

# Introduction au Problème à N Corps et à la Physique des Fermions Fortement Corrélés

Antoine Georges et Thierry Giamarchi

Mars - Juin 2002

*Nous remercions Romain Bel pour son aide dans la préparation de ces notes*

## Preambule: Contenu du cours

Ce cours constitue une introduction aux méthodes modernes du problème à  $N$  corps. L'accent est mis sur la similarité des concepts et des techniques employées avec celles introduites dans le cours de théorie des champs. On s'efforcera, sur des exemples simples, de faire le lien entre les méthodes théoriques introduites et des effets physiques observés. Ces exemples seront empruntés à la physique des solides, et concerneront les effets d'interaction sur le gaz électronique d'un métal.

### Déroulement prévu du cours, à titre indicatif:

**Cours 1: Introduction.** Notions importantes: Etat fondamental, états excités. Excitations élémentaires et leur description par une théorie effective à basse énergie. Exemples physiques. TD1: Rappels de seconde quantification.

**Cours 2: Fonctions de Green à  $T = 0$ .** Fonctions de Green pour le problème à  $N$  corps, à  $T=0$ . Cas des fermions libres (TD2). Expression des valeurs moyennes d'observables. Contenu physique des fonctions de Green: lien avec le spectre d'excitations. Notion de "quasiparticule". Expériences de photoémission.

**Cours 3. Fonctions de Green à température finie.** Formalisme de Matsubara.

**Cours 4-5. Traitement perturbatif des interactions dans un système de fermions.** Représentation d'interaction, matrice  $S$ . Développements diagrammatiques (règles de Feynman). Calcul de la self-énergie au deuxième ordre: temps de vie des quasiparticules. Quelques notions sur les fonctions de Green à deux particules et fonctions de réponse.

**Cours 6. La théorie des liquides de Fermi:** approche phénoménologique de Landau et quelques éléments de justification formelle.

**Cours 7. Quelques notions sur les fonctions de Green à deux particules, les fonctions de réponse. et la réponse linéaire**

**Cours 8. Au delà des approches perturbatives: le problème d'une impureté localisée dans un gaz d'électrons.** "Catastrophe infrarouge". Applications aux singularités des spectres d'absorption des rayons X dans les métaux.

**Cours 9. Une impureté magnétique dans un gaz d'électrons: l'effet Kondo.** Introduction simple au groupe de renormalisation en physique de la matière condensée.

**Cours 10-...?. Introduction aux systèmes unidimensionnels.** Echec de la théorie des liquides de Fermi. "Déconfinement" des excitations de charge et de spin. Bosonisation.

## SUGGESTIONS BIBLIOGRAPHIQUES

### 1. FORMALISME GENERAL

Landau et Lifshitz, *Physique Statistique, tome II* (par Lifshitz et Pitaevskii). [Un classique, bien sûr. Très dense]

Abrikosov, Gorkov, Dzyaloshinski *Methods of quantum field theory in statistical physics* Dover ed. [Une sorte de version très détaillée du précédent]

Fetter et Walecka *Quantum theory of many-particle systems* Mc Graw Hill ed. [Utile pour le formalisme. Précis, détaillé et démodé]

G.D Mahan *Many particle Physics* Plenum ed. [Un classique de base. Utile pour le formalisme détaillé sous une forme plus moderne, et pour diverses applications. Les discussions physiques ne sont pas toujours très satisfaisantes. Certains sujets sont baclés (ex: effet Kondo)]

J.F. Negele et H. Orland *Quantum many-particle physics* Addison-Wesley. [Détaille en particulier les formalismes d'intégrale fonctionnelle].

R.D Mattuck *A guide to Feynman diagrams in the many-body problem, 2nd ed.* Dover. Pub. [Un certain sens de l'humour! Lecture divertissante et recommandée du chapitre 0]

### 2. LIQUIDES DE FERMI, THEORIE DE LANDAU.

D.Pines et P.Nozieres *The theory of quantum liquids, Vol I* Benjamin ed. [Grand classique sur la théorie des liquides de Fermi]

P.Nozieres *Le problème à N corps* Dunod ed. [En français! Assez spécialisé, mais utile pour comprendre le sens du formalisme].

R. Shankar, *Renormalization-group approach to interacting fermions* Reviews of Modern Physics, Vol.66, (1994) p.129. [Une introduction à la théorie des liquides de Fermi utilisant le langage plus moderne du groupe de renormalisation].

### 3. ASPECTS PLUS MODERNES, LIENS AVEC LA THEORIE DES CHAMPS.

E.Fradkin, *Field Theories of Condensed Matter Systems* Addison- Wesley ed. [Un livre se proposant de couvrir de nombreux sujets, parfois un peu superficiel et imprécis].

A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer ed. [Utile et précis, focalisé sur le magnétisme quantique].

A. Tsvelik, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics*, Cambridge Univ. Press. [Un bon livre, un peu dense et assez difficile. Consacré surtout aux systèmes 1D]. Voir aussi le livre plus récent et détaillé consacré aux systèmes 1D par Gogolin, Nersesyan et Tsvelik.

H. Schulz, *Fermi liquids and non-Fermi liquids* Preprint cond-mat/9503150 (accessible par <http://xxx.lpthe.jussieu.fr>) [Notes d'un cours donné aux Houches, abordant les liquides

de Fermi et surtout les systèmes unidimensionnels: bosonisation, ansatz de Bethe].

S. Sachdev, *Quantum Phase Transitions* Cambridge University Press. [Un excellent livre récent consacré aux transitions de phases à température nulle (cadre formel et applications)].

#### 4. REFERENCES GENERALES EN PHYSIQUE DES SOLIDES.

N.W Ashcroft et N.D Mermin *Solid State Physics* [Un excellent livre de base; quelques lacunes sur les sujets les plus récents].

J.Callaway *Quantum theory of the solid state* Academic Press [Bien fait, surtout pour les applications à la physique du solide. Parfois superficiel sur les aspects théoriques].

P.W Anderson *Concepts in solids* Benjamin ed. [Un livre très simple sur le concept d'excitation élémentaire, tourné vers la physique. Déjà ancien mais sans une ride!]

P.W Anderson *Basic notions of condensed matter physics* Frontiers in physics [Felix qui potuit rerum cognoscere causas!]

# Contents

<b>1</b>	<b>Introduction</b>	<b>7</b>
1.1	Qu'est ce que le problème à N corps ? . . . . .	7
1.2	Etat fondamental, Excitations de basse énergie . . . . .	8
1.3	Théorie effective de basse énergie . . . . .	10
1.4	Excitations élémentaires et quasiparticules. . . . .	11
1.5	Exemples . . . . .	11
<b>2</b>	<b>Fonctions de Green à température nulle</b>	<b>15</b>
2.1	Définition . . . . .	15
2.2	Lien avec le spectre d'excitations: représentation spectrale . . . . .	17
2.3	Propriétés générales (Exercices) . . . . .	19
2.3.1	Expression pour dse fermions libres . . . . .	19
2.3.2	Expression des valeurs moyennes d'opérateurs. . . . .	19
2.4	Signification physique de la fonction de Green . . . . .	20
2.5	Densité spectrale et quasiparticules . . . . .	21
2.6	Self-énergie et quasiparticules . . . . .	24
2.7	Mesure de la densité spectrale: expériences de photoémission . . . . .	25
2.8	Annexe/TD1: Notations et rappels de "seconde quantification" . . . . .	25
2.8.1	Ecriture des opérateurs à un corps . . . . .	25
2.8.2	Opérateurs à deux corps . . . . .	27
<b>3</b>	<b>Fonctions de Green à température finie</b>	<b>29</b>
3.1	Définition; temps imaginaire . . . . .	29
3.2	Représentation spectrale . . . . .	31
3.3	Fonctions retardées et avancées; limite $T \rightarrow 0$ . . . . .	32
3.4	Sommes sur les fréquences de Matsubara . . . . .	33

<b>4</b>	<b>Théorie de perturbation et diagrammes de Feynman</b>	<b>35</b>
4.1	Représentation d'interactions . . . . .	35
4.1.1	Calcul de l'opérateur d'évolution $U(\tau)$ . . . . .	37
4.2	Calcul de la fonction de Green au premier ordre . . . . .	40
4.3	Diagrammes de Feynman . . . . .	43
4.3.1	Théorème de Wick . . . . .	43
4.3.2	Diagrammes de Feynman d'ordre 1 . . . . .	45
4.3.3	Diagrammes de Feynman d'ordre 2 . . . . .	47
4.3.4	Equation de Dyson. Self-énergie $\Sigma$ . . . . .	50
4.4	Discussion physique . . . . .	55
4.4.1	Poids spectral des quasi-particules . . . . .	55
4.4.2	Masse effective . . . . .	56
4.4.3	Temps de vie des quasi-particules . . . . .	58
<b>5</b>	<b>Réponse linéaire et RPA</b>	<b>61</b>
5.1	Réponse à une perturbation dépendant du temps . . . . .	61
5.2	Moyennes. Opérateur densité . . . . .	62
5.3	Réponse linéaire. Théorème de fluctuation-dissipation . . . . .	64
5.3.1	Résolution de l'équation d'évolution de $\rho$ dans le cadre de la réponse linéaire . . . . .	64
5.3.2	Calcul de la valeur moyenne de $O$ . . . . .	65
5.4	Calcul de $\chi$ . . . . .	66
5.4.1	Expression de $\chi$ en représentation de Matsubara . . . . .	66
5.4.2	Calcul à l'ordre zéro de la compressibilité et de la susceptibilité magnétique . . . . .	68
5.5	Ecrantage. Méthode R.P.A . . . . .	70

# Chapter 1

## Introduction

### 1.1 Qu'est ce que le problème à N corps ?

On traite dans ce cours de systèmes comprenant un grand nombre de particules identiques, lorsque:

- les effets quantiques liés au principe de Pauli sont importants (régime quantique ou “dégénéré”)
- les interactions entre particules sont *a priori* fortes et ne peuvent être négligées.

La première condition est réalisée lorsque la longueur d’onde thermique  $\lambda_T \simeq h/\sqrt{2mkT}$  est supérieure ou de l’ordre de la distance moyenne entre particules. Dans ce cours, nous nous intéresserons en fait exclusivement aux systèmes de fermions, auquel cas cette condition signifie que la température est faible devant la température de Fermi du système:  $T \ll T_F$ .

Dans la pratique, cette condition est réalisée (au laboratoire) pour deux types de systèmes:

- L’Helium 3 liquide (pour lequel  $T_F$  est de l’ordre de quelques Kelvin): la plupart des autres gaz solidifient à basse température avant que les effets quantiques ne soient observables. Des recherches récentes devraient cependant permettre l’étude de certains gaz d’alcalins dans le régime dégénéré (comme le  $Li^7$ ).
- Les électrons dans les métaux (pour lequel  $T_F$  se mesure en electron-Volt: on rappelle que  $1eV \simeq 12000K$ ). Dans ce cas, il peut évidemment être important de tenir compte d’autres degrés de liberté du solide, comme les vibrations du réseau des ions -phonons- et leur couplage aux électrons.

La variété des comportements observés dans ces systèmes, et en particulier leurs *instabilités* possibles vers des phases ordonnées, illustre bien le rôle clé joué par les interactions: supraconductivité, ordre magnétique (onde de densité de spin ferromagnétique, antiferromagnétique, incommensurable), mise en ordre des charges (“onde de densité de charge”), supraconductivité, transition métal-isolant due aux interactions, etc...

Comment expliquer alors le succès spectaculaire de descriptions simplifiées courantes en physique des solides qui négligent les interactions entre électrons ? Cette question conduit directement au concept de *quasi-particule*, qui sera l’un des enjeux majeurs de ce cours. L’idée essentielle est que même si les *interactions nues* entre particules sont a priori très fortes (l’interaction électrostatique répulsive entre électrons d’un solide par exemple), il peut se faire que les excitations de basse énergie du système soient bien décrites par la combinaison de modes d’excitation élémentaires. A basse énergie, un faible nombre de ces modes est mis en jeu, de sorte que les interactions entre ces modes peuvent être traitées par des méthodes de couplages faibles en raison de leur faible densité. De manière plus imagée, chaque particule physique (électron, atome d’ $^3He$ ) est “habillée” par les interactions en une entité nouvelle appelée “quasi-particule”. Un des principaux buts de ce cours est de donner un contenu précis à cette description.

Il peut également arriver qu’une telle description soit mise en échec: dans de telles situations les interactions ont un effet radical nécessitant des méthodes spécifiques, dont certaines seront évoquées dans la deuxième partie de ce cours.

## 1.2 Etat fondamental, Excitations de basse énergie

Confronté à un hamiltonien impliquant  $N \sim 10^{23}$  particules, on doit d’abord se demander quels sont les bonnes quantités à considérer pour caractériser un tel système.

Un programme ambitieux serait, comme pour tout problème de mécanique quantique, la détermination complète (analytique ou numérique) du spectre  $(E_\alpha, \Psi_\alpha)$  des états propres. Ce programme se heurte cependant en général à des difficultés insurmontables, et même dans les très rares cas où il peut être mis en oeuvre les résultats peuvent être très difficiles à exploiter, pour les raisons suivantes:

- La dimension de l’espace de Hilbert est énorme, d’ordre  $e^{cN}$ . La recherche du seul état fondamental peut être un problème très complexe (cas du modèle d’Heisenberg quantique antiferromagnétique p.ex.). A de rares exceptions près (systèmes unidimensionnels intégrables par l’“ansatz de Bethe”), seules des déterminations *approchées* (variationnelles par exemple) de  $|\Psi_0\rangle$  sont possibles.

- Même si on savait déterminer les  $\sim e^{cN}$  états du spectre, il faudrait reconstruire à partir de cette information les fonctions de réponse physique, qui condensent sous une forme compacte l'information utile et comparable aux expériences. Ceci nécessite non seulement la connaissance des fonctions d'onde, mais aussi des éléments de matrice  $\langle \Psi_\alpha | O | \Psi_\beta \rangle$  de l'observable considérée.
- Pris dans son ensemble, le spectre est sensible à tous les détails du problème: nature détaillée des interactions, du réseau, etc... Souvent, les mesures physiques font intervenir des énergies d'excitation faibles, et c'est donc plutôt aux propriétés des *états excités de basse énergie* que l'on s'intéresse. Ces états de basse énergie sont moins sensibles aux détails du système et possèdent des propriétés *d'universalité*, suggérant la possibilité d'une description simplifiée du problème à basse énergie.

Ces remarques importantes ont traditionnellement conduit à faire un peu passer au second plan la détermination des fonctions d'ondes dans les problèmes à N corps, au profit du calcul direct de quantités plus compactes comme les fonctions de Green ou les fonctions de réponse. Le triomphe des méthodes diagrammatiques dans les années 60 a certainement renforcé cette tendance. Il faut cependant garder en tête les exemples où la réflexion sur la nature des fonctions d'onde (du fondamental, et surtout des états excités de basse énergie) a permis de faire les pas décisifs. Parmi ceux-ci, citons en particulier: la théorie B.C.S de la supraconductivité, les fonctions d'onde de Laughlin pour l'effet Hall quantique. Le développement récent de méthodes numériques (détermination du fondamental par l'algorithme de Lanczos par exemple), ou l'intérêt pour les systèmes mésoscopiques contribuent à renforcer l'intérêt qu'il peut y avoir à "penser en terme de fonctions d'onde". Cet aspect ne sera cependant (par manque de temps) que peu abordé dans ce cours.

Des remarques précédentes, il ressort clairement que c'est la compréhension du *spectre des états excités de basse énergie* qui constitue l'enjeu principal dans l'étude d'un système à N corps en interaction. De cette partie du spectre découlent les propriétés thermodynamiques à basse température et les réponses dynamiques du système à une perturbation extérieure faible (susceptibilités, transport). (Ainsi par exemple, la qualité d'une approximation du fondamental  $|\Psi_0\rangle$  par exemple se juge-t-elle moins à la valeur de l'énergie  $\langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle$  qu'à la possibilité de construire une description fidèle des états excités basée sur cet état approché).

Il faut, à ce stade, distinguer deux situations possibles. Désignons par  $E_0(\Omega)$  l'énergie du fondamental pour un volume fini  $\Omega$  du système, et par  $E_1(\Omega)$  l'énergie du premier état excité. On peut avoir, dans la limite thermodynamique  $\Omega \rightarrow \infty$ :

- (i)  $E_1 - E_0 \rightarrow 0$  : il existe alors des états excités d'énergie arbitrairement basse dans

la limite thermodynamique. On dit que le système est “sans gap”.

- (ii)  $E_1 - E_0 \rightarrow \Delta_g \neq 0$ : le premier état excité reste séparé du fondamental par un gap d'énergie finie dans la limite thermodynamique.

On peut être amené à raffiner cette distinction en considérant le premier état excité ayant un (bon) nombre quantique spécifié: on parlera ainsi de gap dans le secteur de spin (premier état excité ayant  $\Delta S \neq 0$ ), ou dans le secteur de charge (ajout d'une particule). Un métal est un système sans gap. Un isolant ferromagnétique ou antiferromagnétique possède un gap dans le secteur de charge mais non dans le secteur de spin (pour une symétrie continue). Un semiconducteur, un supraconducteur sont des exemples de systèmes ayant un gap.

### 1.3 Théorie effective de basse énergie

Les considérations de cette section s'appliquent au cas des systèmes sans gap (i). Dans un système invariant par translation, une valeur de l'impulsion totale peut être associée à chaque état propre. Dans la limite thermodynamique, l'énergie des états excités de basse énergie  $E_{ex} - E_0 = \hbar\omega$  et leur impulsion  $\vec{p} = \hbar\vec{k}$  sont en général reliées par une relation de dispersion de la forme (dans la limite de basse énergie d'excitation  $\omega \rightarrow 0$ ):

$$\omega = c k^z + \dots \quad (1.1)$$

( $z$  est un exposant appelé “exposant de scaling dynamique”).

Ainsi les basses énergies correspondent elles aux *grandes longueurs d'ondes*  $\lambda = 2\pi/k$ , et donc à la *physique de grande distance*. C'est pour cette raison que la nature du spectre de basse énergie est insensible aux détails du problème à courte distance. Ceci suggère qu'il est possible d'intégrrer sur les degrés de liberté de courte distance pour obtenir une *théorie effective* décrivant les propriétés universelles des états excités de basse énergie. Cette théorie effective peut généralement être formulée comme une théorie des champs (puisque'on peut s'affranchir du réseau aux grandes distances). Dans un système sans gap, cette théorie des champs est une théorie de masse nulle (les fonctions de corrélation temporelles décroissent en loi de puissance).

Comme chaque fois qu'il s'agit d'éliminer les degrés de liberté de courte distance, c'est une approche de *groupe de renormalisation* qu'il faut utiliser pour rendre ces idées précises. Pour des raisons de temps, nous n'aurons cependant l'occasion d'introduire ces méthodes que vers la fin de ce cours. Signalons cependant que la théorie de Landau des liquides de Fermi peut être entièrement approchée de cette manière (cf. [Shankar, Schulz]).

## 1.4 Excitations élémentaires et quasiparticules.

Les états de basse énergie dont il est question ci-dessus sont les états propres du système dans son ensemble, c'est à dire des états à  $N$  particules. On peut se demander s'il est possible de construire le spectre de ces états par combinaison *d'excitations élémentaires*.

Lorsque le système est sans interaction, la construction du spectre de  $N$  fermions libres se fait précisément par composition d'excitations à une particule (un trou) selon les règles imposées par le principe de Pauli.

Lorsque les “bonnes variables” ont été trouvées pour décrire le système en interaction, une description du spectre de basse énergie par composition d'excitations élémentaires est en général possible. Les règles de composition de ces excitations définissent leur statistique. Celle-ci peut être bosonique ou fermionique, mais d'autres cas sont également possibles correspondant à des règles de composition plus complexes (cf. [Haldane]). De plus, l'énergie d'une superposition d'excitations élémentaires peut ne pas être simplement la somme des énergies individuelles: les excitations élémentaires peuvent interagir entre elles. Néanmoins, les états d'énergie très proche du fondamental correspondent à un faible nombre d'excitations créées, de sorte que leur densité est faible: on a affaire à un gaz dilué d'excitations élémentaires (donc dont les interactions effectives sont faibles).

## 1.5 Exemples

Nous indiquons ci-dessous quelques exemples destinés à illustrer les notions introduites ci-dessus: excitations élémentaires (EE) et théorie effective (TE) permettant de les décrire.

### • Spin quantiques en interaction, modèle de Heisenberg

Le modèle de Heisenberg décrit des spins quantiques en interaction d'échange sur un réseau. on se limitera ici à un réseau simple (carré ou cubique par exemple, bipartite, sans frustration), de sorte que le fondamental puisse développer un ordre à longue portée.

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1.2)$$

Notons que, dans cette expression,  $\vec{S}$  désigne le triplet d'opérateurs  $(S^x, S^y, S^z)$  agissant sur les états  $|S, m\rangle$  de la manière habituelle.

La plupart des remarques faites ci-dessus sont bien illustrées sur cet exemple:

- L'espace de Hilbert a pour dimension  $(2S + 1)^{N_s}$ , avec  $N_s$  le nombre de sites du réseau et  $S$  la valeur du spin considéré.

- Lorsque  $J < 0$  (ferromagnétique), l'état fondamental est simple: il s'agit de l'état dans lequel tous les spins sont "alignés entre eux", de manière à maximiser la projection du spin total sur un axe donné, par exemple:  $\prod_i |S_i^z = +S\rangle$  (on a bien sûr une dégénérescence du fondamental).
- Lorsque  $J > 0$  (antiferromagnétique), en revanche, l'état fondamental n'est pas simple. En effet l'état de Néel  $\prod_i |S_i^z = (-1)^i S\rangle$  (avec  $(-1)^i$  la parité du site considéré dans le cas d'un réseau supposé bipartite) *n'est pas un état propre de  $H$* . C'est un état propre du modèle (d'Ising) dans lequel seuls les termes  $S_i^z S_j^z$  sont considérés. Mais les termes d'échange  $S_i^+ S_j^-$  introduisent des "défauts" lorsqu'ils agissent sur cet état.
- Dans les deux cas, lorsque l'état fondamental possède un ordre à longue portée, le spectre d'excitations ne comporte pas de gap. Même si on ne sait pas donner une construction exacte de l'état fondamental dans le cas antiferromagnétique, *on sait caractériser les excitations élémentaires*. Ce sont les modes de Goldstone de la symétrie brisée, c'est à dire les ondes de spin (ou plutôt leur équivalent quantique: les magnons). La loi de dispersion n'est pas la même dans les deux cas:  $\omega_{\vec{k}} = c|\vec{k}|^2 + \dots$  dans le cas ferro ( $z = 2$ ),  $\omega_{\vec{k}} = c|\vec{k}| + \dots$  dans le cas antiferro ( $z = 1$ ). Une théorie des champs effective de basse énergie décrivant ces modes peut être construite dans chaque cas: il s'agit du modèle sigma non-linéaire.

Résumons brièvement quelques autres exemples:

- **Fermions en interaction,  $d=3$ :**  ${}^3He$ , électrons dans les métaux.  
 EE: Quasiparticules fermioniques, charge  $\pm e$ , spin  $1/2$ ,  $\omega = v_F(k - k_F)$ .  
 TE: Théorie de Landau des liquides de Fermi.
- **Fermions en interaction,  $d=1$ :** conducteurs organiques quasi-unidimensionnels.  
 EE: Séparation des modes de spin et de charge:  
 "Spinons" (onde de densité de spin)  $Q = 0, S = 1/2, \omega = v_s(k - k_F)$   
 "Holons" (onde de densité de charge)  $Q = \pm 1, S = 0, \omega = v_c(k - k_F)$   
 TE: "Liquides de Luttinger" (Action effective des champs bosoniques correspondant aux excitations ci-dessus).
- **Gaz d'électrons bidimensionnel sous fort champ magnétique:** système d'effet Hall quantique fractionnaire.

EE: Quasiparticules de charge fractionnaire, obéissant à des statistiques intermédiaires (“anyons”).

TE: Théorie de jauge avec terme topologique



# Chapter 2

## Fonctions de Green à température nulle

### 2.1 Définition

Dans toute la suite de ce cours, on considère un hamiltonien constitué d'une partie libre (énergie cinétique)  $H_0$  et d'un terme d'interaction entre particules  $V$ :

$$H = H_0 + V \quad (2.1)$$

$H_0$  s'écrit comme une somme:

$$H_0 = \sum_{i=1}^N h_0^{(i)} \quad (2.2)$$

où  $h_0$  est l'hamiltonien libre à une particule et  $^{(i)}$  désigne l'action sur les coordonnées de la particule  $i$ . On suppose connus les états propres à *une particule* de  $h_0$ , désignés par  $|k\rangle$  ( $k$  désigne globalement l'ensemble des nombres quantiques nécessaires pour spécifier cet état: en général  $k \equiv (\vec{k}, \sigma)$ ). Les états  $|k\rangle$  sont utilisés pour construire une base de l'espace des états (antisymétriques) à  $N$  particules, puis de l'espace de Fock, selon les règles usuelles dites (pourquoi donc ?) de "seconde quantification". On définit ainsi les opérateurs création  $c_k^\dagger$  et annihilation  $c_k$  relativement à cette base. Dans l'espace réel:

$$c_\sigma(x) \equiv \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}(x) c_{\vec{k}\sigma} \quad , \quad c_\sigma^\dagger(x) \equiv \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}(x)^* c_{\vec{k}\sigma}^\dagger \quad (2.3)$$

Nos conventions et quelques propriétés utiles sur ces points sont regroupées dans l'annexe à ce chapitre.

Nous introduisons la *représentation de Heisenberg* adaptée à l'ensemble grand-canonique. Dans toute la suite, le hamiltonien  $H$  est supposé ne pas dépendre explicitement du temps.

Pour un opérateur  $O$ :

$$O(t) \equiv e^{iH't} O e^{-iH't} \quad (2.4)$$

avec,  $N$  étant l'opérateur nombre de particules:

$$H' \equiv H - \mu N \quad (2.5)$$

On vérifiera que:

$$i \frac{\partial}{\partial t} O(t) = [O(t), H] \quad (2.6)$$

et que:

$$\{c(x, t), c(x', t)\} = \{c^\dagger(x, t), c^\dagger(x', t)\} = 0 \quad , \quad \{c(x, t), c^\dagger(x', t)\} = \delta(x - x') \quad (2.7)$$

Insistons sur le fait que ces relations de commutation ne sont valables *qu'à temps égaux*.

Désignons par  $|\Psi_0\rangle$  l'état fondamental de  $H$  (pour  $N$  particules). On définit la fonction de Green comme:

$$G(x, t; x', t') \equiv -i \langle \Psi_0 | T c(x, t) c^\dagger(x', t') | \Psi_0 \rangle \quad (2.8)$$

où le *produit ordonné en temps* est défini par (pour des fermions):

$$T c(x, t) c^\dagger(x', t') \equiv \theta(t - t') c(x, t) c^\dagger(x', t') - \theta(t' - t) c^\dagger(x', t') c(x, t) \quad (2.9)$$

Pour  $H$  indépendant du temps,  $G(x, t; x', t')$  ne dépend que de  $t - t'$ . Pour  $H$  invariant par translation,  $G(x, t; x', t')$  ne dépend que de  $x - x'$ . Ces deux conditions sont en général réunies dans la suite, et on notera  $G(x, t; \vec{0}, 0) \equiv G(x, t)$ . Dans ce cas, on définira la transformée de Fourier spatiale:

$$G(\vec{k}, t) = \int d^d x G(\vec{x}, t) e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad , \quad G(x, t) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} G(\vec{k}, t) e^{-i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad (2.10)$$

et temporelle:

$$G(\vec{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} G(\vec{k}, t) \quad , \quad G(\vec{k}, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{-i\omega t} G(\vec{k}, \omega) \quad (2.11)$$

On voit que:

$$G(\vec{k}, t) = -i \langle \Psi_0 | T c_{\vec{k}}(t) c_{\vec{k}}^\dagger(0) | \Psi_0 \rangle \quad (2.12)$$

Si  $H$  n'est pas invariant par translation, la fonction de Green n'est pas diagonale dans les impulsions, et dépend de deux moments:  $G(\vec{k}, \vec{k}', t)$ . C'est le cas en présence d'impuretés (effet Kondo par exemple).

On notera que  $G(x, t)$  est discontinue en  $t = 0$ . Sa discontinuité est dictée par l'anticommutation des fermions:

$$G(x, t \rightarrow 0^+) = -i \langle \Psi_0 | c(x, 0) c^\dagger(\vec{0}, 0) | \Psi_0 \rangle, \quad G(x, t \rightarrow 0^-) = +i \langle \Psi_0 | c^\dagger(\vec{0}, 0) c(x, 0) | \Psi_0 \rangle \quad (2.13)$$

de sorte que:

$$G(x, t \rightarrow 0^+) - G(x, t \rightarrow 0^-) = -i \langle \Psi_0 | \{c(x, 0), c^\dagger(0, 0)\} | \Psi_0 \rangle = -i\delta(x) \quad (2.14)$$

$$G(\vec{k}, t \rightarrow 0^+) - G(\vec{k}, t \rightarrow 0^-) = -i \quad (2.15)$$

## 2.2 Lien avec le spectre d'excitations: représentation spectrale

Nous allons montrer dans cette section que la fonction de Green contient des informations sur le spectre des états excités du système.

Considérons d'abord le cas  $t > t'$ , et désignons par  $|\Psi_\alpha\rangle$ ,  $E_\alpha$  le spectre du hamiltonien complet, pour  $N + 1$  particules. On a:

$$\langle \Psi_0 | c_k(t) c_k^\dagger(t') | \Psi_0 \rangle = \sum_\alpha \langle \Psi_0 | c_k(t) | \Psi_\alpha \rangle \langle \Psi_\alpha | c_k^\dagger(t') | \Psi_0 \rangle \quad (2.16)$$

En explicitant la représentation d'Heisenberg des opérateurs, et en utilisant:

$$H' | \Psi_0 \rangle = E_0^{(N)} - \mu N, \quad H' | \Psi_\alpha \rangle = E_\alpha^{(N+1)} - \mu(N + 1) \quad (2.17)$$

On obtient:

$$\langle \Psi_0 | c_k(t) c_k^\dagger(t') | \Psi_0 \rangle = \sum_\alpha e^{i(\mu + E_0^{(N)} - E_\alpha^{(N+1)})(t-t')} |\langle \Psi_0 | c_k | \Psi_\alpha \rangle|^2 \quad (2.18)$$

En répétant ce calcul pour  $t < t'$  (cette fois en introduisant le spectre du système à  $N - 1$  particules), on obtient sans difficulté:

$$iG(k, t) = \theta(t) \sum_\alpha e^{i(\mu + E_0^{(N)} - E_\alpha^{(N+1)})t} |\langle \Psi_0 | c_k | \Psi_\alpha \rangle|^2 - \theta(-t) e^{-i(E_0^{(N)} - E_\beta^{(N-1)} - \mu)t} |\langle \Psi_0 | c_k^\dagger | \Psi_\beta \rangle|^2 \quad (2.19)$$

On observera que, pour  $N$  grand:  $E_0(N + 1) - E_0(N) \simeq E_0(N) - E_0(N - 1) \simeq \mu$ , et donc:

$$\mu + E_0^{(N)} - E_\alpha^{(N+1)} \simeq E_0^{(N+1)} - E_\alpha^{(N+1)} \equiv -\epsilon_\alpha^{(+)}, \quad E_0^{(N)} - E_\beta^{(N-1)} - \mu \simeq E_0^{(N-1)} - E_\beta^{(N-1)} \equiv -\epsilon_\beta^{(-)} \quad (2.20)$$

De sorte que l'évolution temporelle de la fonction de Green fait intervenir des fréquences positives correspondant aux énergies d'excitation du système à  $N + 1$  particules, et des fréquences négatives correspondants au spectre du système à  $N - 1$  particules.

Les éléments de matrice  $\langle \Psi_0 | c_k | \Psi_\alpha \rangle$  mesurent le recouvrement entre la fonction d'onde obtenue par injection d'un électron de moment  $k$  dans le fondamental à  $N$  particules et l'état excité  $|\Psi_\alpha\rangle$  du système à  $N + 1$  particules (interprétation similaire pour  $\langle \Psi_0 | c_k^\dagger | \Psi_\beta \rangle$ ).

Il est commode d'exprimer ces résultats en transformée de Fourier sur le temps, en utilisant la représentation: <sup>1</sup>

$$\theta(t) = - \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi i} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i0^+} \quad (2.21)$$

qu'on pourra s'exercer à démontrer par le théorème des résidus. On obtient l'expression importante:

$$G(k, \omega) = \sum_{\alpha} \frac{|\langle \Psi_0 | c_k | \Psi_\alpha \rangle|^2}{\omega + \mu + E_0^{(N)} - E_\alpha^{(N+1)} + i0^+} + \sum_{\beta} \frac{|\langle \Psi_0 | c_k^\dagger | \Psi_\beta \rangle|^2}{\omega + \mu + E_\beta^{(N-1)} - E_0^{(N)} - i0^+} \quad (2.22)$$

On voit que les pôles de la fonction de Green dans le plan complexe des fréquences sont situés sur l'axe réel, avec:

- une partie imaginaire infinitésimale *négative* pour les excitations correspondant à l'addition d'une particule au système (excitation de type "particule")
- une partie imaginaire infinitésimale *positive* pour les excitations correspondant au retrait d'une particule au système (excitation de type "trou")

Les pôles sont situés aux fréquences d'excitation associées à chaque état excité, avec un résidu au pôle égal aux éléments de matrice de transition figurant dans l'expression ci-dessus.

Cette information sur les états excités peut être condensée dans la définition de la *densité spectrale*:

$$A(k, \omega) = \sum_{\alpha} |\langle \Psi_0 | c_k | \Psi_\alpha \rangle|^2 \delta(\omega + \mu + E_0^{(N)} - E_\alpha^{(N+1)}) , (\omega > 0) \quad (2.23)$$

$$= \sum_{\alpha} |\langle \Psi_0 | c_k^\dagger | \Psi_\beta \rangle|^2 \delta(\omega + \mu - E_0^{(N)} + E_\beta^{(N-1)}) , (\omega < 0) \quad (2.24)$$

On notera que la connaissance de la densité spectrale détermine entièrement la fonction de Green:

$$G(k, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{A(k, \omega')}{\omega - \omega' + i0^+ \text{signe}(\omega')} \quad (2.25)$$

---

<sup>1</sup>Nous utilisons la convention:  $f(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} f(\omega) e^{-i\omega t}$  ,  $f(\omega) = \int dt f(t) e^{+i\omega t}$

et son évolution temporelle:

$$iG(k, t) = \theta(t) \int_0^{+\infty} d\omega A(k, \omega) e^{-i\omega t} - \theta(-t) \int_{-\infty}^0 d\omega A(k, \omega) e^{-i\omega t} \quad (2.26)$$

On notera que l'anticommutation impose la normalisation de la fonction spectrale (conservation du poids spectral total):

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega A(k, \omega) = 1 \quad (2.27)$$

En effet:

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega A(k, \omega) &= \sum_{\alpha} |\langle \Psi_0 | c_k | \Psi_{\alpha} \rangle|^2 + \sum_{\beta} |\langle \Psi_0 | c_k^{\dagger} | \Psi_{\beta} \rangle|^2 \\ &= \langle \Psi_0 | c_k \sum_{\alpha} \langle \Psi_{\alpha} | \Psi_{\alpha} \rangle c_k^{\dagger} | \Psi_0 \rangle + \langle \Psi_0 | c_k^{\dagger} \sum_{\beta} \langle \Psi_{\beta} | \Psi_{\beta} \rangle c^{\dagger} | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \{c_k, c_k^{\dagger}\} | \Psi_0 \rangle \quad (2.28) \end{aligned}$$

## 2.3 Propriétés générales (Exercices)

### 2.3.1 Expression pour des fermions libres

On établira l'expression de  $G(\vec{k}, \omega)$  et de  $G(\vec{k}, t)$  pour un gaz de fermions libres par au moins deux méthodes différentes, par exemple:

- A partir de la définition de  $G(\vec{k}, \omega)$
- En utilisant la représentation spectrale

On montrera ainsi que:

$$G_0(\vec{k}, \omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \epsilon_k + i0^+ \text{signe}(\epsilon_k - \mu)}, \quad A_0(k, \omega) = \delta(\omega + \mu - \epsilon_k) \quad (2.30)$$

$$G_0(\vec{k}, t) = -i[\theta(\epsilon_k - \mu)\theta(t) e^{-i(\epsilon_k - \mu)t} - \theta(\mu - \epsilon_k)\theta(-t) e^{+i(\epsilon_k - \mu)t}] \quad (2.31)$$

### 2.3.2 Expression des valeurs moyennes d'opérateurs.

- On considère un opérateur à un corps:  $\hat{O} = \sum_{k,l} \langle k | \hat{O} | l \rangle c_k^{\dagger} c_l$ .

Comment calculer la valeur moyenne  $\langle \Psi_0 | \hat{O} | \Psi_0 \rangle$  connaissant la fonction de Green ?

Appliquer à la moyenne de l'énergie cinétique et de la densité de particules d'impulsion  $\vec{k}$  donnée. Exprimer ces quantités à partir de la fonction spectrale  $A(\vec{k}, \omega)$ . Expliciter le résultat dans le cas des fermions libres.

- Les valeurs moyennes d'opérateurs à deux corps nécessitent en général la connaissance de la fonction de Green à *deux particules*. Cependant on va montrer que l'énergie totale peut tout de même s'exprimer à partir de  $G$  seule !
- a) Etablir l'identité  $[A, BC] = \{A, B\}C - B\{A, C\}$ .
  - b) Etablir l'équation du mouvement satisfaite par  $c(x, t)$  en séparant terme cinétique et potentiel dans le hamiltonien
  - c) En déduire l'expression de la valeur moyenne de l'énergie potentielle en terme de  $G$
  - d) Conclure.

## 2.4 Signification physique de la fonction de Green

On va donner ici une interprétation physique de la fonction de Green comme recouvrement de deux fonctions d'onde. Cette interprétation conduit assez naturellement à la notion de quasiparticule.

Considérons le système de  $N$  électrons dans son état fondamental  $|\Psi_0\rangle$ . A l'instant  $t = 0$  on injecte un  $(N + 1)$ -ème électron de l'extérieur, de moment  $k$ . La fonction d'onde décrivant le système à l'instant  $t = 0^+$  est <sup>2</sup>:

$$|\Psi(t = 0)\rangle = c_k^\dagger |\Psi_0\rangle \quad (2.32)$$

Cette fonction d'onde *n'est pas un état propre de  $\hat{H}$  en général* (sauf exception, p.ex pour le système sans interaction). Son évolution temporelle fera donc intervenir une décomposition sur l'ensemble du spectre (à  $N + 1$  particules). Au bout d'un temps  $t$ , la fonction d'onde aura évolué pour devenir (en agissant avec l'opérateur d'évolution  $e^{-iHt}$ ):

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-iHt} c_k^\dagger |\Psi_0\rangle \quad (2.33)$$

Considérons maintenant la fonction d'onde qui, à l'instant  $t$  décrit la réunion du système de  $N$  particules dans son état fondamental et d'un électron physique de moment  $k$  *venant d'être injecté dans le système*. Cette fonction d'onde est:

$$|\Psi_e\rangle = c_k^\dagger e^{-iHt} |\Psi_0\rangle \quad (2.34)$$

Cherchons à comparer les fonctions d'onde  $|\Psi(t)\rangle$  et  $|\Psi_e\rangle$ , c'est à dire à estimer si l'électron injecté dans le système à l'instant  $t = 0$  "ressemble" encore à un électron isolé (ou, plus

---

<sup>2</sup>Il faudrait en fait normaliser cette fonction d'onde par  $\langle \Psi_0 | c_k c_k^\dagger | \Psi_0 \rangle$ , mais cela n'a guère d'importance pour la suite de l'argument

précisément, si la fonction d'onde  $|\Psi(t)\rangle$  ressemble à celle d'un électron et du système dans son état fondamental, qui auraient évolué indépendamment sans interagir). Pour effectuer cette comparaison, on forme le produit scalaire (recouvrement):

$$\langle \Psi_e | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi_0 | e^{iH't} c_k | e^{-iH't} c_k^\dagger | \Psi_0 \rangle \equiv i G(k, t) , (t > 0) \quad (2.35)$$

La fonction de Green est donc une mesure directe de ce recouvrement.

Lorsque  $c_k^\dagger |\Psi_0\rangle$  est un état propre du système, ce recouvrement est une simple phase. Son module, égal à un, ne décroît pas au cours du temps. Ceci traduit l'évolution cohérente de la fonction d'onde  $|\Psi(t)\rangle$  qui évolue sans se mélanger aux autres états excités du système. C'est ce qui se passe dans un système sans interaction.

En présence d'interactions, l'évolution temporelle de  $|\Psi(t)\rangle$  fait intervenir sa décomposition sur l'ensemble des états excités du système: c'est précisément ce que nous avons fait en effectuant une décomposition spectrale de la fonction de Green. La fonction spectrale  $A(\vec{k}, \omega)$  mesure le poids des états excités d'énergie  $\omega$  (à  $d\omega$  près) dans cette décomposition (cf. Eq.(2.26)). Il en résulte que le recouvrement  $\langle \Psi_e | \Psi(t) \rangle$  n'est plus une simple phase mais *décroît au cours du temps*. Ceci traduit la *perte de cohérence* de la fonction d'onde correspondant à l'injection d'un électron dans le système: au bout d'un temps long, cette fonction d'onde s'est décomposée sur tous les états excités du système, qui ont évolué différemment, de sorte qu'elle a perdu toute ressemblance avec un électron physique. Le temps caractéristique sur lequel a lieu cette perte de cohérence doit être identifié au *temps de vie* d'un électron dans le système.

## 2.5 “Portrait robot” de la densité spectrale d'un liquide de Fermi: “quasiparticule”.

Nous décrivons qualitativement dans cette section, à la lumière de l'interprétation physique ci-dessous, la manière dont se comporte la fonction de Green dans un système de fermions en interaction dans le cas générique, c'est à dire lorsque la nature des excitations de basse énergie obéit à la théorie de Landau des liquides de Fermi. Ce cas générique est réalisé dans un métal tridimensionnel par exemple, mais d'autres systèmes font exception, comme les systèmes unidimensionnels.

L'un des points fondamentaux de la description de Landau est l'existence d'une *surface de Fermi pour le système en interaction* (surface de l'espace des impulsions  $\vec{k}$ ). Pour des  $\vec{k}$  loin de cette surface, il y a décroissance rapide de la fonction de Green, traduisant une perte de cohérence rapide de la fonction d'onde décrivant l'injection d'un électron.

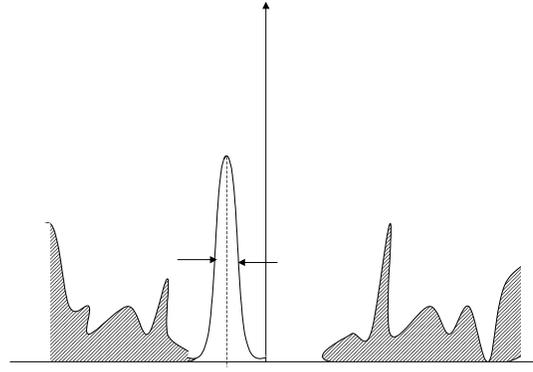


Figure 2.1: Représentation schématique de la densité spectrale en fonction de  $\omega$ . Le pic de quasiparticule (de poids  $Z_{\vec{k}}$ ) devient étroit ( $\Gamma_{\vec{k}} \rightarrow 0$ ) lorsque le vecteur d'onde  $\vec{k}$  se rapproche de la surface de Fermi. Le reste du poids spectral ( $1 - Z_{\vec{k}}$ ) correspond à des excitations "incohérentes" de haute énergie et de durée de vie courte (en grisé sur la figure).

Lorsque  $\vec{k}$  se rapproche de la surface de Fermi en revanche, une seconde échelle de temps, beaucoup plus longue, apparaît. Une fraction  $Z_k < 1$  du poids spectral (qui peut être petite mais reste par hypothèse finie) contribue à cette décroissance lente. L'échelle de temps,  $1/\Gamma_k$  associée à cette décroissance lente *diverge lorsque  $k$  tend vers la surface de Fermi du système*. Ainsi, lorsqu'on se rapproche de cette surface, la notion de propagation cohérente d'un électron retrouve t elle asymptotiquement un sens. On peut associer une entité cohérente, se propageant à la manière d'une particule, pour décrire cette propagation cohérente: on parle de quasiparticule. On peut se représenter physiquement cette quasiparticule comme un électron physique "habillé" par la déformation qu'il provoque dans le milieu lors de son mouvement.  $1/\Gamma_k$  s'interprète comme la durée de vie de cette entité cohérente, à laquelle on peut donc associer une relation de dispersion (valable sur des temps inférieurs à  $1/\Gamma_k$ ): on désignera par  $E_k$  l'énergie d'une quasiparticule de moment  $k$  (à ne pas confondre avec les énergies à une particule du hamiltonien libre,  $\epsilon_k$ !).

Cette séparation des échelles de temps correspond à une décomposition de la fonction

de Green sous la forme:

$$G(k, t) \simeq Z_k e^{i(\mu - E_k)t} e^{-\Gamma_k t} + G_{inc}(t) \quad (2.36)$$

ou  $G_{inc}$  décroît rapidement. En transformée de Fourier:

$$G(k, \omega) \simeq Z_k \frac{1}{\omega + \mu - E_k + i\Gamma_k} + G_{inc}(\omega) \quad (2.37)$$

et la fonction spectrale prend donc la forme (en prenant la partie imaginaire):

$$A(k, \omega) \simeq Z_k \frac{\Gamma_k/\pi}{(\omega + \mu - E_k)^2 + \Gamma_k^2} + A_{inc}(\omega) \quad (2.38)$$

La signature de la quasiparticule au niveau de la fonction spectrale est donc un pic étroit centré sur son énergie par rapport au niveau de Fermi,  $E_k - \mu$ , de largeur  $\Gamma_k$  et de poids spectral total  $Z_k$ . Lorsqu'on se rapproche de la surface de Fermi, ce pic tend vers une fonction delta, et la quasiparticule se manifeste pratiquement comme un pôle isolé de la fonction de Green.

Comme nous le verrons plus loin, la validité de la théorie de Landau et la possibilité d'une description de quasiparticule sont justifiées par des considérations *d'espace des phases* lors des collisions. Il en résulte que la largeur  $\Gamma_k$  tend vers 0 bien plus rapidement que l'énergie d'excitation:

$$\Gamma_k \simeq A \frac{1}{k_F} (k - k_F)^2 + \dots \quad (2.39)$$

alors que:

$$E_k - \mu \simeq \frac{k_F}{m^*} (k - k_F) + \dots \quad (2.40)$$

$m^*$  définit la *masse effective* des quasiparticules (les relations ci-dessus sont données, pour simplifier, dans un cas isotrope).

Lorsque les interactions ont un effet important dans le système, on peut avoir:

- Un résidu de quasiparticule faible ( $Z_k \ll 1$ )
- Une masse effective élevée ( $m^*/m \gg 1$ )
- Un préfacteur  $A$  grand, conduisant à un temps de vie court pour les quasiparticules (ou plus exactement, à une échelle d'énergie en dessous de laquelle les quasiparticules cohérentes existent qui est anormalement basse). Il en résulte par exemple une signature au niveau des propriétés de transport, par exemple un terme en  $T^2$  de la résistivité anormalement grand.

Ces effets n'étant d'ailleurs pas nécessairement liés entre eux. *Ce sont autant d'indices caractéristiques d'un métal très corrélé.* Il y en a d'autres, comme par exemple l'existence de transferts importants de poids spectral entre structures cohérentes et incohérentes lorsqu'on varie la température ou d'autres paramètres (pression).

## 2.6 Self-énergie et quasiparticules

Il est commode de définir la *self-énergie* par:

$$G(\vec{k}, \omega)^{-1} = G_0(\vec{k}, \omega)^{-1} - \Sigma(\vec{k}, \omega) \quad (2.41)$$

où  $G_0$  est la fonction de Green du système sans interaction, donnée plus haut.

La surface de Fermi du système en interaction est définie par le lieu des pôles de  $G$ , c'est à dire par les solutions  $\vec{k} = \vec{k}_F$  de l'équation:

$$\mu - \epsilon_{\vec{k}_F} - \Sigma(\vec{k}_F, 0) = 0 \quad (2.42)$$

Cette surface *diffère en général de celle du système sans interaction.* De fortes distortions (rarement observées en pratique) sont une autre signature potentielle de fortes corrélations électroniques.

Cependant, on montre ("théorème de Luttinger") que, *en l'absence de brisure de symétrie ou d'ordre à longue portée*, le volume de la zone de Brillouin intérieure à la surface de Fermi est le même en présence et en l'absence d'interactions, pour un même nombre de particules.

En effectuant un développement (supposé régulier) de la self-énergie au voisinage de  $\vec{k} = \vec{k}_F$  et  $\omega = 0$ , on identifie sans difficulté (nous donnons les formules pour un système isotrope):

$$Z_k = \left[ 1 - \frac{\partial \Sigma(k, \omega)}{\partial \omega} \Big|_{\omega=0} \right]^{-1} \quad (2.43)$$

$$\frac{m}{m^*} = Z \left[ 1 + \frac{m}{k_F} \frac{\partial \Sigma(k, \omega)}{\partial k} \Big|_{k=k_F} \right] \quad (2.44)$$

avec  $k_F/m = \partial \epsilon_k / \partial k|_{k=k_F}$  ( $k_F$  est le moment de Fermi et  $m$  la masse des porteurs en l'absence d'interactions (donnée par la dispersion de la bande)).

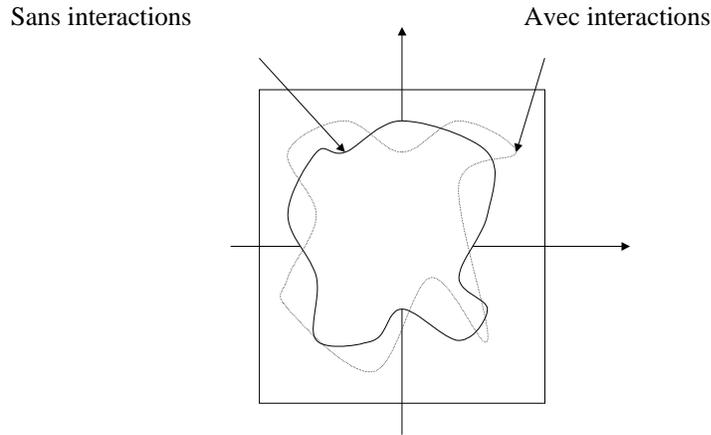


Figure 2.2: Représentation schématique de la surface de Fermi avec et sans interactions, illustrant le “théorème de Luttinger”.

## 2.7 Mesure de la densité spectrale: expériences de photoémission

La densité spectrale  $A(\vec{k}, \omega)$  peut en principe être mesurée expérimentalement par photoémission résolue en angle. Les limitations de cette technique, qui a fait des progrès remarquables au cours des 10 dernières années ont été décrites dans le cours oral. On se reportera à l'article joint [Claessen et al., Phys. Rev. Lett. **69**, 808 (1992)] pour une belle illustration de cette technique.

## 2.8 Annexe/TD1: Notations et rappels de “seconde quantification”

### 2.8.1 Ecriture des opérateurs à un corps

1. Etablir les règles de commutation des opérateurs champs:

$$c(x) \equiv \sum_{\vec{k}} \phi_{\vec{k}}(x) c_{\vec{k}} \quad (2.45)$$

$$\{c(x), c(x')\} = \{c^\dagger(x), c^\dagger(x')\} = 0 \quad , \quad \{c(x), c^\dagger(x')\} = \delta(x - x') \quad (2.46)$$

2. Si  $\hat{o}[i]$  désigne l'action de l'opérateur à un corps  $\hat{o}$  sur la particule  $i$ , on considère:

$$\hat{O} \equiv \sum_{i=1}^N \hat{o}[i] \quad (2.47)$$

On pourra vérifier que l'action de cet opérateur dans l'espace de Fock s'écrit:

$$\hat{O} = \sum_{k,l} \langle k|\hat{o}|l \rangle c_k^\dagger c_l \quad (2.48)$$

avec, si  $\hat{o}$  est diagonal dans la base  $|x \rangle$ :

$$\langle k|\hat{o}|l \rangle \equiv \int dx \phi_k(x)^* \phi_l(x) o(x) \quad (2.49)$$

Appliquer cette formule à l'opérateur densité de particules au point  $x$ :

$$\rho(x) = \sum_{i=1}^N \delta(x - x_i) \quad (2.50)$$

Donner son expression en termes des  $c_k$  et en termes des opérateurs de champ  $c(x)$ . Exprimer le nombre total de particules  $\hat{N}$ :

$$\rho(x) = c^\dagger(x)c(x) \quad , \quad \hat{N} = \int dx c^\dagger(x)c(x) = \sum_k c_k^\dagger c_k \quad (2.51)$$

3. On considère un hamiltonien de particules indépendantes:

$$\hat{H}_0 = \sum_{i=1}^N \hat{h}[i] \quad (2.52)$$

Diagonaliser cet opérateur et l'écrire en notations seconde quantifiée dans les deux cas suivants:

a) Particules libres dans le continu, de masse  $m$ :

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2m} \quad \phi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{\Omega}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{x}} \quad \hat{H}_0 = \sum_k \epsilon_{\mathbf{k}} c_k^\dagger c_k \quad (2.53)$$

b) Modèle de liaison forte sur un réseau cubique (en dimension  $d$ ), l'intégrale de transfert de site à site (plus proches voisins) étant  $t$ :

$$\hat{H}_0 = -t \sum_{\langle ij \rangle} c_i^\dagger c_j = \sum_k \epsilon_{\mathbf{k}} c_k^\dagger c_k \quad \epsilon_{\mathbf{k}} = -2t \sum_{\mu=1}^d \cos k_\mu a \quad (2.54)$$

## 2.8.2 Opérateurs à deux corps

On suppose le hamiltonien d'interaction donné par un potentiel à deux corps:

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \sum_{i \neq j} v(x_i - x_j) \quad (2.55)$$

Etablir l'expression seconde-quantifiée correspondante. Il est commode d'utiliser l'opérateur densité introduit plus haut.

$$\hat{V} = \frac{1}{2} \int dx \int dy v(x - y) \hat{\rho}(x) \hat{\rho}(y) - \frac{1}{2} v(0) \int dx \hat{\rho}(x) = \quad (2.56)$$

$$\frac{1}{2} \sum_{klmn} c_k^\dagger c_l^\dagger c_n c_m \langle kl|v|mn \rangle \quad (2.57)$$

avec:

$$\langle kl|v|mn \rangle \equiv \int dx \int dy v(x - y) \phi_k(x)^* \phi_l(y)^* \phi_m(x) \phi_n(y) \quad (2.58)$$

(On notera l'ordre des indices dans cette dernière expression).

References à consulter: cours de J. Dalibard, Fetter et Walecka [Introduction], Mahan, Negele et Orland.



# Chapter 3

## Fonctions de Green à température finie

### 3.1 Définition; temps imaginaire

Nous souhaitons généraliser la notion de fonction de Green du chapitre précédent à  $T \neq 0$ . Il serait *a priori* naturel de considérer la moyenne thermodynamique:

$$\frac{\text{Tr}[e^{-\beta H'} T c_k(t) c_k^\dagger(t')]}{\text{Tr}e^{-\beta H'}} \quad (3.1)$$

Cependant cet objet n'est pas commode à manier en pratique. En effet, ses pôles dans le plan complexe possèdent une partie réelle (à cause de l'opérateur d'évolution  $e^{iH't}$ ) et une partie imaginaire (à cause de l'opérateur densité  $e^{-\beta H'}$ ). Ses propriétés analytiques sont donc bien moins simples que pour la fonction de Green du chapitre précédent, et cela poserait des problèmes techniques dans les calculs perturbatifs.

On choisit donc généralement de ramener tous les pôles de  $G$  sur l'axe réel, en travaillant en "temps imaginaire". Plus précisément, on définit l'évolution des opérateurs par:

$$O(\tau) \equiv e^{H'\tau} O e^{-H'\tau} \quad (3.2)$$

où  $\tau$  est un paramètre *réel* dont on précisera le domaine de variation dans la suite.

Remarque: On prendra garde à ce que:  $O(\tau)^\dagger = O^\dagger(-\tau) \neq O^\dagger(\tau)$ .

On définit ainsi la fonction de Green à température finie par:

$$\mathcal{G}(k, \tau - \tau') \equiv - \frac{\text{Tr}[e^{-\beta H'} T_\tau c_k(\tau) c_k^\dagger(\tau')]}{\text{Tr}e^{-\beta H'}} \quad (3.3)$$

Une propriété essentielle de cette fonction est qu'elle est *antipériodique* de période  $2\beta$ , en raison de l'anticommuation des fermions:

$$\mathcal{G}(k, \tau + \beta) = -\mathcal{G}(k, \tau) \quad (3.4)$$

Pour le montrer, choisissons  $-\beta < \tau \leq 0$ , de sorte que  $0 \leq \tau + \beta < \beta$ ; le numérateur de  $\mathcal{G}(k, \tau + \beta)$  s'écrit:

$$\text{Tr}[e^{-\beta H'} c_k(\tau + \beta) c_k^\dagger(0)] = \text{Tr}[e^{-\beta H'} e^{H'(\tau+\beta)} c_k e^{-H'(\tau+\beta)} c_k^\dagger(0)] \quad (3.5)$$

soit, en simplifiant et en utilisant l'invariance cyclique de la trace:

$$\text{Tr}[e^{-\beta H'} c_k^\dagger e^{H'\tau} c_k e^{-H'\tau}] = \text{Tr}[e^{-\beta H'} c_k^\dagger(0) c_k(\tau)] = -\text{Tr}[e^{-\beta H'} T_\tau c_k(\tau) c_k^\dagger(0)] \quad (3.6)$$

ce qui établit la propriété (3.4).

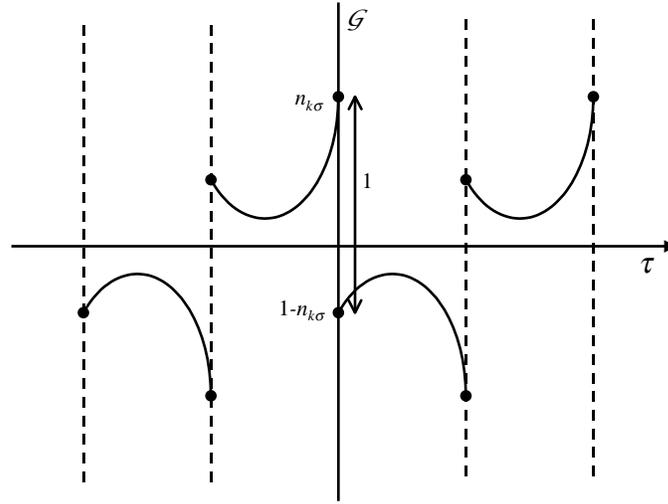


Figure 3.1: Représentation schématique de la fonction de Green à  $T \neq 0$ , illustrant l'antipériodicité et la discontinuité à  $\tau = 0$ .

La décomposition de Fourier de  $\mathcal{G}$  se fait donc sur les fréquences telles que  $e^{i\omega\beta} = -1$ , ce qui définit les *fréquences de Matsubara*:

$$\omega_n = \frac{(2n + 1)\pi}{\beta} \quad (3.7)$$

On a:

$$\mathcal{G}(k, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega_n \tau} \hat{\mathcal{G}}(k, i\omega_n) \quad , \quad \hat{\mathcal{G}}(k, i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau \mathcal{G}(k, \tau) e^{i\omega_n \tau} \quad (3.8)$$

Certaines propriétés de la fonction de Green ainsi définie sont tout à fait semblables à celles du chapitre précédent. Ainsi, l'anticommutation des fermions impose une discontinuité à  $\tau = 0$ :

$$\mathcal{G}(k, 0^+) - \mathcal{G}(k, 0^-) = -1 \quad (3.9)$$

On voit que la limite  $\tau \rightarrow 0$  est ambiguë, ce qui se traduit par la divergence de la somme  $\sum_n \mathcal{G}(k, i\omega_n)$ . Cette divergence provient du comportement à haute fréquence en  $1/i\omega_n$  de  $\hat{\mathcal{G}}$  (voir plus bas). Le facteur  $e^{-i\omega_n\tau}$  rend cette somme convergente dès que  $\tau \neq 0$ , mais avec des limites différentes selon que  $\tau \rightarrow 0^+$  ou  $\tau \rightarrow 0^-$ .

Les valeurs moyennes thermodynamiques d'opérateurs à un corps dans l'ensemble grand-canonique s'obtiennent à partir de  $\mathcal{G}$ . Pour un opérateur diagonal en  $k$ , on a:

$$\langle O \rangle \equiv \frac{\text{Tr}[e^{-\beta H'} O]}{\text{Tr}[e^{-\beta H'}]} = \lim_{\tau \rightarrow 0^-} \sum_k o_k \mathcal{G}(k, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_k o_k \sum_n \mathcal{G}(k, i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+} \quad (3.10)$$

En particulier, le nombre de particules de moment  $\vec{k}$  et de spin  $\sigma$  est donné par:

$$N_{\vec{k}\sigma} = \mathcal{G}(k, \tau = 0^-) = \frac{1}{\beta} \sum_n \mathcal{G}(k, i\omega_n) e^{i\omega_n 0^+} \quad (3.11)$$

alors que  $\mathcal{G}(k, \tau = 0^+) = N_k - 1$ .

## 3.2 Représentation spectrale

La fonction de Green thermique admet une décomposition sur le spectre des états propres du système. La nouveauté par rapport au chapitre précédent est que les éléments de matrices entre deux états excités quelconques contribuent, alors que seules les transitions entre le fondamental et un état excité intervenaient à  $T = 0$ . Désignant ici par  $|a\rangle$  les états propres du système, d'énergie  $E_a$  et pour un nombre de particules  $N_a$  ( $E'_a \equiv E_a - \mu N_a$ ), on obtient sans difficulté:

$$\mathcal{G}(k, i\omega_n) = \frac{1}{Z_G} \sum_{a,b} |\langle a|c_k|b\rangle|^2 \frac{e^{-\beta E'_a} + e^{-\beta E'_b}}{i\omega_n + E'_a - E'_b} \quad (3.12)$$

On peut donc introduire la densité spectrale:

$$\rho(k, \omega) \equiv \frac{1}{Z_G} \sum_{a,b} |\langle a|c_k|b\rangle|^2 (e^{-\beta E'_a} + e^{-\beta E'_b}) \delta(\omega + E'_a - E'_b) \quad (3.13)$$

De sorte que:

$$\mathcal{G}(k, i\omega_n) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\rho(\omega)}{i\omega_n - \omega} \quad (3.14)$$

La fonction  $\rho$  est normalisée:

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \rho(k, \omega) = 1 \quad (3.15)$$

ce qui établit le comportement haute fréquence de  $\hat{\mathcal{G}}$  mentionné ci-dessus:  $\hat{\mathcal{G}} \sim 1/i\omega_n$ .

On notera que la fonction spectrale dépend en général de la température (sauf pour un système libre: voir ci-dessous). Cette dépendance *a deux origines*: d'une part les éléments de matrice sont maintenant pondérés par les poids de Boltzmann correspondant, d'autre part de nouvelles transition apparaissent par rapport au cas  $T = 0$ .

Dans les systèmes en forte interaction, d'importantes redistributions de poids spectral peuvent être observées lorsqu'on varie  $T$ . Les énergies impliquées dans cette redistribution *peuvent être très supérieures à la variation de  $kT$*  (contrairement à une croyance assez répandue). Par exemple, dans un isolant très corrélé le poids spectral correspondant à l'ouverture d'un gap de quelques dizaines de Kelvin peut entraîner une redistribution du poids spectral sur des échelles de l'ordre de l'électron-Volt ("isolants Kondo" par exemple). Ce phénomène est souvent observé expérimentalement (photoémission, conductivité optique).

### 3.3 Fonctions retardées et avancées; limite $T \rightarrow 0$

Nous admettrons que la fonction  $\mathcal{G}$  admet un prolongement analytique à toute fréquence complexe  $\zeta$ :

$$\mathcal{G}(k, \zeta) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\rho(k, \omega)}{\zeta - \omega} \quad (3.16)$$

Cette fonction est analytique partout sauf sur l'axe réel. Ses pôles sont concentrés sur l'axe réel (donnant lieu à une coupure dans la limite d'un grand volume).

Pour  $\omega$  réel, il est usuel de définir deux fonctions correspondant à deux manières différentes d'approcher l'axe réel: la fonction *retardée* correspond à  $\zeta = \omega + i0^+$ , la fonction *avancée* à  $\zeta = \omega - i0^+$ :

$$\mathcal{G}^A(k, \omega) \equiv \mathcal{G}(k, \omega + i0^+) \quad , \quad \mathcal{G}^R(k, \omega) \equiv \mathcal{G}(k, \omega - i0^+) \quad (3.17)$$

Les pôles de  $\mathcal{G}^R$  (resp.  $\mathcal{G}^A$ ) ont une partie imaginaire infinitésimale négative (resp. positive).

Examinons la limite de température nulle de ces diverses quantités, ce qui nous permettra de faire le lien avec le formalisme du chapitre précédent. *Nous supposons l'état fondamental non-dégénéré*. Dans la limite  $T \rightarrow 0$ , nous avons:

$$Z_G \simeq e^{-\beta(E_0 - \mu(N))} = e^{-\beta E'_0} \quad (3.18)$$

où  $\langle N \rangle$  est la moyenne grand-canonique du nombre de particules. De même:

$$e^{-\beta E'_a} + e^{-\beta E'_b} \simeq e^{-\beta E'_a} \theta(E'_b - E'_a) + e^{-\beta E'_b} \theta(E'_a - E'_b) \quad (3.19)$$

Pour  $\omega > 0$ , on obtient donc:

$$\rho(k, \omega) \simeq \frac{1}{e^{-\beta E'_0}} \sum_{ab; E'_a < E'_b} e^{-\beta E'_a} \delta(\omega + E'_a - E'_b) \quad (3.20)$$

Seul le terme  $|a\rangle = |\Psi_0\rangle$  contribue finalement dans cette somme pour  $T \rightarrow 0$ . Répétant ce calcul pour  $\omega < 0$ , on obtient finalement:

$$\lim_{T \rightarrow 0} \rho(k, \omega) = A(k, \omega) \quad (3.21)$$

où  $A(k, \omega)$  est la fonction spectrale à  $T = 0$  introduite au chapitre précédent.

On voit donc que la fonction de Green à  $T = 0$  du chapitre précédent est reliée à la limite  $T \rightarrow 0$  de  $\mathcal{G}$  de la manière suivante:

$$G_{T=0}(k, \omega) = \theta(\omega) \lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{G}^R(k, \omega) + \theta(-\omega) \lim_{T \rightarrow 0} \mathcal{G}^A(k, \omega) \quad (3.22)$$

Dans le cas où le fondamental du système est dégénéré, la limite  $T \rightarrow 0$  de  $\mathcal{G}$  introduit une superposition des fonctions de Green correspond aux différents fondamentaux.

### 3.4 Sommes sur les fréquences de Matsubara

On cherche à calculer une somme de la forme:

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \phi(i\omega_n) \quad (3.23)$$

Nous supposons que la fonction d'une variable complexe  $\phi(z)$  possède des pôles simples en  $z = z_l$ , de résidu  $r_l$ , qu'elle est analytique en dehors de ces pôles et qu'elle décroît "assez vite" pour  $|z| \rightarrow \infty$ . Nous supposons de plus que ces pôles ne coïncident pas avec les fréquences de Matsubara  $i\omega_n$ .

On remarque que le facteur de Fermi prolongé dans le plan complexe:

$$f(z) \equiv \frac{1}{1 + e^{\beta z}} \quad (3.24)$$

a ses pôles aux fréquences de Matsubara  $z = i\omega_n$ , avec un résidu  $-\frac{1}{\beta}$ . On applique alors le théorème de Cauchy à l'intégrale:

$$\int_C \frac{dz}{2i\pi} f(z)\phi(z) \quad (3.25)$$

où le contour  $\mathcal{C}$  est par exemple un grand cercle englobant tous les pôles de  $\phi$ , et dont on fait tendre le rayon vers l'infini. On trouve alors:

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \phi(i\omega_n) = \sum_l r_l f(z_l) \quad (3.26)$$

Un cas particulièrement important en pratique est celui où les pôles de  $\phi$  se trouvent sur l'axe réel, de sorte que  $\phi(z)$  admet une représentation spectrale:

$$\phi(z) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\text{Im}\phi(\omega + i0^+)}{z - \omega} \quad (3.27)$$

On a alors:

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \phi(i\omega_n) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \text{Im}\phi(\omega + i0^+) f(\omega) \quad (3.28)$$

On appliquera par exemple ces formules pour démontrer que:

$$\frac{1}{\beta} \sum_n \frac{1}{i\omega_n - \xi_k} e^{i\omega_n 0^+} = f(\xi_k) \quad (3.29)$$

en prenant  $\phi(z) = \frac{1}{z - \xi_k} e^{\eta z}$  avec  $\eta = 0^+$ . On notera l'importance du facteur de convergence pour définir précisément la somme.

# Chapter 4

## Théorie de perturbation et diagrammes de Feynman

### 4.1 Représentation d'interactions

On considère un système caractérisé par un hamiltonien  $H$ , ainsi qu'une fonction d'onde quelconque  $|\psi_t\rangle$  vérifiant l'équation de Schrödinger  $i\partial_t|\psi_t\rangle = H|\psi_t\rangle$ , ainsi qu'un opérateur  $O$ , dont la moyenne à l'instant  $t$  est donnée par  $\langle\psi_t|O|\psi_t\rangle$ . Cette représentation constitue la représentation de Schrödinger. Cependant si  $H$  est indépendant du temps, on a:

$$|\psi_t\rangle = e^{-\frac{i}{\hbar}Ht}|\psi_{t=0}\rangle$$

On peut alors passer en représentation d'Heisenberg, où les opérateurs dépendent du temps, et où les fonctions d'ondes n'en dépendent plus. On a alors:

$$O(t) = e^{iHt}Oe^{-iHt}$$

Il existe enfin une autre représentation, que nous allons utiliser ici, appelée représentation de Matsubara, où les opérateurs dépendent d'un temps imaginaire  $\tau$  de la façon suivante:

$$O(\tau) = e^{\tau K}Oe^{-\tau K}$$

où l'on a posé  $K = H - \mu N$ , ce qui revient uniquement à un changement de l'origine des énergies, afin que l'énergie de Fermi soit l'origine des énergies.

Dans toute la suite, on s'intéressera à un hamiltonien de la forme  $K = K_0 + V = H_0 + V - \mu N$ , où  $H_0$  est un hamiltonien d'électrons indépendants et  $V$  un potentiel de couplage entre les électrons.

A température finie, on a vu que la solution du problème était donnée par le calcul explicite de la fonction de Green:

$$\mathcal{G} \propto \text{Tr} \left[ e^{-\tau K} c c^\dagger \right]$$

On doit alors découpler  $V$  et  $H_0$ , puisque de manière générale, on n'a pas  $e^{-iHt} \neq e^{-iH_0t} e^{-iVt}$ , si  $H$  et  $V$  ne commutent pas.

Considérons alors un opérateur  $O$ , qui s'écrit en représentation de Matsubara:

$$\begin{aligned} O(\tau) &= e^{\tau K} O e^{-\tau K} \\ &= e^{\tau K} e^{-\tau K_0} e^{\tau K_0} O e^{-\tau K_0} e^{\tau K_0} e^{-\tau K} \\ &= U^{-1}(\tau) \hat{O}(\tau) U(\tau) \end{aligned} \quad (4.1)$$

où on a posé  $U(\tau) = e^{\tau K_0} e^{-\tau K}$  et  $\hat{O}(\tau) = e^{\tau K_0} O e^{-\tau K_0}$ .

On a alors ramené toute la difficulté du problème dans l'opérateur  $U$ . Il s'agit alors de calculer  $U$  en perturbation de  $V$ . Si on reprend alors l'expression de la fonction de Green à température finie, on a, pour  $\tau > 0$ :

- numérateur:

$$\begin{aligned} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta K} T_\tau [c_k(\tau) c_k^\dagger(0)] \right\} &= \text{Tr} \left[ e^{-\beta K} e^{\tau K} c_k e^{-\tau K} c_k^\dagger \right] \\ &= \text{Tr} \left[ e^{-\beta K_0} e^{\beta K_0} e^{-\beta K} T_\tau e^{\tau K} e^{-\tau K_0} e^{\tau K_0} c_k e^{-\tau K_0} e^{\tau K_0} c_k^\dagger \right] \\ &= \text{Tr} \left[ e^{-\beta K_0} U(\beta) T_\tau U^{-1}(\tau) \hat{c}(\tau) U(\tau) \hat{c}^\dagger(0) \right] \end{aligned}$$

- fonction de partition:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} \left[ e^{-\beta K_0} \left( e^{\beta K_0} e^{-\beta K} \right) \right] \\ &= \text{Tr} \left[ e^{-\beta K_0} U(\beta) \right] \end{aligned}$$

La fonction de Green se réécrit alors, de manière compacte:

$$\mathcal{G}(k, \tau) = - \frac{\text{Tr} \left[ e^{-\beta K_0} U(\beta) T_\tau U^{-1}(\tau) \hat{c}(\tau) U(\tau) \hat{c}^\dagger(0) \right]}{\text{Tr} \left[ e^{-\beta K_0} U(\beta) \right]} \quad (4.2)$$

Dans cette expression, toutes les interactions sont contenues dans  $U(\tau)$ , et c'est donc cet opérateur que nous allons chercher à calculer.

### 4.1.1 Calcul de l'opérateur d'évolution $U(\tau)$

On a donc  $U(\tau) = e^{\tau K_0} e^{-\tau K}$ , et donc sa dérivée par rapport à  $\tau$  s'écrit:

$$\begin{aligned}
 \frac{dU(\tau)}{d\tau} &= K_0 e^{\tau K_0} e^{-\tau K} + e^{\tau K_0} (-K) e^{-\tau K} \\
 &= e^{\tau K_0} K_0 e^{-\tau K} + e^{\tau K_0} (-K) e^{-\tau K} \\
 &= e^{\tau K_0} (K_0 - K) e^{-\tau K} \\
 &= e^{\tau K_0} (-V) e^{-\tau K} \\
 &= -\hat{V}(\tau) U(\tau)
 \end{aligned}$$

On doit donc résoudre l'équation:

$$\frac{dU(\tau)}{d\tau} = -\hat{V}(\tau) U(\tau) \quad (4.3)$$

$\hat{V}(\tau)$  lui même est facile à obtenir. Par exemple si on considère un potentiel d'interaction à deux corps, et donc du type  $V = \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \langle \alpha\beta | V | \gamma\delta \rangle c_\alpha^\dagger c_\beta^\dagger c_\delta c_\gamma$ , on a:

$$\begin{aligned}
 \hat{V}(\tau) &= \dots e^{\tau K_0} c_{k_1+q}^\dagger c_{k_2-q}^\dagger c_{k_2} c_{k_1} e^{-\tau K_0} \\
 &= \dots \hat{c}_{k_1+q}^\dagger(\tau) \hat{c}_{k_2-q}^\dagger(\tau) \hat{c}_{k_2}(\tau) \hat{c}_{k_1}(\tau)
 \end{aligned} \quad (4.4)$$

Par ailleurs:

$$\begin{aligned}
 \hat{c}_{k_0}^\dagger(\tau) &= e^{\tau \sum_k \xi_k c_k^\dagger c_k} c_{k_0}^\dagger e^{-\tau \sum_k \xi_k c_k^\dagger c_k} \\
 &= e^{\tau \xi_{k_0} c_{k_0}^\dagger c_{k_0}} c_{k_0}^\dagger e^{-\tau \xi_{k_0} c_{k_0}^\dagger c_{k_0}}
 \end{aligned} \quad (4.5)$$

Or, si on désigne par  $|0\rangle$  et  $|1\rangle$  les deux états désignant le remplissage de l'état  $|k_0\rangle$ , on a:

$$\begin{aligned}
 \hat{c}_{k_0}^\dagger(\tau) |0\rangle &= e^{\tau K_0} c_{k_0}^\dagger |0\rangle \\
 &= e^{\tau K_0} |1\rangle \\
 &= e^{\tau \xi_{k_0}} |1\rangle \\
 &= e^{\tau \xi_{k_0}} c_{k_0}^\dagger |0\rangle
 \end{aligned} \quad (4.6)$$

et

$$\begin{aligned}
 \hat{c}_{k_0}^\dagger(\tau) |1\rangle &= 0 \\
 &= e^{\tau \xi_{k_0}} c_{k_0}^\dagger |1\rangle
 \end{aligned} \quad (4.7)$$

et donc, en faisant de même pour  $\hat{c}_{k_0}(\tau)$

$$\begin{aligned}\hat{c}_{k_0}^\dagger(\tau) &= e^{\tau\xi_{k_0}}c_{k_0}^\dagger \\ \hat{c}_{k_0}(\tau) &= e^{-\tau\xi_{k_0}}c_{k_0}\end{aligned}\tag{4.8}$$

On obtient donc pour  $\hat{V}$ :

$$\hat{V} = \sum_{k_1, k_1, q} e^{\tau(\xi_{k_1+q} + \xi_{k_2-q} - \xi_{k_1} - \xi_{k_2})} [c_{k_1+q}^\dagger c_{k_2-q}^\dagger c_{k_2} c_{k_1}]\tag{4.9}$$

On doit donc résoudre l'équation 4.3 avec la condition initiale évidente  $U(\tau = 0) = 1$ . On pourrait alors naïvement dire que

$$U(\tau) = e^{-\int_0^\tau d\tau_1 \hat{V}(\tau_1)}$$

Cependant, comme  $[\hat{V}(\tau_1), \hat{V}(\tau_2)] \neq 0$ , la solution n'est pas aussi simple. On va donc devoir effectuer un calcul en perturbation. On décompose alors  $U$  en puissance de  $V$ :

$$U = 1 + U_1 + U_2 \dots$$

A l'ordre 1, on a donc:

$$\frac{dU_1}{d\tau} = -\hat{V}(\tau)$$

soit

$$U_1(\tau) = -\int_0^\tau d\tau_1 \hat{V}(\tau_1)\tag{4.10}$$

A l'ordre 2:

$$\frac{dU_2}{d\tau} = -\hat{V}(\tau) \left[ -\int_0^\tau d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \right]$$

soit

$$U_2(\tau) = \int_0^\tau d\tau_2 \hat{V}(\tau_2) \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \hat{V}(\tau_1)\tag{4.11}$$

De manière plus générale, on a donc, pour tout  $n$ :

$$U_n(\tau) = (-1)^n \int_0^\tau d\tau_n \int_0^{\tau_n} d\tau_{n-1} \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \hat{V}(\tau_n) \hat{V}(\tau_{n-1}) \dots \hat{V}(\tau_1)\tag{4.12}$$

ainsi que:

$$U(\tau) = \sum_{n=0}^{\infty} U_n(\tau)\tag{4.13}$$

L'équation 4.13 nous donne alors une solution exacte, mais assez désagréable à manipuler. En effet, si  $U$  était une simple fonction, au lieu d'un opérateur, l'équation 4.13 se réécrirait en:

$$\frac{1}{n!} \int_0^\tau d\tau_n \int_0^{\tau_n} d\tau_{n-1} \dots \int_0^{\tau_2} d\tau_1 \prod_i \hat{V}(\tau_i)$$

Mais ceci n'est pas possible puisque  $[V(\tau_1), V(\tau_2)] \neq 0$  Cependant, on va pouvoir utiliser le  $T_\tau$  pour symétriser la somme. L'équation 4.13 va alors se réécrire:

$$\begin{aligned} U_n(\tau) &= \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\tau d\tau_n \int_0^\tau \dots d\tau_1 T_\tau [\hat{V}(\tau_n) \dots \hat{V}(\tau_1)] \\ &= \frac{1}{n!} T_\tau \left[ \left( - \int_0^\tau d\tau_\alpha \hat{V}(\tau_\alpha) \right)^n \right] \end{aligned} \quad (4.14)$$

On en déduit directement que:

$$U(\tau) = T_\tau e^{-\int_0^\tau d\tau_1 \hat{V}(\tau_1)} \quad (4.15)$$

Remarques importantes:

- on a  $T_\tau[\hat{V}(\tau_1)\hat{V}(\tau_2)] = \begin{cases} \hat{V}(\tau_1)\hat{V}(\tau_2) & \text{si } \tau_1 > \tau_2 \\ +\hat{V}(\tau_2)\hat{V}(\tau_1) & \text{si } \tau_1 < \tau_2 \end{cases}$  puisque l'opérateur  $V$  contient un nombre pair d'opérateurs de fermions.
- Tout ce que nous avons fait précédemment n'est valable que si  $\frac{\partial H}{\partial t} = 0$ , car la notion d'équilibre thermodynamique n'est pas bien définie si l'énergie du système dépend du temps.

On définit alors un opérateur  $S$ :

$$S(\tau_2, \tau_1) = T_\tau e^{-\int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau_1 \hat{V}(\tau_1)} = U(\tau_2)U(\tau_1)^{-1} \quad (4.16)$$

la dernière égalité n'étant vraie que grâce à l'opérateur  $T_\tau$ .

On peut alors en tirer une nouvelle expression de  $\mathcal{G}$ . En effet, pour  $\beta > \tau > 0$ , on a, d'après l'équation 4.2:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(k_0, \tau) &= -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta K_0} T_\tau S(\beta, \tau) \hat{c}_{k_0}(\tau) S(\tau, 0) \hat{c}_{k_0}^\dagger(0) \right] \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta K_0} T_\tau (S(\beta, \tau) \hat{c}_{k_0}(\tau) S(\tau, 0) \hat{c}_{k_0}^\dagger(0)) \right] \\ &= -\frac{1}{Z} \text{Tr} \left[ e^{-\beta K_0} T_\tau (S(\beta, \tau) S(\tau, 0) \hat{c}_{k_0}(\tau) \hat{c}_{k_0}^\dagger(0)) \right] \end{aligned}$$

ce qui implique que:

$$\mathcal{G}(k_0, \tau) = -\frac{\text{Tr} \left[ e^{-\beta K_0} T_\tau (S(\beta) \hat{c}_{k_0}(\tau) \hat{c}_{k_0}^\dagger(0)) \right]}{\text{Tr} \left[ e^{-\beta K_0} S(\beta) \right]} \quad (4.17)$$

avec  $S(\beta) = S(\beta, 0) = T_\tau e^{-\int_0^\beta d\tau_1 \hat{V}(\tau_1)}$

## 4.2 Calcul de la fonction de Green au premier ordre

On considère un potentiel de la forme:

$$\begin{aligned}
 V &= \frac{1}{2} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \int dx dx' V(x-x') \rho_{\sigma_1}(x) \rho_{\sigma_2}(x) \\
 &= \frac{1}{2} \int dx dx' V(x-x') \rho_{\uparrow}(x) \rho_{\downarrow}(x) \\
 &= \frac{1}{2\Omega} \sum_{k_1, k_1, q} V_q c_{k_1+q, \uparrow}^{\dagger} c_{k_2-q, \downarrow}^{\dagger} c_{k_2, \downarrow} c_{k_1, \uparrow}
 \end{aligned} \tag{4.18}$$

A l'ordre zéro, on a:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}^{(0)} &= -\frac{1}{Z_0} \text{Tr} \left[ e^{-\beta K_0} \hat{c}_{k_0}(\tau) \hat{c}_{k_0}^{\dagger}(0) \right] \\
 &= -\langle T_{\tau} \hat{c}_{k_0}(\tau) \hat{c}_{k_0}^{\dagger}(0) \rangle_{K_0}
 \end{aligned} \tag{4.19}$$

Or, d'après 4.8:

$$\hat{c}_{k_0}(\tau) = e^{-\tau \xi_{k_0}} c_{k_0} \tag{4.20}$$

$$\hat{c}_{k_0}^{\dagger}(0) = c_{k_0}^{\dagger} \tag{4.21}$$

Si  $\tau > 0$ , on a donc:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}^{(0)} &= -\langle e^{-\tau \xi_{k_0}} c_{k_0} c_{k_0}^{\dagger} \rangle \\
 &= -e^{-\tau \xi_{k_0}} (1 - f_{k_0})
 \end{aligned} \tag{4.22}$$

avec  $f_{k_0} = \frac{1}{e^{\beta \xi_{k_0}} + 1}$

On en déduit alors que:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{G}(i\nu_n) &= \int_0^{\beta} d\tau \mathcal{G}(\tau) e^{i\nu_n \tau} \\
 &= -\frac{1}{i\nu_n - \xi_{k_0}} \underbrace{\left[ e^{(i\nu_n - \xi_{k_0})\beta} - 1 \right]}_{-(e^{-\beta \xi_{k_0}} + 1)} \underbrace{[1 - f_{k_0}]}_{\frac{1}{e^{-\beta \xi_{k_0}} + 1}} \\
 &= \frac{1}{i\nu_n - \xi_{k_0}}
 \end{aligned} \tag{4.23}$$

On retrouve alors bien le résultat pour des électrons indépendants.

On peut alors effectuer le calcul à l'ordre 1. En utilisant le résultat 4.17, on obtient:

$$\mathcal{G}(k_0, \tau) = -\frac{\text{Tr} \left[ e^{-\beta K_0} T_{\tau} (S(\beta) \hat{c}_{k_0}(\tau) \hat{c}_{k_0}^{\dagger}(0)) \right]}{\text{Tr} \left[ e^{-\beta K_0} S(\beta) \right]} \tag{4.24}$$

En divisant alors numérateur et dénominateur par  $\text{Tre}^{-\beta K_0}$ , on obtient une expression plus utilisable de la fonction de Green:

$$\mathcal{G}(\tau, k) = -\frac{\langle T_\tau S(\beta) \hat{c}_{k_0}(\tau) \hat{c}_{k_0}^\dagger(0) \rangle_0}{\langle T_\tau S(\beta) \rangle_0} \quad (4.25)$$

Introduisons alors l'expression de  $S$  au premier ordre  $S(\beta) = 1 - \int_0^\beta d\tau_1 \hat{V}(\tau_1)$  dans 4.25:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}(\tau, k) &= \frac{\langle T_\tau \hat{c} \hat{c}^\dagger \rangle_0 - \langle T_\tau \int_0^\beta d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \hat{c} \hat{c}^\dagger \rangle_0}{1 - \langle \int_0^\beta d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \rangle_0} \\ &\approx \left( \langle T_\tau \hat{c} \hat{c}^\dagger \rangle_0 - \langle T_\tau \int_0^\beta d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \hat{c} \hat{c}^\dagger \rangle_0 \right) \left( 1 + \langle \int_0^\beta d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \rangle_0 \right) \\ &\approx \langle T_\tau \hat{c} \hat{c}^\dagger \rangle_0 - \left[ \langle T_\tau \int_0^\beta d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \hat{c} \hat{c}^\dagger \rangle_0 - \langle T_\tau \hat{c} \hat{c}^\dagger \rangle_0 \langle T_\tau \int_0^\beta d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \hat{c} \hat{c}^\dagger \rangle_0 \right] \end{aligned} \quad (4.26)$$

Or, d'après les résultats de l'ordre zéro, on a:

$$\langle T_\tau \hat{c} \hat{c}^\dagger \rangle_0 = e^{-\tau \xi_{k_0}} (1 - n_{k_0}) \quad (4.27)$$

Nous pouvons ensuite évaluer le terme  $\langle T_\tau \int_0^\beta d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \hat{c} \hat{c}^\dagger \rangle_0$ . En effet, si on écrit:

$$\hat{V}(\tau_1) = \frac{1}{2\Omega} \sum_q V(q) \underbrace{\sum_{k_1} \hat{c}_{k_1+q, \uparrow}^\dagger \hat{c}_{k_1, \uparrow}}_{\hat{\rho}_\uparrow(q, \tau_1)} \underbrace{\sum_{k_2} \hat{c}_{k_2-q, \downarrow}^\dagger \hat{c}_{k_2, \downarrow}}_{\hat{\rho}_\downarrow(-q, \tau_1)}$$

Ce qui implique que:

$$\langle T_\tau \int_0^\beta d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \hat{c} \hat{c}^\dagger \rangle_0 = \frac{1}{2\Omega} \sum_q \int_0^\beta V_q d\tau_1 \langle \hat{\rho}_\uparrow(q, \tau_1) \rangle \langle \hat{\rho}_\downarrow(-q, \tau_1) \rangle \quad (4.28)$$

puisque les spins  $\uparrow$  et  $\downarrow$  sont découplés. On peut alors directement réécrire le troisième terme de 4.26:

$$\begin{aligned} \langle T_\tau \int_0^\beta d\tau_1 \hat{V}(\tau_1) \hat{c} \hat{c}^\dagger \rangle_0 &= \langle \rho_\uparrow \rho_\downarrow c_\uparrow c_\uparrow^\dagger \rangle_0 \\ &= \langle \rho_\uparrow c_\uparrow c_\uparrow^\dagger \rangle_0 \langle \rho_\downarrow \rangle_0 \end{aligned} \quad (4.29)$$

Par ailleurs on a, par définition:

$$\begin{aligned} \rho_\downarrow(-q, \tau) &= \sum_k \hat{c}_{k-q, \downarrow}^\dagger(\tau) \hat{c}_{k, \downarrow}(\tau) \\ &= \sum_k e^{\tau(\xi_{k-q} - \xi_k)} c_{k-q, \downarrow}^\dagger(\tau) c_{k, \downarrow}(\tau) \end{aligned} \quad (4.30)$$

Ceci nous permet donc de dire que

$$\langle \rho_{\downarrow}(-q, \tau) \rangle = \begin{cases} 0 & \text{si } q \neq 0 \\ \sum_k n_{k,\downarrow} & \text{si } q = 0 \end{cases}$$

On peut donc alors faire un bilan provisoire en écrivant l'expression de la correction à l'ordre 1 à la fonction de Green:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{(1)}(k_0, \tau) &= \frac{V_0}{2\Omega} \sum_{k_1, k_2} \int_0^\beta d\tau_1 n_{k_2, \downarrow} \left[ \langle T_\tau \hat{c}_{k_1, \uparrow}^\dagger(\tau_1) \hat{c}_{k_1, \uparrow}(\tau_1) \hat{c}_{k_0, \uparrow}(\tau) \hat{c}_{k_0, \uparrow}^\dagger(0) \rangle_0 \right. \\ &\quad \left. - \langle T_\tau \hat{c}_{k_1, \uparrow}^\dagger(\tau_1) \hat{c}_{k_1, \uparrow}(\tau_1) \rangle_0 \langle \hat{c}_{k_0, \uparrow}(\tau) \hat{c}_{k_0, \uparrow}^\dagger(0) \rangle_0 \right] \end{aligned} \quad (4.31)$$

Si on regarde alors le premier terme de l'intégrale, on s'aperçoit qu'il faut que  $k_1 = k_0$ , puisque l'hamiltonien  $H_0$  ne couple pas les différents  $k$ . En effet si  $k_1 \neq k_0$ , les termes en  $k_1$  et en  $k_0$  étant décorrélés, la correction au premier ordre est nulle. On obtient donc finalement:

$$\mathcal{G}^{(1)} = \frac{V_0}{2\Omega} \left( \sum_{k_2} n_{k_2, \downarrow} \right) \int_0^\beta d\tau_1 e^{-\tau \xi_{k_0}} \left[ \langle T_\tau \underbrace{c_{k_0}^\dagger}_{(\tau_1)} \underbrace{c_{k_0}}_{(\tau_1)} \underbrace{c_{k_0}}_{(\tau)} \underbrace{c_{k_0}^\dagger}_{(0)} \rangle_0 - n_{k_1, \uparrow} (1 - n_{k_0, \uparrow}) \right] \quad (4.32)$$

puisque d'après les résultats 4.8:

$$\begin{aligned} \hat{c}_{k_1, \uparrow}^\dagger(\tau_1) \hat{c}_{k_1, \uparrow}(\tau_1) \hat{c}_{k_0, \uparrow}(\tau) \hat{c}_{k_0, \uparrow}^\dagger(0) &= e^{\tau \xi_{k_1}} c_{k_1}^\dagger e^{-\tau \xi_{k_1}} c_{k_1} e^{-\tau \xi_{k_0}} c_{k_0} c_{k_0}^\dagger \\ &= e^{-\tau \xi_{k_0}} c_{k_1}^\dagger c_{k_1} c_{k_0} c_{k_0}^\dagger \end{aligned}$$

Ceci nous permet de dire que:

- Si  $\tau_1 > \tau$ , alors  $\mathcal{G}^{(1)} = 0$  car  $c_{k_0} c_{k_0} = \mathbf{0}$ .
- Si  $\tau_1 < \tau$ ,  $\langle c_{k_0} c_{k_0}^\dagger c_{k_0} c_{k_0}^\dagger \rangle = 1 - n_{k_0}$

On a donc *in fine*, pour  $\tau < \beta$ , seul domaine intéressant pour calculer ensuite  $\mathcal{G}(i\nu_n)$ :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{(1)} &= \frac{V_0}{2\Omega} \left( \sum_{k_2} n_{k_2, \downarrow} \right) \int_0^\beta d\tau_1 e^{-\tau \xi_{k_0}} [\theta(\tau - \tau_1)(1 - n_{k_0}) - n_{k_0}(1 - n_{k_0})] \\ &= \frac{V_0}{2\Omega} \left( \sum_{k_2} n_{k_2, \downarrow} \right) (1 - n_{k_0}) e^{-\tau \xi_{k_0}} (\tau - \beta n_{k_0}) \end{aligned} \quad (4.33)$$

On veut à présent calculer  $\mathcal{G}^{(1)}(p, i\omega_n)$ . Cette grandeur s'écrit:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{(1)}(p, i\omega_n) &= \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \mathcal{G}^{(1)}(p, \tau) \\ &= \frac{V_0}{2\Omega} N_{\downarrow} (1 - n_{k_0}) \left[ \int_0^\beta d\tau \tau e^{(i\omega_n - \xi_{k_0})\tau} - \beta n_{k_0} \int_0^\beta d\tau e^{(i\omega_n - \xi_{k_0})\tau} \right] \end{aligned} \quad (4.34)$$

Le second terme de l'équation 4.34 est assez simple à calculer. Il est en effet essentiellement constitué par, avec  $k_0 \equiv p$ :

$$\begin{aligned}
(1 - n_p)\beta n_p \int_0^\beta d\tau e^{(i\omega_n - \xi_p)\tau} &= \beta \underbrace{(1 - n_p) n_p}_{\frac{1}{e^{-\beta\xi_p} + 1}} \frac{1}{i\omega_n - \xi_p} [-e^{-\beta\xi_p} - 1] \\
&= -\beta n_p \frac{1}{i\omega_n - \xi_p}
\end{aligned} \tag{4.35}$$

Le premier terme est un peu plus compliqué, mais le calcul se fait aisément si on remarque que, avec  $F_\alpha = (1 - n_p) \int_0^\beta d\tau e^{\alpha\tau}$ , le premier terme s'écrit:

$$\frac{\partial F_\alpha}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha=i\omega_n - \xi_p}$$

Or  $F_\alpha = (1 - n_p) \frac{1}{\alpha} [e^{\alpha\beta} - 1]$ , ce qui implique que:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial F_\alpha}{\partial \alpha} \Big|_{\alpha=i\omega_n - \xi_p} &= (1 - n_p) \left[ -\frac{1}{\alpha^2} \right] [e^{\alpha\beta} - 1] + \frac{\beta}{\alpha} e^{\alpha\beta} \\
&= -(1 - n_p) \left\{ \frac{1}{(i\omega_n - \xi_p)^2} [e^{-\beta\xi_p} + 1] - \frac{\beta}{i\omega_n - \xi_p} e^{\alpha\beta} \right\} \\
&= \frac{1}{(i\omega_n - \xi_p)^2} - n_p \frac{1}{i\omega_n - \xi_p} \beta
\end{aligned} \tag{4.36}$$

puisque

$$\begin{aligned}
e^{\beta\xi_p} (1 - n_p) &= e^{-\beta\xi_p} \frac{1}{1 + e^{-\beta\xi_p}} \\
&= \frac{1}{1 + e^{\beta\xi_p}} = n_p
\end{aligned}$$

On remarque alors que le second terme de l'équation 4.36 se simplifie avec le second terme de l'équation 4.34. La fonction de Green s'écrit donc finalement:

$$\mathcal{G}^{(1)}(p, i\omega_n) = \frac{V_{q=0}}{2\Omega} N_\downarrow \left( \frac{1}{i\omega_n - \xi_p} \right)^2 \tag{4.37}$$

On s'aperçoit alors que le résultat est remarquablement simple. On peut donc supposer que tant d'efforts pour un résultat si évident sont un peu superflu : il existe peut-être une méthode moins fastidieuse pour y parvenir.

## 4.3 Diagrammes de Feynman

### 4.3.1 Théorème de Wick

La base de la méthode que nous allons exposer maintenant repose essentiellement sur le théorème de Wick. Dans le calcul précédent, on a eu à calculer des termes du type

$\langle T_\tau \hat{c}_k^\dagger(\tau') \hat{c}_k(\tau') \hat{c}_p(\tau) \hat{c}_p^\dagger(0) \rangle_0$  Ce que nous faisons donc est de créer des états, puis de les détruire, ou inversement. Le théorème de Wick nous dit alors que une telle moyenne va être égale somme de termes constitués du produit de moyennes à deux termes appariés deux à deux. Remarquons que ceci ne marche que parce que l'hamiltonien est gaussien.

Dans le calcul précédent nous avons à faire le calcul de:

$$\langle T_\tau S_\beta c_p(\tau) c_p^\dagger(0) \rangle_0 = \int_0^\beta \langle T_\tau c_{k+q}^\dagger(\tau') c_{k'-q}^\dagger(\tau') c_{k'\downarrow}(\tau') c_{k\uparrow}(\tau') c_{p\uparrow}(\tau) c_{p\downarrow}^\dagger(0) \rangle_0$$

les moyennes étant effectuées avec l'hamiltonien  $K_0$ .

Quels appariements sont alors possibles? Tout d'abord, on peut dire que les valeurs moyennes à deux opérateurs du type  $c^\dagger c^\dagger$  et  $cc$  vont être nulles. Par ailleurs, comme l'hamiltonien  $K_0$  ne couple pas les spins, les appariements entre opérateurs qui ont des spins différents vont également donner une valeur moyenne non nulle. Cependant, ceci ne s'arrête pas là. En effet, nous n'avons jusqu'à présent considéré que le numérateur de la fonction de Green. Mais si à présent on regarde l'expression complète, c'est-à-dire avec le dénominateur, on a, au premier ordre:

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= \frac{\langle c_p c_p^\dagger \rangle - \langle \int_0^\beta H_{int} c_p c_p^\dagger \rangle}{1 - \int_0^\beta d\tau' \langle H_{int} \rangle} \\ &= \langle c_p c_p^\dagger \rangle - \int_0^\beta d\tau' \left( \langle H_{int} c_p c_p^\dagger \rangle - \langle H_{int} \rangle \langle c_p c_p^\dagger \rangle \right) \end{aligned} \quad (4.38)$$

Si on utilise alors le théorème de Wick, on voit que tous les appariements où l'on va avoir des termes du type  $\langle c_p c_p^\dagger \rangle$  vont s'annuler avec la contribution au premier ordre du dénominateur. On peut par ailleurs montrer que ce résultat est vrai à quelque ordre que ce soit.

Dans le cas particulier du modèle de Hubbard, que nous regardons depuis le début, il ne reste alors plus qu'un appariement possible, étant donné que l'on ne peut coupler que des opérateurs qui ont le même spin entre eux. On a donc un terme du type:

$$\sum_{k,k',q} V_q \int_0^\beta d\tau' \langle c_{\uparrow,k+q}^\dagger(\tau') c_{p\uparrow}(\tau) \rangle \langle c_{k'-q}^\dagger(\tau') c_{k'}(\tau') \rangle \langle c_{k\uparrow}(\tau') c_{p\uparrow}^\dagger(0) \rangle \quad (4.39)$$

Comme toutes ces moyennes se font dans l'hamiltonien sans interactions, il faut qu'à l'issue de l'action des deux opérateurs on retombe dans le même état. Ceci implique que:

- d'après le troisième terme que  $p = k$
- d'après le deuxième terme que  $q = 0$
- d'après le premier terme que  $k + q = p$ , ce qui est déjà vérifié d'après les deux égalités précédentes.

On se retrouve donc avec un terme encore plus simple:

$$\sum_{k'} V_{q=0} \int_0^\beta d\tau' \underbrace{\langle T_\tau c_p^\dagger(\tau') c_p(\tau) \rangle}_{\mathcal{G}(p, \tau - \tau')} \underbrace{\langle T_\tau c_{k'}^\dagger(\tau) c_{k'}(\tau) \rangle}_{n_{k' \uparrow}} \underbrace{\langle T_\tau c_p^\dagger(\tau') c_p(0) \rangle}_{\mathcal{G}(p, \tau' - 0)} \quad (4.40)$$

Il suffit alors de remplacer les fonctions de Green par leurs expressions et d'intégrer. Mais on peut encore faire plus simple.

### 4.3.2 Diagrammes de Feynman d'ordre 1

Reprenons le terme qui nous intéresse:

$$\langle \underbrace{c_{k_3}^\dagger c_{k_4}^\dagger c_{k_2} c_{k_1}}_{H_{int}} c_{p \uparrow} c_{p \uparrow}^\dagger \rangle$$

avec ici  $k_3 = k + q, k_4 = k' - q, k_2 = k'$  et  $k_1 = k$ . On représente alors l'interaction par un diagramme de Feynman(4.1), auquel on rajoute les termes  $c_p^\dagger$  et  $c_p$  qui constituent les "pattes externes".

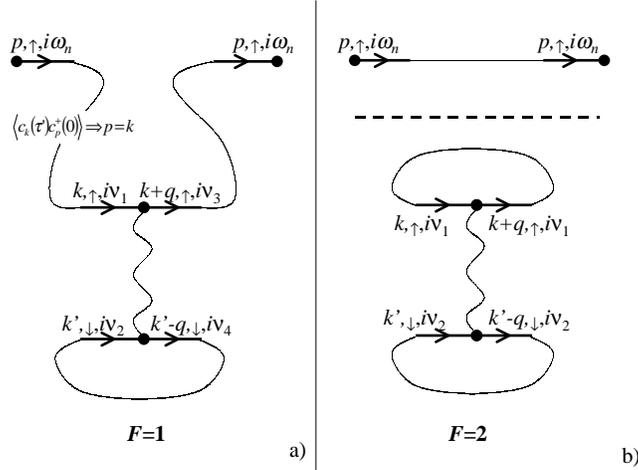


Figure 4.1: Diagrammes de Feynman au premier ordre pour le modèle de Hubbard. L'un est connecté (a) et l'autre est déconnecté (b).

Il y a un certain nombre de règles à utiliser pour construire les divers diagrammes:

- Dessiner tous les diagrammes plans, c'est-à-dire que l'on empêche les lignes de fermions de se croiser, connectés, c'est-à-dire non sécables en deux parties, et topologiquement distincts. En effet, les diagrammes non connectés s'annulent avec le dénominateur,

et le fait de considérer les diagrammes plans permet de compenser le terme en  $1/n!$  provenant du développement de l'exponentielle.

- On connecte les diverses branches.
- Il faut assurer la conservation de toutes les quantités conservées par l'hamiltonien libre (impulsion, spin...) le long d'une ligne. On peut par ailleurs travailler en fréquence plutôt qu'en temps. L'Hamiltonien libre étant invariant par translation dans le temps la fréquence est conservée le long d'une ligne.
- L'interaction est locale dans le temps

$$H_{int} = \int_0^\beta d\tau c^\dagger(\tau)c^\dagger(\tau)c(\tau)c(\tau)$$

ce qui donne en transformée de Fourier un terme en  $\delta(\nu_1 + \nu_2 - \nu_3 - \nu_4)$ . Il faut donc assurer la conservation à chaque interaction de la fréquence totale. Pour des interactions invariantes par translation dans l'espace l'impulsion totale doit être également conservée.

- Chaque vertex d'interaction donne un facteur  $V_q$  pour un potentiel de la forme (4.18) (le facteur  $1/2$  devant l'interaction est absorbé par le fait que pour un seul diagramme topologiquement distinct il y a en fait deux contractions due à l'indiscernabilité des pattes d'interaction).
- On intègre (ou on somme) sur tous les degrés de liberté restant :  $\frac{1}{\Omega} \sum_k, \frac{1}{\beta} \sum_{\nu_n}$ .
- on attribue un signe à chaque diagramme, qui est donné par  $(-1)^{n+F}$ , où  $n$  est l'ordre du développement et  $F$  le nombre de boucles de Fermions. Ce rôle de  $F$  est dû aux permutations qu'il faut effectuer pour obtenir un terme en  $cc^\dagger$ .

En ce qui concerne le modèle de Hubbard, si on considère le schéma (a) de la figure 4.1, qui est le seul diagramme connecté pour ce modèle, on peut évaluer directement la fonction de Green. Elle vaut:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{(1)} &= + \sum_{k, i\nu_n} \mathcal{G}_\uparrow^{(0)}(p, i\omega_n) \mathcal{G}_\uparrow^{(0)}(p, i\omega_n) V_{q=0} \mathcal{G}_\downarrow^{(0)}(p, i\nu_n) \\ &= \frac{1}{\beta\Omega} \frac{1}{(i\omega_n - \xi_p)^2} V_{q=0} \sum_{k, i\nu_n} \frac{1}{i\nu_n - \xi_k} \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_k f(\xi_k) = \sum_k n_{k,\downarrow} \end{aligned} \tag{4.41}$$

d'après les résultats sur les sommes de Matsubara.

Remarquons tout de même que ce résultat n'est pas ici strictement applicable. En effet, si l'on reprend la démonstration de ce résultat, on a à un moment donné une intégrale complexe à calculer, et qui s'écrit ici:

$$\oint dz \frac{f(z)}{z - \xi_k}$$

que l'on intègre sur un contour circulaire afin de l'annuler. Cependant, la fonction  $f$  n'assure la convergence de l'intégrand quand  $R \rightarrow +\infty$  que pour les  $z$  tels que  $\Re(z) > 0$  (on a dans l'exponentielle un terme en  $-R \cos(\theta)$ ). En effet, le dénominateur ne converge pas assez rapidement, dans le plan complexe, pour annuler l'intégrale. Pour que le résultat soit toujours valable (et il l'est), il faut donc rajouter un terme dans l'intégrale comme suit:

$$\oint dz \frac{f(z)}{z - \xi_k} e^{\Re(z)0^+}$$

Cette somme sur les fréquences correspond en fait à évaluer la fonction de corrélation à temps égaux  $T_\tau c(\tau) c^\dagger(\tau)$ , ce qui demande de définir l'ordre dans le temps à temps égaux. La régularisation de l'intégrale correspond donc à choisir que temps "égal" signifie  $\tau = -0$  de façon à avoir  $-T_\tau c(\tau) c^\dagger(\tau) = c^\dagger(\tau) c(\tau)$ .

Si maintenant on s'intéresse à un modèle plus général que le modèle de Hubbard, on a une interaction qui s'écrit:

$$H_{int} = \frac{1}{2\Omega} \sum_{k,k',q,\sigma_1,\sigma_2} (c_{k+q}^\dagger c_k)_{\sigma_1} (c_{k'-q}^\dagger c_{k'})_{\sigma_2} V_{\sigma_1\sigma_2}(q) \quad (4.42)$$

L'interaction se symbolise alors par la figure 4.2.

On peut alors, en utilisant les diagrammes de Feynman, écrire directement la fonction de Green à l'ordre 1 (pour cela, il suffit de dessiner tous les diagrammes qui ne contiennent qu'une seule fois l'interaction). Les seuls diagrammes à prendre en compte sont alors ceux donnés figure 4.3

Les contributions à la fonction de Green à l'ordre 1 sont donc données par:

- pour le diagramme (a), on a  $\mathcal{G}^2(p, i\omega_n) \frac{1}{\beta\Omega} \sum_{k,i\nu_n,\sigma_2} V_{\uparrow,\sigma_2}(q=0) \mathcal{G}^{(0)}(k, i\nu_n)$
- pour le diagramme (b), on a  $-\mathcal{G}^2(p, i\omega_n) \frac{1}{\beta\Omega} \sum_{k,i\nu_n} V_{\uparrow,\uparrow}(q=k-p) \mathcal{G}^{(0)}(k, i\nu_n)$

### 4.3.3 Diagrammes de Feynman d'ordre 2

A l'ordre 2, pour le même genre d'interaction, on a beaucoup plus de diagramme, dont certains sont donnés figure 4.4. Cette figure montre par ailleurs une représentation plus schématique encore de ces diagrammes.

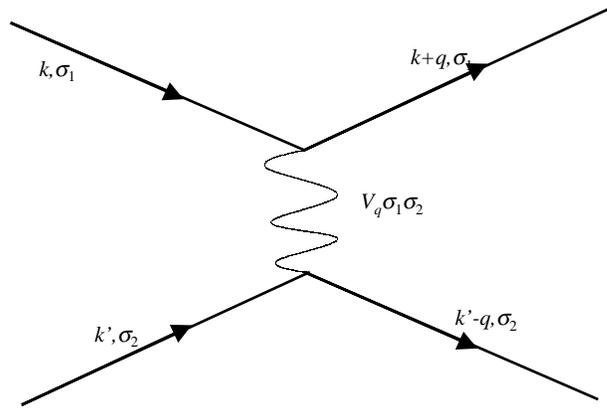


Figure 4.2: Représentation de l'interaction dans un cas plus général.

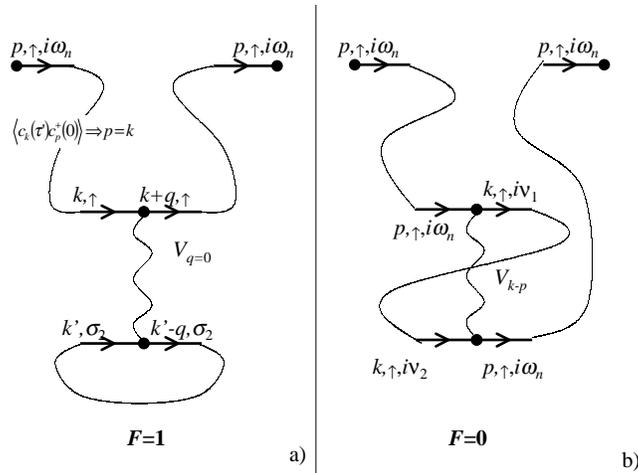


Figure 4.3: Diagrammes de Feynman pour une interaction plus générale que le modèle de Hubbard.

On peut alors faire une remarque supplémentaire. On va pouvoir trouver des "séries géométriques" de diagrammes de Feynman, comme représenté figure 4.5.

Cette série s'écrit, en terme de fonction de Green, si l'on représente l'interaction par  $\{\}$ :

$$\mathcal{G}^0(p, i\nu_n) + (\mathcal{G}^0(p, i\nu_n))^2 \{\} + (\mathcal{G}^0(p, i\nu_n))^3 \{\}^2$$

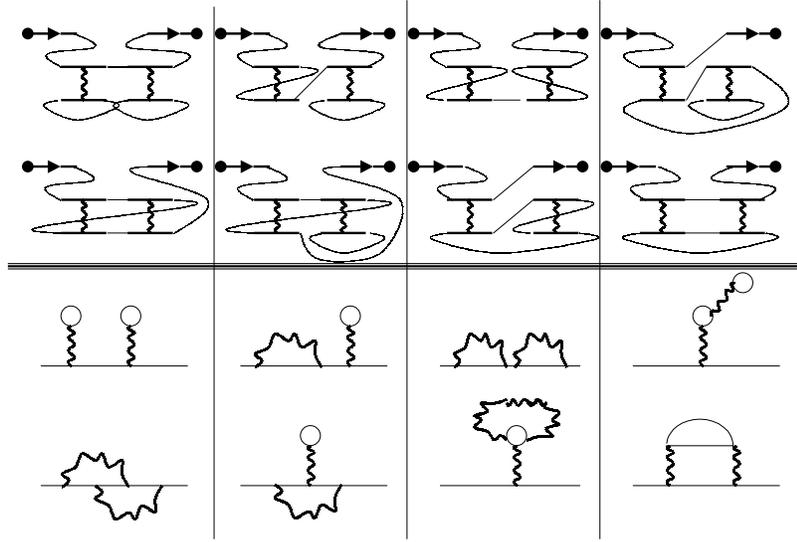


Figure 4.4: Exemples de diagrammes de Feynman d'ordre 2. Les huit diagrammes du haut ont leur équivalent plus schématique en bas.

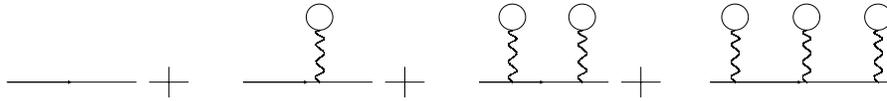


Figure 4.5: Exemple de "série géométrique" de diagrammes.

$$+ \left( \mathcal{G}^0(p, i\nu_n) \right)^4 \{ \}^3 = \frac{\mathcal{G}^0(p, i\nu_n)}{1 - \{ \}(p, i\nu_n)\mathcal{G}^0(p, i\nu_n)} \quad (4.43)$$

On voit donc que plus l'ordre de la perturbation augmente plus la fonction de Green libre apparaît avec une puissance élevée. Comme l'on s'intéresse ultimement aux propriétés de basse énergie du système ( $(\omega, \xi_k) \rightarrow 0$ ), on voit qu'une série de perturbation brutale est vouée à l'échec car l'ordre  $n + 1$  sera plus divergent que l'ordre  $n$ , et ce même si la partie venant de l'interaction  $\{ \}$  se comporte de façon parfaitement régulière.

Il est en fait plus astucieux de resommer toute la série géométrique pour obtenir.

$$\frac{1}{[\mathcal{G}^0(p, i\nu_n)]^{-1} - \Sigma(p, i\nu_n)} = \frac{1}{i\nu_n - \xi_p - \Sigma(p, i\nu_n)}$$

Cette expression ne contient bien sur qu'une partie de tout les diagrammes, mais une

telle resommation peut en fait se généraliser à tous les ordres.

### 4.3.4 Equation de Dyson. Self-énergie $\Sigma$

On peut montrer (*Equation de Dyson*) que la fonction de Green exacte est:

$$\mathcal{G}(p, i\nu_n) = \frac{1}{i\nu_n - \xi_p - \Sigma(p, i\nu_n)} \quad (4.44)$$

où  $\Sigma$  est la *self-énergie*. Pour obtenir  $\Sigma$  il faut écrire tous les diagrammes qui sont une particule irréductible, c'est-à-dire les diagrammes qui ne peuvent pas être coupés en deux si l'on coupe une et une seule ligne de fermions. On retire de plus les "pattes" externes de ces diagrammes. Par exemple, le terme du premier ordre de la série géométrique représentée figure 4.5 rentrera dans la détermination de  $\Sigma$ , mais pas les termes d'ordre supérieurs. Autre exemple : dans les diagrammes représentés dans la figure 4.4, les deux premiers diagrammes de la première ligne ne sont pas avec une particule irréductible, alors que les autres le sont.

L'équation de Dyson s'avère être un outil extrêmement puissant. En effet, elle évite l'effet pervers du calcul en perturbation qui est que lorsque l'on augmente l'ordre en diagramme, l'effet des singularités augmente, ce qui oblige à aller à l'ordre infini pour avoir un résultat correct.

#### Calcul à l'ordre 1

On va maintenant calculer la self énergie au premier ordre pour l'hamiltonien d'interaction:

$$H_{int} = \sum_{k, k', q, \sigma} V(q) c_{k+q, \sigma}^\dagger c_{k', \sigma}^\dagger c_{k', \sigma'} c_{k, \sigma}$$

Les deux diagrammes à prendre en compte sont ceux donnée figure 4.3. On a alors deux termes, le terme de *Hartree* et le terme de *Fock*:

$$\begin{aligned} \Sigma_{(H)}^{(1)} &= \frac{1}{\beta} \frac{1}{\Omega} \sum_{\nu', k', \sigma'} V(q=0) \frac{1}{i\nu' - \xi_{k'}} \\ &= \frac{2}{\Omega} \sum_{k'} f(\xi'_k) V(q=0) \end{aligned} \quad (4.45)$$

$$\begin{aligned} \Sigma_{(F)}^{(1)} &= -\frac{1}{\beta} \frac{1}{\Omega} \sum_{\nu', k'} V(q=k-k') \frac{1}{i\nu' - \xi_{k'}} \\ &= -\frac{1}{\Omega} \sum_{k'} f(\xi'_k) V(k-k') \end{aligned} \quad (4.46)$$

Quelle est alors la signification physique de ces résultats? On montrera très bientôt que si d'une part on effectue un *prolongement analytique*, c'est-à-dire si l'on remplace dans l'expression de  $\mathcal{G} i\omega_n$  par  $\omega + i\delta$ , cela nous permet de définir une *fonction de Green retardée* par  $\mathcal{G}_{ret}(\omega, k) = \mathcal{G}_{Mats.}(i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta, k)$ , Cette fonction retardée permet de calculer la densité spectrale par:

$$A(k, \omega) = -\frac{1}{\pi} \Im [G_{ret}(\omega, k)] \quad (4.47)$$

Dans ce cas, la fonction de Green retardée s'écrit:

$$\mathcal{G}_{ret}(\omega, k) = \frac{1}{\omega - \xi_k - \Sigma_H - \Sigma_F + i\delta}$$

ce qui donne:

$$\Im [\mathcal{G}_{ret}] = -\delta \left[ \omega - \underbrace{(\xi_k + \Sigma_H + \Sigma_F + i\delta)}_{E_k} \right]$$

Il s'agit toujours d'une fonction  $\delta$ , comme pour les particules libres. Le terme de Hartree ne fait que déplacer le potentiel chimique. Il correspond à une interaction de la particule que l'on a rajoutée avec la densité moyenne des particules du système. Le terme de Fock n'existe que grâce à l'indiscernabilité des particules: on ajoute une particule qui interagit avec la moyenne des autres particules et l'on détruit une particule du milieu. On commence déjà à percevoir un premier effet des interactions : la modification des paramètres physiques. En effet, le terme de Fock peut à priori dépendre de l'impulsion. On voit donc que la nouvelle énergie des excitations serait  $\xi_k + \Sigma(k)$ . Une telle redefinition des énergies peut être absorbée dans une redefinition de la masse des particules

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

Aucun des termes d'ordre un n'est cependant capable de donner un temps de vie fini aux excitations. La fonction spectrale reste une pure fonction  $\delta$ . Ceci n'est pas physiquement raisonnable car du fait des interactions une particule doit pouvoir échanger de l'énergie avec le milieu. Il est donc nécessaire d'aller à l'ordre suivant pour voir de tels effets.

## Calcul à l'ordre 2

Il faut donc aller à l'ordre 2 pour éventuellement commencer à voir l'effet dynamiques des interactions. Si l'on considère alors pour le calcul de  $\Sigma$  les diagrammes avec une particule irréductible représentés figure 4.4, on voit que le seul qui va importer est le dernier représenté, puisque c'est le seul où, apparemment, la self-énergie va dépendre de

$i\omega$ . En fait on peut montrer que c'est effectivement le seul qui va donner une contribution traduisant réellement l'effet des interactions, à savoir la transformation du pic delta en une fonction plus large.

Traçons donc le diagramme soigneusement (figure 4.6).

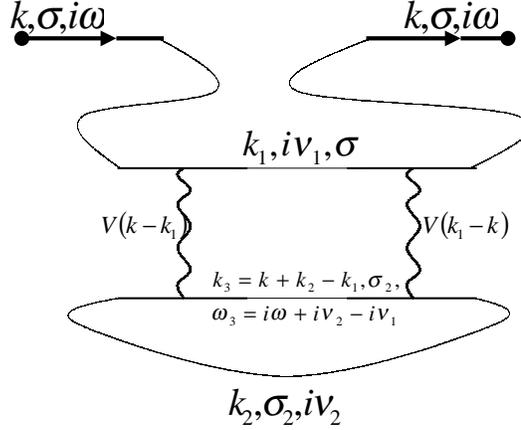


Figure 4.6: Diagramme de Feynman pour le calcul de la fonction self-énergie à l'ordre 2. Les valeurs indiquées satisfont bien aux règles de conservation et au fait que l'interaction ne change pas le spin.

Si on écrit alors la valeur de la self-énergie pour ce diagramme, on a:

$$\begin{aligned}\Sigma^{(2)} &= -2 \frac{1}{\beta^2 \Omega^2} \sum_{i\nu_1, i\nu_2} \sum_{k_1, k_2} V(k_1 - k) V(k - k_1) \mathcal{G}^0(i\nu_1, k_1) \mathcal{G}^0(i\nu_2, k_2) \mathcal{G}^0(i\nu_3, k_3) \\ &= -2 \frac{1}{\beta^2 \Omega^2} \sum_{i\nu_1, i\nu_2} \sum_{k_1, k_2} V(k_1 - k) V(k - k_1) \frac{1}{i\nu_1 - \xi_{k_1}} \frac{1}{i\nu_2 - \xi_{k_2}} \frac{1}{i\nu_3 - \xi_{k_3}}\end{aligned}\quad (4.48)$$

le facteur 2 provenant de la sommation sur  $\sigma_2$ .

Il faut impérativement faire les sommes de Matsubara avant le prolongement analytique. La première somme s'écrit :

$$\begin{aligned}\frac{1}{\beta} \sum_{\nu_1} \frac{1}{i\nu_1 - \xi_{k_1}} &= \frac{1}{i\omega + i\nu_2 - i\nu_1 - \xi_{k+k_2-k_1}} = \frac{1}{i\omega + i\nu_2 - \xi_{k_1} - \xi_{k_3}} f(\xi_{k_1}) - \\ &- \left[ \frac{1}{i\omega + i\nu_2 - \xi_{k_1} - \xi_{k_3}} f(-\xi_{k_3} + i\omega + i\nu_2) \right] \\ &= \frac{1}{i\omega + i\nu_2 - \xi_{k_1} - \xi_{k_3}} [f(\xi_{k_1}) - f(-\xi_{k_3})]\end{aligned}\quad (4.49)$$

puisque,  $f$  étant la fonction de Fermi-Dirac, on a  $f(-\xi_{k_3} + i\omega + i\nu_2) = f(-\xi_{k_3})$ , par définition des fréquences de Matsubara.

Si l'on fait alors la seconde somme, on a :

$$\begin{aligned} \sum_{\nu_2} \frac{1}{i\omega + i\nu_2 - \xi_{k_1} - \xi_{k+k_2-k_1}} \frac{1}{i\nu_2 - \xi_{k_2}} &= \frac{1}{i\omega + \xi_{k_2} - \xi_{k_1} - \xi_{k+k_2-k_1}} [f(\xi_{k_2}) - f(\xi_{k_1} + \xi_{k_3} - i\omega)] \\ &= \frac{1}{i\omega + \xi_{k_2} - \xi_{k_1} - \xi_{k+k_2-k_1}} [f(\xi_{k_2}) + f^B(\xi_{k_1} + \xi_{k_3})] \end{aligned} \quad (4.50)$$

où  $f^B$  est le facteur de Bose. Finalement, on obtient pour la self-énergie :

$$\Sigma = -\frac{1}{\Omega^2} \sum_{k_1, k_2} \frac{|V(k - k_1)|^2}{i\omega + \xi_{k_2} - \xi_{k_1} - \xi_{k_3}} [f(\xi_{k_1}) - f(-\xi_{k_3})] [f(\xi_{k_2}) + f^B(\xi_{k_3} + \xi_{k_1})] \quad (4.51)$$

Sans calculer pour l'instant explicitement la self-énergie, on peut écrire qu'après le prolongement analytique  $i\omega \rightarrow \omega + i\delta$ , la self énergie s'écrit  $\Sigma = \Sigma' + i\Sigma''$ . On a alors :

$$\begin{aligned} \mathcal{G}_{ret} &= \frac{1}{\omega - \xi_k - \Sigma' - i\Sigma''} \\ &= \frac{(\omega - \xi_k - \Sigma') + i\Sigma''}{(\omega - \xi_k - \Sigma')^2 + (\Sigma'')^2} \end{aligned} \quad (4.52)$$

ce qui implique que la fonction densité spectrale va s'écrire :

$$A(\omega, k) = \frac{\Sigma''}{(\omega - \xi_k - \Sigma')^2 + (\Sigma'')^2} \quad (4.53)$$

On voit alors que même si  $\Sigma$  n'est qu'un simple constante, on obtient une lorentzienne. La partie imaginaire de la self-énergie donne donc le temps de vie des quasi-particules.

Calculons cette partie imaginaire en faisant le prolongement analytique. On a alors :

$$\Sigma_{ret} = -\frac{1}{\Omega^2} \sum_{k_1, k_2} \frac{|V(k - k_1)|^2}{\omega + \xi_{k_2} - \xi_{k_1} - \xi_{k_3} + i\delta} [f(\xi_{k_1}) - f(-\xi_{k_3})] [f(\xi_{k_2}) + f^B(\xi_{k_3} + \xi_{k_1})] \quad (4.54)$$

On peut alors calculer directement la partie imaginaire de la self énergie retardée en utilisant que  $\frac{1}{x+i\epsilon} = \frac{1}{x} - i\pi\delta x$  :

$$\begin{aligned} \Sigma_{ret}'' &= i\frac{\pi}{\Omega^2} \sum_{k_1, k_2} |V(k - k_1)|^2 [f(\xi_{k_1}) - f(-\xi_{k_3})] [f(\xi_{k_2}) + f^B(\xi_{k_3} + \xi_{k_1})] \delta(\omega + \xi_{k_2} - \xi_{k_1} - \xi_{k_3}) \\ &= i\frac{\pi}{\Omega^2} \sum_{k_1, k_2} |V(k - k_1)|^2 [f(\xi_{k_1}) - f(\xi_{k_1} - \omega - \xi_{k_2})] [f(\xi_{k_2}) + f^B(\omega + \xi_{k_2})] \delta(\omega + \xi_{k_2} - \xi_{k_1} - \xi_{k_3}) \end{aligned} \quad (4.55)$$

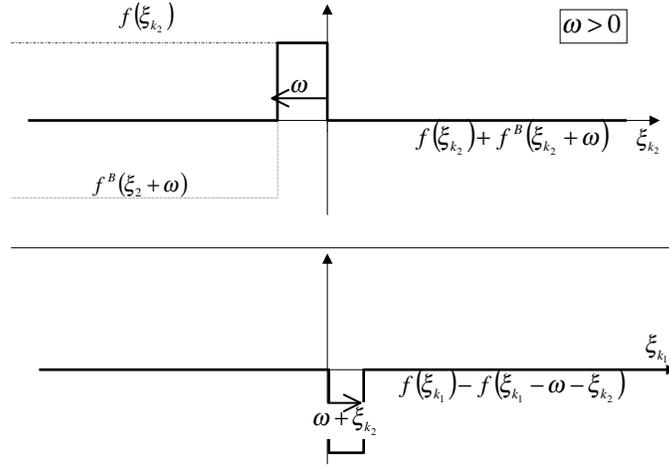


Figure 4.7: Représentation à température nulle des facteurs de Fermi et de Bose intervenant dans la self énergie. On voit que les valeurs de  $\xi_1$  et  $\xi_2$  sont limités à un petit domaine  $\omega$  autour de la surface de Fermi.

Si on veut alors effectuer l'intégration sur  $k_1$  et  $k_2$ , on s'aperçoit que celle-ci va être très pénible puisque le vecteur  $k_3$  va dépendre des coordonnées angulaires de ces deux vecteurs.

Cependant, dans l'expression de  $\Sigma''$  apparaissent des termes qui imposent que  $-\omega \leq \xi_2 \leq 0$  et que  $0 \leq \xi_1 \leq \xi_2 + \omega \leq \omega$ , comme indiqué figure 4.7. Dans la mesure où l'on ne considère que des excitations de basse énergie, c'est-à-dire  $\omega \ll E_F$ , ceci signifie que les énergies et ne vont que très peu dépendre des angles entre les vecteurs  $k_i$ . Ceci est d'autant plus vérifié que l'on est à grande dimension. Pour simplifier le calcul, regardons donc la self énergie moyennée sur  $k_3$ :

$$\overline{\Sigma''}_{ret}(\omega) = \frac{1}{\sum_k 1} \sum_k \Sigma''(k, \omega)$$

Si on remplace les sommations sur les vecteurs d'ondes par les intégrales, en supposant pour simplifier que  $V(q) = V = C^{ste}$ , on obtient:

$$\overline{\Sigma''}_{ret} = \frac{\pi V^2}{(2\pi)^{3d}} \int dk_1 dk_2 dk_3 \delta(\omega + \xi_{k_2} - \xi_{k_1} - \xi_{k_3}) [f(\xi_{k_1}) - f(\xi_{k_1} - \omega - \xi_{k_2})] \times [f(\xi_{k_2}) + f^B(\omega + \xi_{k_2})] \quad (4.56)$$

En introduisant la densité d'état en énergie, et en supposant que celle-ci est constant sur les intervalles d'énergies considérés (ce qui est légitime car  $\omega \ll E_F$ ), on a :

$$\begin{aligned} \overline{\Sigma''_{ret}} &= \frac{n(E_F)^3 \pi V^2}{(2\pi)^{3d}} \int d\xi_{k_1} d\xi_{k_2} d\xi_{k_3} \delta(\omega + \xi_{k_2} - \xi_{k_1} - \xi_{k_3}) \times \\ &\quad [f(\xi_{k_1}) - f(\xi_{k_1} - \omega - \xi_{k_2})] [f(\xi_{k_2}) + f^B(\omega + \xi_{k_2})] \end{aligned} \quad (4.57)$$

Finalement, le delta supprime une sommation et, en prenant en compte les restrictions imposées par les facteurs de remplissage :

$$\begin{aligned} \overline{\Sigma''_{ret}} &= -\frac{n(E_F)^3 \pi V^2}{(2\pi)^{3d}} \int_{-\omega}^0 d\xi_{k_2} \int_0^{\xi_{k_2} + \omega} d\xi_{k_1} \\ &= -\frac{n(E_F)^3 \pi V^2}{(2\pi)^{3d}} \int_{-\omega}^0 d\xi_{k_2} (\xi_{k_2} + \omega) \\ &= -\frac{n(E_F)^3 \pi V^2}{(2\pi)^{3d}} \left[ \omega^2 - \frac{\omega^2}{2} \right] = -\frac{n(E_F)^3 \pi V^2}{(2\pi)^{3d}} \frac{\omega^2}{2} \end{aligned} \quad (4.58)$$

Remarques :

1. on a considéré que le potentiel valait  $V(x-x') = V_0 \delta(x-x')$ , c'est-à-dire que  $V(q) = C^{ste}$ . Ceci n'est pas une approximation délirante, attendu que plus généralement, si l'interaction est à courte portée ( $\lambda$ ), on a une largeur de l'interaction dans l'espace réciproque  $\lambda^{-1}$ . Comme on est toujours proche de  $k_F$ , on peut souvent ne tenir compte que de  $V(q \approx 0)$ .
2. pour le calcul à l'ordre 2, le diagramme tout en bas à gauche de la figure 4.4 contribuait également. Plus exactement, c'est le même que celui que nous avons calculé lorsque l'interaction est de portée nulle (ce que nous avons supposé, cf. remarque 1).

## 4.4 Discussion physique

### 4.4.1 Poids spectral des quasi-particules

Considérons dans un premier temps que  $\Sigma''$  est nulle. La fonction de Green retardée s'écrit alors :

$$G^{ret}(\omega, k) = \frac{1}{\omega - \xi_k - \Sigma' + i\delta}$$

ce qui implique que la densité spectrale va s'écrire :

$$A(k, \omega) = \delta \left[ \omega - \underbrace{(\xi_k + \Sigma'(\omega, k))}_{E_k} \right] = Z_k(\omega - E_k) \quad (4.59)$$

où l'existence de  $Z_k$  provient du fait que  $\Sigma'$  dépend également de  $\omega$ , et que l'on a la relation  $\delta[f(x)] = \delta(x - x_i) \frac{1}{f'(x_i)}$ , où  $x_i$  est tel que  $f(x_i) = 0$ . Or ici:

$$f(\omega) = \omega - \xi_k - \Sigma'(k, \omega)$$

ce qui implique que:

$$\frac{1}{Z_k} = \frac{\partial f}{\partial \omega} = 1 - \left( \frac{\partial}{\partial \omega} \Sigma'(\omega, k) \right)_{\omega=E_k} \quad (4.60)$$

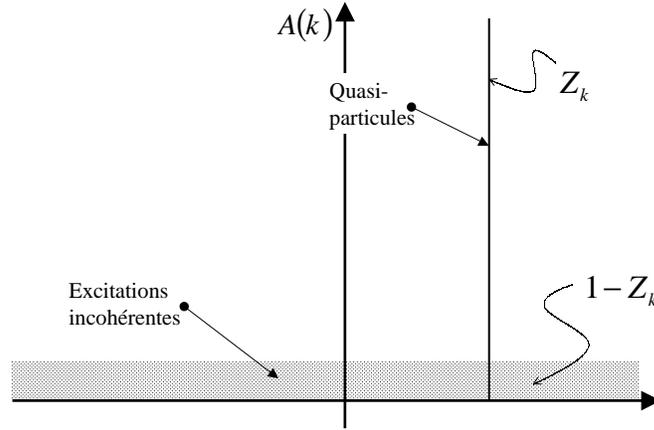


Figure 4.8: Représentation de la densité spectrale pour  $\Sigma'' = 0$ . Les quasi-particules se comportent comme des particules, à ceci près qu'elles ont un poids spectral inférieur à 1

Le problème qui se pose ici est qu'à priori  $Z_k \neq 1$ , ce qui contredit la conservation des probabilités. Ceci provient du fait que l'on a fixé arbitrairement  $\Sigma'' = 0$ , ce qui implique en fait que  $\Sigma' = 0$ . Il y a en fait une partie de la densité spectrale composée d'excitations incohérentes (figure 4.8).

#### 4.4.2 Masse effective

Dans un problème d'électrons indépendants, on a:

$$\xi_k = \frac{k^2}{2m} - \mu \quad (4.61)$$

Cependant, dans le problème de particules en interactions, va apparaître une masse effective que l'on peut définir formellement par:

$$E_k = E_0 + \frac{k^2}{2m^*} - \mu \quad (4.62)$$

Dans l'équation 4.62,  $E_0$  représente un décalage en énergie, qui peut par exemple provenir du terme d'Hartree.

Il est alors légitime de se demander ce que vaut le rapport  $\frac{m}{m^*}$ . On a par définition de  $E_k$ :

$$E_k = \xi_k + \Sigma'(k, \omega) = \frac{k^2}{2m} + \Sigma'(k, \omega) \quad (4.63)$$

Par ailleurs, on a d'une part:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial E_k}{\partial \xi_k} \right) &= \frac{\partial E_k}{\partial k} \left( \frac{\partial \xi_k}{\partial k} \right)^{-1} \\ &= \frac{k}{m^*} \frac{m}{k} = \frac{m}{m^*} \end{aligned} \quad (4.64)$$

et d'autre part, d'après l'équation 4.63:

$$\begin{aligned} \left( \frac{\partial E_k}{\partial \xi_k} \right) &= \frac{\partial E_k}{\partial k} \left( \frac{\partial \xi_k}{\partial k} \right)^{-1} \\ &= \frac{m}{k} \left( \frac{k}{m} + \frac{\partial \Sigma'}{\partial k} \right) \\ &= 1 + \frac{m}{k} \frac{\partial \Sigma'}{\partial k} \end{aligned} \quad (4.65)$$

Par ailleurs, on a, en se souvenant que  $\omega = E_k$ :

$$\frac{\partial \Sigma'}{\partial k} = \frac{\partial \Sigma'}{\partial \omega} \frac{k}{m^*} + \frac{\partial \Sigma'}{\partial k}$$

ce qui implique, en injectant cette expression dans 4.65 et en égalant celle-ci à 4.64, que:

$$1 + \left( \frac{\partial \Sigma'}{\partial \omega} \right)_{\omega=E_k} \frac{m}{m^*} + \frac{m}{k} \frac{\partial \Sigma'}{\partial k} = \frac{m}{m^*} \quad (4.66)$$

Si on écrit alors que  $\frac{m}{k} \frac{\partial \Sigma'}{\partial k} = \left( \frac{\partial \xi_k}{\partial k} \right)^{-1} \frac{\partial \Sigma'}{\partial k} = \frac{\partial \Sigma'}{\partial \xi_k}$ , en remaniant l'expression 4.66, on obtient que:

$$\frac{m}{m^*} = \lim_{\xi_k \rightarrow 0} \left\{ \left( \frac{1 + \frac{\partial \Sigma'(\omega, k)}{\partial \xi_k}}{1 - \frac{\partial \Sigma'(\omega, k)}{\partial \omega}} \right)_{\omega=E_k} \right\} \quad (4.67)$$

L'équation 4.67 montre alors que si  $\Sigma'$  est indépendant de  $k$ , alors le rapport  $\frac{m}{m^*} \approx Z(k = k_F)$ .

### 4.4.3 Temps de vie des quasi-particules

Reprenons l'expression 4.53, où on avait supposé que  $\Sigma' = C^{ste}$ :

$$A(\omega, k) = \frac{\Sigma''}{(\omega - \xi_k - \Sigma')^2 + (\Sigma'')^2} \quad (4.68)$$

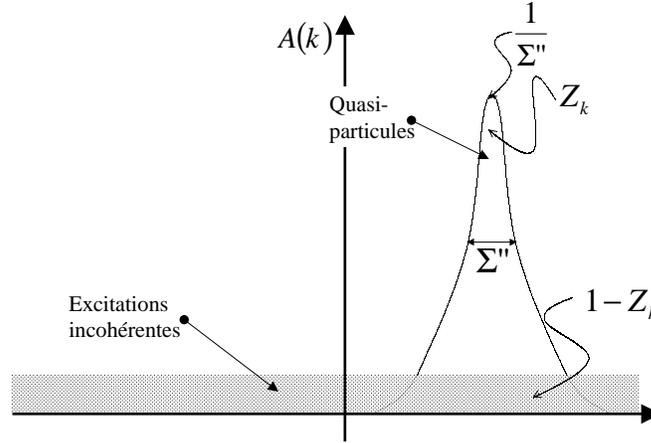


Figure 4.9: Densité spectrale pour  $\Sigma' = C^{ste}$ . On constate l'apparition d'une largeur de la densité spectrale, synonyme d'un temps de vie de la quasi-particule.

La quasi-particule possède ici un temps de vie fini (figure 4.9), donné par  $\tau^{-1} = \Sigma''$ , ce temps de vie se rajoutant à une masse effective différente de  $m$  et au poids de quasi-particule. Cependant, dire que ceci correspond à un temps de vie n'a de sens que si  $\tau \gg \frac{1}{E_k}$ , soit:

$$\Sigma'' \ll E_k \quad (4.69)$$

ce qui s'exprime aussi par  $\Sigma'' \ll \omega$ , toutes les énergies du système étant confinée dans une bande  $\omega$  autour de  $E_F$ .

Cependant, le calcul au second ordre que nous avons vu précédemment nous indique que  $\Sigma'' \propto V^2 \omega^2$  (équation 4.58). Ceci nous indique que plus on se rapproche du niveau de Fermi (caractérisé par  $k \rightarrow k_F$ ,  $\omega \rightarrow 0$  et  $T \rightarrow 0$ ), plus la quasi-particule va ressembler à un objet sans interactions : *les excitations de basse énergie sont pratiquement des excitations libres*. De plus, cette dépendance en  $\omega$  ne provenait en fait que de contraintes "géométriques" de l'espace des phase. *Ce comportement est donc directement lié à l'existence même d'une surface de Fermi.*

Ceci a pour origine une théorie beaucoup plus générale, qui est la *théorie de Landau des liquides de Fermi*. Cette théorie a une portée extrêmement générale (fermions lourds, hélium 3), même si il existe certains systèmes où elle ne s'applique pas, en particulier ceux où la surface de Fermi est détruite par les interactions (interactions attractives par exemple).



# Chapter 5

## Etude de la réponse d'un gaz d'électrons à une perturbation extérieure. Réponse linéaire

### 5.1 Réponse à une perturbation dépendant du temps

On considère un système représenté par un hamiltonien

$$H = H_{cin} + H_{int} \quad (5.1)$$

On applique alors à ce système une perturbation à priori dépendante du temps et de l'espace, ce qui transforme l'hamiltonien en:

$$H + \int dx h(x, t) O(x, t) \quad (5.2)$$

où  $h$  est un champ extérieur et  $O$  une observable qui lui est couplée, telle que  $\langle O \rangle = 0$ . Par exemple:

Observable $O$	Champ $h$
$\psi^\dagger \psi - \rho_0$ (densité)	$\mu$ (potentiel chimique)
$\rho_\downarrow - \rho_\uparrow$ (densité de spin)	$h$ (champ magnétique)
$j(x)$ (courant électrique)	$\vec{A}$

On veut alors savoir ce que vaut:

$$\langle O(x_0, t_0) \rangle_{H+H_{pert}}$$

Ceci constitue un problème quasi-inextricable, sauf si on ne s'intéresse qu'à la partie linéaire de la réponse, autrement dit uniquement au premier ordre en  $h$ , c'est-à-dire si on cherche  $\chi(x_0, x, t_0, t)$  telle que:

$$\langle O(x_0, t_0) \rangle_{H+H_{pert}} = \int dx dt \chi(x_0, x, t_0, t) h(x, t) \quad (5.3)$$

Dans le cadre de cette approximation,  $\chi$  ne se calcule qu'à l'ordre zéro en  $h$ , c'est-à-dire uniquement avec  $H$  : c'est là que réside l'immense simplification de la réponse linéaire. Notons que si  $H$  ne dépend pas du temps et est invariant par translation dans l'espace, la relation 5.3 s'écrit dans l'espace réciproque:

$$O(q, \omega) = \chi(q, \omega) h(q, \omega) \quad (5.4)$$

## 5.2 Moyennes. Opérateur densité

Il nous faut maintenant définir ce que signifie  $\langle \rangle_{H+H_{pert}}$ . Rappelons que si  $H$  est indépendant du temps, alors on a:

$$\langle O \rangle = \frac{\text{Tr} [e^{-\beta H} e^{iHt} O e^{-iHt}]}{\text{Tr} [e^{-\beta H}]} \quad (5.5)$$

Ici,  $H$  dépend du temps, et donc il survient deux problèmes pour généraliser l'équation 5.5:

1. L'évolution d'un opérateur dans le temps n'est plus donnée par  $e^{iHt}$ . Cependant on pourrait trouver une généralisation à partir de l'équation de Schrödinger.
2. Le facteur  $e^{\beta H}$  perd tout son sens. En effet, que faut-il mettre pour  $H$ ? Le problème est que la dépendance temporelle de  $H$  fait perdre son sens à la notion d'équilibre thermodynamique.

On va donc introduire la matrice (ou opérateur) densité du système. Celle-ci est définie, si le système est dans un état pur  $|\psi_0\rangle$ , par:

$$\rho = |\psi_0\rangle\langle\psi_0|$$

On a alors  $\text{Tr} \rho = 1$  et

$$\langle \psi_0 | O | \psi_0 \rangle = \langle O \rangle = \text{Tr} [\rho O]$$

Plus généralement, on définit l'opérateur densité par:

$$\rho = \sum_n c_n |n\rangle\langle n| \quad (5.6)$$

où les  $c_n$  sont choisis de telles sortes que  $\text{Tr}\rho = 1$ . Il est alors évident que l'on a :

$$\langle O \rangle = \text{Tr}[\rho O] \quad (5.7)$$

On peut alors, à l'aide de cet opérateur, écrire une valeur moyenne à l'instant  $t$ . Pour cela, on va supposer que la perturbation est adiabatique, c'est-à-dire que les  $c_n$  ne changent pas au cours du temps. Physiquement, ceci signifie que l'on a placé le système en contact avec un réservoir, que ses niveaux se sont peuplés, et qu'on le laisse évoluer après avoir coupé le contact avec le réservoir en considérant que même si les niveaux d'énergies changent, leur peuplement reste le même au cours du temps. On a alors :

$$\rho = \sum_n c_n |\psi_n(t)\rangle \langle \psi_n(t)| \quad (5.8)$$

Il faut alors connaître l'équation du mouvement de  $\rho(t)$ . On a, en dérivant l'équation 5.8 :

$$i \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = \sum_n c_n \left( i \frac{\partial |\psi\rangle}{\partial t} \langle \psi| + |\psi\rangle i \frac{\partial \langle \psi|}{\partial t} \right) \quad (5.9)$$

Or  $i \partial_t |\psi\rangle = H |\psi\rangle$  et  $-i \partial_t \langle \psi| = \langle \psi| H$  donc :

$$\begin{aligned} i \frac{\partial \rho(t)}{\partial t} &= \sum_n c_n [H(t) |\psi\rangle \langle \psi| - |\psi\rangle \langle \psi| H(t)] \\ &= [H(t), \rho(t)] \end{aligned} \quad (5.10)$$

L'équation d'évolution de  $\rho$  étant déterminée, tout le problème consiste à calculer  $\rho(t)$  pour pouvoir calculer la moyenne :

$$\langle O \rangle_t = \text{Tr}[\rho(t) O]$$

On va supposer de plus que  $h(x, t = -\infty) = 0$ , ce qui signifie que l'on va réécrire le champ extérieur comme :

$$h(x, t) e^{-\delta|t|}$$

On a alors :

$$\rho(t = -\infty) = e^{-\beta H} = \rho_0 \quad (5.11)$$

ce qui nous donne les conditions initiales. Il suffit (!) alors de résoudre l'équation différentielle.

## 5.3 Réponse linéaire. Théorème de fluctuation-dissipation

### 5.3.1 Résolution de l'équation d'évolution de $\rho$ dans le cadre de la réponse linéaire

Si on se replace alors dans l'approximation de la réponse linéaire, on peut écrire que:

$$\rho(t) = \rho_0 + f(t)$$

avec  $f \propto h$ . L'équation différentielle 5.10 se réécrit alors, dans le cadre de cette approximation:

$$\begin{aligned} i \frac{\partial f(t)}{\partial t} &= [H + H_p(t), \rho_0 + f(t)] \\ &\simeq \underbrace{[H, \rho_0]}_{=0} + [H, f(t)] + [H_p(t), \rho_0] \end{aligned} \quad (5.12)$$

soit:

$$i \frac{\partial f(t)}{\partial t} - [H(t), f(t)] = [H_p(t), \rho_0] \quad (5.13)$$

Par ailleurs, on a:

$$\begin{aligned} i \partial_t \left( e^{iHt} f(t) e^{-iHt} \right) &= -H e^{iHt} f e^{-iHt} + e^{iHt} f H e^{-iHt} + i e^{iHt} \left( \frac{\partial f}{\partial t} \right) e^{-iHt} \\ &= e^{iHt} \left[ i \frac{\partial f(t)}{\partial t} \right] e^{-iHt} + e^{iHt} [H, f(t)] e^{-iHt} \end{aligned} \quad (5.14)$$

Si on reporte ce résultat dans l'équation 5.13, on obtient:

$$i \partial_t \left[ e^{iHt} f(t) e^{-iHt} \right] = e^{iHt} [H_p, \rho_0] e^{-iHt} \quad (5.15)$$

Si on définit à nouveau les opérateurs  $\hat{f} = e^{iHt} f(t) e^{-iHt}$ , et que l'on remarque que  $H$  et  $\rho_0$  commutent, par définition de  $\rho_0$ , on obtient que:

$$\begin{aligned} e^{iHt} [H_p, \rho_0] e^{-iHt} &= \left[ e^{iHt} H(t) e^{-iHt}, \rho_0 \right] \\ &= \left[ \hat{H}_p(t), \rho_0 \right] \end{aligned} \quad (5.16)$$

On peut donc réécrire l'équation 5.15 selon:

$$i \frac{\partial \hat{f}(t)}{\partial t} = \left[ \hat{H}_p(t), \rho_0 \right] \quad (5.17)$$

Remarquons que dans ce cas, la dépendance en temps de l'opérateur  $\hat{H}_p$  provient de deux sources différentes.

L'intégration de l'équation différentielle est maintenant évidente:

$$\hat{f}(t) = -i \int_{-\infty}^t dt' [\hat{H}_p(t'), \rho_0] \quad (5.18)$$

Ce qui se réécrit comme:

$$f(t) = -i \int_{-\infty}^t dt' e^{-iHt'} [H_p(t'), \rho_0] e^{iHt} \quad (5.19)$$

### 5.3.2 Calcul de la valeur moyenne de $O$

Par ailleurs, comme on a supposé que  $\langle O \rangle = \text{Tr} [\rho_0 O] = 0$ , on a:

$$\langle O(x_0, t_0) \rangle = \text{Tr} [\rho(t_0) O(x_0)] = \text{Tr} [f(t_0) O(x_0)] \quad (5.20)$$

On peut alors, en utilisant ce dernier résultat, calculer la valeur moyenne de  $O$  à l'aide de 5.19:

$$\begin{aligned} \langle O \rangle_{t_0} &= -i \int_{-\infty}^{t_0} dt' \text{Tr} [e^{-iHt'} [H_p(t'), \rho_0] e^{iHt'} O(x_0)] \\ &= -i \int_{-\infty}^{t_0} dt' \text{Tr} [[H_p(t'), \rho_0] \hat{O}(x_0, t_0)] \end{aligned} \quad (5.21)$$

la dernière équation ayant été obtenue en utilisant l'invariance de la trace par permutation circulaire ( $\text{Tr}[ABC] = \text{Tr}[CAB] = \text{Tr}[BCA]$ ).

On peut réutiliser cette invariance pour écrire que:

$$\begin{aligned} \text{Tr} [(H\rho_0 - \rho_0 H)O] &= \text{Tr} [\rho_0 OH - \rho_0 HO] \\ &= [\rho_0 [O, H]] \end{aligned} \quad (5.22)$$

ce qui nous permet de réécrire l'équation 5.21:

$$\begin{aligned} \langle O \rangle_{t_0} &= -i \int_{-\infty}^{t_0} dt' \text{Tr} [\rho_0 [\hat{O}(x_0, t_0), \hat{H}_p(t')]] \\ &= -i \int dx \int_{-\infty}^{t_0} dt \text{Tr} [\rho_0 [\hat{O}(x_0, t_0), \hat{O}(x, t)]] h(x, t) \end{aligned} \quad (5.23)$$

Si on compare l'expression 5.23 à l'expression 5.3, on en conclut que:

$$\begin{aligned} \chi(x_0, x, t_0, t) &= -i\theta(t_0 - t) \text{Tr} [\rho_0 [\hat{O}(x_0, t_0), \hat{O}(x, t)]] \\ &= -i\theta(t_0 - t) \langle [\hat{O}(x_0, t_0), \hat{O}(x, t)] \rangle_H \end{aligned} \quad (5.24)$$

le fait que l'on fait la moyenne en utilisant  $H$  vient du fait que seul l'opérateur densité  $\rho_0$  intervient dans la trace.

Ce résultat est en fait extrêmement général et est connu sous le nom de théorème de fluctuation dissipation:

*Pour un système qui est à l'équilibre thermodynamique, la réponse linéaire à une perturbation extérieure est entièrement déterminée par les fluctuations du système en l'absence de perturbation.*

En fait, ceci se comprend assez bien. En effet, si le système ne présente aucune fluctuation, c'est que tout écart au niveau fondamental est très défavorable et donc que le système va avoir du mal à réagir à une perturbation extérieure. Inversement, si le système fluctue énormément, on va pouvoir atteindre facilement à l'aide de la perturbation des états qui ne sont pas le fondamental.

## 5.4 Calcul de $\chi$

### 5.4.1 Expression de $\chi$ en représentation de Matsubara

On cherche maintenant à savoir comment s'écrit  $\chi^{Mat}(q, i\omega_n)$ .

Supposons dans un premier temps que cette fonction s'écrive:

$$\chi^{Mat}(x, \tau) = -\langle T_\tau O(x, \tau) O^+(0, 0) \rangle \quad (5.25)$$

En général, on veut plutôt  $\chi^{Mat}(q, i\omega_n)$ , qui s'écrit:

$$\begin{aligned} \chi^{Mat}(q, i\omega_n) &= -\int dx \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} e^{-iqx} \langle O(x, \tau) O^+(0, 0) \rangle \\ &= -\frac{1}{(\beta\Omega)^2} \sum_{q_1, n_1, q_2, n_2} \underbrace{\int dx \int d\tau e^{-i[(q-q_1)x - (\omega_n - \omega_{n_1})\tau]} \langle O(q_1, i\omega_{n_1}) O(q_2, i\omega_{n_2}) \rangle}_{\beta\Omega \delta(q-q_1) \delta(\omega_n - \omega_{n_1})} \\ &= -\frac{1}{\beta\Omega} \sum_{q_2, n_2} \langle O(q, \omega_n) O^+(q_2, \omega_{n_2}) \rangle \\ &= -\frac{1}{\beta\Omega} \langle O(q, \omega_n) O^+(q, \omega_n) \rangle \end{aligned} \quad (5.26)$$

car impulsion et fréquences doivent être conservées par l'Hamiltonien non perturbé (invariance par translation dans le temps et dans l'espace).

Supposons à présent que  $O$  vaille, par exemple:

$$O = \psi^+(x, \tau) \psi(x, \tau)$$

Soit:

$$O(q, i\omega_n) = \sum_{k, \nu} c_{k-q, i\nu - i\omega_n}^+ c_{k, i\nu} \quad (5.27)$$

Le calcul de  $\chi(k, i\omega_n)$  est alors formellement identique à celui de la fonction de Green. On avait en effet dans ce cas à calculer  $\langle c^+c \rangle$ , et ici on a à calculer la valeur moyenne donnée dans l'équation 5.26. On peut donc effectuer le même traitement que celui effectué dans le chapitre 4.1, pour aboutir à une représentation diagrammatique. Cependant, il va y avoir de légères différences, comme par exemple la représentation des opérateurs  $O$  et  $O^+$  comme montré figure 5.1, conforme à l'expression 5.27 de  $O$  et à son expression conjuguée.

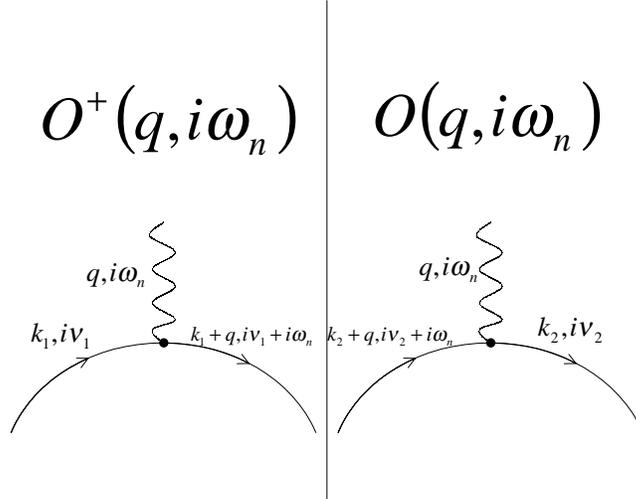


Figure 5.1: Représentation diagrammatique des opérateurs  $O$  et  $O^+$

Remarques :

1. ici, contrairement à ce qui se passe dans le cas des fonctions de Green, la fréquence  $\omega_n$  est une fréquence de boson. En effet, dans la représentation de l'interaction,  $\nu_1$  et  $\nu_1 + i\omega_n$  doivent être des fréquences de fermions, et donc s'écrire sous la forme  $\frac{(2n+1)\pi}{\beta}$ . Ceci n'est possible que si

$$\omega_n = \frac{2n\pi}{\beta}$$

2. la forme de la représentation s'interprète grâce à la perturbation extérieure, dont le rôle est ici non pas — contrairement à ce qui se passait pour la fonction de Green — d'injecter une particule dans le système, mais uniquement de l'impulsion et de l'énergie ( $\omega$ ).

On sait donc calculer l'objet  $\chi^{Mat}(q, i\omega_n)$ . Cependant, ce que l'on veut véritablement calculer est la grandeur donnée dans l'équation 5.24:

$$\chi^{Ret}(q, \omega) = -i\theta(t_0 - t)\langle [\hat{O}(x_0, t_0), \hat{O}(x, t)] \rangle_H$$

On peut en fait montrer que:

$$\chi^{Ret}(q, \omega) = \chi^{Mat}(q, i\omega_n \rightarrow w + i\delta) \quad (5.28)$$

où  $\delta$  est une quantité infinitésimale positive, dont le rôle fondamental est d'assurer la causalité, qui existe dans  $\chi^{Ret}(q, \omega)$  du fait du facteur  $\theta(t_0 - t)$ .

## 5.4.2 Calcul à l'ordre zéro de la compressibilité et de la susceptibilité magnétique

Les bases du calcul sont présentées dans le tableau suivant.

	Compressibilité	Susceptibilité
Def. thermo.	$\kappa = \frac{\partial N}{\partial \mu}$	$\frac{\partial m}{\partial h}$
Hamiltonien	$\int \mu(x, t)\rho(x)$	$\int h m_z$
Grandeur moyenne	$\rho = \psi_\uparrow^\dagger \psi_\uparrow + \psi_\downarrow^\dagger \psi_\downarrow$	$m_z = \frac{1}{2}(\psi_\uparrow^\dagger \psi_\uparrow - \psi_\downarrow^\dagger \psi_\downarrow)$
Fonction de corrélation	$\chi = \langle \rho\rho \rangle$	$\langle m_z m_z \rangle$

On peut alors représenter le calcul à l'ordre zéro *en interaction* par la figure 5.2

Si on connecte les diagrammes en respectant les règles (figure 5.3), on s'aperçoit que l'on a deux fois le même diagramme à la direction du spin près, ce qui ne joue pas puisque la fonction de Green ne dépend pas du spin. On s'aperçoit également que le calcul à l'ordre zéro est le même pour les deux fonctions de corrélation : *la compressibilité et la susceptibilité magnétique sont les mêmes à l'ordre zéro en interaction.*

Les relations de conservation impliquent que, en utilisant les notations de la figure 5.3:

$$k_1 = k_2 = k; \nu_1 = \nu_2 = \nu$$

La contribution de ce diagramme s'écrit donc:

$$\begin{aligned} \chi(q, i\omega) &= \frac{2}{\beta\Omega} \sum_{k, i\nu} G^{(0)}(k+q, i\nu+i\omega) G^{(0)}(k, i\nu) \\ &= \frac{2}{\Omega\beta} \sum_{k, i\nu} \left\{ \frac{1}{i\nu+i\omega - \xi_{k+q}} \frac{1}{i\nu - \xi_k} \right\} \end{aligned}$$

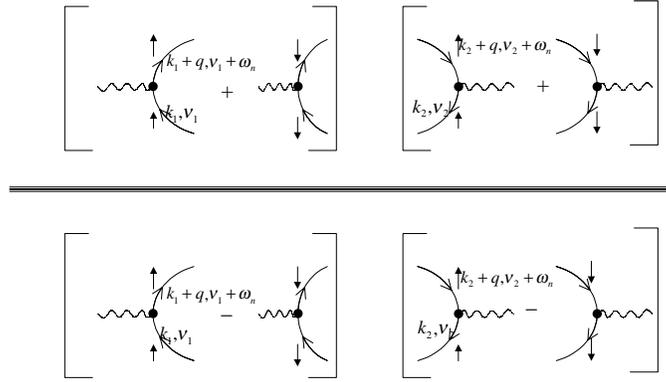


Figure 5.2: Représentation du calcul des fonctions de corrélation  $\langle \rho \rho \rangle$  (en haut) et  $\langle m_z m_z \rangle$  (en bas).

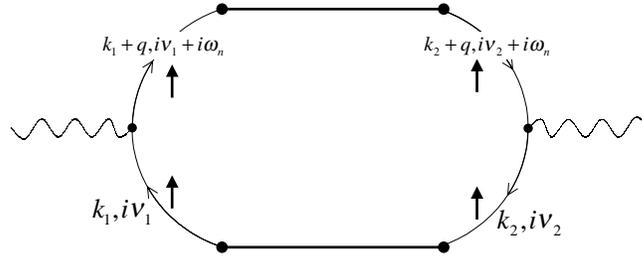


Figure 5.3: Représentation de la fonction de corrélation pour la compressibilité et la susceptibilité

$$\begin{aligned}
 &= \frac{2}{\Omega} \sum_k \left\{ \frac{f(\xi_k)}{\xi_k + i\omega - \xi_{k+q}} + \frac{f(\xi_{k+q} - i\omega)}{\xi_{k+q} - \xi_k - i\omega} \right\} \\
 &= \frac{2}{\Omega} \sum_k \left\{ \frac{f(\xi_k) - f(\xi_{k+q})}{i\omega + \xi_k - \xi_{k+q}} \right\} \tag{5.29}
 \end{aligned}$$

en utilisant que  $i\omega$  est une fréquence de boson et donc que  $f(\xi - i\omega) = f(\xi + i\omega) = f(\xi)$ . On peut alors directement en déduire la fonction retardée:

$$\chi^{Ret}(q, \omega) = \frac{2}{\Omega} \sum_k \left\{ \frac{f(\xi_k) - f(\xi_{k+q})}{\omega + \xi_k - \xi_{k+q} + i\delta} \right\} \quad (5.30)$$

Si maintenant on souhaite avoir la réponse à un champ uniforme et statique, on doit prendre la limite  $\omega \rightarrow 0; q \rightarrow 0$ . Mais dans quel ordre?

Si l'on veut des quantités thermodynamiques, il faut d'abord faire tendre  $\omega$  vers zéro, **puis**  $q$ . On a alors:

$$\chi^{Ret}(q, \omega = 0) = \frac{2}{\Omega} \sum_k \left\{ \frac{f(\xi_k) - f(\xi_{k+q})}{\xi_k - \xi_{k+q} + i\delta} \right\} \quad (5.31)$$

ce qui implique que:

$$\chi''(q, \omega = 0) = 0 \quad (5.32)$$

$$\chi'(q, \omega = 0) = \frac{2}{\Omega} \sum_k \frac{\xi_k - \xi_{k+q}}{\xi_k - \xi_{k+q}} \frac{\partial f}{\partial \xi_k} = \frac{2}{\Omega} \sum_k \frac{\partial f}{\partial \xi_k} \quad (5.33)$$

A  $T = 0$ , on a donc:

$$\chi'(q, \omega = 0) = - \int d\xi n(\xi) \delta(\xi) = -n(\xi = 0) \quad (5.34)$$

Remarques:

1. Le diagramme que l'on a utilisé ici est assez proche de celui que nous avons utilisé au paragraphe 4.3.4 (figure 4.6), dont la boucle supérieure représente justement la réponse du gaz d'électrons à une fluctuation de densité.
2. Si on prend les limites de  $q$  et  $\omega$  dans l'autre sens, on va essentiellement mesurer des quantités de transport.

## 5.5 Ecrantage. Méthode R.P.A

On considère à nouveau un hamiltonien couplé à une perturbation extérieure, qui consiste en l'introduction d'une charge caractérisée par  $\rho(r)$ :

$$H = H_0 + \underbrace{\int dr dr' V(r - r') \rho(r') \rho(r)}_{H_{int}} + \underbrace{\int dr V_{ext}(r, t) \rho(r)}_{H_{ext}} \quad (5.35)$$

$$H = H_0 + \int dq V_q \rho(q) \rho(-q) + \int V_{ext}(q) \rho(q) \quad (5.36)$$

avec  $V_{ext}(q) = Q_{ext}V_0(q)$ , et  $V_0(q) = \frac{1}{q^2}$  (interaction coulombienne).

Si on applique alors les résultats de la réponse linéaire, on a tout de suite:

$$\langle \rho(q) \rangle_{H_0+H_{int}+H_{ext}} = \langle \rho_q \rho_q \rangle_{H_0+H_{int}} V_0(q) Q_{ext} \quad (5.37)$$

Le potentiel extérieur change la densité locale du gas d'électrons. Ce changement induit à son tour un potentiel puisque les électrons ont une charge. Le potentiel total est donc donné par  $V^{tot} = V^{ind} + V^{ext}$ . Or:

$$V^{ind}(q) = V_0(q) \langle \rho(q) \rangle = V_0(q) \langle \rho \rho \rangle V_0(q) Q_{ext} \quad (5.38)$$

$$V^{ext} = V_0(q) Q_{ext} \quad (5.39)$$

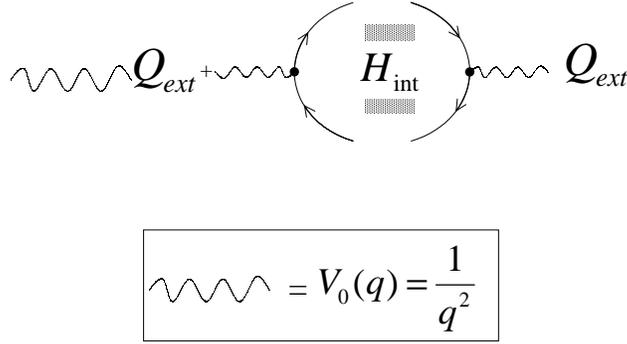


Figure 5.4: Représentation diagrammatique de  $V^{tot}$

Ceci s'exprime diagrammatiquement par la figure 5.4. Le problème est qu'en général, on ne sait pas calculer le second diagramme.

On va donc effectuer une approximation de champ moyen, appelé R.P.A. (Random Phase Approximation), qui consiste à remplacer le terme  $H^{ext} + H^{int}$  par un terme de champ moyen, ce qui s'écrit:

$$\int dq V_q \rho(q) \rho(-q) + \int V_{ext}(q) \rho(q) = \int V_{tot}(q) \rho(q) \quad (5.40)$$

Si on applique alors les résultats de la réponse linéaire sur ce nouvel hamiltonien, on obtient que:

$$\langle \rho(q) \rangle_H = \langle \rho_q \rho_q \rangle_{\underline{\underline{H_0}}} V^{tot} \quad (5.41)$$

Les relations entre  $V^{tot}$ ,  $V^{ind}$  et  $V^{ext}$  vont alors nous donner une équation auto-consistante. En effet:

$$\begin{aligned} V^{tot}(q) &= V^{ext} + V^{ind} \\ &= V_0(q)Q_{ext} + V_0(q)\langle\rho\rho\rangle_{H_0}V^{tot}(q) \end{aligned}$$

soit:

$$V^{tot}(q) = \frac{V_0(q)Q_{ext}}{1 - V_0(q)\langle\rho\rho\rangle_{H_0}} \quad (5.42)$$

Si on reprend alors les résultats du paragraphe précédent, on peut trouver une représentation diagrammatique de l'équation 5.42 (figure 5.5).

$$\begin{aligned} V^{tot}(q) &= \frac{\text{wavy line } Q_{ext}}{1 - \text{wavy line} \text{---} \text{bubble} \text{---} \text{wavy line}} \\ &= \text{wavy line} + \text{wavy line} \text{---} \text{bubble} + \text{wavy line} \text{---} \text{bubble} \text{---} \text{bubble} + \dots \end{aligned}$$

Figure 5.5: Représentation diagrammatique de l'approximation R.P.A.  $V^{tot}$  est alors une série géométrique de diagrammes.

L'expression de ce diagramme est alors donnée, en utilisant l'équation 5.30:

$$\begin{aligned} V^{tot}(q) &= \frac{V_0(q)Q_{ext}}{1 - V_0(q) \underbrace{\frac{1}{\Omega} \sum_k \frac{f(\xi_k) - f(\xi_{k+q})}{\omega + \xi_k - \xi_{k+q} + i\delta}}_{\chi^0(q,\omega)}} \\ &= \frac{Q_{ext}}{q^2 - \chi^0(q,\omega)} \end{aligned} \quad (5.43)$$

Si on prend alors la transformée de Fourier de l'équation 5.43, en utilisant le résultat 5.34, on obtient que:

$$V^{tot}(r) = \mathcal{T}\mathcal{F}^{-1} \left\{ \frac{Q_{ext}}{q^2 + n(E_F)} \right\} = \frac{1}{r} e^{-\frac{r}{\lambda}} \quad (5.44)$$

On retrouve alors le phénomène d'écrantage de la charge extérieure par les électrons.

L'approximation R.P.A. consiste donc en le calcul des susceptibilités en présence d'interactions. D'autre part, elle prend en compte intrinsèquement l'aspect auto-consistant du phénomène physique mis en jeu. De plus, si  $\chi^0$  devient suffisamment grand,  $\chi_{RPA}^{tot} \rightarrow \infty$ , ce qui implique l'existence d'une transition de phase vers un état ordonné.