

I	APPROXIMATION DE BORN - OPPENHEIMER	2
----------	--	----------

II	COUPLAGE ELECTRON – PHONON	3
-----------	-----------------------------------	----------

III	COUPLAGE ELECTRONS – PHONONS DANS LES METAUX	5
------------	---	----------

III.1	PREMIERES CONSIDERATIONS	5
--------------	---------------------------------	----------

III.2	EFFET DU COUPLAGE ELECTRONS – PHONONS AU PREMIER ORDRE EN PERTURBATION	8
--------------	---	----------

Interaction électrons - phonons

I Approximation de Born - Oppenheimer

Considérons à nouveau l'hamiltonien général d'un cristal:

$$(1) \quad H = T_{e^-} + V_{e^-e^-} + T_{ion} + V_{ion-ion} + V_{el-ion}$$

La première approximation que nous avons effectuée est de supposer que les ions étaient immobiles. Le problème se résumait alors à un problème purement électronique:

$$(2) \quad H_{e^-} = T_{e^-} + V_{e^-e^-} + V_{e^-ion}$$

On désigne par \vec{R} l'ensemble des positions des ions, c'est-à-dire que l'on a, si l'on suppose les ions identiques de masse M :

$$(3) \quad \vec{R} = \{\vec{R}_1, \dots, \vec{R}_{N_0}\}$$

On désigne de même par \vec{r} l'ensemble des positions de électrons:

$$(4) \quad \vec{r} = \{\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N\}, \text{ avec } N = ZN_0.$$

Imaginons alors que, pour \vec{R} donné, on connaisse les vecteurs propres de H_{e^-} , notés $\psi_n(\vec{r}, \vec{R})$.

Décomposons alors les solutions de H sur la base de ces fonctions propres:

$$(5) \quad \Phi(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_n \chi_n(\vec{R}) \psi_n(\vec{r}, \vec{R}), \text{ avec } H\Phi - E\Phi = 0$$

L'équation aux valeurs propres de H implique alors:

$$(6) \quad H\Phi - E\Phi = H_{e^-}\Phi + [T_{ion} + V_{ion-ion}]\Phi - E\Phi, \text{ soit}$$

$$(7) \quad H\Phi - E\Phi = \sum_n (E_n(\vec{R}) - E) \chi_n(\vec{R}) \psi_n(\vec{r}, \vec{R}) + \sum_n (T_{ion} + V_{ion-ion}) \chi_n \psi_n$$

Si on multiplie cette relation par ψ_n^* , et que l'on intègre sur \vec{r} , on obtient:

$$(8) \quad 0 = (E_n(\vec{R}) - E + V_{ion-ion}) \chi_n(\vec{R}) + \sum_n \langle \psi_n | T_{ion} | \psi_n \rangle \chi_n(\vec{R}),$$

puisque $V_{ion-ion}$ ne dépend pas de \vec{r} .

Or on a:

$$(9) \quad T_{ion} = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_{i=1}^{N_0} \Delta_{\vec{R}_i},$$

et donc:

$$(10) \quad \langle \psi_n | T_{ion} | \psi_n \rangle = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_i \left\{ \langle \psi_n | \Delta_{\vec{R}_i} \psi_n \rangle \chi_n(\vec{R}) + 2 \langle \psi_n | \vec{\nabla}_{\vec{R}_i} \psi_n \rangle \cdot \vec{\nabla}_{\vec{R}_i} \chi_n + \langle \psi_n | \Delta_{\vec{R}_i} \chi_n \right\}$$

On obtient au final:

$$(11) \quad (E_n(\vec{R}) - E + V_{ion-ion} + T_{ion})\chi_n(\vec{R}) + \sum_n c_{n'n}\chi_n(\vec{R}) = 0,$$

avec $c_{n'n} = A_{n'n}(\vec{R}, \vec{\nabla}_{\vec{R}}) + B_{n'n}(\vec{R})$ et

$$(12) \quad A_{n'n} = -\frac{\hbar^2}{M} \sum_i \langle \psi_n | \vec{\nabla}_i \psi_n \rangle_{\vec{r}} \cdot \vec{\nabla}_i \text{ et}$$

$$(13) \quad B_{n'n} = -\frac{\hbar^2}{2M} \sum_i \langle \psi_n | \Delta_i \psi_n \rangle_{\vec{r}}$$

L'approximation de Born – Oppenheimer revient alors à négliger les termes non diagonaux $c_{n'n}$. On est alors ramené à l'équation aux valeurs propres:

$$(14) \quad [E_n(\vec{R}) - E + V_{ion-ion} + T_{ion}]\chi_n(\vec{R}) = 0,$$

ce qui correspond à la résolution des phonons dans un potentiel, où E_n est la contribution de la distribution électronique à ce potentiel. Les χ_n sont donc les fonctions d'ondes des phonons.

Autrement exprimé, cette approximation revient à négliger l'action de T_{ion} sur les fonction d'ondes électroniques ψ_n , ce qui revient à l'approximation de Born – Oppenheimer, et dans ce cas $\psi(\vec{r}, \vec{R})\chi(\vec{R})$ est fonction propre de H .

Le terme adiabatique traduit le fait que le mouvement des ions est suffisamment lent pour qu'il n'y ait pas de couplage entre ψ_n et χ_n .

L'étude du couplage entre électrons et phonons revient alors à tenir compte des $c_{n'n}$.

A partir de maintenant, on notera:

$$(15) \quad \psi_n(\vec{r}, \vec{R})\chi_{nj}(\vec{R}) \equiv |n, j\rangle, n \text{ désignant l'état électronique et } j \text{ l'état de phonon.}$$

II Couplage électron – phonon

Dans le cadre de l'hypothèse adiabatique, on a donc:

$$(16) \quad H_{ad} = \sum_{n,j} \langle n, j | H | n, j \rangle |n, j\rangle \langle n, j|,$$

puisque les $|n, j\rangle$ sont vecteurs propres de H .

Par contre, en dehors de cette hypothèse, H n'est plus diagonal dans cette base et s'écrit donc très généralement:

$$(17) \quad H_{e-ph} = \sum_{\substack{n \neq n' \\ n, n'}} \sum_{j, j'} \langle n, j | H | n', j' \rangle |n, j\rangle \langle n', j'|$$

On doit donc à présent calculer le terme:

$$(18) \quad \langle n, j | H | n', j' \rangle = \langle \psi_n \chi_{n,j} | H | \psi_{n'} \chi_{n',j'} \rangle.$$

Or, dans le paragraphe précédent, on a vu que pour $n \neq n'$,

$$(19) \quad \langle \psi_n | H | \psi_{n'} \chi_{n',j'} \rangle = c_{nn'} \chi_{n',j'}, \text{ ce qui implique que}$$

$$(20) \quad \langle n, j | H | n', j' \rangle = \langle \chi_{nj} | c_{nn'} | \chi_{n',j'} \rangle$$

Par ailleurs, pour évaluer $c_{nn'}$, il faut évaluer $\vec{\nabla}_i \psi_{n'}$. On suppose par ailleurs connues les fonctions à l'équilibre, c'est-à-dire pour $\vec{R}_i = \vec{R}_i^{(0)}$, $\psi_n^{(0)}$ et $V_{e^- - ion}(\vec{r} - \vec{R}^{(0)})$.

Lorsque l'on sort de l'équilibre, il apparaît une modification du potentiel donnée par:

$$(21) \quad \delta V_{e^- - ion} = V_{e^- - ion}(\vec{r} - \vec{R}) - V_{e^- - ion}(\vec{r} - \vec{R}^{(0)})$$

On va alors utiliser une technique de perturbation au premier ordre. Les fonction d'ondes électroniques sont alors modifiées comme suit:

$$(22) \quad |\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_{\substack{n' \neq n \\ n, n'}} |\psi_{n'}^{(0)}\rangle \frac{\langle \psi_{n'}^{(0)} | \delta V | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}}$$

Or on sait que

$$(23) \quad \delta V = \sum_i \vec{W}_i^{(0)} \cdot \vec{u}_i, \text{ où } \vec{u}_i \text{ est le déplacement de l'ion } i \text{ et } \vec{W}_i^{(0)} = \left(\vec{\nabla}_i V_{e^- - ion} \right)_{\vec{R}_i = \vec{R}_i^{(0)}},$$

au premier ordre en $\vec{u}_i = \vec{R}_i - \vec{R}_i^{(0)}$.

On a donc:

$$(24) \quad |\psi_n\rangle = |\psi_n^{(0)}\rangle + \sum_i \sum_{n' \neq n} |\psi_{n'}^{(0)}\rangle \frac{\langle \psi_{n'}^{(0)} | \vec{W}_i^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} \vec{u}_i$$

On va donc effectuer un développement au premier ordre en \vec{u}_i , et donc en \vec{R}_i . On a donc à cet ordre $B_{nn} = 0$, puisque Δ_i est du second ordre.

Par ailleurs, on a, d'après l'équation (24):

$$(25) \quad \vec{\nabla}_i \psi_n = \sum_{n' \neq n} \psi_{n'}^{(0)} \frac{\langle \psi_{n'}^{(0)} | \vec{W}_i^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}},$$

ce qui implique que, d'après la définition (12) de A_{nn} :

$$(26) \quad A_{nn} = -\frac{\hbar^2}{M} \sum_i \langle \psi_n^{(0)} | \sum_{n'' \neq n} \psi_{n''}^{(0)} \frac{\langle \psi_{n''}^{(0)} | \vec{W}_i^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_{n''}^{(0)}} \cdot \vec{\nabla}_i$$

D'après les conditions d'orthonormalisation, on a $n'' = n$, et donc:

$$(27) \quad A_{nn} = -\frac{\hbar^2}{M} \sum_i \frac{\langle \psi_n^{(0)} | \vec{W}_i^{(0)} | \psi_n^{(0)} \rangle}{E_n^{(0)} - E_n^{(0)}} \cdot \vec{\nabla}_i$$

En se souvenant que, puisque $B_{nn} = 0$ au premier ordre, on a $c_{nn} = A_{nn}$, on va pouvoir évaluer le terme (20):

$$(28) \quad \langle n, j | H | n', j' \rangle = -\frac{\hbar^2}{M} \sum_i \frac{\langle \psi_n^{(0)} | \vec{W}_i^{(0)} | \psi_{n'}^{(0)} \rangle}{E_{n'}^{(0)} - E_n^{(0)}} \langle \chi_{nj} | \vec{\nabla}_i | \chi_{n', j'} \rangle.$$

Ceci constitue donc la perturbation pour calculer la modification des fonctions électroniques lors de petits déplacements des ions.

Posons alors $H_{ion, n} = T_{ion} + V_{ion-ion} + E_n(\vec{R})$. Les fonctions propres de phonons sont solutions de cet hamiltonien avec

$$(29) \quad H_{ion, n} \chi_{nj} = E_{nj} \chi_{nj}$$

Par ailleurs, on a:

$$(30) \quad H_{ion,n} \vec{u}_i - H_{ion,n}, \vec{u}_i = -\frac{\hbar^2}{2M} [\Delta_i, \vec{u}_i] + (E_n - E_{n'}) \vec{u}_i,$$

puisque $V_{ion-ion}$ ne dépend que de \vec{u}_i et de n , et que T_{ion} ne dépend pas de n . On a donc, d'après les résultats sur les commutateurs:

$$(31) \quad H_{ion,n} \vec{u}_i - H_{ion,n}, \vec{u}_i = -\frac{\hbar^2}{M} \vec{\nabla}_i + (E_n - E_{n'}) \vec{u}_i$$

On peut donc réexprimer le terme $\langle \chi_{nj} | \vec{\nabla}_i | \chi_{n',j'} \rangle$ en évaluant la moyenne de l'égalité (31) entre ces deux vecteurs:

$$(32) \quad (E_{nj} - E_{n',j'}) \langle \chi_{nj} | \vec{u}_i | \chi_{n',j'} \rangle = -\frac{\hbar^2}{M} \langle \chi_{nj} | \vec{\nabla}_i | \chi_{n',j'} \rangle + (E_n - E_{n'}) \langle \chi_{nj} | \vec{u}_i | \chi_{n',j'} \rangle,$$

ce qui se réécrit au premier ordre, puisque $\langle \chi_{nj} | \vec{u}_i | \chi_{n',j'} \rangle$ est déjà du premier ordre:

$$(33) \quad -\frac{\hbar^2}{M} \langle \chi_{nj} | \vec{\nabla}_i | \chi_{n',j'} \rangle = (E_{nj} - E_{n',j'} + E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}) \langle \chi_{nj} | \vec{u}_i | \chi_{n',j'} \rangle$$

En insérant cette expression dans l'équation (28), on obtient finalement:

$$(34) \quad \boxed{\langle n, j | H | n', j' \rangle = \left(1 - \frac{E_{n',j'} - E_{nj}}{E_n^{(0)} - E_{n'}^{(0)}} \right) \sum_i \langle \psi_n^{(0)} | \vec{W}_i^{(0)} | \psi_{n'}^{(0)} \rangle_{\vec{r}} \langle \chi_{nj} | \vec{u}_i | \chi_{n',j'} \rangle_{\vec{u}}}$$

III Couplage électrons – phonons dans les métaux

III.1 Premières considérations

On considère une bande de conduction comportant N électrons, auxquels sont associés N vecteurs d'ondes $\vec{k}_1 \dots \vec{k}_N$. La fonction d'onde totale des N électrons s'obtient alors par un déterminant de Slater:

$$(35) \quad \psi_n^{(0)} = D(\vec{k}_1 \dots \vec{k}_N)$$

En ce qui concerne les phonons, qui sont des bosons, leur fonction d'onde globale s'écrit:

$$(36) \quad \chi_{nj} = \prod_{\lambda} |n_{\lambda}\rangle$$

Nous allons aborder le problème du couplage de la manière suivante : lors de l'interaction, il y aura diffusion d'un électron d'un état \vec{k}_{i_0} vers un état \vec{k}'_{i_0} , et l'annihilation d'un boson dans l'état λ_0 , c'est-à-dire $|n_{\lambda_0}\rangle \rightarrow |n_{\lambda_0} - 1\rangle$.

La correspondance avec les notations du paragraphe précédent se fait de la manière suivante:

$$(37) \quad \begin{cases} |n, j\rangle \leftrightarrow D(\vec{k}_1 \dots \vec{k}_{i_0} \dots \vec{k}_N) |n_{\lambda_0}\rangle \prod_{\lambda \neq \lambda_0} |n_{\lambda}\rangle \\ |n', j'\rangle \leftrightarrow D(\vec{k}_1 \dots \vec{k}'_{i_0} \dots \vec{k}_N) |n_{\lambda_0} - 1\rangle \prod_{\lambda \neq \lambda_0} |n_{\lambda}\rangle \end{cases}$$

Par ailleurs, en seconde quantification:

$$(38) \quad \frac{1}{\sqrt{n_{\lambda_0}}} c_{\vec{k}'_{i_0}}^+ c_{\vec{k}_{i_0}} a_{\lambda_0} \leftrightarrow |n', j'\rangle \langle n, j|$$

Il faut maintenant évaluer le terme $\langle n, j | H | n', j' \rangle$.

Or on a vu dans le chapitre sur les phonons que, dans le cas d'un atome par maille:

$$(39) \quad \vec{u}_i = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN_0}} \sum_{\vec{q}, s} \frac{\vec{e}_{\vec{q}, s}}{\sqrt{\omega_{\vec{q}, s}}} (a_{-\vec{q}, s}^+ + a_{\vec{q}, s}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i^0}$$

On a donc, en posant $\lambda_0 = (\vec{q}_0, s_0)$:

$$(40) \quad \langle \chi_{nj} | \vec{u}_i | \chi_{n'j'} \rangle = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN_0}} \sqrt{n_{\lambda_0}} \vec{e}_{\lambda_0} e^{i\vec{q}_0 \cdot \vec{R}_i^{(0)}},$$

puisque le seul processus que l'on considère ici est l'annihilation d'un phonon dans l'état λ_0 .

En ce qui concerne le terme électronique, on va faire l'hypothèse des potentiels rigides, c'est-à-dire que la forme du potentiel ne change pas si l'on déplace les ions (ceci est une grosse approximation, qui peut ne pas être compatible avec l'écrantage, en particulier). Ceci s'écrit mathématiquement:

$$(41) \quad V_{e^-ion}(\vec{r}, \vec{R}) = \sum_{i,j} U(\vec{r}_j - \vec{R}_i).$$

On a alors, d'après la définition (23) de $\vec{W}_i^{(0)}$:

$$(42) \quad \vec{W}_i^{(0)} = \sum_i \vec{\nabla}_{R_i} U(\vec{r}_j - \vec{R}_i) = - \sum_j \vec{\nabla}_{r_j} U(\vec{r}_j - \vec{R}_i),$$

et donc:

$$(43) \quad \langle \psi_n^{(0)} | \vec{W}_i^{(0)} | \psi_{n'}^{(0)} \rangle = - \langle \vec{k}_{i_0} | \vec{\nabla}_{\vec{r}} U(\vec{r} - \vec{R}_i^{(0)}) | \vec{k}_{i_0} \rangle$$

Dorénavant, pour ne pas alourdir l'écriture, nous n'allons plus particulariser les indices avec λ_0 et i_0 .

On trouve donc finalement:

$$(44) \quad \begin{aligned} & \langle nj | H | n' j' \rangle \langle nj | \\ &= - \sqrt{\frac{\hbar}{2MN_0\omega_{\vec{q}, s}}} \sqrt{n_{\vec{q}, s}} \vec{e}_{\vec{q}, s} \cdot \sum_i \langle \vec{k} | \vec{\nabla}_{\vec{r}} U(\vec{r} - \vec{R}_i^{(0)}) | \vec{k} \rangle e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i^{(0)}} \frac{1}{n_{\vec{q}, s}} c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} a_{\vec{q}, s} \end{aligned}$$

On peut alors supposer que la bande est bien décrite en terme d'ondes planes, c'est-à-dire $\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}$. En fait, ceci n'est qu'un allègement supplémentaire d'écriture, l'utilisation de fonctions de Bloch ne changeant rien à la physique du problème, mais conduisant à des écritures plus compliquées.

Or, dans ce cas, on a:

$$(45) \quad \langle \vec{k} | \vec{\nabla} U(\vec{r} - \vec{R}_i^{(0)}) | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\Omega} \int_{\Omega} d^3\vec{r} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}} \vec{\nabla} U(\vec{r} - \vec{R}_i^{(0)})$$

$$(46) \quad \langle \vec{k} | \vec{\nabla} U(\vec{r} - \vec{R}_i^{(0)}) | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\Omega} e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}_i^{(0)}} \int_{\Omega} d^3\vec{r} \vec{\nabla} U(\vec{r}) e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}}$$

$$(47) \quad \langle \vec{k} | \vec{\nabla} U(\vec{r} - \vec{R}_i^{(0)}) | \vec{k} \rangle = \frac{-i}{\Omega} (\vec{k} - \vec{k}') e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{R}_i^{(0)}} \int_{\Omega} d^3\vec{r} U(\vec{r}) e^{i(\vec{k} - \vec{k}') \cdot \vec{r}},$$

par intégration par parties.

Si on introduit alors la transformée de Fourier de U :

$$(48) \quad \bar{u}(\vec{q}) = \frac{1}{\Omega_0} \int_{\Omega} U(\vec{r}) e^{i\vec{q} \cdot \vec{r}} ,$$

on obtient que:

$$(49) \quad \left\langle \vec{k} \left| \vec{\nabla} U(\vec{r} - \vec{R}_i^{(0)}) \right| \vec{k}' \right\rangle = -\frac{i}{N} (\vec{k}' - \vec{k}) \bar{u}(\vec{k}' - \vec{k}) e^{i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{R}_i^{(0)}}$$

Seul l'exponentielle dans cette expression dépend de l'indice i , ce qui signifie que lorsque l'on va sommer sur i , on va avoir, selon le résultat bien connu:

$$(50) \quad \sum_i e^{i(\vec{k} - \vec{k}' + \vec{q}) \cdot \vec{R}_i^{(0)}} = NS(\vec{k}' - \vec{k} - \vec{q}),$$

où S est le facteur de structure du réseau réciproque, c'est-à-dire $S(\vec{k}) = 1$ si $\vec{k} \in R.R.$, 0 sinon.

On se retrouve finalement avec une expression, valable dans le cas d'un métal avec un seul atome par maille, dans l'hypothèse de potentiels rigides et dans une description en ondes planes:

$$(51) \quad \left\langle n, j \left| H \right| n', j' \right\rangle \left\langle n', j' \right| \left\langle nj \right| = -i \sqrt{\frac{\hbar n_{\vec{q}s}}{2MN\omega_{\vec{q}s}}} \bar{e}_{\vec{q}s}(\vec{k}' - \vec{k}) \bar{u}(\vec{k}' - \vec{k}) c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} a_{\vec{q}s} S_{\vec{q} - \vec{k}' + \vec{k}}$$

D'où, si l'on reprend l'expression (16), l'expression de l'hamiltonien total:

$$(52) \quad H_{e^- - ph}^{annihil} = -i \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, s} S_{\vec{k}' - \vec{k} - \vec{q}}(\vec{k}' - \vec{k}) \bar{e}_{\vec{q},s} \frac{\bar{u}(\vec{k}' - \vec{k})}{\sqrt{\omega_{\vec{q},s}}} c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} a_{\vec{q}s}$$

On peut refaire un calcul strictement identique, mais avec la création d'un phonon. Les seules choses qui vont changer sont l'étape (40) du calcul précédent, mais puisque l'on crée un phonon de vecteur d'onde $-\vec{q}$, les termes comportant du q ne vont pas être modifiés, ainsi que l'étape (38), où le terme d'annihilation $a_{\vec{q},s}$ va être transformé en $a_{-\vec{q},s}^+$.

On va donc avoir un hamiltonien global réunissant les processus de création et d'annihilation d'un phonon:

$$(53) \quad H_{e^- - ph} = \sum_{\vec{k}, \vec{k}', \vec{q}, s} g_{\vec{q},s}(\vec{k}' - \vec{k}) S_{\vec{k}' - \vec{k} - \vec{q}} c_{\vec{k}}^+ c_{\vec{k}} (a_{-\vec{q}s}^+ + a_{\vec{q}s}),$$

$$\text{avec } g_{\vec{q},s}(\vec{k}' - \vec{k}) = -i \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{q}s}}} \bar{e}_{\vec{q},s}(\vec{k}' - \vec{k}) \bar{u}(\vec{k}' - \vec{k})$$

Rappelons à ce stade les hypothèses effectuées pour aboutir à cette expression:

- petits déplacements des ions
- processus d'interaction à deux électrons et un seul phonon
- cristal avec un atome par maille
- potentiels rigides
- traitement en ondes planes

On voit dans l'expression de l'hamiltonien qu'il y a alors deux types de processus qui vont être pris en compte dans ce cadre:

- les processus normaux, où $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q}$
- les processus *Umklapp*, où $\vec{k}' = \vec{k} + \vec{q} + \vec{\bar{k}}$, avec $\vec{\bar{k}} \in R.R.$

Ceci étant, dans les métaux, les processus dominants sont les processus normaux. Remarquons que dans ce cas, il intervient dans l'hamiltonien un terme en $(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{e}_{\vec{q}} = \vec{q} \cdot \vec{e}_{\vec{q}}$, ce qui signifie que les phonons transverses ne contribuent pas au couplage électrons – phonons dans le cadre des processus normaux (ceci n'est bien entendu plus vrai dans le cas des processus Umklapp).

III.2 Effet du couplage électrons – phonons au premier ordre en perturbation

Dans un métal, on va donc négliger les processus Umklapp. L'hamiltonien de couplage va donc s'écrire:

$$(54) \quad H_{e-ph} = \sum_{\vec{k}, \vec{q}, s} g_{\vec{q}, s} c_{\vec{k}+\vec{q}}^+ c_{\vec{k}} (a_{\vec{q}, s} + a_{-\vec{q}, s}^+) \text{ avec } g_{\vec{q}, s} = -i \sqrt{\frac{\hbar}{2MN}} \vec{q} \cdot \vec{e}_{\vec{q}}^{(s)} \frac{\bar{u}(\vec{q})}{\sqrt{\omega_{\vec{q}}^{(s)}}}$$

En utilisant la règle d'or de Fermi, nous allons maintenant évaluer la probabilité pour qu'un électron soit diffusé de l'état \vec{k} vers l'état $\vec{k} + \vec{q}$ avec annihilation d'un phonon \vec{q} .

On a:

$$(55) \quad P_{\vec{k}, \vec{k}+\vec{q}}^{annihil} = \frac{2\pi}{\hbar} \left| \langle \vec{k} + \vec{q}, n_{\vec{q}} - 1 | H_{e-ph} | \vec{k}, n_{\vec{q}} \rangle \right|^2 \delta(E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}} - \hbar\omega_{\vec{q}})$$

Ceci se réécrit, en utilisant l'expression (54) de l'interaction:

$$(56) \quad P_{\vec{k}, \vec{k}+\vec{q}}^{annihil} = \frac{2\pi}{\hbar} |g_{\vec{q}}^{(s)}|^2 n_{\vec{q}} \delta(E_{\vec{k}+\vec{q}} - E_{\vec{k}} - \hbar\omega_{\vec{q}}^{(s)})$$

On peut de même évaluer la probabilité de diffusion d'un électron de \vec{k} vers $\vec{k} - \vec{q}$ avec création d'un phonon \vec{q} :

$$(57) \quad P_{\vec{k}, \vec{k}-\vec{q}}^{création} = \frac{2\pi}{\hbar} |g_{-\vec{q}}^{(s)}|^2 (n_{\vec{q}} + 1) \delta(E_{\vec{k}-\vec{q}} - E_{\vec{k}} + \hbar\omega_{-\vec{q}})$$

Or, on a, d'après le cours sur les phonons:

- $|\vec{e}_{\vec{q}}| = |\vec{e}_{-\vec{q}}|$
- $\omega_{\vec{q}} = \omega_{-\vec{q}}$

Et de plus, comme U est réel, $|\bar{u}(-\vec{q})| = |\bar{u}(\vec{q})|$, ce qui implique que $|g_{-\vec{q}}^{(s)}| = |g_{\vec{q}}^{(s)}|$. On a donc finalement:

$$(58) \quad P_{\vec{k}, \vec{k}-\vec{q}}^{création} = \frac{2\pi}{\hbar} |g_{\vec{q}}^{(s)}|^2 (n_{\vec{q}} + 1) \delta(E_{\vec{k}-\vec{q}} - E_{\vec{k}} + \hbar\omega_{\vec{q}})$$

Remarque : à température nulle, il n'y pas de phonons, ni de couplage électrons – phonons. En effet:

- $P^{annihil} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0$ car $n_{\vec{q}} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0$
- $P^{création} \xrightarrow{T \rightarrow 0} 0$, puisque avec une statistique de Fermi – Dirac pour les électrons, on doit avoir $E_{\vec{k}} < E_{\vec{k}-\vec{q}}$ et $E_{\vec{k}-\vec{q}} - E_{\vec{k}} + \hbar\omega_{\vec{q}} = 0$ avec $\hbar\omega_{\vec{q}} > 0$, ce qui est impossible (violation de la conservation de l'énergie).

