fonction de partition peut être mis sous la forme

$$Z = \prod_{n=1}^N V_n$$

où

$$V_n = \exp[\beta(J\sigma_n\sigma_{n+1} + H\sigma_n)] \quad (109)$$

$$V_N = \exp[\beta(J\sigma_N\sigma_1 + H\sigma_N)] \quad (110)$$

Les éléments de la matrice  $V_n$ , de dimension  $2 \times 2$ , dépendent de  $\sigma_n$  et  $\sigma_{n+1}$ . On a

$$V_n(1, 1) = \exp[\beta(J + H)] \quad (\sigma_n = 1, \sigma_{n+1} = 1)$$

$$V_n(1, 2) = \exp[\beta(-J + H)] \quad (\sigma_n = 1, \sigma_{n+1} = -1)$$

$$V_n(2, 1) = \exp[\beta(-J - H)] \quad (\sigma_n = -1, \sigma_{n+1} = 1)$$

$$V_n(2, 2) = \exp[\beta(J - H)] \quad (\sigma_n = -1, \sigma_{n+1} = -1).$$

La matrice  $V_n$  est appelée 'matrice de transfert'. Remarquons que tous les  $V_n$  ont les mêmes éléments. On a donc  $Z = \text{Tr} V^N$ . Soient  $z_1$  et  $z_2$  les valeurs propres de  $V$  obtenues en diagonalisant la matrice  $V$ :

$$z_1 = \exp(\beta J) \cosh(\beta H) + \sqrt{\exp(2\beta J) \cosh^2(\beta H) - 2 \sinh(2\beta J)} \quad (111)$$

$$z_2 = \exp(\beta J) \cosh(\beta H) - \sqrt{\exp(2\beta J) \cosh^2(\beta H) - 2 \sinh(2\beta J)} \quad (112)$$

On obtient

$$Z = z_1^N + z_2^N = z_1^N (1 + \exp[-N \ln(z_1/z_2)]) \quad (113)$$

où  $z_1$  est la plus grande valeur propre. Quand  $N \rightarrow \infty$ ,  $Z = z_1^N$ .

La susceptibilité est calculée par  $\chi = (dM/dH)_{H \rightarrow 0}$  où  $M = -\partial F / \partial H$  avec  $F = -k_B T \ln Z$ . On obtient

$$\chi \simeq \frac{1}{T} \exp[2J/k_B T] \quad (114)$$

Ce résultat montre qu'il n'y a pas de transition de phase en 1D (absence d'anomalie de  $\chi$ , voir figure 4).

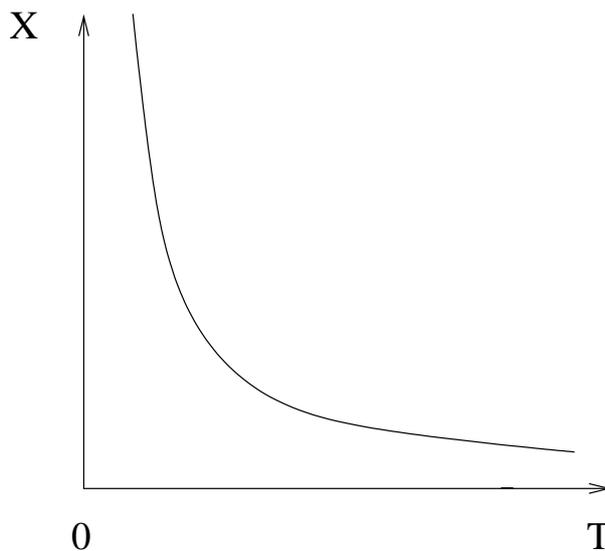


FIG. 4:  $\chi$  en fonction de  $T$ .

**Exercice 14.3** Définir le paramètre d'ordre d'un réseau antiferromagnétique de spins d'Ising.

**Réponse:** On prend le cas d'une chaîne de  $N$  spins comme exemple. Le paramètre d'ordre est défini par  $M_s = \frac{1}{N} \sum_i (-1)^i S_i$  (aimantation alternée ou 'staggered magnetization' en anglais).

**Exercice 14.4** Le modèle de Potts à  $q$  états est donné par l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = -J \sum_{(i,j)} \delta_{\sigma_i \sigma_j}$$

où  $\sigma_i$  est le 'spin' au site  $i$  avec  $q$  valeurs possibles ( $\sigma_i = 1, 2, \dots, q$ ) et la somme s'effectue sur les paires  $(i, j)$ .

- Définir le paramètre d'ordre de ce modèle.
- Décrire l'état fondamental et préciser sa dégénérescence dans le cas où  $J > 0$ .
- Si  $J < 0$ , quel est l'état fondamental du réseau carré pour  $q = 2$  et  $q = 3$ ?
- Montrer qu'à une constante près le modèle de Potts est équivalent au modèle d'Ising pour  $q = 2$ .

**Réponse:**

- Paramètre d'ordre du modèle de Potts:

$$p = \frac{q^{\frac{\max(M_1, M_2, \dots, M_q)}{N}} - 1}{q - 1} \quad (115)$$

où  $M_i$  est le nombre de spins dans l'état  $i$  ( $i = 1, \dots, q$ ) et  $N$ , le nombre total de spins du système. Dans l'état ordonné (un des  $M_i$  est égal à  $N$ , les autres sont nuls)  $p = 1$ , dans l'état désordonné, tous les  $M_i$  sont égaux ( $=N/q$ )  $p = 0$ .

**Exercice 14.5** Inclure dans le programme du modèle d'Ising pour le réseau carré montré dans ce chapitre le calcul de la capacité calorifique et de la susceptibilité magnétique.

**Réponse:**  $C_v$  et  $\chi$  par spin s'écrivent

$$C_v = N * N * (U^{**2} - E2M) / T^{**2}$$

$$CHI = N * N * (AM^{**2} - A2M) / T$$

où E2M est la moyenne du carré de l'énergie par spin et A2M la moyenne du carré de l'aimantation (par spin).

Contactez [diep@ptm.u-cergy.fr](mailto:diep@ptm.u-cergy.fr) pour avoir un programme.

**Exercice 14.6** Modifier le programme du modèle d'Ising pour le cas d'un réseau cubique.

**Réponse:** Pour un réseau cubique, il faut considérer la direction  $z$ . Il faut ouvrir une boucle sur  $k$ , par exemple, l'interaction s'écrit

```
do i=1,N
...
do j=1,N
...
do k=1,N
kp=k+1-(k/N)*N
km=k-1+(1/k)*N
E=-S(i,j,k)*(...+S(i,j,kp)+S(i,j,km))
enddo
enddo
enddo
etc.
```

**Exercice 14.7** Modifier le programme du modèle d'Ising pour le cas d'un réseau cubique centré.

**Réponse:** Pour un réseau cubique centré, il faut considérer deux sous-réseaux, l'un pour les spins aux sommets du cube, l'autre pour les spins aux centres. Il faut ouvrir une boucle sur les sous-réseaux, par exemple, l'interaction s'écrit

```
do i=1,N
...
do j=1,N
...

```

```

do k=1,N
kp=k+1-(k/N)*N
km=k-1+(1/k)*N
do m=1,2
if(m.eq.1)then
E=-S(i,j,k,1)*(S(i,j,k,2)+S(im,j,k,2)+S(i,jm,k,2)+S(im,jm,k,2)+ S(i,j,km,2)+S(im,j,km,2)+S(i,jm,km,2)+S(im,jm,km,2))
else
E=-S(i,j,k,2)*(S(i,j,k,1)+S(ip,j,k,1)+S(i,jp,k,1)+S(ip,jp,k,1)+ S(i,j,kp,1)+S(ip,j,kp,1)+S(i,jp,kp,1)+S(ip,jp,kp,1))
endif
enddo
enddo
enddo
etc.

```

**Exercice 14.8** Ecrire un programme pour le modèle de Heisenberg.

**Réponse:** Pour les spins de Heisenberg, par exemple sur un réseau carré, l'interaction s'écrit

$$E = -SX(i,j) * (SX(ip,j) + SX(im,j) + SX(i,jp) + SX(i,jm)) - SY(i,j,k) * (SY(ip,j) + SY(im,j) + SY(i,jp) + SY(i,jm)) - SZ(i,j,k) * (SZ(ip,j) + SZ(im,j) + SZ(i,jp) + SZ(i,jm))$$

Pour générer un spin de module 1 aléatoirement, on écrit

```

pi=acos(-1.)
SZ(i,j)=2*rand()-1
phi=2*pi*rand()
SX(i,j)=SQRT(1-Z(i,j)**2)*COS(phi)
SY(i,j)=SQRT(1-Z(i,j)**2)*SIN(phi)

```

Le reste du programme suit le même principe que le programme modèle.

**Exercice 14.9** Ecrire la partie qui réalise l'histogramme  $H(E)$  dans un programme de simulation Monte Carlo.

**Exercice 14.10** Etat fondamental par la méthode numérique:

On peut déterminer dans la plupart des cas l'état fondamental d'un système de spins (Ising, XY, Heisenberg) par la méthode numérique suivante:

- on génère une configuration aléatoire de spins sur un réseau,
- on calcule le champ local subi par un spin selon l'hamiltonien du modèle,
- on aligne le spin considéré dans la direction de son champ local,
- on continue avec un autre spin jusqu'à ce que tous les spins sont considérés (un 'balayage'),
- on recommence un autre balayage en suivant l'évolution de l'énergie interne du système,
- on arrête les itérations lorsque l'énergie converge vers une valeur avec la précision souhaitée,
- on analyse la configuration finale de spins pour déterminer la nature de l'ordre de l'état fondamental.

Ecrire un programme qui réalise les étapes précédentes. L'appliquer au modèle de spins d'Ising sur le réseau carré avec les interactions entre les premiers voisins  $J_1$  et entre les seconds voisins  $J_2$ . Déterminer le diagramme de phase à la température  $T = 0$  dans l'espace  $(J_1, J_2)$ .

## IX. EXERCICES ET PROBLÈMES DU CHAPITRE 15: MÉTHODE DES FONCTIONS DE GREEN EN MAGNÉTISME

**Exercice 15.1** Démontrer la formule (15.13).

**Exercice 15.2** Appliquer la méthode des fonctions de Green à un système de spins d'amplitude  $S$  en une dimension.

**Exercice 15.3** Appliquer la méthode des fonctions de Green à un système de spins d'Ising  $\pm 1/2$  en une dimension sous un champ magnétique appliqué.

**Guide:** On prend le modèle d'Ising avec l'hamiltonien suivant

$$\mathcal{H} = -2J \sum_n S_n^z S_{n+1}^z - g\mu_B H \sum_n S_n^z \quad (116)$$

où  $S_n^z = \pm 1/2$  est la composante  $z$  du spin associé aux matrices de Pauli  $2S_n^z = \sigma_n^z = \pm 1$  [Eq. (8.5) du livre]. Le modèle d'Ising correspond au fait qu'on ne prend en compte que l'interaction entre les matrices  $S^z$  (pas les autres composantes). Il y a une habitude de prendre  $S_z = \pm 1$  pour des raisons pratiques dans les calculs (voir les exercices 14.1 et 14.2, par exemple). Le résultat obtenu est identique à un facteur constant près.

Prenons le site  $i$ . On définit la fonction de Green suivante

$$G_i(t) \equiv \langle\langle S_i^+(t); S_i^- \rangle\rangle \quad (117)$$

L'équation du mouvement de  $G_i(t)$  est ( $\hbar = 1$ )

$$i \frac{dG_i(t)}{dt} = 2 \langle S_i^z \rangle \delta(t) + 2J \langle\langle S_i^+(t)[S_{i+1}^z(t) + S_{i-1}^z(t)]; S_i^- \rangle\rangle + g\mu_B H \langle\langle S_n^+(t); S_n^- \rangle\rangle \quad (118)$$

Cette équation génère la fonction de Green suivante

$$G_{i+1}(t) = \langle\langle S_i^+(t)[S_{i+1}^z(t) + S_{i-1}^z(t)]; S_i^- \rangle\rangle \quad (119)$$

Eq. (118) devient

$$i \frac{dG_i(t)}{dt} = 2 \langle S_i^z \rangle \delta(t) + 2G_{i+1}(t) + g\mu_B H G_i(t) \quad (120)$$

L'équation du mouvement de  $G_{i+1}(t)$  génère la fonction de Green suivante

$$G_{i+2}(t) \equiv \langle\langle S_i^+(t)S_{i-1}^z(t)S_{i+1}^z(t); S_i^- \rangle\rangle \quad (121)$$

On écrit l'équation du mouvement de  $G_{i+2}(t)$  mais on négligera les fonctions d'ordre supérieur. On a

$$i \frac{dG_i(t)}{dt} = 2 \langle S_i^z \rangle \delta(t) + 2G_{i+1}(t) + g\mu_B H G_i(t) \quad (122)$$

$$i \frac{dG_{i+1}(t)}{dt} = 2 \langle S_i^z(S_{i-1}^z + S_{i+1}^z) \rangle \delta(t) + JG_i(t) + 4JG_{i+2}(t) + g\mu_B H G_{i+1}(t) \quad (123)$$

$$i \frac{dG_{i+2}(t)}{dt} = 2 \langle S_{i-1}^z S_i^z S_{i+1}^z \rangle \delta(t) + \frac{J}{2} G_i(t) + g\mu_B H G_{i+2}(t) \quad (124)$$

Les transformations de Fourier  $G_k(t) = \int_{-\infty}^{\infty} G_k(E) e^{-iEt} dE$  ( $k = i, i+1, i+2$ ) donnent, avec  $E' = E - g\mu_B H$ ,

$$E' G_i(E') - 2G_{i+1}(E') = \frac{1}{\pi} x_1 \quad (125)$$

$$-JG_i(E') + E' G_{i+1}(E') - 4JG_{i+2}(E') = \frac{2}{\pi} x_2 \quad (126)$$

$$-\frac{J}{2} G_{i+1}(E') + E' G_{i+2}(E') = \frac{1}{\pi} x_3 \quad (127)$$

où  $x_1 = \langle S_i^z \rangle$ ,  $2x_2 = \langle S_i^z(S_{i-1}^z + S_{i+1}^z) \rangle$ ,  $x_3 = \langle S_i^z S_{i-1}^z S_{i+1}^z \rangle$

Les solutions de ces équations sont

$$G_i(E') = \frac{1}{\pi} \left[ \frac{x_1/2 - 2x_3}{E'} + \frac{x_1/4 + x_2 + x_3}{E' - 2J} + \frac{x_1/4 - x_2 + x_3}{E' + 2J} \right] \quad (128)$$

$$G_{i+1}(E') = \frac{1}{\pi} \left[ \frac{x_1/4 + x_2 + x_3}{E' - 2J} + \frac{-x_1/4 + x_2 - x_3}{E' + 2J} \right] \quad (129)$$

$$G_{i+2}(E') = \frac{1}{\pi} \left[ \frac{-x_1/8 + x_3/2}{E'} + \frac{x_1/16 + x_2/4 + x_3/4}{E' - 2J} + \frac{x_1/16 - x_2/4 + x_3/4}{E' + 2J} \right] \quad (130)$$

Le théorème spectral [voir Eq. (15.44), par exemple] donne

$$\langle S_i^- S_i^+ \rangle = \frac{x_1 - 4x_3}{e^{\beta g \mu_B H} - 1} + \frac{x_1/2 + 2x_2 + 2x_3}{e^{\beta(g \mu_B H + 2J)} - 1} + \frac{x_1/2 - 2x_2 + 2x_3}{e^{\beta(g \mu_B H - 2J)} - 1} \quad (131)$$

$$\langle S_i^- S_i^+ (S_{i-1}^z + S_{i+1}^z) \rangle = \frac{x_1/2 + 2x_2 + 2x_3}{e^{\beta(g \mu_B H + 2J)} - 1} + \frac{-x_1/2 + 2x_2 - 2x_3}{e^{\beta(g \mu_B H - 2J)} - 1} \quad (132)$$

$$\langle S_i^- S_i^+ S_{i-1}^z S_{i+1}^z \rangle = \frac{-x_1/4 + x_3}{e^{\beta g \mu_B H} - 1} + \frac{x_1/8 + x_2/2 + x_3/2}{e^{\beta(g \mu_B H + 2J)} - 1} + \frac{x_1/8 - x_2/2 + x_3/2}{e^{\beta(g \mu_B H - 2J)} - 1} \quad (133)$$

On peut faire un développement limité pour des petites valeurs de  $H$ , on a au premier ordre de  $H$

$$x_1 - 4x_3 = \beta g \mu_B H \left[ \frac{1}{2} - 2x_2 \coth \beta J \right] \quad (134)$$

$$\left[ -1 + \frac{1}{2} \coth \beta J \right] x_1 + 2x_3 \coth \beta J = \frac{\beta g \mu_B H}{\sinh^2 \beta J} x_2 \quad (135)$$

$$x_1 - 4x_3 = 2\beta g \mu_B H [-x_2' + x_2 \coth \beta J] \quad (136)$$

où  $x_2' = \langle S_{i-1}^z S_{i+1}^z \rangle$ .

On a ici 3 équations pour 4 inconnues  $x_1, x_2, x_3, x_2'$ . Il est impossible de les résoudre. Mais on voit que quand  $H = 0$ , on a  $x_1 = x_3 = 0$ , c'est-à-dire l'absence de l'ordre à  $T \neq 0$  ( $x_1 = \langle S_i^z \rangle$ ), comme on l'a trouvé dans l'exercice 14.1.

Pour aller plus loin dans ce problème, par exemple quand on veut calculer les fonctions de corrélation entre le spin au site 0 et le spin au site  $n$ , on considère les fonctions de Green suivantes

$$G_{0,n} = \langle \langle S_0^+(t) S_n^z(t); S_0^- \rangle \rangle \quad (137)$$

$$G_{1,n} = \langle \langle S_0^+(t) [S_{-1}^z(t) + S_1^z(t)] S_n^z(t); S_0^- \rangle \rangle \quad (138)$$

$$G_{2,n} = \langle \langle S_0^+(t) S_{-1}^z(t) S_1^z(t) S_n^z(t); S_0^- \rangle \rangle \quad (139)$$

On suit la même méthode ci-dessus, on obtient

$$2x_{1,n} - 8x_{3,n} = \beta g \mu_B H [x_1 - 4x_{2,n} \coth \beta J] \quad (140)$$

$$\langle S_1^z S_n^z \rangle + \langle S_{-1}^z S_n^z \rangle = (x_{1,n} + 4x_{3,n}) \coth \beta J - 2 \frac{\beta g \mu_B H}{\sinh^2 \beta J} x_{2,n} \quad (141)$$

$$4x_{3,n} - x_{1,n} = 2\beta g \mu_B H [\langle S_{-1}^z S_1^z S_n^z \rangle - x_{2,n} \coth \beta J] \quad (142)$$

où  $x_{1,n} = \langle S_0^z S_n^z \rangle$ ,  $2x_{2,n} = \langle S_0^z (S_{-1}^z + S_1^z) \rangle$ ,  $x_{3,n} = \langle S_0^z S_{-1}^z S_1^z S_n^z \rangle$

Quand  $H = 0$ ,  $x_{1,n} = 4x_{3,n}$ , on obtient

$$\langle S_{-1}^z S_n^z \rangle + \langle S_1^z S_n^z \rangle = 2 \langle S_0^z S_n^z \rangle \coth \beta J \quad (143)$$

Prenons une solution de la forme  $\langle S_m^z S_n^z \rangle = AX^{n-m}$  où  $A$  est une constante: quand  $m = n$ , on a  $\langle S_n^z S_n^z \rangle = A = 1/4$ . Fixant  $n = 0$ ,  $m = -1$ ,  $m = 1$  et  $m = 0$  dans (143) on a

$$X + \frac{1}{X} = 2 \coth \beta J \quad (144)$$

La solution de cette équation est  $X = A \tanh \frac{\beta J}{2}$ . Autrement dit,

$$\langle S_0^z S_n^z \rangle = \frac{1}{4} \left[ \tanh \frac{\beta J}{2} \right]^n \quad (145)$$

On voit que, pour  $n = 0$ , on a  $\langle S_0^z S_0^z \rangle = 1/4$  comme il le faut pour un spin 1/2. Pour  $n = 1$ , on a

$$x_2 = \langle S_0^z S_1^z \rangle = \frac{1}{4} \tanh \frac{\beta J}{2} \quad (146)$$

Substituant ceci dans (134) et (135) on obtient

$$x_1 = \langle S_0^z \rangle = \beta g \mu_B H e^{\beta J} \quad (147)$$

La susceptibilité est donc

$$\chi = N g \mu_B \langle S_0^z \rangle / H = \beta (g \mu_B)^2 e^{\beta J} = \frac{(g \mu_B)^2 e^{\beta J}}{k_B T} \quad (148)$$

On retrouve ici le résultat de l'exercice 14.2. L'argument de l'exponentielle est  $\beta J$  ici car on a utilisé le facteur 2 dans l'hamiltonien et les spins 1/2: pour retrouver l'argument dans l'exponentielle de  $\chi$  dans l'exercice 14.2 il faut diviser  $J$  par 2 et multiplier par 4 (l'inverse de l'amplitude de spin au carré).

**Exercice 15.4** Appliquer la méthode des fonctions de Green à un système de spins de Heisenberg avec les interactions entre les premiers voisins et entre les seconds voisins, dans le cas d'un réseau cubique simple.

**Guide:** On suit le calcul du paragraphe 15.3 en ajoutant les interactions entre seconds voisins  $J_2$  dans les équations (15.24), (15.28)-(15.30). On obtient à la place de (15.32) l'équation suivante

$$\hbar \omega G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{\langle S^z \rangle}{\pi} + J \langle S^z \rangle Z G_{\vec{k}}(\omega) \left[ 1 - \frac{1}{Z} \sum_{\vec{\rho}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} \right] \quad (149)$$

$$+ J_2 \langle S^z \rangle Z_2 G_{\vec{k}}(\omega) \left[ 1 - \frac{1}{Z_2} \sum_{\vec{\rho}_2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}_2} \right] \quad (150)$$

o  $Z$  est le nombre de premiers voisins, et  $Z_2$  est le nombre de seconds voisins. On en déduit

$$G_{\vec{k}}(\omega) = \frac{\langle S^z \rangle}{\pi} \frac{1}{\hbar \omega - Z J \langle S^z \rangle (1 - \gamma(\vec{k})) - Z_2 J_2 \langle S^z \rangle (1 - \gamma_2(\vec{k}))} \quad (151)$$

$$= \frac{\langle S^z \rangle}{\pi} \frac{1}{\hbar \omega - \epsilon_{\vec{k}}} \quad (152)$$

où

$$\gamma(\vec{k}) = \frac{1}{Z} \sum_{\vec{\rho}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}} \quad (153)$$

$$\gamma_2(\vec{k}) = \frac{1}{Z_2} \sum_{\vec{\rho}_2} e^{i\vec{k} \cdot \vec{\rho}_2} \quad (154)$$

et

$$\epsilon_{\vec{k}} = Z J \langle S^z \rangle (1 - \gamma(\vec{k})) + Z_2 J_2 \langle S^z \rangle (1 - \gamma_2(\vec{k})) \quad (155)$$

**Exercice 15.5** Gaz d'électrons par la méthode des fonctions de Green:

On considère un gaz de  $N$  électrons, de volume  $\Omega$ . On définit la fonction de Green suivante:

$$iG_{\alpha,\beta}(\vec{r}t, \vec{r}'t') = \langle \varphi_0 | \hat{T} [\Psi_{H\alpha}(\vec{r}t) \Psi_{H\beta}^\dagger(\vec{r}'t')] | \varphi_0 \rangle$$

où  $|\varphi_0\rangle$  est l'état fondamental,  $\Psi_{H\alpha}(\vec{r}t)$  l'opérateur de champ de la particule à  $(\vec{r}t)$  de spin  $\alpha$  dans la représentation de Heisenberg, et  $\hat{T}$  l'opérateur ordre du temps défini par  $\hat{T}[A(t)B(t')] = A(t)B(t')$  si  $t > t'$  et  $\hat{T}[A(t)B(t')] = \pm B(t')A(t)$  si  $t' > t$  (le signe dépend du caractère bosonique ou fermionique). On suppose qu'il n'y a pas d'interaction entre les particules.

a) Montrer que

$$iG_{\alpha,\beta}(\vec{r}t, \vec{r}'t') = iG_{\alpha,\beta}^0(\vec{r}t, \vec{r}'t') = \delta_{\alpha\beta} \left( \frac{1}{2\pi} \right)^3 \int d\vec{k} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')} e^{-i\omega_k(t-t')} \times$$

$$[\theta(t-t')\theta(k - k_F) - \theta(t' - t)\theta(k_F - k)]$$

où  $\theta(y)$  est la fonction de Heavyside, et  $\omega_k = \frac{\hbar k^2}{2m}$ .

b) Montrer que la transformée de Fourier (espace et temps) s'écrit

$$G_{\alpha,\beta}^0(\vec{k}, \omega) = \delta_{\alpha\beta} \left[ \frac{\theta(k-k_F)}{\omega-\omega_k+i\eta} + \frac{\theta(k_F-k)}{\omega-\omega_k-i\eta} \right]$$

où  $\eta$  est une constante positive infinitésimale. On utilisera

$$\theta(t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega(t-t')}}{\omega+i\eta}$$

et calculera les intégrales par la méthode du contour dans le plan complexe  $\omega$ .

c) Montrer que

$$N = -i \frac{\Omega}{(2\pi)^4} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int d\vec{k} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega\eta} \text{Tr} G(\vec{k}, \omega)$$

$$E = -\frac{i}{2} \frac{\Omega}{(2\pi)^4} \lim_{\eta \rightarrow 0} \int d\vec{k} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega\eta} \left( \frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \hbar\omega \right) \text{Tr} G(\vec{k}, \omega)$$

d) Calculer  $N$  et  $E$  de l'état fondamental en fonction de  $k_F$  en utilisant  $G_{\alpha,\beta}^0(\vec{k}, \omega)$ .

## X. EXERCICES ET PROBLÈMES DU CHAPITRE 16: MAGNÉTISME DES SURFACES

**Exercice 16.1** Etudier les modes de magnon de surface dans le cas d'un ferromagnétique semi-infini de structure cubique centrée à  $k_x = k_y = 0, \pi/a$  en s'inspirant du paragraphe 16.3.

**Guide:** Dans le cas ferromagnétique, il suffit d'écrire l'équation du mouvement pour  $S_m^+$ . On utilise ensuite la transformation de Fourier dans le plan  $xy$ , on obtient pour  $n > 2$

$$(E - E_n)U_n = \left[ 4\gamma_1(\vec{k}_{\parallel})(U_{n-1} + U_{n+1}) + \epsilon(U_{n-2} + U_{n+2}) \right] \quad (156)$$

et pour les deux premières couches

$$(E - E_1)U_1 = \left[ 4\gamma_1(\vec{k}_{\parallel})U_2 + \epsilon U_3 \right] \quad (157)$$

$$(E - E_2)U_2 = \left[ 4\gamma_1(\vec{k}_{\parallel})(U_1 + U_3) + \epsilon U_4 \right] \quad (158)$$

où  $E = \frac{\hbar\omega}{J_1 S}$ ,  $\epsilon = \frac{J_2}{J_1}$ , et

$$E_n = 8 - 6\epsilon[1 - \gamma_2(\vec{k}_{\parallel})] \quad (n = 2, 3, \dots) \quad (159)$$

$$E_1 = 8 - 5\epsilon[1 - \gamma_2(\vec{k}_{\parallel})] \quad (160)$$

$$\gamma_1(\vec{k}_{\parallel}) = \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \quad (161)$$

$$\gamma_2(\vec{k}_{\parallel}) = \frac{1}{2}[\cos(k_x a) + \cos(k_y a)] \quad (162)$$

Mode de volume: remplacer  $U_{n\pm 1} = U_n \exp(\pm i k_z a/2)$  dans Eq.(156) pour obtenir le mode de volume  $E = E_n - \left[ 8\gamma_1(\vec{k}_{\parallel}) \cos(k_z a/2) + 2\epsilon \cos(k_z a) \right]$

Mode de surface: remplacer  $U_{n\pm 1} = U_1 \phi^n$  dans Eqs.(156)- (158) pour obtenir l'énergie du mode de surface  $E$  et le facteur d'atténuation  $\phi$ .

**Exercice 16.2** Calculer la valeur critique de  $\epsilon$  défini dans le paragraphe 16.3 pour un cristal infini.

**Réponse:** Si  $J_1$  et  $J_2$  sont positifs (ferromagnétiques), l'état ferromagnétique est stable. En revanche, si  $J_2$  devient négatif, l'état ferromagnétique est instable à une valeur critique de  $\epsilon = J_2/J_1$ . Pour un cristal infini, cette valeur s'obtient en annulant l'énergie  $E$  du mode de volume d'énergie la plus basse. Ceci signifie que l'onde de spin correspondante devient instable (mode 'mou'). L'état fondamental n'est plus ferromagnétique si  $\epsilon < \epsilon_c$  (la valeur critique de  $\epsilon$ ). On a  $\epsilon_c = -\frac{4}{3}$  ( $J_2 < 0$ )

**Exercice 16.3** Montrer que dans l'hypothèse de l'aimantation uniforme (16.49), l'énergie propre  $E_i$  est proportionnelle à  $M$ .

**Réponse:** Si on remplace tous les  $\langle S_n^z \rangle$  par l'aimantation uniforme  $M$ , on voit que les éléments de la matrice  $\mathbf{M}$  dans le paragraphe 16.4 sont proportionnels à  $M$ . L'énergie propre  $E_i$  obtenue en résolvant  $\det \mathbf{M} = 0$  est donc proportionnelle à  $M$ .

**Exercice 16.4** On considère un système composé de trois films  $A$ ,  $B$  et  $C$ , de spins d'Ising d'épaisseurs respectives  $N_1$ ,  $N_2$  et  $N_3$ . L'interaction entre deux spins appartenant au même film est ferromagnétique. Soient  $J_1$ ,  $J_2$  et  $J_3$  les amplitudes de ces interactions dans les trois films. On suppose que les films sont couplés antiferromagnétiquement aux interfaces par une interaction  $J_s$ , la même pour les deux interfaces  $A - B$  et  $B - C$ . On applique un champ magnétique dans la direction  $z$ . Déterminer le champ critique au-delà de laquelle les spins sont parallèles au champ, en fonction des paramètres donnés. On supposera, pour simplifier, que  $J_1 = J_2 = J_3$ .

**Réponse:** L'énergie due aux interactions dans les plans est identique pour les deux états (spins de  $B$  parallèles ou antiparallèles au champ  $H$ ). Il suffit de considérer une colonne de spins suivant l'axe  $z$ . Cette énergie dans l'état où les spins de  $B$  sont antiparallèles à  $H$  est

$$E_A = -J_1(N_1 - 1) + J_s - HN_1 - J_2(N_2 - 2) + J_s + HN_2 - J_3(N_3 - 1) - HN_3.$$

L'état où les spins de  $B$  parallèles à  $H$  est

$$E_F = -J_1(N_1 - 1) - J_s - HN_1 - J_2(N_2 - 2) - J_s - HN_2 - J_3(N_3 - 1) - HN_3$$

( $J_s$  est négatif). On voit que  $E_F < E_A$  quand  $H > H_c = \frac{2J_s}{N_2}$  (on a pris  $J_1 = J_2 = J_3$ ).

**Exercice 16.5** Etudier par la théorie du champ moyen présentée au chapitre 9 le cas d'un film mince de 3 couches atomiques de spins d'Ising  $\pm 1/2$  en interaction ferromagnétique  $J$ , supposée identique partout, entre les premiers voisins.

**Réponse:** On prend l'hamiltonien  $\mathcal{H} = -J \sum_{i,j} S_i S_j$  où  $S_i = \pm 1$  (spin d'Ising du site  $i$ ). On suppose la structure cubique avec l'orientation de la surface [100]. Dans la théorie du champ moyen, les valeurs moyennes des spins des 3 couches sont

$$\langle S_1 \rangle = \tanh [\beta J (Z \langle S_1 \rangle + \langle S_2 \rangle)]$$

$$\langle S_2 \rangle = \tanh [\beta J (Z \langle S_2 \rangle + \langle S_1 \rangle + \langle S_3 \rangle)]$$

$$\langle S_3 \rangle = \tanh [\beta J (Z \langle S_3 \rangle + \langle S_2 \rangle)]$$

où  $\beta = 1/(k_B T)$  et  $Z = 4$  le nombre de premiers voisins dans le plan  $xy$ . Par symétrie,  $\langle S_1 \rangle = \langle S_3 \rangle$ , il ne nous reste que deux équations à résoudre numériquement d'une manière auto-cohérente ('self-consistent').

**Exercice 16.6** En utilisant la méthode de Holstein-Primakoff du chapitre 10 pour un cristal semi-infini de spins de Heisenberg, écrire l'expression qui permet de calculer l'aimantation de la surface en fonction de la température. Démontrer qu'un mode de surface de très basse fréquence contribue à baisser cette aimantation par rapport à celle de l'état massif.

**Guide:** On peut modifier les formules (10.53)-(10.55) pour un cristal semi-infini: on écrit les équations du mouvement pour les spins des différentes couches, puis on effectue la transformation de Fourier dans le plan  $xy$  seulement. On peut utiliser les formules (10.53)-(10.55) pour raisonner: plus l'énergie  $\epsilon_{\vec{k}}$  du mode  $\vec{k}$  est faible, plus  $\langle n_{\vec{k}} \rangle$  est grand (formule (10.53)). Par conséquent,  $M$  est plus faible [formule (10.55)]. Les modes de surface de basse énergie baissent les aimantations des couches, mais l'aimantation de la surface subit davantage cette baisse à cause du manque de voisins.

## XI. EXERCICES ET PROBLÈMES DU CHAPITRE 17: PHÉNOMÈNES DE TRANSPORT

### Exercice 17.1 Effet Hall - Magnéto-résistance

L'expression générale de la densité de courant dans un matériau, en présence d'un champ électrique  $\vec{\epsilon}$  et d'un champ magnétique  $\vec{B}$ , s'écrit en série de puissance de  $\vec{\epsilon}$  et  $\vec{B}$ :

$$\vec{j}_i = \sum_j \sigma_{ij} \epsilon_j + \sum_{j,l} \sigma_{ijl} \epsilon_j B_l + \sum_{j,l,m} \sigma_{ijlm} \epsilon_j B_l B_m \text{ où}$$

$\sigma_{ij}$ : tenseur conductivité électrique dite normale ou ordinaire,

$\sigma_{ijl}$ : tenseur conductivité due à l'interaction entre  $\vec{\epsilon}$  et  $\vec{B}$ . Quand  $\vec{\epsilon} \cdot \vec{B} = 0$ , on a l'effet Hall.

$\sigma_{ijlm}$ : tenseur conductivité due à l'interaction entre  $\vec{\epsilon}$  et  $\vec{B}$  en second ordre. Ceci est à l'origine de la magnéto-résistance.

#### I. Approximation linéaire pour les champs faibles:

Cette approximation est utilisée lorsque  $\omega_c \tau \ll 1$  où  $\omega_c$  est la fréquence cyclotron et  $\tau$  le temps de relaxation. On suppose que  $\vec{B}$  est parallèle à  $\vec{Oz}$  et  $\vec{e}$  parallèle à  $\vec{Ox}$ . Dans un premier temps, on suppose que  $\tau$  est indépendant de l'énergie de l'électron et la masse effective électronique est isotrope.

a) Calculer le coefficient Hall  $R_e$  défini comme le rapport entre  $\epsilon_y$  et  $j_x B_z$  où  $\epsilon_y$  est la composante  $y$  du champ électrique induit par le champ magnétique et  $j_x$  la densité du courant d aux électrons libres.

b) Quel est le coefficient  $R_h$  pour le courant des trous ?

c) Donner l'expression du coefficient total  $R$  lorsque les électrons et les trous participent à la conduction. On notera  $R = R_0$ . On exprime les résultats en fonction de  $n$ ,  $p$ ,  $\sigma$ ,  $\mu_e$  et  $\mu_h$  (respectivement, densité d'électrons, densité de trous, conductivité ( $\sigma_e = \sigma_h = \sigma$ ), mobilité d'électron et mobilité de trou ( $\mu_e = \sigma_e/(ne)$ ,  $\mu_h = \sigma_h/(pe)$ ).

## II. Champs modérés :

a) Ecrire les équations du mouvement d'un électron dans les deux directions  $x$  et  $y$ . On introduit la quantité complexe  $Z = v_x + iv_y$  où  $v_x$  et  $v_y$  sont les composantes de la vitesse de l'électron considéré. Montrer que la solution des équations du mouvement a la forme

$$Z(t) = Z_0 + \frac{e}{i\omega_c m_e^*} (\epsilon_x + i\epsilon_y)(1 - e^{i\omega_c t})$$

où  $Z_0 = Z(t=0)$ .

b) Montrer que la valeur moyenne de  $Z$  sur toutes les collisions est donnée par

$$\bar{Z} = \frac{e}{m_e^*} \frac{\tau}{i\omega_c \tau - 1}$$

En déduire que

$$\begin{aligned} j_x &= \frac{ne^2}{m_e^*} \left[ \frac{\tau}{1+\omega_c^2 \tau^2} \epsilon_x - \frac{\omega_c \tau^2}{1+\omega_c^2 \tau^2} \epsilon_y \right] \\ j_y &= \frac{ne^2}{m_e^*} \left[ \frac{\tau}{1+\omega_c^2 \tau^2} \epsilon_y + \frac{\omega_c \tau^2}{1+\omega_c^2 \tau^2} \epsilon_x \right] \end{aligned}$$

c) Montrer que lorsque les électrons et les trous participent à la conduction, le coefficient Hall s'écrit

$$R = \frac{\sigma_e^2 R_e + \sigma_h^2 R_h + \sigma_e^2 \sigma_h^2 R_e R_h (R_e + R_h) B_z^2}{(\sigma_e + \sigma_h)^2 + \sigma_e^2 \sigma_h^2 (R_e + R_h)^2 B_z^2}$$

Discuter le cas où la conduction est due à un type d'impureté ( $p$  ou  $n$ ) et le cas d'un conducteur intrinsèque ( $p = n$ ).

d) Les résultats jusqu'ici montrent que la présence du champ magnétique n'a aucun effet sur la résistance lorsque la conduction est due à un seul type de porteurs ( $n$  ou  $p$ ) et lorsque le temps de relaxation est constant et lorsque la masse effective est isotrope (surfaces équi-énergétiques sphériques). Si une de ces trois conditions n'est pas remplie, il y a une correction à la résistivité initiale  $\rho_0$ . Montrer que quand les électrons et les trous participent à la conduction (la masse effective supposée isotrope et  $\tau$  constant), la correction à la résistivité est donnée par

$$\frac{\Delta \rho}{\rho_0} = \frac{np\mu_e\mu_h(\mu_e + \mu_h)^2 B_z^2}{(n\mu_e + p\mu_h)^2} \equiv \xi R_0^2 \sigma_0^2 B_z^2$$

où le coefficient magnétorésistance transverse  $\xi$  est

$$\xi = \frac{np\mu_e\mu_h(\mu_e + \mu_h)^2}{(p\mu_h^2 - n\mu_e^2)^2}$$

et  $\sigma_0 \equiv \sigma_e + \sigma_h$  quand  $B_z = 0$ ,  $R_0$  est donné par l'approximation I.

Application numérique : pour que  $\frac{\Delta \rho}{\rho_0} \simeq 0.1$  dans un champ de  $10^3$  Gauss, quelle est la mobilité totale ( $\mu_e + \mu_h$ )?

## III. Effets des collisions:

On suppose encore que la masse effective  $m^*$  est isotrope, mais que le temps de relaxation  $\tau$  dépend de l'énergie de l'électron sous la forme  $\tau = aE^{-s}$ . Cette forme regroupe plusieurs types de collisions. Les formules pour  $j_x$  et  $j_y$  dans la partie I sont encore valables à condition que les quantités  $\frac{\tau}{1+\omega_c^2 \tau^2}$  et  $\frac{\omega_c \tau^2}{1+\omega_c^2 \tau^2}$  soient remplacées par leur valeur moyennée sur toutes les énergies.

a) Montrer que dans ce cas, le coefficient Hall s'écrit  $R = -\frac{K}{ne}$  où le facteur de correction  $K$  est donné par

$$K = \frac{\langle \frac{\tau^2}{1+\omega_c^2 \tau^2} \rangle}{\langle \frac{\tau}{1+\omega_c^2 \tau^2} \rangle^2 + \omega_c^2 \langle \frac{\tau^2}{1+\omega_c^2 \tau^2} \rangle^2} \quad (163)$$

. En déduire que  $K = \frac{\langle \tau^2 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}$  pour les collisions suffisamment fortes.

b) Il reste à calculer  $\langle \tau^2 \rangle$  et  $\langle \tau \rangle$ . Montrer que

$$\langle \tau \rangle = a(k_B T)^{-s} \frac{\Gamma(5/2-s)}{\Gamma(5/2)}$$

et

$$\langle \tau^2 \rangle = a^2 (k_B T)^{-2s} \frac{\Gamma(5/2-2s)}{[\Gamma(5/2-s)]^2}$$

Estimer  $K$  pour  $s = 1/2$  (collisions avec phonons) et  $s = -3/2$  (collisions avec impuretés).

c) On suppose un seul type de porteurs, montrer que

$$\frac{\Delta \rho}{\rho_0} = \frac{e^2 B_z^2}{(m_e^*)^2} \left[ \frac{\langle \tau^3 \rangle \langle \tau \rangle - \langle \tau^2 \rangle^2}{\langle \tau \rangle^2} \right]$$

## IV. Effets de structure de bande :

Les surfaces équi-énergétiques ne sont plus sphériques. Les masses effectives dans les trois directions principales sont  $m_x^*$ ,  $m_y^*$  et  $m_z^*$  (pour les électrons).

a) Montrer que le coefficient Hall s'écrit  $R = -\frac{KM}{ne}$  où  $M$  (le facteur de correction pour les masses) est donné par

$$M = \frac{3(m_x^* + m_y^* + m_z^*)}{m_x^* m_y^* m_z^* \left( \frac{1}{m_x^*} + \frac{1}{m_y^*} + \frac{1}{m_z^*} \right)^2}$$

dans la limite de champ faible ( $B_z^2 \simeq 0$ ).

Application numérique: calculer  $M$  pour  $Si$  et  $Ge$ , sachant que  $m_x^* = m_l^*$  et  $m_y^* = m_z^* = m_t^*$  avec  $m_l^*(Si) = 0.92m_0$ ,  $m_t^*(Si) = 0.191m_0$ ,  $m_l^*(Ge) = 1.59m_0$ ,  $m_t^*(Ge) = 0.0815m_0$  ( $m_0$ : masse au repos).

b) On suppose que  $m_x^* = m_l^*$  et  $m_y^* = m_z^* = m_t^*$ . Montrer que

$$\frac{\Delta\sigma}{\sigma_0} = [(\zeta + 1)F(\gamma) - 1]R_0^2\sigma_0^2B_z^2$$

$$\text{où } F(\gamma) = \frac{(\gamma^2 + \gamma + 1)(2\gamma + 1)}{\gamma(\gamma + 2)^2}$$

$$\gamma + 1 = \frac{\langle \tau^3 \rangle}{\langle \tau \rangle^2}$$

$$\text{et } \gamma = m_l^*/m_t^*$$

### Exercice 17.2 Equation de Boltzmann avec champ fort

Le champ électrique  $\vec{\varepsilon}$  est supposé parallèle à l'axe  $Oz$ . La fonction de distribution  $f$  dépend de l'énergie  $E$  et de l'angle  $\theta$  que fait le vecteur d'onde  $\vec{k}$  avec  $\vec{\varepsilon}$ . En exprimant  $f$  en fonction des polynômes de Legendre  $P_n$ :

$$f(E, \cos\theta) = \sum_{n=0}^{\infty} g_n(E)P_n(\cos\theta)$$

et en retenant seulement les deux premiers termes

1. Montrer que le terme de champ dans l'équation de Boltzmann est donné par

$$-\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)_{ch} = \frac{q\varepsilon}{\hbar} \left( g + \frac{2}{3}E'g' + \frac{\hbar^2 k_z}{m^*} g'_0 \right)$$

où  $g = g_1/k$  ( $k = k_z \cos\theta$ ),  $g'$  et  $g'_0$  sont les dérivées par rapport à  $E$

2. Montrer que le terme de collision s'écrit

$$\left(\frac{\partial f}{\partial t}\right)C = \phi_0 + \phi_1$$

où

$$\phi_0 = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int \{w(\vec{k}, \vec{k}')g_0(E') - w(\vec{k}', \vec{k})g_0(E)\} d^3k'$$

$$\phi_1 = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int \{w(\vec{k}, \vec{k}')k'_z g(E') - w(\vec{k}', \vec{k})k_z g(E)\} d^3k'$$

$w(\vec{k}, \vec{k}')$  est la probabilité (par unité de temps) pour que, dans une collision,  $\vec{k}$  devient  $\vec{k}'$ .

3. En fait, la probabilité pour qu'une transition ait lieu est

$$\bar{w} = w(\vec{k}, \vec{k}')f(E_k)[1 - f(E_{k'})]$$

avec

$$w(\vec{k}, \vec{k}') = \frac{\pi}{NM} \frac{|I|^2}{w_{\vec{q}_j}} \left[ s(\omega_{\vec{q}_j}) + \frac{1}{2} \pm \frac{1}{2} \right] \delta(E_{k'} - E_k \pm \hbar\omega_{\vec{q}_j})$$

où  $I$  est le facteur de couplage électron-phonon,  $N$  le nombre total d'électrons,  $M$  la masse des ions. Les signes  $\pm$  correspondent respectivement à l'émission et l'absorption d'un phonon d'énergie  $\hbar\omega_{\vec{q}_j}$  de la branche  $j$ , de vecteur d'onde  $\vec{q}_j$ ;  $s(\omega_{\vec{q}_j})$  est le nombre d'occupation du mode  $\omega_{\vec{q}_j}$ . On suppose que  $f[1 - f] \simeq f$  (haute température). Pour les phonons acoustiques, on utilisera  $\omega(\vec{q}) = v_s q$  ( $v_s$ : vitesse du son) et  $I = \pm iCq$  ( $C$ : potentiel de déformation). Montrer que

$$\phi_0 = \frac{2m^*v_s^2}{\tau} \left[ E g_0'' + \left( \frac{E}{k_B T} + 2 \right) g'_0 + \frac{2g_0}{k_B T} \right]$$

$$\phi_1 = -\frac{k_z g}{\tau}$$

où  $\tau$  est le temps de relaxation calculé pour des champs faibles.

4. Ecrire l'équation de Boltzmann et montrer que

$$g = -\frac{q\varepsilon\hbar l}{\sqrt{2m^*}} \frac{g'_0}{\sqrt{E}}$$

En déduire l'équation différentielle suivante pour  $g_0$ :

$$(E + \lambda k_B T) g''_0 + \left( \frac{E}{k_B T} + 2 + \frac{\lambda k_B T}{E} \right) g'_0 + \frac{2}{k_B T} g_0 = 0$$

avec

$$\lambda = \frac{q^2 l^2}{6m^* v_s^2 k_B T} \varepsilon^2 \equiv \frac{\varepsilon^2}{\varepsilon_0^2}$$

5. Dans la limite des champs forts  $\lambda = \varepsilon^2/\varepsilon_0^2 \gg E/k_B T$ , montrer que la solution de l'équation ci-dessus est de la forme

$$g_0 = A e^{-E^2/2\lambda k_B^2 T^2}$$

où  $A$  est donné par

$$A = \frac{4\pi^2}{\Gamma(3/4)} \frac{n}{(2\lambda)^{3/4}} \left( \frac{\hbar^2}{2m^* k_B T} \right)^{3/2}$$

avec  $n = \frac{N}{\Omega}$  (densité de particules). Calculer le courant  $j$  et montrer que  $j = \gamma \sqrt{\varepsilon}$  où

$$\gamma = en \frac{\sqrt{e l v_s}}{(m^* k_B T)^{1/4}} \frac{\sqrt{2\pi}}{3^{3/4} \Gamma(3/4)}$$

### Exercice 17.3 Equation du mouvement pour les gaz

L'équation de mouvement pour les gaz, appelée l'équation de Boltzmann, est l'outil de base pour décrire le mouvement d'un gaz réel. Si  $f(\vec{r}, \vec{p}, t)$  est la fonction de distribution au temps  $t$  d'une collection de particules, on écrit

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \frac{\partial f}{\partial \vec{r}} + \vec{F} \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = \left[ \frac{\partial f}{\partial t} \right]_c$$

Le membre de gauche décrit un mouvement *lent* et régulier, et le membre de droite décrit l'effet des collisions *rapides* et irrégulières. Les échelles de temps et de longueur intéressantes dans l'équation de Boltzmann sont très supérieures à la durée de collision et aux dimensions moléculaires. On va traiter quelques exemples, tout d'abord sans collisions, puis avec collisions.

#### I. Cas sans collisions:

a) On suppose  $\vec{F} = 0$  et pas de collisions. Donner dans ce cas la solution de l'équation de Boltzmann. Pour un gaz à la température  $T$ , concentré à l'origine à l'instant  $t = 0$ , calculer la distribution de densité  $n(\vec{r}, t)$  à l'instant  $t$  ultérieur.

b) Oscillation de plasma: cas à deux dimensions

On considère un gaz dilué d'électrons à deux dimensions (on peut réaliser expérimentalement un tel gaz à la surface de l'hélium liquide à très basse température, environ  $0.5 K$ ). Ecrire l'équation de Boltzmann en tenant compte des interactions de Coulomb entre les électrons. Résoudre pour une onde plane, c'est-à-dire pour une fonction de distribution de la forme

$$f = f_0 + f' e^{-i\omega t + i\vec{k} \cdot \vec{r}}$$

( $f_0 = n(2\pi m k_B T)^{-1} \exp(-p^2/2m k_B T)$ ;  $f' \ll f_0$ ).

Montrer que la relation de dispersion des ondes planes dans ce plasma d'électrons à deux dimensions s'écrit

$$\omega^2 = \frac{2\pi e^2 n}{m} k$$

Noter que la relation de dispersion ci-dessus est encore valable en présence de collisions.

## II. Cas avec collisions et diffusion:

On examine maintenant les collisions des particules avec des impuretés *fixes*. Il s'agit par exemple d'étudier les électrons d'un métal en effectuant des collisions sur des atomes fixes d'impureté. Le terme de collision s'écrit alors

$$\frac{\partial f}{\partial t_c} = \left(\frac{1}{4\pi}\right) \int d\Omega' \gamma [f(1-f') - f'(1-f)] = \left(\frac{1}{4\pi}\right) \int d\Omega' \gamma (f - f')$$

où  $f' = f(\vec{r}, \vec{p}', t)$ ; les collisions sur des atomes d'impureté conservent l'énergie et donc  $\vec{p}$  et  $\vec{p}'$  ne diffèrent qu'en direction,  $\int d\Omega'$  est l'intégration sur la direction de  $\vec{p}'$ ; le taux de diffusion  $\gamma$  (supposé constant) est proportionnel à la densité d'impuretés. On suppose que  $f$  s'écarte peu de  $f_0$  et que la différence est une onde plane de grande longueur d'onde. On cherche donc la fonction de distribution sous la forme

$$f = f_0 + f_1 = (1 + \psi(\vec{p}, t)e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}})f_0$$

avec  $\psi \ll 1$ .

a) Montrer que l'équation de Boltzmann prend la forme

$$\frac{\partial \psi}{\partial t} = -(K_1 + K)\psi$$

où  $K$  est l'opérateur de collision, défini par

$$-K\psi = \left(\frac{\gamma}{4\pi}\right) \int d\Omega' (\psi' - \psi)$$

et où  $K_1 = i\vec{k}\cdot\vec{v}$  ( $\vec{v} = \vec{p}/m$ ). Si l'on connaît les valeurs propres  $\gamma_\alpha$  et les vecteurs propres  $\psi_\alpha$  de  $K_1 + K$ , la solution de l'équation de Boltzmann s'écrit

$$\psi = \sum_\alpha a_\alpha(t)\psi_\alpha$$

avec  $a_\alpha = a_\alpha(0)\exp(-\gamma_\alpha t)$ . Comme on suppose  $k$  petit,  $K_1$  peut être considéré comme une perturbation.

b) Montrer que les valeurs propres et les vecteurs propres de l'opérateur de collision  $K$  sont  $\gamma_{00} = 0$  ( $\psi_{00} = 1$ ) et  $\gamma_{0\alpha}$  ( $\int d\Omega \psi_{0\alpha} = 0$ ).

c) On tient compte maintenant de la perturbation  $K_1$ . Montrer qu'il n'y a pas de correction du premier ordre aux valeurs propres, mais qu'à l'ordre 2 en  $k$  on obtient

$$\gamma_0 = \gamma_{20} = -k^2 v^2 / (3\gamma)$$

$$\gamma_\alpha = \gamma + O(k^2) \quad (\alpha \neq 0).$$

d) Montrer qu'à cet ordre de perturbation, la solution de l'équation de Boltzmann s'écrit

$$\psi = a_0(0)\exp(-Dk^2 t) + \sum_\alpha a_\alpha(0)\exp(-\gamma_\alpha t)$$

$$D = v^2 / (3\gamma) = v^2 \tau / 3$$

où  $\tau = 1/\gamma$  est le temps moyen entre deux collisions. Pour quelle raison physique le premier terme de la somme ci-dessus décroît-il très lentement lorsque  $k$  est très petit?

e) Montrer que si  $t \gg \tau$ ,  $f_1$  satisfait à l'équation de diffusion

$$\frac{\partial f_1}{\partial t} = D\nabla^2 f_1$$

où  $f_1$  représente le nombre de particules ayant la même énergie.

### Exercice 17.4 Transport dans les super-réseaux semiconducteurs

On considère un super-réseau semiconducteur constitué de  $N$  couches successives de couples puits-barrière de potentiel (voir figure ci-après).

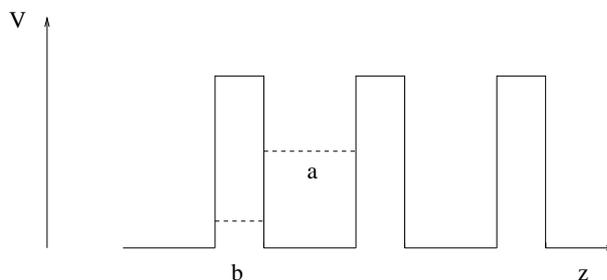


FIG. 5: Géométrie du super-réseau puits-barrière.

Les dimensions transverses sont très grandes devant  $L = a + b$  (problème à une dimension). Le paramètre de maille est très petit devant  $a$  et  $b$ , on traitera les électrons de conduction dans l'approximation de la masse effective :

$$\varepsilon = \frac{\hbar^2 k^2}{2m^*}$$

On prendra la même masse effective dans les couches  $a$  et  $b$ .

### I. États quantiques des électrons dans le super-réseau. Densité d'états

On décrira les porteurs par des ondes planes. Dans les puits il existe des états liés, couplés par effet tunnel à travers les barrières lorsque celles-ci sont assez minces.

- Rappeler quels sont les états quantiques dans un puits isolé avec  $V \rightarrow \infty$ . On prendra dans le puits

$$\varphi_a(r) = e^{i(k_x x + k_y y)} [\alpha e^{ik_z z} + \beta e^{-ik_z z}]$$

- Si  $V$  est fini et  $b$  pas trop grand, on peut prendre des ondes évanescentes dans la barrière

$$\varphi_b(r) = e^{i(k_x x + k_y y)} [\alpha' e^{-qz} + \beta' e^{+qz}]$$

On suppose que  $k_x$  et  $k_y$  sont conservés aux interfaces et on se ramène donc à un problème à une dimension.

- En écrivant la conservation de l'énergie aux interfaces, calculer la relation entre  $q$ ,  $V$  et  $k_z$ .
- On définit des matrices de transfert  $T_a$  et  $T_b$  à travers les puits et les barrières de la manière suivante :

$$\begin{pmatrix} \varphi(a) \\ \frac{\partial \varphi}{\partial z}(a) \end{pmatrix} = T_a \begin{pmatrix} \varphi(0) \\ \frac{\partial \varphi}{\partial z}(0) \end{pmatrix} \quad (164)$$

et

$$\begin{pmatrix} \varphi(a+b) \\ \frac{\partial \varphi}{\partial z}(a+b) \end{pmatrix} = T_b \begin{pmatrix} \varphi(a) \\ \frac{\partial \varphi}{\partial z}(a) \end{pmatrix} \quad (165)$$

Montrer que  $T_a$  et  $T_b$  sont donnés par:

$$T_a = \begin{pmatrix} \cos k_z a & \frac{\sin k_z a}{k_z} \\ -k_z \sin(k_z a) & \cos k_z a \end{pmatrix} \quad (166)$$

$$T_b = \begin{pmatrix} \cosh qb & \frac{\sinh qb}{q} \\ q \sinh qb & \cosh qb \end{pmatrix} \quad (167)$$

En déduire la matrice de transfert  $T$  du couple puits-barrière, et enfin la matrice de transfert  $T_N$  du super-réseau des  $N$  couches.

- Déduire formellement, c'est-à-dire de la matrice  $T_N$ , la condition de quantification des  $k_z$  dans le cas a) d'une solution périodique, à la Born-Von-Karman; b) d'un ancrage parfait aux deux bouts :  $\varphi(0) = 0$  et  $\varphi[N(a+b)] = 0$ . Montrer que ces conditions sont satisfaites lorsque les valeurs propres de  $T$  sont racines d'ordre  $N$  de l'unité, ce qui donne une relation caractéristique entre  $k_z$  et  $q$  que l'on écrira. On se propose de résoudre approximativement cette dernière relation:
- Montrer qu'il existe des solutions à l'équation

$$\cos k_z a \cosh qb - \left( \frac{k_z}{2q} - \frac{q}{2k_z} \right) \sin k_z a \sinh qb = 1 - \frac{n^2 \pi^2}{2N^2}$$

où  $n$  est un entier petit. Soit  $(k_1, q_1)$  la solution de plus petit  $k_z$ . Montrer par un raisonnement simple que cette équation a d'autres solutions  $(k_i, q_i)$  si la différence d'énergie potentielle entre la barrière et le puits est

”moyenne”. Commenter la signification physique de tels états. Ecrire l'équation caractéristique en  $k_z$  pour énergie

$$E(k_z) = n^2 E_0 + t_n \cos k_z b \quad (168)$$

avec  $E_0 = \frac{\hbar^2}{2m^*} \frac{\pi^2}{a^2}$  et  $t_n \ll E_0$ . en déduire la densité d'états du super-réseau que l'on comparera à la densité d'états du puits isolé (succession de plateaux)

## II. Transport dans les super-réseaux:

On a alors un champ électrique  $\vec{\varepsilon}$  constant et uniforme dirigé selon l'axe  $z$ .

1. En utilisant la relation de dispersion trans73 dans la mini-bande ( $k_x, k_y, n = 1$ ) et l'équation de transport de Boltzmann **linéarisée** avec un temps de relaxation  $\tau$  constant, calculer la conductivité  $\sigma$ . On trouvera dans l'expression de  $\sigma$ , l'intégrale:

$$\int \sin^2 k_z b \frac{\partial f_0}{\partial E} dk_z$$

qui est une constante  $C$  que l'on ne calculera pas. Montrer que  $C \neq 0$ . Comparer qualitativement à la conductivité d'un solide homogène de la nature du puits.

2. On utilise la relation de dispersion trans73 mais on tient compte des termes non linéaires de l'équation de Boltzmann. Montrer que l'équation donnant  $g$  est de la forme

$$\frac{\partial g}{\partial k_z} + \alpha g = \beta \sin k_z b \left( -\frac{\partial f_0}{\partial E} \right)$$

Chercher une solution de la forme

$$g = g_0 \exp\left[-\frac{\hbar k_z}{e\varepsilon\tau}\right].$$

Ecrire l'équation satisfaite par  $\partial g_0 / \partial k_z$ . Pour intégrer cette équation on aura intérêt à poser:

$$\sin k_z b = \frac{e^{ik_z b} - e^{-ik_z b}}{2i}$$

et on négligera la variation de  $-\partial f_0 / \partial E$  avec  $k_z$  car  $t_n$  est petit. En déduire le courant  $I$  en fonction de l'intensité du champ appliqué  $\varepsilon$ . A partir de quel champ seuil  $\varepsilon_s$  apparaissent les non-linéarités ? Comment ce champ varie-t-il avec la qualité du super-réseau, c'est-à-dire selon la valeur de  $\tau$ ?

3. Représenter la relation  $I(\varepsilon)$ . Montrer que  $I$  passe par un maximum, calculer  $I_{max}$  et le champ  $\varepsilon_m$  pour lequel il est atteint. Calculer la résistance différentielle du dispositif. Qu'en conclure ?

## XII. EXERCICES ET PROBLÈMES DU CHAPITRE 18: SYSTÈMES DE SPINS FRUSTRÉS

**Exercice 18.1** Démontrer (18.24)-(18-26).

**Exercice 18.2** Déterminer le diagramme de phase de l'état fondamental du modèle d'Ising sur le réseau carré 'damier' (un carré sur deux a un site central): l'interaction entre le spin central et ses premiers voisins est  $J_1$ , celle entre deux spins voisins sur un lien vertical est  $J_2$  et sur un lien horizontal est  $J_3$ . Préciser les phases où il y a un désordre partiel.

**Exercice 18.3** On s'inspire de la méthode présentée dans le paragraphe 18.2 pour déterminer la configuration de l'état fondamental du réseau triangulaire de spins XY en interactions  $J_1$ , antiferromagnétique, entre les premiers voisins et  $J_2$ , entre les seconds voisins. Analyser les cas où  $J_2$  est positif et négatif.

**Exercice 18.4** On étudie l'état fondamental du réseau de Villain de spins XY défini au paragraphe 18.2 en prenant l'interaction antiferromagnétique  $J_{AF} = -\eta J_F$  où  $\eta$  est un coefficient positif. Montrer que la valeur critique de  $\eta$  au-dessus de laquelle la configuration de spins est non colinéaire est  $\eta_c = 1/3$ . Déterminer l'angle entre deux spins voisins dans cet état en fonction de  $\eta$ .

**Réponse:** L'énergie d'une plaquette du du réseau de Villain de spins XY défini dans la figure 18.2, avec spins  $\mathbf{S}_1$  et  $\mathbf{S}_2$  liés par l'interaction antiferromagnétique  $\eta$ , est

$$H_p = \eta \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 - \mathbf{S}_2 \cdot \mathbf{S}_3 - \mathbf{S}_3 \cdot \mathbf{S}_4 - \mathbf{S}_4 \cdot \mathbf{S}_1 \quad (169)$$

où  $(\mathbf{S}_i)^2 = 1$ . La méthode variationnelle donne

$$\delta[H_p - \frac{1}{2} \sum_{i=1}^4 \lambda_i (\mathbf{S}_i)^2] = 0 \quad (170)$$

Par symétrie,  $\lambda_1 = \lambda_2 \equiv \lambda$ ,  $\lambda_3 = \lambda_4 \equiv \mu$ . On a

$$\lambda \mathbf{S}_1 - \eta \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_4 = 0 \quad (171)$$

$$-\eta \mathbf{S}_1 + \lambda \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3 = 0 \quad (172)$$

$$\mathbf{S}_2 + \mu \mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_4 = 0 \quad (173)$$

$$\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_3 + \mu \mathbf{S}_4 = 0 \quad (174)$$

On en déduit

$$(\lambda - \mu)(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) + (\mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_4) = 0 \quad (175)$$

$$(\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) + (\mu + 1)(\mathbf{S}_3 + \mathbf{S}_4) = 0 \quad (176)$$

d'où

$$\mu = - \left[ \frac{1 + \eta}{\eta} \right]^{1/2} \quad (177)$$

$$\lambda = \eta \mu = -[\eta(1 + \eta)]^{1/2} \quad (178)$$

Pour calculer l'angle entre deux spins, par exemple,  $\mathbf{S}_1$  et  $\mathbf{S}_4$ , on écrit

$$(\lambda \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_4)^2 = (-\eta \mathbf{S}_2)^2$$

d'où

$$\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_4 = \cos \theta_{14} = \frac{1}{2\lambda} (\eta^2 - \lambda^2 - 1) = \frac{1}{2} \left[ \frac{\eta+1}{\eta} \right]^{1/2}$$

On trouve de la même manière  $\cos \theta_{23} = \cos \theta_{34} = \cos \theta_{41} = \frac{1}{2} \left[ \frac{\eta+1}{\eta} \right]^{1/2}$ . On a donc  $\theta_{14} = \theta_{23} = \theta_{34} = \theta_{41} \equiv \theta$ . En revanche  $|\theta_{12}| = 3|\theta|$ . Ces solutions existent si  $|\cos \theta| \leq 1$ , c'est-à-dire  $\eta > \eta_c = 1/3$ . Quand  $\eta = 1$ , on a  $\theta = \pi/4$ ,  $\theta_{12} = 3\pi/4$ .

**Exercice 18.5** On étudie l'état fondamental d'un système semi-infini de spins de Heisenberg composé par un empilement des couches de structure triangulaire. On suppose que l'interaction entre les spins premiers voisins appartenant à la surface  $J_s$  est antiferromagnétique. Partout ailleurs, l'interaction entre les spins de la même couche et les spins des couches voisines est ferromagnétique avec la même valeur  $J$ . Déterminer la configuration de l'état fondamental en fonction du rapport  $J_s/J$ .

**Guide:** En l'absence de la seconde couche, les spins de la surface forment la structure  $120^\circ$ , supposée planaire (plan  $xy$ ). Chaque spin de la surface subit maintenant l'interaction ferromagnétique du spin de la seconde couche. A cause de cette interaction, les trois spins d'une plaquette triangulaire de la surface se 'referment' dans la direction  $z$ : Soit  $\alpha$  la projection sur le plan ( $xy$ ) de l'angle entre deux spins voisins de la surface et  $\beta$  l'angle entre un spin de la surface et le spin voisin de la seconde couche (voir figure). On a

$$\alpha_{1,2} = 0, \quad \alpha_{2,3} = \frac{2\pi}{3}, \quad \alpha_{3,1} = \frac{4\pi}{3}. \quad (179)$$

L'énergie d'une cellule composée d'un triangle de la surface et le triangle juste en-dessous donne, pour les spins  $1/2$ ,

$$H_p = -\frac{9J}{2} - \frac{3J}{2} \cos \beta - \frac{9J_s}{2} \cos^2 \beta + \frac{9J_s}{4} \sin^2 \beta. \quad (180)$$

La minimisation de cette énergie on obtient

$$\frac{\partial H_p}{\partial \beta} = \frac{27J_s}{2} \cos \beta \sin \beta + \frac{3J}{2} \sin \beta = 0 \quad (181)$$

d'où

$$\cos \beta = -\frac{J}{9J_s}. \quad (182)$$

Cette solution est valable pour  $J_s < -J/9$ . Pour  $J_s > -J/9$ , l'état fondamental est ferromagnétique.

Note: On peut utiliser un programme décrit dans l'exercice 14.10 pour déterminer numériquement cette structure. L'accord est parfait avec la formule ci-dessus.

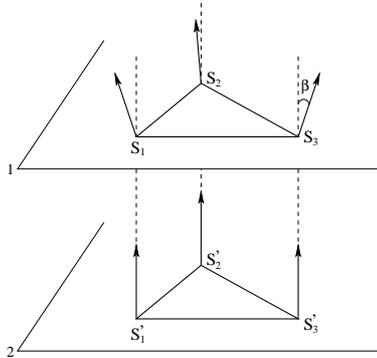


FIG. 6: Configuration de spin de l'état fondamental. La projection sur le plan  $(xy)$  de l'angle entre deux spins voisins de la surface esr  $\alpha = 120^\circ$ , l'angle entre deux spins sur l'axe  $z$  est  $\beta$ .

**Exercice 18.6** Calculer le spectre des magnons du réseau triangulaire de spins de Heisenberg en interaction antiferromagnétique entre les premiers voisins. Estimer la longueur de spin à  $T = 0$ .