 Julia Meyer (julia.meyer@univ-grenoble-alpes.fr)

TD 4 – 24 janvier 2023

N'hésitez pas à me poser des questions (voir adresse email ci-dessus).

Les questions qui peuvent être abordées sans avoir résolu les questions précédentes sont marquées par une flêche ($\rightarrow$).

1 Sommes de Matsubara

Quand on calcule des diagammes de Feynman à température finie, il faut souvent faire des sommes sur les fréquences de Matsubara :

$$\mathcal{I} = \frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(i\omega_n) e^{i\omega_n \tau}.$$

Ici nous supposons que $\phi(z)$ possède des pôles en $z = z_l$ avec $l = 1, \ldots$ et est analytique sinon. En outre $\tau > 0$.

Nous allons considérer le cas des fermions.

1. $\rightarrow$ Considérer la fonction
$$n_F(z) = \frac{1}{e^{\beta z} + 1}.$$
Déterminer les pôles, leur ordre, ainsi que les résidus associés à ces pôles.

Solution: Les pôles correspondent à des zéros du dénominateur, c.a.d., $e^{\beta z} = -1$ ou $\beta z = (2m+1)\pi i$ avec $m \in \mathbb{Z}$. La fonction $n_F(z)$ possède donc des pôles à $z_m = i\omega_n$, où ω_n sont les fréquences de Matsubara fermioniques. Il s'agit de pôles du premier ordre : $\lim_{z\to z_m} [(z - z_m) n_F(z)] < \infty$. En particulier,

$$e^{\beta z} = e^{\beta z_m + \beta(z - z_m)} \approx e^{\beta z_m}(1 + \beta(z - z_m)) = -(1 + \beta(z - z_m)).$$

Donc le résidu associé à ces pôles est donné par

$$\text{Res}(n_F, z_m) = \lim_{z\to z_m} [(z - z_m) n_F(z)] = -\frac{1}{\beta}.$$

2. $\rightarrow$ Montrer que $n_F(z)e^{z\tau}$ tend exponentiellement vers zéro dans la limite $|z| \to \infty$ pour $0 < \tau < \beta$.

Solution: Il faut distinguer $\Re z > 0$ et $\Re z < 0$:

$$n_F(z)e^{z\tau} = \frac{e^{z\tau}}{e^{z\beta} + 1} \approx \begin{cases} e^{z(\tau-\beta)} & \Re z > 0, \\ e^{z\tau} & \Re z < 0, \end{cases}$$

pour $|z| \gg 1/\beta$. Pour $0 < \tau < \beta$, la partie réelle de l'exposant est négative dans les deux cas. Donc, $\lim_{|z|\to\infty} n_F(z)e^{z\tau} = 0$.

3. $\rightarrow$ Déterminer la valeur de

$$\mathcal{I}' = \frac{1}{2\pi i} \oint dz\ \phi(z) n_F(z) e^{z\tau},$$

où le contour d'intégration est un cercle autour de l'origine du plan complexe avec rayon $R \rightarrow \infty$.

> **Solution:** Comme la fonction à intégrer tend exponentiellement vers zéro pour $|z| \rightarrow \infty$, l'intégrale est nulle : $\mathcal{I}' = 0$.

4. Utiliser le théorème des résidus pour obtenir

$$\mathcal{I}' = -\frac{1}{\beta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \phi(i\omega_n) e^{i\omega_n \tau} + \sum_l \mathrm{Res}_{z=z_l} \left[\phi(z)\right] n_F(z_l) e^{z_l \tau}.$$

> **Solution:** Alternativement $\mathcal{I}'$ peut être calculé en utilisant le calcul des résidus :
>
> $$\mathcal{I}' = 2\pi i \sum_{z_i} \mathrm{Res}[\frac{1}{2\pi i} \phi(z) n_F(z) e^{z\tau}]_{z=z_i}.$$
>
> La fonction à intégrer à des pôles $z = i\omega_n$ et $z = z_l$. En supposant que ces valeurs sont distinctes, on obtient alors
>
> $$\begin{aligned} \mathcal{I}' &= \sum_n \mathrm{Res}[\phi(z) n_F(z) e^{z\tau}]_{z=i\omega_n} + \sum_l \mathrm{Res}[\phi(z) n_F(z) e^{z\tau}]_{z=z_l} \\ &= \sum_n \phi(i\omega_n)(-\frac{1}{\beta}) e^{i\omega_n \tau} + \sum_l \mathrm{Res}[\phi(z)]_{z=z_l} n_F(z_l) e^{z_l \tau}. \end{aligned}$$

5. Trouver une expression pour $\mathcal{I}$ à partir des résultats ci-dessus.

> **Solution:** Selon le résultat de la question précédente,
>
> $$\mathcal{I}' = -\mathcal{I} + \sum_l \mathrm{Res}_{z=z_l}[\phi(z)] n_F(z_l) e^{z_l \tau}.$$
>
> Avec $\mathcal{I}' = 0$ (question 3), on obtient donc
>
> $$\mathcal{I} = \sum_l \mathrm{Res}_{z=z_l}[\phi(z)] n_F(z_l) e^{z_l \tau}.$$

CONCLUSION : Si la fonction $\phi(z)$ est composée de fonctions de Green sans interactions, elle ne contient que des pôles. Par contre, s'il faut sommer sur des fonctions de Green en présence d'interactions tel que $\Im\Sigma \neq 0$, il y aura aussi des coupures. Dans ce cas, le contour d'intégration doit être séparé en plusieurs parties et le résultat contient des contributions des intégrales de part et d'autre des coupures.

Voir, par exemple, G.D. Mahan, *Many-particle physics*, châpitre 3.5.

2 Formule de Kubo

En cours, nous avons vu la formule de Kubo pour la conductivité électrique. Ici nous allons approfondir quelques points. Voir, par exemple, P. Coleman, *Many-body physics*, châpitre 10.2 ou A. Altland & B. Simons, *Condensed matter field theory*, châpitre 7.4.

L'opérateur de courant paramagnétique est donné par

$$\vec{j}_{\text{para}}(\vec{r},t) = -i\frac{e}{2m}\left\{\psi^\dagger(\vec{r},t)(\vec{\nabla}\psi(\vec{r},t)) - (\vec{\nabla}\psi^\dagger(\vec{r},t))\psi(\vec{r},t)\right\}.$$

Sa transformée de Fourier prend la forme

$$\vec{j}_{\text{para}}(\vec{q},t) = \frac{e}{m}\int d^3p\, \vec{p}\, a^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}/2}(t)a_{\vec{p}+\vec{q}/2}(t).$$

Démonstration : Pour obtenir $\vec{j}_{\text{para}}(\vec{q},t)$, il faut prendre la transformée de Fourier,

$$\begin{aligned}
\vec{j}_{\text{para}}(\vec{q}) &= -i\frac{e}{2m}\int d^3r\, e^{-i\vec{q}\vec{r}}\int d^3p_1\, d^3p_2 \times \left\{a^\dagger_{\vec{p}_1}e^{-i\vec{p}_1\vec{r}}(\vec{\nabla}a_{\vec{p}_2}e^{i\vec{p}_2\vec{r}}) - (\vec{\nabla}a^\dagger_{\vec{p}_1}e^{-i\vec{p}_1\vec{r}})a_{\vec{p}_2}e^{i\vec{p}_2\vec{r}}\right\} \\
&= \frac{e}{2m}\int d^3p_1\, d^3p_2\, a^\dagger_{\vec{p}_1}a_{\vec{p}_2}(\vec{p}_1+\vec{p}_2)\int d^3r\, e^{-i(\vec{p}_1-\vec{p}_2+\vec{q})\vec{r}} \\
&= \frac{e}{m}\int d^3p\, \vec{p}\, a^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}/2}a_{\vec{p}+\vec{q}/2},
\end{aligned}$$

où nous avons omit l'argument t des opérateurs pour simplicité.

1. $\rightarrow$ La fonction de correlation à calculer est donnée par

$$\chi_R^{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}',t-t') = -i\theta(t-t')\langle[j_{\text{para},\alpha}(\vec{r},t), j_{\text{para},\beta}(\vec{r}',t')]\rangle.$$

Par la suite, nous allons travailler dans l'espace réciproque. Montrer que

$$\langle\vec{j}_{\text{para}}(\vec{q})\cdot\vec{j}_{\text{para}}(\vec{q}')\rangle \propto \delta(\vec{q}+\vec{q}').$$

Solution: Avec la formule donnée dans la question précédente,

$$\langle\vec{j}_{\text{para}}(\vec{q})\cdot\vec{j}_{\text{para}}(\vec{q}')\rangle = \frac{e^2}{m^2}\int d^3p\int d^3p'\, \vec{p}\cdot\vec{p}'\langle a^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}/2}a_{\vec{p}+\vec{q}/2}a^\dagger_{\vec{p}'-\vec{q}'/2}a_{\vec{p}'+\vec{q}'/2}\rangle.$$

Il faut donc évaluer

$$\begin{aligned}
&\langle a^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}/2}a_{\vec{p}+\vec{q}/2}a^\dagger_{\vec{p}'-\vec{q}'/2}a_{\vec{p}'+\vec{q}'/2}\rangle \\
=\;& \langle a^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}/2}a_{\vec{p}+\vec{q}/2}\rangle\langle a^\dagger_{\vec{p}'-\vec{q}'/2}a_{\vec{p}'+\vec{q}'/2}\rangle - \langle a^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}/2}a_{\vec{p}'+\vec{q}'/2}\rangle\langle a^\dagger_{\vec{p}'-\vec{q}'/2}a_{\vec{p}+\vec{q}/2}\rangle \\
=\;& \langle a^\dagger_{\vec{p}}a_{\vec{p}}\rangle\langle a^\dagger_{\vec{p}'}a_{\vec{p}'}\rangle\delta(\vec{q}) \\
&-\langle a^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}/2}a_{\vec{p}-\vec{q}/2}\rangle\langle a^\dagger_{\vec{p}+\vec{q}/2}a_{\vec{p}+\vec{q}/2}\rangle\delta(\vec{p}-\frac{\vec{q}}{2}-\vec{p}'-\frac{\vec{q}'}{2})\delta(\vec{p}+\frac{\vec{q}}{2}-\vec{p}'+\frac{\vec{q}'}{2}) \\
=\;& \langle a^\dagger_{\vec{p}}a_{\vec{p}}\rangle\langle a^\dagger_{\vec{p}'}a_{\vec{p}'}\rangle\delta(\vec{q}) - \langle a^\dagger_{\vec{p}-\vec{q}/2}a_{\vec{p}-\vec{q}/2}\rangle\langle a^\dagger_{\vec{p}+\vec{q}/2}a_{\vec{p}+\vec{q}/2}\rangle\delta(\vec{p}-\vec{p}')\delta(\vec{q}+\vec{q}').
\end{aligned}$$

Le premier terme s'annule après intégration sur $\vec{p},\vec{p}'$. Donc $\langle\vec{j}_{\text{para}}(\vec{q})\cdot\vec{j}_{\text{para}}(\vec{q}')\rangle \propto \delta(\vec{q}+\vec{q}')$. Par conséquent, nous pouvons écrire

$$\chi_R^{\alpha\beta}(\vec{q},t-t') = -i\theta(t-t')\langle[j_{\text{para},\alpha}(\vec{q},t), j_{\text{para},\beta}(-\vec{q},t')]\rangle.$$

Pour obtenir le courant total, il faut inclure la contribution diamagnétique. La fonction de réponse correspondante est donnée par

$$Q^{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}',t-t') = \chi_R^{\alpha\beta}(\vec{r}-\vec{r}',t-t') + \frac{ne^2}{m}\delta_{\alpha\beta}\delta(\vec{r}-\vec{r}')\delta(t-t')$$

ou, en tenant compte du résultat de la question 2 ci-dessus,

$$Q^{\alpha\beta}(\vec{q},t-t') = \chi_R^{\alpha\beta}(\vec{q},t-t') + \frac{ne^2}{m}\delta_{\alpha\beta}\delta(t-t').$$

En généralisant le résultat du point 7. dans le fichier Hartree-Fock.pdf, on peut écrire

$$n = -k_BT\sum_n \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\,\mathcal{G}_0(\vec{p},i\epsilon_n).$$

Cette formule peut s'écrire aussi sous la forme

$$n = \frac{k_BT}{m}\sum_n \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\,p_\alpha^2\mathcal{G}_0^2(\vec{p},i\epsilon_n),$$

en utilisant $p_\alpha\mathcal{G}_0^2(\vec{p},i\epsilon_n) = m\frac{\partial\mathcal{G}_0(\vec{p},i\epsilon_n)}{\partial p_\alpha}$ et en faisant une intégration par partie.
Démonstration : Nous utilisons la deuxième formule comme point de départ :

$$\begin{aligned}\int dp_\alpha\; p_\alpha^2\mathcal{G}_0^2(\vec{p},i\epsilon_n) &= \int dp_\alpha\; p_\alpha m\frac{\partial\mathcal{G}_0(\vec{p},i\epsilon_n)}{\partial p_\alpha}\\ &= m\left[p_\alpha\mathcal{G}_0(\vec{p},i\epsilon_n)\right]_{-\infty}^{\infty} - m\int dp_\alpha\;\mathcal{G}_0(\vec{p},i\epsilon_n).\end{aligned}$$

Comme $\lim_{|p_\alpha|\to\infty}\left[p_\alpha\mathcal{G}_0(\vec{p},i\epsilon_n)\right] = 0$, le premier term s'annule et on obtient

$$\sum_n \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\,\mathcal{G}_0(\vec{p},i\epsilon_n) = -m\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}\,p_\alpha^2\mathcal{G}_0^2(\vec{p},i\epsilon_n).$$

2. $\rightarrow$ Au lieu d'évaluer la fonction de réponse retardée directement, nous calculons $\chi^{\alpha\beta}(\vec{q},i\omega_m)$ et obtenons la fonction de réponse retardée par continuation analytique, $i\omega_m \rightarrow \omega + i\eta$. En particulier, nous sommes intéressés par $\chi^{\alpha\beta}(\vec{q}=0,i\omega_m)$ pour décrire la réponse à un champ uniforme.
   Avec le résultat du cours et les formules de la question 3 ci dessus, nous obtenons l'expression suivante qui inclut la réponse diamagnétique :

   $$Q^{\alpha\beta}(0,i\omega_m) = -\frac{e^2}{m^2}k_BT\sum_n \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3}p_\alpha p_\beta\left\{\mathcal{G}_0(\vec{p},i\epsilon_n+i\omega_m) - \mathcal{G}_0(\vec{p},i\epsilon_n)\right\}\mathcal{G}_0(\vec{p},i\epsilon_n).$$

   La conductivité est donnée par

   $$\sigma^{\alpha\beta}(0,\omega) = \frac{1}{-i\omega}\lim_{\eta\to 0} Q^{\alpha\beta}(0,i\omega_m\rightarrow\omega+i\eta).$$

   Démontrer $\sigma^{\alpha\beta}(0,\omega) \propto \delta_{\alpha\beta}$.

   Solution: Si $\alpha \neq \beta$, la fonction à intégrer est impaire, donc l'intégrale sur $\vec{p}$ s'annule. Par conséquent, $\sigma^{\alpha\beta}(0,\omega) \propto \delta_{\alpha\beta}$.

3. Afin d'évaluer $Q^{\alpha\beta}(0,i\omega_m)$, convertir l'intégrale sur p dans une intégrale sur ξ en utilisant que l'intégrale est dominée par des valeurs $\xi \approx 0$.

Solution: En utilise le fait que

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} p_\alpha^2 f(|\vec{p}|) = \frac{1}{3} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} |p|^2 f(|\vec{p}|).$$

En outre,

$$\int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} F(|\vec{p}|) = \int_{-\epsilon_F}^{\infty} d\xi_{\vec{p}}\, \nu(E_F + \xi_{\vec{p}}) F(\sqrt{2m(\epsilon_F + \xi_{\vec{p}})}),$$

où ν est la densité d'états. Si l'intégrale est dominée par $\xi \approx 0$, on peut approximer $\nu(E_F + \xi_{\vec{p}}) \approx \nu(E_F)$ et $|\vec{p}|^2 \approx 2mE_F$ et on intégrer de $-\infty$ jusqu'à ∞. Donc

$$\begin{aligned}
& Q^{\alpha\beta}(0, i\omega_m) \\
= \quad & -\frac{e^2}{m^2} k_B T \sum_n \delta_{\alpha\beta} \int \frac{d^3p}{(2\pi)^3} p_\alpha^2 \left\{ \mathcal{G}_0(\vec{p}, i\epsilon_n + i\omega_m) - \mathcal{G}_0(\vec{p}, i\epsilon_n) \right\} \mathcal{G}_0(\vec{p}, i\epsilon_n) \\
= \quad & -\frac{e^2}{m^2} k_B T \sum_n \delta_{\alpha\beta} \frac{1}{3} 2mE_F \nu(E_F) \int d\xi \left\{ \mathcal{G}_0(\xi, i\epsilon_n + i\omega_m) - \mathcal{G}_0(\xi, i\epsilon_n) \right\} \mathcal{G}_0(\xi, i\epsilon_n).
\end{aligned}$$

A noter : $n = k_F^3/(6\pi^2)$ et $\nu = mk_F/(2\pi)^2$. Donc $n = 2E_F\nu/3$.

4. Evaluer l'intégrale sur ξ par intégration dans le plan complexe pour ω_m. Quelle est la condition sur ϵ_n et ω_m pour obtenir un résultat non-nul ?

Solution: Pour évaluer l'intégrale par intégration dans le plan complexe, il faut connaître la position des pôles. Pour obtenir un résultat non-nul, l'existence de pôles des deux côtés de l'axe réelle est nécessaire. C'est le cas pour $\epsilon_n(\epsilon_n + \omega_m) < 0$. Supposons $\omega_m > 0$. Dans ce cas, on obtient

$$\int d\xi \left\{ \mathcal{G}_0(\xi, i\epsilon_n + i\omega_m) - \mathcal{G}_0(\xi, i\epsilon_n) \right\} \mathcal{G}_0(\xi, i\epsilon_n) \quad = \quad 2\pi i \frac{1}{i\omega_m} \theta(-n)\theta(n+m).$$

5. Démontrer $Q^{\alpha\beta}(0, i\omega_m) = \delta_{\alpha\beta} \frac{ne^2}{m}$.

Solution: Avec les résultats des questions précédentes, on obtient

$$Q^{\alpha\beta}(0, i\omega_m) \quad = \quad -\delta_{\alpha\beta} \frac{ne^2}{m} k_B T \sum_{-m<0<n} \frac{2\pi}{\omega_m} = \delta_{\alpha\beta} \frac{ne^2}{m}.$$

6. $\rightarrow$ En présence de désorde, les fonctions de Green acquièrent une self-énergie :

$$\mathcal{G}_0(\vec{p}, i\epsilon_n) \rightarrow \bar{\mathcal{G}}(\vec{p}, i\epsilon_n) = \frac{1}{i\epsilon_n - \xi_{\vec{p}} \pm \frac{i}{2\tau}}.$$

Qu'est-ce qui détermine le signe de la self-énergie ?

Solution: La self-énergie ne change pas la structure analytique de la fonction de Green. Les pôles restent odnc du même côté de l'axe réelle. Par conséquent,

$$\bar{\mathcal{G}}(\vec{p}, i\epsilon_n) = \frac{1}{i\epsilon_n - \xi_{\vec{p}} + \frac{i}{2\tau}\mathrm{sign}(\epsilon_n)}.$$

7. Refaire les calculs de la question 6. en remplaçant $\mathcal{G}_0$ par $\bar{\mathcal{G}}$.

Solution: Supposons $\omega_m > 0$. Dans ce cas, on obtient

$$\begin{aligned}
& \int d\xi \left\{\mathcal{G}_0(\xi, i\epsilon_n + i\omega_m) - \mathcal{G}_0(\xi, i\epsilon_n)\right\} \mathcal{G}_0(\xi, i\epsilon_n) \\
= & \; 2\pi i \frac{1}{i\omega_m + \frac{i}{2\tau}\mathrm{sign}(\epsilon_n + \omega_m) - \frac{i}{2\tau}\mathrm{sign}(\epsilon_n)} \theta(-n)\theta(n+m) \\
= & \; 2\pi i \frac{1}{i\omega_m + \frac{i}{\tau}} \theta(-n)\theta(n+m).
\end{aligned}$$

Pour $Q^{\alpha\beta}$, on obtient alors

$$Q^{\alpha\beta}(0, i\omega_m) \quad = \quad \delta_{\alpha\beta} \frac{ne^2}{m} \frac{\omega_m}{\omega_m + \frac{1}{\tau}}.$$

8. Conclure sur le résultat pour la conductivité dc $\sigma_{\alpha\beta}(0, \omega \to 0)$ en présence de désordre.

Solution: La conductivité est donnée par

$$\sigma^{\alpha\beta}(0, \omega) = \frac{1}{-i\omega} \delta_{\alpha\beta} \frac{ne^2}{m} \frac{-i\omega}{-i\omega + \frac{1}{\tau}}.$$

Donc

$$\sigma^{\alpha\beta}(0, \omega \to 0) = \delta_{\alpha\beta} \frac{ne^2}{m} \tau.$$

CONCLUSION : Le résultat obtenu ici s'appèle la conductivité de Drude. Avec ce formalisme, on peut inclure des effets d'interférence en présence de désordre pour obtenir des corrections à ce résultat (localisation faible). D'autres corrections apparaissent, si on tient compte des interactions. Ces corrections aussi peuvent être calculées à l'aide des diagrammes de Feynman.