

Approximation des Phases Aléatoires Self-Consistante dans le Modèle de Hubbard

Steffen Schäfer

▶ **To cite this version:**

Steffen Schäfer. Approximation des Phases Aléatoires Self-Consistante dans le Modèle de Hubbard. Physique mathématique [math-ph]. Université Joseph-Fourier - Grenoble I, 1998. Français. NNT : . tel-00002990

HAL Id: tel-00002990
https://theses.hal.science/tel-00002990

Submitted on 12 Jun 2003

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université Joseph Fourier – Grenoble I
Technische Universität München

Thèse en Cotutelle

présentée par

Steffen SCHÄFER

pour obtenir le titre de

Docteur en Physique

(arrêtés ministériels du 5 juillet 1984, du 30 mars 1992 et du 18 janvier 1994)

Approximation des Phases Aléatoires Self-Consistante dans le Modèle de Hubbard

---

Soutenue publiquement le 8 octobre 1998 devant la commission d'examen:

M.	**T. Dombre**	Président
Mme.	**M. Lavagna**	Rapporteur
M.	**F. Gebhard**	Rapporteur
M.	**P. Schuck**	Directeur de Thèse
M.	**W. Brenig**	Directeur de Thèse
M.	**R. Arvieu**	Invité

Thèse préparée au sein de l'Institut des Sciences Nucléaires (ISN 98.75)

Table des matières

Remerciements **vii**

1 Introduction **1**

2 Formalisme général **5**

2.1 Réponse linéaire 5

2.1.1 Susceptibilité magnétique 8

2.2 Représentations de la mécanique quantique 9

2.2.1 Représentation de Schrödinger 9

2.2.2 Représentation de Heisenberg 10

2.2.3 Représentation de Dirac 11

2.3 Fonctions de Green 12

2.3.1 Propriétés analytiques 14

2.3.2 Relations de Kramers-Kronig 16

2.3.3 Température finie 18

3 La méthode de l'Equation de Dyson **21**

3.1 Les équations du mouvement et l'Equation de Dyson 22

3.2 Le propagateur à une particule 25

3.2.1 L'approximation Hartree-Fock 27

3.2.2 La self-énergie exacte 28

3.3 La RPA self-consistante 29

3.3.1 Règle de somme pondérée par l'énergie 30

3.4 Le propagateur particule-trou 31

3.4.1 Comparaison entre la RPA et la RPA self-consistante 34

3.4.2 Dérivation à partir d'un principe variationnel 38

3.4.3 La self-énergie RPA 39

4 Le modèle de Hubbard **43**

4.1 Le problème électronique d'un solide réaliste 43
4.2 Quelques propriétés du modèle de Hubbard 46
4.3 Méthodes approximatives 48
4.3.1 La théorie Hartree-Fock 49
4.3.2 Les Approximations de Hubbard 52
4.4 Application de la théorie RPA 55
4.4.1 Corrélations de charge et de spin longitudinal 56
4.4.2 La règle de somme pondérée par l'énergie 65
4.4.3 Corrélations de spin transverse 67

5 La chaîne de Hubbard **71**

5.1 Les liquides de Fermi et de Luttinger 71
5.1.1 La théorie de Landau du liquide de Fermi 72
5.1.2 La notion du liquide de Luttinger 77
5.2 L'ansatz de Bethe 81
5.3 Résultats de la théorie RPA 84
5.3.1 Méthode numérique 85
5.3.2 Les nombres d'occupation 87
5.3.3 La susceptibilité $\chi^0(q,\omega)$ 91
5.3.4 La susceptibilité de charge $\chi^{\mathrm{ch}}(q,\omega)$ 101
5.3.5 La susceptibilité de spin longitudinal $\chi^{\mathrm{sp}}(q,\omega)$ 104
5.3.6 Règle de somme pondérée par l'énergie 107
5.3.7 La limite du couplage fort 111
5.3.8 Conséquences pour le propagateur à une particule 119

6 Conclusions et perspectives **123**

A Susceptibilité libre **131**

A.1 Dérivation à partir du propagateur à une particule 131
A.2 La susceptibilité libre en une dimension 133

B Solution numérique de la RPA renormalisée **135**
B.1 Calcul de la susceptibilité libre renormalisée 135
B.1.1 La méthode des trapèzes 137
B.1.2 La méthode des fractions 138
B.1.3 Evaluation par l'identité de Dirac 139
B.2 Calcul des nombres d'occupation 139
B.2.1 Contribution des continus de spin et de charge 140
B.2.2 Contribution des pôles 140

C Cohérence de la limite du couplage fort **141**

Deutsche Zusammenfassung (résumé en allemand) **145**

Bibliographie **153**

Remerciements

Je remercie Peter Schuck et Wilhelm Brenig pour avoir accepté de diriger cette thèse en cotutelle. Ils ont toujours su me faire bénéficier de leur savoir et de leur expérience.

Mes remerciements vont ensuite à Mireille Lavagna et Florian Gebhard pour leurs remarques, critiques, encourageantes et amicales, ainsi que pour leur travail de rapporteur.

Je remercie Thierry Dombre pour la relecture du manuscrit et pour la présidence du jury.

Un grand merci aussi à Robert Arvieu qui ma laissé profiter de la fraîcheur de sa maison et de son esprit pendant les moments les plus tendus de cette thèse.

Je voudrais ensuite remercier tous les membres du groupe théorique de l'Institut des Sciences Nucléaires pour leur accueil sympathique. En particulier, Thierry Bertrand qui a du souffrir énormément de mes questions linguistiques interminables.

Mes remerciements incluent Jorge Dukelsky et Thomas Alm pour leurs conseils et de nombreuses discussions intéressantes, et Detlef Von-Eiff pour son soutien et sa compagnie.

Merci encore à Eberhard Wildermuth, non seulement pour son amitié, mais aussi pour m'avoir donné la possibilité de calculer sur les ordinateurs de l'Institut für Quantenelektronik de la ETH Zürich.

Enfin un grand merci à mes parents, mes amis et à Marie-Josée Ilamoko, qui m'ont apporté tout ce dont j'avais besoin pour réaliser ce travail.

Chapitre 1

Introduction

Dans les dernières décennies, le *Modèle de Hubbard* [1] a joué un rôle crucial pour la compréhension des systèmes d'électrons fortement corrélés sur réseau. Bien que trop simpliste pour une application directe au problème électronique d'un solide réaliste, il prend la place d'un modèle générique, tels les modèles de Ising ou de Heisenberg pour les systèmes de spins, respectivement, classiques ou quantiques.

Le modèle de Hubbard schématise la propagation et l'interaction des électrons dans un solide cristallin à bandes d'énergie étroites. Déjà sa version la plus simple, le modèle de Hubbard à une bande avec des déplacements électroniques limités aux sauts entre premiers voisins du réseau cristallin, possède un diagramme de phase très riche, contenant des phases magnétiques, isolantes, métalliques et supraconductrices.

Il s'est révélé particulièrement important dans la compréhension de la transition métal-isolant engendrée par des interactions électron-électron. Cette *transition dite de Mott* [2, 3] apparaît, lorsqu'on fait varier la pression ou la température, dans plusieurs oxydes des métaux de transition, notamment dans le sesquioxyde de vanadium (V_2O_3) [4], dont la modélisation recquiert un modèle de Hubbard à deux bandes [5].

La découverte de la supraconductivité à haute température critique ($T_c \approx 30$K) dans des échantillons multiphasés de LaBaCuO, par J. Bednorz et K.A. Müller en 1986 [6], a stimulé la recherche sur des matériaux à oxyde de cuivre avec la synthèse et l'étude de composés tels que $La_{2-x}Sr_xCuO_4$, avec $x \approx 0.15$, ou $YBa_2Cu_3O_{7-y}$, avec $y \approx 0.1 \ldots 0.5$. Ces supraconducteurs modernes sont tous formés de plans CuO_2 qui se décrivent par le biais du modèle de Hubbard à trois bandes [3, 7], également connu sous le nom de *modèle de Emery* [8].

Le modèle de Hubbard intervient aussi dans la description d'autres matériaux à électrons fortement corrélés, comme les fullerènes ou les alliages à base de terres rares, appelés "Fermions Lourds", en raison de la grande masse effective de leurs porteurs de charge [3, 9].

En dépit de sa simplicité structurelle et malgré les efforts développés dans les trois dernières décennies, la compréhension de ses propriétés reste incomplète. Une solution exacte n'existant qu'à une dimension [10], il lance un défit énorme aux méthodes à N corps. De nombreux formalismes ont été développés et appliqués au modèle de Hubbard et à d'autres systèmes de fermions fortement corrélés, chacun avec ses points forts et ses faiblesses [3, 11]. Néanmoins, au-delà de la théorie du champ moyen, une approche à N corps communément acceptée manque jusqu'à présent.

Dans cette thèse nous proposons une nouvelle méthode qui s'entend comme généralisation directe de la théorie Hartree-Fock aux fonctions de corrélations à N corps. Cette méthode, dont les bases ont été établies dans les années 60 [12, 13, 14], se sert de l'Equation de Dyson comme point de départ. En retenant uniquement les contributions instantanées de l'opérateur de masse, elle nous permet d'obtenir une expression explicite pour le propagateur à N corps.

Ce formalisme a été appliqué et étendu indépendamment par différents groupes, surtout en physique nucléaire. Cela explique qu'il soit connu sous des appellations aussi différentes que "RPA Self-Consistante", "Cluster Mean Field" ou encore "Méthode de l'Equation du Mouvement" [12, 13, 15, 16, 17, 18, 19].

Dans le modèle de Heisenberg antiferromagnétique à une dimension [20] il reproduit le spectre à un magnon de la solution exacte, $\omega_k = \frac{\pi}{2}|\sin k|$. A deux dimensions, ce formalisme, que nous appellerons dorénavant *RPA Self-Consistante* (SCRPA), est en bon accord avec des calculs de Monte-Carlo Quantique.

De ce fait, l'application au modèle de Hubbard à une bande avec interaction répulsive paraît particulièrement attrayante. En physique des solides, des approximations similaires ont été utilisée dans le passé afin de déduire les propriétés à une particule, en couplant le propagateur à un électron de manière approximative aux fonctions de Green à trois corps [21, 22, 23]. Pour les propagateurs de paires de fermions, elle nous conduira, comme nous le verrons par la suite, à un système d'équations intégrales non-linéaires.

Au premier abord, nous nous limiterons au modèle de Hubbard à une dimen-

sion. Nous pourrons ainsi comparer nos résultats à la solution exacte, provenant de l'ansatz de Bethe [10]. A dimension plus élevée, on ne dispose pas d'un tel repère absolu. De plus la complexité numérique des équations SCRPA augmente rapidement avec la dimension spatiale. Il s'avère donc indispensable d'acquérir une expérience en travaillant dans la limite unidimensionnelle.

L'inconvénient de cette stratégie est de commencer par le cas où le caractère quantique est le plus manifeste, et où les corrélations sont les plus présentes. Cependant, notre méthode se trouve en accord avec plusieurs théorèmes importants, parmi lesquels nous citons celui de Luttinger [24, 25] ou la règle de somme pondérée par l'énergie.

En ce qui concerne la solution numérique, nous nous restreignons, dans cette thèse, à la *RPA renormalisée*. En négligeant les corrélations à deux corps dans l'opérateur de masse de la SCRPA, cette approximation facilite la solution numérique par rapport à la SCRPA, tout en gardant ses aspects self-consistants. Ne prenant pas en considération les corrélations dites *d'emboîtement*, c'est-à-dire celles transférant une impulsion $q = 2k_F$, nous ne pouvons guère espérer reproduire des phénomènes typiques pour les modèles unidimensionnels, tels que le comportement de liquide de Luttinger qui apparaît dans la solution exacte de la chaîne dopée.

Cependant, même la RPA renormalisée nous fournit un certain nombre de résultats intéressants, surtout dans la limite du couplage fort de la chaîne de Hubbard à moitié remplie. Dans cette limite nous retrouvons, à un facteur près, la distribution des impulsions et l'énergie fondamentale de la solution exacte.

Nous soulignons encore une fois, que cette thèse représente une première application d'une nouvelle méthode à l'un des modèles d'électrons fortement corrélés qui se trouve au centre d'intérêt de la communauté des physiciens de la matière condensée depuis de nombreuses années. Surtout à une dimension, il ne s'agit pas de mettre en cause les résultats obtenus par d'autres formalismes souvent mieux adaptés, mais de tester la performance et la faisabilité de notre approche. Eu égard aux approximations incorporées, ses prédictions correspondent plutôt à un scénario générique, que l'on espère retrouver en dimensions plus élevées.

L'organisation de cette thèse se fait selon le plan suivant:

Au prochain chapitre, nous donnerons une brève introduction à la théorie de la réponse linéaire et aux fonctions de Green.

Le chapitre 3 est consacré à la présentation de la RPA Self-Consistante. Nous commencerons par sa dérivation à partir de l'Equation de Dyson. Une première application au propagateur à une particule nous amènera à la théorie Hartree-Fock. Ensuite, nous déterminerons le propagateur particule-trou de la SCRPA en termes d'un système fermé d'équations intégrales non linéaires. Nous exposerons son lien avec un principe variationnel et discuterons les différences entre la SCRPA et la RPA renormalisée, ainsi que l'accord avec la règle de somme pondérée par l'énergie et les prédictions pour le propagateur à une particule.

Au début du chapitre 4 nous présenterons le modèle de Hubbard, ses propriétés et son rôle en physique des solides. Nous passerons en revue quelques unes des méthodes approximatives les plus utilisées, avant d'étudier les susceptibilités de charge et de spin en SCRPA et en RPA renormalisée.

Au chapitre 5, nous donnerons une brève introduction aux modèles unidimensionnel. Nous présenterons leurs particularités et les problèmes soulevés lorsqu'on tente une description dans le cadre de la théorie des liquides de Fermi. Ensuite, nous discuterons la solution de la RPA renormalisée pour la chaîne de Hubbard, en fonction du remplissage et de la constante de couplage. Nous comparerons ses résultats, numériques et analytiques, à l'ansatz de Bethe et aux calculs de Monte-Carlo Quantique. La limite du couplage fort nous permettra de dériver des expressions analytiques pour tous les éléments de notre théorie. De plus, cette limite nous donnera une première idée du mécanisme impliqué dans la transition Mott-Hubbard.

Chapitre 2

Formalisme général

Dans ce chapitre, nous résumons la théorie des fonctions de Green en commençant par une brève motivation provenant de l'approximation de la réponse linéaire. Ensuite nous rappellerons les éléments centraux du formalisme des fonctions de Green et rassemblerons quelques propriétés analytiques qui nous seront utiles dans les chapitres suivants. A la fin de ce chapitre, nous discuterons en quelques mots comment le formalisme doit être adapté pour être applicable à des systèmes à température finie. Pour des questions plus détaillées, nous renvoyons le lecteur à la littérature, notamment aux réf. [26, 27, 28, 29, 30].

2.1 Réponse linéaire

Comment un système physique réagit-il à une perturbation extérieure? Pour répondre à cette question, examinons un système décrit par un hamiltonien

$$H(t) \;=\; H_0 + V(t)\;. \tag{2.1}$$

H_0 représente le système non perturbé et $V(t)$ une perturbation extérieure. Cette dernière provient d'un champ extérieur, $F(t)$, qui dépend du temps et qui est couplé à l'observable B du système:

$$V(t) \;=\; B\,F(t) \tag{2.2}$$

Comment cette perturbation extérieure se manifeste-t-elle dans la valeur moyenne d'une autre observable, représentée par l'opérateur A?

Considérons le système à température nulle et choisissons les unités telles que $\hbar = 1$. La fonction d'onde $|\phi_S(t)\rangle$ satisfait à l'équation de Schrödinger:

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\,|\phi_S(t)\rangle \;=\; [H_0 + F(t)B]\;|\phi_S(t)\rangle \tag{2.3}$$

Nous supposons de plus les opérateurs H_0 et B indépendants du temps.

Afin de nous débarrasser de la présence de H_0 dans (2.3), nous passons à la représentation de Dirac par une transformation unitaire:

$$\begin{aligned} |\phi_D(t)\rangle &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t}\,|\phi_S(t)\rangle \\ A_D(t) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0 t}\,A\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0 t} \end{aligned} \tag{2.4}$$

Cette représentation n'est autre que celle de Heisenberg pour le système non perturbé. Evidemment, les valeurs moyennes $\langle\, B\,\rangle_t$ ne sont pas affectées par cette transformation. $|\phi_D(t)\rangle$ satisfait à une équation du type Schrödinger

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\,|\phi_D(t)\rangle \;=\; F(t)B_D(t)\,|\phi_D(t)\rangle\;. \tag{2.5}$$

Supposons la perturbation absente pour $t \to -\infty$. Le système se trouve alors dans le fondamental non perturbé, $|\phi_0\rangle$, qui est indépendant du temps car en l'absence d'une perturbation la représentation de Dirac et celle de Heisenberg sont identiques. Cette condition aux limites nous permet d'intégrer formellement l'éq. de Schrödinger (2.5):

$$|\phi_D(t)\rangle \;=\; |\phi_0\rangle \;-\mathrm{i}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}\tau\;B_D(\tau)F(\tau)\,|\phi_D(t)\rangle \tag{2.6}$$

L'état $|\phi_D(t)\rangle$ peut être trouvé en itérant (2.6).

Pour de faibles perturbations, il suffit de s'arrêter après la première itération:

$$|\phi_D(t)\rangle \;=\; |\phi_0\rangle \;-\mathrm{i}\int_{-\infty}^{t}\mathrm{d}\tau\;B_D(\tau)F(\tau)\,|\phi_0\rangle \;+\mathcal{O}(F^2) \tag{2.7}$$

Pour simplifier, admettons pour l'instant que les opérateurs A et B soient hermitiques et que le champ $F(t)$ soit réel. Au premier ordre, le changement de la valeur moyenne de A par rapport à sa valeur dans l'état non perturbé,

$$\langle\, A\,\rangle_0 \;\equiv\; \langle\phi_0|\,A\,|\phi_0\rangle\;, \tag{2.8}$$

est donné par

$$\langle A \rangle_t - \langle A \rangle_0 = -\mathrm{i} \int_{-\infty}^{t} \mathrm{d}\tau \, F(\tau) \, \langle \phi_0 | \, [A_D(t), \, B_D(\tau)] \, | \phi_0 \rangle \ . \tag{2.9}$$

La réponse du système, se manifestant dans le changement de l'observable A, est alors linéaire par rapport au champ F s'attaquant à B. D'où le nom de l'approximation de la *réponse linéaire*.

Pour de fortes perturbations, la réponse peut se saturer ou subir d'autres phénomènes non linéaires. Ces effets impliquent des termes d'ordres plus élevés en F qui ne sont pas inclus dans cette théorie.

Considérons d'abord une perturbation se réduisant à une impulsion donnée au système à $t = t'$, c'est-à-dire, $F(t) = \delta(t - t')$. La réponse (2.9) devient:

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_t - \langle A \rangle_0 &= -\mathrm{i} \, \Theta(t - t') \, \langle \phi_0 | \, [A_D(t), \, B_D(t')] \, | \phi_0 \rangle \\ &=: G^{\mathrm{ret}}_{AB}(t, t') \end{aligned} \tag{2.10}$$

Ceci définit la *fonction de Green* du système. L'indice "ret" indique que la fonction de Green est retardée, c'est-à-dire qu'il tient compte du fait que la réponse du système, mesurée par dans le changement de $\langle A \rangle_t$, est seulement présente après que la perturbation ait été appliquée. La fonction de Green $G^{\mathrm{ret}}_{AB}(t, t')$ n'est fonction que de la différence des temps t et t', puisque l'hamiltonien H_0 ne dépend pas explicitement du temps.

Toute perturbation $F(t)$ peut être développée en série d'impulsions $\delta(t - t')$, ce qui nous permet d'écrire la réponse (2.9) sous forme de convolution:

$$\langle A \rangle_t - \langle A \rangle_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\tau \, G^{\mathrm{ret}}_{AB}(t - \tau) \, F(\tau) \tag{2.11}$$

Si nous développons le champ perturbatif en série de Fourier,

$$F(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \, F(\omega) \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega t + \eta t} \ , \tag{2.12}$$

où le facteur $\eta \to 0^+$ tient compte de l'établissement adiabatique de la perturbation, la réponse de l'observable A se simplifie, grâce au théorème de convolution, et on obtient la *formule de Kubo*:

$$\langle A \rangle_t - \langle A \rangle_0 = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi} \, G^{\mathrm{ret}}_{AB}(\omega) \, F(\omega) \, \mathrm{e}^{-\mathrm{i}(\omega + \mathrm{i}\eta)t} \tag{2.13}$$

2.1.1 Susceptibilité magnétique

Considérons comme exemple concret la réponse d'un système à un champ magnétique appliqué, $\mathbf{B}(t)$, que nous supposons homogène dans l'espace et variable dans le temps.

Il agit sur le moment magnétique du système, provenant de l'ensemble des spin,

$$\mathbf{m} = \sum_i \mathbf{m}_i = g_J \mu_B \sum_i \mathbf{S}_i \,, \tag{2.14}$$

où g_J est leur facteur gyromagnétique et μ_B le magnéton de Bohr. Nous divisons le système en petites cellules désignées par l'indice i, dont chacune apporte la contribution $\mathbf{m}_i$ au moment magnétique [31]. Cette perturbation s'introduit dans l'hamiltonien par le terme

$$V(t) = -\mathbf{m} \cdot \mathbf{B}(t) = -m^\alpha \, B^\alpha(t) \tag{2.15}$$

La dernière égalité tire son origine de la convention de sommation d'Einstein que nous utiliserons désormais par défaut. Nous observons l'effet de cette perturbation en regardant l'aimantation $\mathbf{M}$, qui n'est rien d'autre que le moment magnétique par unité de volume $\mathcal{V}$,

$$\mathbf{M} = \frac{g_J \mu_B}{\mathcal{V}} \sum_i \langle \, \mathbf{S}_i \, \rangle \,. \tag{2.16}$$

Un choix naturel pour les deux opérateurs A et B qui figurent dans la fonction de Green semble donc être le moment magnétique $\mathbf{m}$. La réponse de l'aimantation dans l'approximation linéaire se calcule avec l'éq. (2.11),

$$\langle \, M^\alpha \, \rangle_t - \langle \, M^\alpha \, \rangle_0 = -\frac{1}{\mathcal{V}} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}t' \, \Big\langle\!\Big\langle \, m^\alpha(t); \, m^\beta(t') \, \Big\rangle\!\Big\rangle^{\mathrm{ret}} \, B^\beta(t') \,, \tag{2.17}$$

où nous avons introduit la fonction de Green retardée

$$\Big\langle\!\Big\langle \, m^\alpha(t); \, m^\beta(t') \, \Big\rangle\!\Big\rangle^{\mathrm{ret}} \equiv -\mathrm{i}\,\Theta(t-t') \, \Big\langle \phi_0 \Big| \Big[m_D^\alpha(t), \, m_D^\beta(t') \Big] \Big| \phi_0 \Big\rangle \,. \tag{2.18}$$

Un coup d'œil à l'éq. (2.17) montre que cette fonction de Green est intimement lié au *tenseur de la susceptibilité magnétique*, que nous définissons comme réponse du spin au site i à une perturbation agissant sur le spin au site j:

$$\chi_{ij}^{\alpha\beta}(t,t') = -\frac{g_J^2 \mu_B^2}{\mathcal{V}} \, \Big\langle\!\Big\langle \, S_i^\alpha(t); \, S_j^\beta(t') \, \Big\rangle\!\Big\rangle \tag{2.19}$$

C'est à cette quantité que nous consacrerons une grande partie de notre intérêt dans cette thèse.

2.2 Les différentes représentations de la mécanique quantique

Dans ce paragraphe, nous rappellerons brièvement les différentes représentations utilisées en mécanique quantique pour la description des systèmes dépendants du temps.

2.2.1 Représentation de Schrödinger

Nous commençons par la représentation la plus répandue, qui est celle de Schrödinger. Elle est caractérisée par une dépendance en temps des états, tandis que les opérateurs n'en dépendent que si le problème n'est pas invariant par translation dans le temps. Autrement dit, la dépendance en temps des opérateurs ne peut être qu'explicite.

Un état pur, $|\phi_S(t)\rangle$, satisfait à l'éq. de Schrödinger,

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\,|\phi_S(t)\rangle \;=\; H(t)\,|\phi_S(t)\rangle\;, \tag{2.20}$$

dont l'hamiltonien peut éventuellement dépendre du temps. En introduisant l'opérateur d'évolution dans le temps,

$$|\phi_S(t)\rangle \;=\; U_S(t,t_0)\,|\phi_S(t_0)\rangle \tag{2.21}$$

l'équation de Schrödinger peut être transcrite en une équation différentielle pour l'opérateur unitaire $U_S(t,t_0)$:

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}U_S(t,t_0) \;=\; H(t)\,U_S(t,t_0) \tag{2.22}$$

Grâce à la condition aux limites $U_S(t_0,t_0) = \mathbf{1}$, nous trouvons la solution formelle de (2.22),

$$U_S(t,t_0) \;=\; \mathbf{1} \;-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}\tau\,H(\tau)\,U_S(\tau,t_0)\;, \tag{2.23}$$

qui se transforme par itération en série de von Neumann:

$$\begin{aligned} U_S(t,t_0) \;&=\; \mathbf{1} \\ &+\sum_{n=1}^{\infty}(-\mathrm{i})^n\int_{t_0}^{t}\mathrm{d}t_1\int_{t_0}^{t_1}\mathrm{d}t_2\ldots\int_{t_0}^{t_{n-1}}\mathrm{d}t_n\,H(t_1)\,H(t_2)\ldots H(t_n) \end{aligned} \tag{2.24}$$

Les bornes des intégrales sont soumises à la condition $t \geq t_1 \geq \ldots \geq t_n \geq t_0$. Cet ordre chronologique doit être respecté strictement, car, pour des temps t_i différents, les hamiltoniens ne commutent pas nécessairement les uns avec les autres. On peut contourner ce problème en introduisant *l'opérateur chronologique de Dyson*,

$$T_D(A(t)\,B(t')) \;=\; \begin{cases} A(t)\,B(t') & \text{pour } t > t' \\ B(t')\,A(t) & \text{pour } t < t' \end{cases} \;. \tag{2.25}$$

Il nous donne la possibilité d'écrire le résultat sous la forme finale:

$$\begin{aligned} U_S(t,t_0) \;&=\; \mathbf{1} \\ &\quad + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-\mathrm{i})^n}{n!} \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_1 \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_2 \ldots \int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t_n\, T_D\left[H(t_1)\,H(t_2)\ldots H(t_n)\right] \\ &=\; T_D\,\exp\left[-\mathrm{i}\int_{t_0}^{t} \mathrm{d}t'\,H(t')\right] \end{aligned} \tag{2.26}$$

Le facteur $n!$ dans le dénominateur de la seconde ligne provient des $n!$ manières d'ordonner les t_i qui donnent toutes la même contribution à $U_S(t,t_0)$. Le facteur exponentiel dans la dernière ligne est seulement une notation abrégée pour le développement en série. Si l'hamiltonien ne dépend pas explicitement du temps, l'équation (2.26) se réduit à

$$U_S(t,t_0) \;=\; \exp\left[-\mathrm{i}\,H\,(t-t_0)\right] \;. \tag{2.27}$$

2.2.2 Représentation de Heisenberg

Pour tout problème en mécanique quantique, nous avons la liberté de rendre les états indépendants du temps en les fixant à un temps t_0 arbitraire:

$$|\phi_H\rangle \;\equiv\; |\phi_S(t_0)\rangle \tag{2.28}$$

Afin de conserver la dépendance en temps d'une valeur moyenne $\langle\, A\,\rangle$, nous devons transformer simultanément les opérateurs selon

$$A_H(t) \;=\; U_S^{-1}(t,t_0)\,A_S\,U_S(t,t_0) \;. \tag{2.29}$$

En dérivant (2.29) par rapport à t, nous trouvons, grâce à l'éq. (2.22), l'équation du mouvement pour les opérateurs de Heisenberg,

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A_H(t) \;=\; [A_H(t),\,H_H(t)] \;+\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}A_H(t) \;, \tag{2.30}$$

où la dérivée partielle tient compte de la dépendance en temps *explicite* de l'opérateur A, c'est-à-dire de celle dans la représentation de Schrödinger.

2.2.3 Représentation de Dirac

Il est commode de choisir une troisième représentation pour des systèmes dont l'hamiltonien est composé d'une partie H_0, qui décrit le système libre et qui est indépendant du temps, et d'une interaction $V(t)$, qui peut dépendre explicitement du temps:

$$H(t) \;=\; H_0 + V(t)\;. \tag{2.31}$$

Dans cette représentation que nous avons déjà discutée brièvement au début de ce chapitre, la dépendance en temps triviale, générée par H_0, est transférée des états aux opérateurs par la transformation (2.4),

$$\begin{aligned} |\phi_D(t)\rangle &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0\,(t-t_0)}\,|\phi_S(t)\rangle \\ A_D(t) &= \mathrm{e}^{\mathrm{i}H_0\,(t-t_0)}\,A_S\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}H_0\,(t-t_0)}\;. \end{aligned} \tag{2.32}$$

Les opérateurs obéissent à l'équation du mouvement de Heisenberg, caractérisée par H_0,

$$\mathrm{i}\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}A_D(t) \;=\; [A_D(t),\,H_0] + \mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}A_D(t)\;, \tag{2.33}$$

pendant que les états suivent une équation du type Schrödinger où l'interaction remplace l'hamiltonien:

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\,|\phi_D(t)\rangle \;=\; V_D(t)\,|\phi_D(t)\rangle \tag{2.34}$$

Nous définissons l'opérateur d'évolution pour les états de Dirac,

$$|\phi_D(t)\rangle \;=\; U_D(t,t_0)\,|\phi_D(t_0)\rangle\;, \tag{2.35}$$

qui, par analogie avec le chapitre 2.2.1, peut s'écrire sous la forme

$$U_D(t,t_0) \;=\; T_D\,\exp\left[-\mathrm{i}\int\limits_{t_0}^{t}\mathrm{d}t'\,V_D(t')\right]\;. \tag{2.36}$$

Cette équation constitue le point de départ pour les méthodes perturbatives dépendantes du temps et notamment les techniques des diagrammes de Feynman. Elle montre que l'évolution des états de Dirac est uniquement caractérisée par l'interaction. Pour cette raison, on appelle la représentation de Dirac également *représentation d'interaction.*

2.3 Fonctions de Green

Avant de développer un formalisme pour les fonctions de Green, nous donnons quelques définitions générales. Commençons avec la définition d'une fonction de Green à deux temps, causale ou retardée, pour un système à température nulle et en équilibre,

$$\begin{aligned} G^c_{AB}(t,t') &\equiv \langle\langle\, A(t);\, B(t')\,\rangle\rangle^c \\ &:= -\mathrm{i}\,\langle 0|\, T_\epsilon A(t)B(t')\,|0\rangle \\ G^{\mathrm{ret}}_{AB}(t,t') &\equiv \langle\langle\, A(t);\, B(t')\,\rangle\rangle^{\mathrm{ret}} \\ &:= -\mathrm{i}\,\Theta(t-t')\,\left\langle 0|\,[A(t),\, B(t')]_{-\epsilon}\,|0\right\rangle\,, \end{aligned} \tag{2.37}$$

où $|0\rangle$ est le fondamental exact du système et $\epsilon = \pm 1$. T_ϵ est *l'opérateur chronologique de Wick*,

$$T_\epsilon(A(t)\,B(t)) \;=\; \Theta(t-t')\,A(t)\,B(t') \,+\, \epsilon\,\Theta(t'-t)\,B(t')\,A(t)\,. \tag{2.38}$$

$A(t)$ et $B(t')$ sont des opérateurs complètement généraux, dont la dépendance en temps est donnée dans la représentation de Heisenberg. Pour un système que nous supposons conservatif,

$$\frac{\partial H}{\partial t} \;=\; 0\,, \tag{2.39}$$

elle se traduit par

$$X_H(t) = e^{\mathrm{i}Ht}\,X_S\,e^{-\mathrm{i}Ht}\,. \tag{2.40}$$

Comme nous utilisons dorénavant presque exclusivement la représentation de Heisenberg, nous nous permettons de supprimer les indices "H". Dans le cadre de la seconde quantification, $A(t)$ et $B(t')$ sont composés d'opérateurs fermioniques ou bosoniques, ou d'un mélange des deux. Pour des combinaisons paires d'opérateurs fermioniques ou pour des combinaisons bosoniques, le choix de la fonction de Green de commutateur ($\epsilon = +1$) s'impose [1], tandis que nous choisirons la fonction de Green d'anticommutateur ($\epsilon = -1$) pour des combinaisons impaires d'opérateurs fermioniques.

Généralement, A et B dépendent d'un ou de plusieurs indices. $\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle$ doit être considérée comme notation allégée pour la fonction de Green matricielle $\langle\langle\, A_\alpha;\, B_\beta\,\rangle\rangle$,

[1] Dans quelques cas, le choix contraire, $\epsilon = -1$, pour des fonctions de Green à caractère bosonique peut tout de même fournir des informations supplémentaires [29].

où les indices α et β adopteront toutes les nombres quantiques possibles. A et B peuvent également être des opérateur de spin ou des opérateurs à plusieurs composantes, par exemple $\mathbf{A} = (A_1, A_2, \ldots)$.

Nous établissons l'équation du mouvement de la fonction de Green $\langle\langle\, A(t);\, B(t')\,\rangle\rangle$ en dérivant par rapport à t:

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\langle\langle\, A(t);\, B(t')\,\rangle\rangle = \delta(t-t')\,\left\langle\, [A(t),\, B(t)]_{-\epsilon}\,\right\rangle \,+\, \langle\langle\, [A,\, H]\,(t);\, B(t')\,\rangle\rangle \qquad (2.41)$$

Cette relation, comme la plupart, est valable pour les fonctions de Green retardées et causales, et nous omettrons désormais dans les cas échéants les super-scripts correspondants. La fonction δ provient de la dérivée de la fonction de Heaviside ou de celle de l'opérateur de Wick, tandis que le commutateur apparaît suite à l'équation du mouvement pour les opérateurs de Heisenberg, l'éq. (2.30). Dans cette dernière, nous avons supposé que la dérivée partielle $\partial A/\partial t$ est nulle, car A n'est pas fonction explicite du temps. La différence entre la fonction retardée et la fonction causale vient alors uniquement des différentes conditions aux limites.

Pour un système invariant par translation dans le temps, nous sommes libres de choisir le moment auquel nous commençons nos observations. Par conséquent, les fonctions de Green à deux temps (2.37) ne dépendront que de la différence entre t et t'. Leurs transformées de Fourier sont fonction d'une seule fréquence,

$$\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega} \,=\, \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}(t-t')\;\langle\langle\, A(t);\, B(t')\,\rangle\rangle\;\mathrm{e}^{\mathrm{i}\omega(t-t')}\;. \qquad (2.42)$$

Ceci nous permet d'écrire la transformée de Fourier de l'équation du mouvement sous la forme:

$$\omega\;\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega} = \left\langle\, [A,\, B]_{-\epsilon}\,\right\rangle \,+\, \langle\langle\, [A,\, H];\, B\,\rangle\rangle_{\omega} \qquad (2.43)$$

A la droite de l'équation du mouvement apparaît une fonction de Green généralisée, $\langle\langle\, [A,\, H];\, B\,\rangle\rangle_{\omega}$. Nous verrons avec plus de détails par la suite qu'elle est composée d'une partie "libre", c'est-à-dire proportionelle à $\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega}$, et d'une partie contenant l'interaction une fois explicitement. Cette dernière partie, étant en générale constituée d'un nombre d'opérateurs plus élevé que $\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega}$, est considérée comme *fonction de Green d'ordre supérieur*.

2.3.1 Propriétés analytiques

Afin de dériver quelques propriétés utiles des fonctions de Green retardées et causales, considérons les états et énergies propres de l'hamiltonien H:

$$H\,|n\rangle \;=\; E_n\,|n\rangle \tag{2.44}$$

Les états forment une base orthonormalisée de l'espace de Hilbert:

$$\langle n|m\rangle \;=\; \delta_{nm} \qquad \text{et} \qquad \sum_n |n\rangle\langle n| \;=\; \mathbf{1} \tag{2.45}$$

La relation de fermeture nous sert à transcrire la fonction de corrélation $\langle\, A(t)B(t')\,\rangle$,

$$\langle\, A(t)B(t')\,\rangle \;=\; \sum_n \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{n0}(t-t')}\;\langle 0|\,A\,|n\rangle\,\langle n|\,B\,|0\rangle \;\;, \tag{2.46}$$

où $\omega_{n0} \;=\; E_n - E_0$ représente l'énergie d'excitation de l'état $|n\rangle$ par rapport au fondamental. Grâce à l'éq. (2.46), nous obtenons la *représentation spectrale* de la fonction de Green retardée:

$$\begin{aligned}\langle\!\langle\, A(t);\, B(t')\,\rangle\!\rangle^{\mathrm{ret}} \;=\; -\mathrm{i}\Theta(t-t')\Big\{ &\quad \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{n0}(t-t')} \quad \langle 0|\,A\,|n\rangle\,\langle n|\,B\,|0\rangle \\ &-\epsilon\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega_{n0}(t-t')} \quad \langle 0|\,B\,|n\rangle\,\langle n|\,A\,|0\rangle\Big\}\end{aligned} \tag{2.47}$$

De la même façon, on obtient pour la fonction de Green causale:

$$\begin{aligned}\langle\!\langle\, A(t);\, B(t')\,\rangle\!\rangle^{c} \;=\; &-\mathrm{i}\Theta(t-t')\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega_{n0}(t-t')}\;\langle 0|\,A\,|n\rangle\,\langle n|\,B\,|0\rangle \\ &-\mathrm{i}\epsilon\,\Theta(t'-t)\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega_{n0}(t-t')}\;\langle 0|\,B\,|n\rangle\,\langle n|\,A\,|0\rangle\end{aligned} \tag{2.48}$$

Ces équations illustrent notre constatation antérieure que les fonctions de Green ne dépendent que de la différence entre t et t'.

Nous passons à la transformée de Fourier en utilisant la représentation suivante de la fonction de Heaviside,

$$\Theta(\tau) \;=\; \int\limits_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\,\frac{\mathrm{i}\,\mathrm{e}^{-\mathrm{i}\omega\tau}}{\omega+\mathrm{i}0^+}\;, \tag{2.49}$$

et son inverse

$$\frac{\mathrm{i}}{\omega+\mathrm{i}0^+} \;=\; \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\tau\,\Theta(\tau)\,\mathrm{e}^{+\mathrm{i}\omega\tau}\;. \tag{2.50}$$

On trouve ainsi pour les fonction de Green transformées:

$$\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega}^{\mathrm{ret}\atop c} \;=\; \sum_n \left[\frac{\langle 0|\, A\,|n\rangle\,\langle n|\, B\,|0\rangle}{\omega - \omega_{n0} + \mathrm{i}0^+} \;-\epsilon\, \frac{\langle 0|\, B\,|n\rangle\,\langle n|\, A\,|0\rangle}{\omega + \omega_{n0} \pm \mathrm{i}0^+} \right] \tag{2.51}$$

Elle peuvent être conçues comme des séries de pics lorentziens infiniment étroits et centrés sur les fréquences d'excitations du système dont chacun possède un poids correspondant à l'élément de matrice qui se trouve au numérateur. Nous nous servons de l'identité de Dirac,

$$\frac{1}{\omega \pm \mathrm{i}0^+} \;=\; \mathcal{P}\frac{1}{\omega} \;\mp\; \mathrm{i}\pi\delta(\omega)\,, \tag{2.52}$$

pour intégrer la partie imaginaire de la fonction retardée sur tout l'axe des fréquences et trouvons ainsi le *théorème spectral pour les (anti-)commutateurs*:

$$\begin{aligned} \left\langle\, [A,\, B]_{-\epsilon}\, \right\rangle \;&=\; \sum_n \left[\langle 0|\, A\,|n\rangle\,\langle n|\, B\,|0\rangle \;-\epsilon\,\langle 0|\, B\,|n\rangle\,\langle n|\, A\,|0\rangle\right] \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \delta(\omega - \omega_{n0}) \\ &=\; -\frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\; \mathrm{Im}\; \langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega}^{\mathrm{ret}} \end{aligned} \tag{2.53}$$

Les fonctions de corrélation $\langle\, A\, B\,\rangle$ se calculent de façon analogue en tenant en compte que les énergies d'excitation ω_{n0} sont toujours positives. Nous intégrons la partie imaginaire de $\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega}^{\mathrm{ret}}$ sur toutes les fréquences positives. On n'obtient qu'une contribution du premier terme de (2.51), sauf pour la fréquence $\omega_{00} = 0$ qui nécessite un examen plus approfondi:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\pi} \int\limits_{0}^{\infty} \mathrm{d}\omega\; \mathrm{Im}\; \langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega}^{\mathrm{ret}} \;&=\; \sum_{n>0} \langle 0|\, A\,|n\rangle\,\langle n|\, B\,|0\rangle \int\limits_{0}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \delta(\omega - \omega_{n0}) \\ &\quad + \langle 0|\, A\,|0\rangle\,\langle 0|\, B\,|0\rangle\; (1-\epsilon) \int\limits_{0}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \delta(\omega) \end{aligned} \tag{2.54}$$

Au premier coup d'œil, l'intégrale sur la moitié du pic delta paraît choquante. Rappelons que, dans le cas présent, la fonction δ est définie comme limite d'une fonction lorentzienne. L'intégrale dans la seconde ligne se réduit alors à 1/2. En incluant le fondamental $n = 0$ dans la somme du premier terme, (2.54) devient:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\pi} \int\limits_{0}^{\infty} \mathrm{d}\omega\; \mathrm{Im}\; \langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega}^{\mathrm{ret}} \;&=\; \sum_n \langle 0|\, A\,|n\rangle\,\langle n|\, B\,|0\rangle \;-\frac{1+\epsilon}{2}\,\langle 0|\, A\,|0\rangle\,\langle 0|\, B\,|0\rangle \\ &=\; \langle\, A\, B\,\rangle \;-\frac{1+\epsilon}{2}\,\langle\, A\,\rangle\,\langle\, B\,\rangle \end{aligned} \tag{2.55}$$

Nous nous débarrassons du second terme dans le membre de droite en introduisant les opérateurs de fluctuation

$$\tilde{A} \equiv A - \langle A \rangle \qquad \text{et} \qquad \tilde{B} \equiv B - \langle B \rangle \ . \tag{2.56}$$

Ceci nous permet d'écrire le *théorème spectral sur les corrélations* sous sa forme finale:

$$\left\langle \tilde{A}\,\tilde{B} \right\rangle = -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}\omega \, \mathrm{Im} \left\langle\!\!\left\langle \tilde{A};\, \tilde{B} \right\rangle\!\!\right\rangle_\omega^{\mathrm{ret}} \tag{2.57}$$

Nous voyons à partir de l'éq. (2.51) que la partie imaginaire de la fonction de Green constitue la partie dissipative de la réponse à une perturbation, car elle nous renseigne sur la possibilité du système d'absorber une fréquence extérieure proposée. L'éq. (2.57) nous montre que c'est elle qui gouverne les fluctuation du système. Pour cela, cette fameuse relation est aussi connue sous le nom de *théorème de fluctuation-dissipation* (Pour plus de détails voir, par exemple, réf. [27]).

De manière analogue, on peut dériver un théorème de fluctuation-dissipation pour les fonctions de Green causales:

$$\begin{aligned} \langle B\,A \rangle &= \frac{\mathrm{i}\epsilon}{2\pi} \int_{\curvearrowleft} \mathrm{d}\omega \, \langle\!\langle A;\, B \rangle\!\rangle_\omega^c \\ \langle A\,B \rangle &= \frac{\mathrm{i}}{2\pi} \int_{\curvearrowright} \mathrm{d}\omega \, \langle\!\langle A;\, B \rangle\!\rangle_\omega^c \end{aligned} \tag{2.58}$$

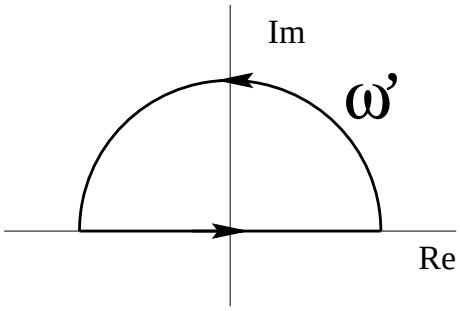
Les contours sont composés de l'axe réel et du demi-cercle supérieur ou inférieur à l'infini (pour des détails voir (2.60)). Ces relations se vérifient immédiatement à partir de la représentation spectrale des fonctions de Green (2.51) en appliquant le théorème des résidus.

2.3.2 Relations de Kramers-Kronig

Afin de dériver les relations de Kramers-Kronig, considérons l'intégrale

$$I_{\mathcal{C}}(\omega) = \oint_{\mathcal{C}} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\langle\!\langle A;\, B \rangle\!\rangle_{\omega'}^{\mathrm{ret}}}{\omega' - \omega + \mathrm{i}0^+} \ . \tag{2.59}$$

Le contour $\mathcal{C}$ est constitué par un demi cercle de rayon infini incluant tout l'axe réel et étant bouclé dans le demi-plan supérieur:



(2.60)

Cette intégrale s'évalue à zéro pour toute valeur de ω, grâce au théorème des résidus. L'intégrand est régulier dans tout le demi-plan supérieur: L'unique pôle de $1/(\omega' - \omega + \mathrm{i}0^+)$ est en dessous de l'axe réel et nous savons, par la représentation spectrale (2.51), que $\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle^{\mathrm{ret}}_{\omega'}$ est régulière dans le demi-plan supérieur.

L'éq. (2.51) nous donne également le comportement de la fonction de Green pour des grands ω:

$$\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle^{\mathrm{ret}}_{\omega} \xrightarrow{\omega\to\infty} \frac{1}{\omega}\left\langle\, [A,\, B]_{-\epsilon}\,\right\rangle \tag{2.61}$$

L'intégrand se comportant comme $1/\omega^2$ pour $\omega \to \infty$, la contribution du demi-cercle à l'intégrale est nulle.

Par conséquent, l'intégrale sur l'axe réel, qui se sépare en deux parties à l'aide de l'identité de Dirac (2.52), vaut également zéro:

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle^{\mathrm{ret}}_{\omega'}}{\omega' - \omega + \mathrm{i}0^+} = \mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle^{\mathrm{ret}}_{\omega'}}{\omega' - \omega} - \mathrm{i}\pi\,\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega} = 0 \tag{2.62}$$

Pour obtenir l'expression finale des relations de Kramers-Kronig, il suffit de regarder séparément la partie réelle et imaginaire de (2.62):

$$\begin{aligned} \mathrm{Re}\,\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle^{\mathrm{ret}}_{\omega} &= -\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\mathrm{Im}\,\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle^{\mathrm{ret}}_{\omega'}}{\omega - \omega'} \\ \mathrm{Im}\,\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle^{\mathrm{ret}}_{\omega} &= +\frac{1}{\pi}\mathcal{P}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\mathrm{Re}\,\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle^{\mathrm{ret}}_{\omega'}}{\omega - \omega'} \end{aligned} \tag{2.63}$$

Ces relations nous donnent le moyen de calculer soit la partie réelle, soit la partie imaginaire de $\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle^{\mathrm{ret}}_{\omega}$ en connaissant l'autre partie pour toutes les valeurs de ω!

2.3.3 Température finie

Le formalisme présenté dans les paragraphes précédents peut être généralisé aisément pour des systèmes à température finie.

A température nulle, le système se trouve dans le fondamental, pendant que les autres états sont vides. Les observables sont alors des valeurs moyennes sur le fondamental. En revanche, à température finie, tous les états du système sont occupés. La probabilité d'occupation est donnée par le facteur de Boltzmann

$$p(|n\rangle) \;=\; \left\langle n\right| \mathrm{e}^{-\beta\, H} \left|n\right\rangle \;=\; \mathrm{e}^{-\beta\, E_n} \tag{2.64}$$

Par conséquent, les observables sont des valeurs moyennes thermiques,

$$\langle\, A\,\rangle \;=\; \frac{1}{\Xi}\,\mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta\, H}\, A\right) \;=\; \frac{1}{\Xi}\sum_n \left\langle n\right| \mathrm{e}^{-\beta\, H}\, A \left|n\right\rangle \;, \tag{2.65}$$

où $\beta = 1/(k_B T)$ désigne la température inverse et Ξ la fonction de partition

$$\Xi \;=\; \mathrm{tr}\left(\mathrm{e}^{-\beta\, H}\right) \;. \tag{2.66}$$

Pour des phénomènes permettant des fluctuations du nombre de particules, par exemple la supraconductivité BCS [32], nous calculons les valeurs moyennes avec l'ensemble grand-canonique. Il permet au nombre de particules de fluctuer et fixe uniquement sa valeur moyenne, $\left\langle \hat{N} \right\rangle$, à l'aide d'un multiplicateur de Lagrange, μ, qui est le potentiel chimique. Pour tenir compte de ces changements, il suffit de remplacer l'hamiltonien H par $H' = H - \mu\hat{N}$ dans toutes les formules de ce paragraphe. De plus, nous adaptons la représentation de Heisenberg:

$$X(t) = e^{\mathrm{i}H't}\, X\, e^{-\mathrm{i}H't} \tag{2.67}$$

Pour l'instant, nous nous limitons au cas où le nombre de particules reste fixe, et nous choisissons l'ensemble canonique. Ces modifications pour températures finies se reportent dans la représentation spectrale (2.51),

$$\begin{aligned} \left\langle\!\left\langle\, A;\, B\,\right\rangle\!\right\rangle_{\omega}^{\mathrm{ret}\;\;c} \;&=\; \tfrac{1}{\Xi}\sum_{n,m} \;\; \langle m|\, A\,|n\rangle\, \langle n|\, B\,|m\rangle \\ &\qquad \left[\, \frac{\mathrm{e}^{-\beta E_m}}{\omega - \omega_{nm} + \mathrm{i}0^+} \;-\; \epsilon\, \frac{\mathrm{e}^{-\beta E_n}}{\omega - \omega_{nm} \pm \mathrm{i}0^+} \,\right] \;, \end{aligned} \tag{2.68}$$

où $\omega_{nm} = E_n - E_m$ dénote la différence d'énergie entre les états $|n\rangle$ et $|m\rangle$. Malgré ces changements, le théorème spectral pour les commutateurs (2.53) ne subit aucune

modification:

$$\left\langle \, [A,\, B]_{-\epsilon} \, \right\rangle \;=\; -\frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \; \mathrm{Im} \; \langle\!\langle \, A;\, B \, \rangle\!\rangle_{\omega}^{\mathrm{ret}} \tag{2.69}$$

Le théorème de fluctuation-dissipation (2.55) devient:

$$\begin{aligned} \langle \, A\, B \, \rangle \;\; &= \;\; -\frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \; \frac{\mathrm{Im} \; \langle\!\langle \, A;\, B \, \rangle\!\rangle_{\omega}^{\mathrm{ret}} \; \mathrm{e}^{\beta\omega}}{\mathrm{e}^{\beta\omega} \; - \; \epsilon} \\ &\quad + \frac{1+\epsilon}{2\,\Xi} \sum_{n,m}^{E_n = E_m} \langle m| \, A \, |n\rangle \, \langle n| \, B \, |m\rangle \; \mathrm{e}^{-\beta E_n} \end{aligned} \tag{2.70}$$

La borne inférieure de l'intégrale dans (2.55) a ainsi été remplacée par un "cutoff" plus souple, représenté par la fonction de Bose (pour $\epsilon = +1$) ou celle de Fermi (pour $\epsilon = -1$):

$$f_{\epsilon}(\omega) \;=\; \frac{1}{e^{\beta\omega} \; - \; \epsilon} \tag{2.71}$$

Dans le théorème de fluctuation-dissipation (2.70) pour commutateurs ($\epsilon = +1$) apparaît un terme supplémentaire à la seconde ligne, contenant des moyennes thermodynamiques et quantiques imbriquées. Ce terme nous empêche d'écrire (2.70) sous forme plus compacte, telle que (2.55). Généralement, son évaluation se fait en consultant la fonction de Green correspondante pour anti-commutateurs [29].

Chapitre 3

La méthode de l'Equation de Dyson

Au début de ce chapitre, nous présentons les équations du mouvement pour une fonction de Green générale. Grâce à l'équation de Dyson, nous trouvons une solution formelle pour cette fonction de Green dans laquelle apparaît un opérateur de masse. La difficulté consistera désormais à en déduire une expression utile pour ce dernier. Pour surmonter ce problème, nous proposons une approche de champ moyen généralisée qui satisfait à la règle de somme pondérée par l'énergie.

Pour le propagateur à une particule, elle nous dirige vers une théorie de Hartree-Fock, tandis que nous trouvons pour les fonctions de corrélation de paires de fermions une approximation des phases aléatoires étendue. Elle nous amène vers un système d'équations intégrales couplées que nous chercherons à résoudre de façon self-consistante, d'où le nom SCRPA. Pour le propagateur particule-trou nous insistons sur les points communs et les différences entre la SCRPA et d'autres théories du type RPA. A la fin du chapitre, nous utiliserons l'expérience acquise lors de l'étude des fonctions de Green particule-trou pour perfectionner la théorie du propagateur à une particule. Nous dériverons une expression pour la self-énergie qui tient compte des corrélations particule-trou tout en restant conforme à notre RPA améliorée.

3.1 Les équations du mouvement et l'Equation de Dyson

Dans le chapitre 2, nous avons vu qu'une fonction de Green $\langle\langle\, A(t);\, B(t')\,\rangle\rangle$ est couplée, par son équation du mouvement, à une autre fonction de Green d'ordre supérieur:

$$\mathrm{i}\frac{\partial}{\partial t}\,\langle\langle\, A(t);\, B(t')\,\rangle\rangle = \delta(t-t')\,\left\langle\, [A(t),\, B(t)]_{-\epsilon}\,\right\rangle \,+\, \langle\langle\, [A,\, H]\,(t);\, B(t')\,\rangle\rangle \qquad (3.1)$$

Bien entendu, nous avons la possibilité d'établir une seconde équation du mouvement pour la fonction de Green supérieure $\langle\langle\, [A,\, H]\,(t);\, B(t')\,\rangle\rangle$. Cette procédure nous amènera à une série infinie d'équations du mouvement que nous chercherons à découpler à un moment donné, afin de pouvoir déterminer $\langle\langle\, A(t);\, B(t')\,\rangle\rangle$. Naturellement, comme pour toute approximation, ce découplage doit être motivé par des raisons physiques.

Par la suite, nous développerons une méthode systématique pour découpler cette série d'équations du mouvement dans le cas où A et B sont conjugués hermitiques, c.à.d. $B \equiv A^{+}$. Nous commençons avec la transformée de Fourier de l'éq. du mouvement (3.1):

$$\omega\,\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega} \,=\, \left\langle\, [A,\, B]_{-\epsilon}\,\right\rangle \,+\, \langle\langle\, [A,\, H];\, B\,\rangle\rangle_{\omega} \qquad (3.2)$$

En supposant que l'inverse de $\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega}$ existe, nous définissons "l'hamiltonien" effectif $\mathcal{H}_{AB}(\omega)$:

$$\mathcal{H}_{AB}(\omega) \,:=\, \langle\langle\, [A,\, H];\, B\,\rangle\rangle_{\omega}\;\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega}^{-1} \qquad (3.3)$$

Nous introduisons la matrice norme,

$$\mathcal{N} \,:=\, \left\langle\, [A,\, B]_{-\epsilon}\,\right\rangle \,, \qquad (3.4)$$

et réécrivons l'éq. du mouvement sous forme d'*Equation de Dyson*:

$$\omega\,\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega} \,=\, \mathcal{N} \,+\, \mathcal{H}_{AB}(\omega)\,\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_{\omega} \qquad (3.5)$$

Nous insistons encore une fois sur le fait qu'il s'agit généralement de fonctions de Green *matricielles*. Toutes les opérations, telles que les multiplications dans les membres de droite des éqs. (3.3) et (3.5), doivent ainsi être interprétées comme

des opérations matricielles. Grâce à l'introduction de l'hamiltonien effectif, nous pouvons résoudre formellement l'éq. de Dyson:

$$\langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_\omega \;=\; \Big\{\omega \;-\; \mathcal{H}_{AB}(\omega)\Big\}^{-1}\,\mathcal{N} \tag{3.6}$$

Le problème consiste désormais à trouver une possibilité pour déterminer $\mathcal{H}_{AB}(\omega)$. Afin de dériver une expression plus explicite pour l'hamiltonien effectif, nous reportons l'inverse de la solution formelle (3.6) dans (3.3),

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{AB}(\omega) \;&=\; \langle\langle\, [A,\, H];\, B\,\rangle\rangle_\omega\;\mathcal{N}^{-1}\,\Big\{\omega \;-\; \mathcal{H}_{AB}(\omega)\Big\} \\ &\equiv\qquad\quad \mathcal{H}^{\mathrm{I}}_{AB}(\omega) \qquad\quad -\;\; \mathcal{H}^{\mathrm{II}}_{AB}(\omega)\;, \end{aligned} \tag{3.7}$$

où nous posons

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{\mathrm{I}}_{AB}(\omega) \;&:=\; \langle\langle\, [A,\, H];\, B\,\rangle\rangle_\omega\,\mathcal{N}^{-1}\,\omega\;, \\ \mathcal{H}^{\mathrm{II}}_{AB}(\omega) \;&:=\; \langle\langle\, [A,\, H];\, B\,\rangle\rangle_\omega\,\mathcal{N}^{-1}\,\mathcal{H}_{AB}(\omega)\;. \end{aligned} \tag{3.8}$$

La première partie, $\mathcal{H}^{\mathrm{I}}_{AB}(\omega)$, peut être calculée à l'aide de l'équation du mouvement pour la fonction de Green supérieure $\langle\langle\, [A,\, H];\, B\,\rangle\rangle_\omega$. Cette fois, nous établissons l'équation du mouvement "par la droite", c.à.d. nous dérivons $\langle\langle\, [A,\, H]\,(t);\, B(t')\,\rangle\rangle$ par rapport à t' au lieu de t:

$$\begin{aligned} &\langle\langle\, [A,\, H]\,(t);\, B(t')\,\rangle\rangle_\omega \left(-\mathrm{i}\frac{\overleftarrow{\partial}}{\partial t'}\right) \\ &\quad=\; \delta(t-t')\,\Big\langle\, [[A,\, H]\,(t),\, B(t)]_{-\epsilon}\,\Big\rangle \;+\; \langle\langle\, [A,\, H]\,(t);\, [H,\, B]\,(t')\,\rangle\rangle_\omega \end{aligned} \tag{3.9}$$

Après transformation de Fourier, on obtient:

$$\langle\langle\, [A,\, H];\, B\,\rangle\rangle_\omega\;\omega \;=\; \Big\langle\, [[A,\, H],\, B]_{-\epsilon}\,\Big\rangle \;+\; \langle\langle\, [A,\, H];\, [H,\, B]\,\rangle\rangle_\omega \tag{3.10}$$

C'est à ce moment que notre hypothèse $B \equiv A^+$ devient importante. La seconde partie de l'hamiltonien effectif, $\mathcal{H}^{\mathrm{II}}_{AB}(\omega)$, ne contient que des contributions *réductibles*. Ceci signifie que le diagramme de Feynman de $\mathcal{H}^{\mathrm{II}}_{AB}(\omega)$ peut être décomposé en deux parties indépendantes en coupant un "propagateur libre". Ce dernier est constitué de N lignes de fermions (bosons), où N correspond au nombre d'opérateurs de création ou annihilation présents dans A. De plus, on peut démontrer que l'unique fonction de $\mathcal{H}^{\mathrm{II}}_{AB}(\omega)$ est d'annuler *toutes* les contribution réductibles de $\mathcal{H}^{\mathrm{I}}_{AB}(\omega)$ (pour plus de détails voir réf. [33]). Puisque le double commutateur

$\left\langle\, [[A,\, H],\, B]_{-\epsilon} \,\right\rangle$ n'est constitué que de contributions réductibles, nous nous contentons de mettre l'indice "irréductible" à la fonction de Green à la droite de (3.10), et écrivons l'expression finale pour l'hamiltonien effectif:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{AB}(\omega) &= \left\{ \left\langle\, [[A,\, H],\, B]_{-\epsilon} \,\right\rangle \;+\; \langle\!\langle\, [A,\, H];\, [H,\, B] \,\rangle\!\rangle_{\omega}^{\mathrm{irr}} \right\} \mathcal{N}^{-1} \\ &\equiv \qquad \mathcal{H}_{AB}^{\mathrm{SC}} \qquad + \qquad \mathcal{H}_{AB}^{\mathrm{res}}(\omega) \end{aligned} \tag{3.11}$$

L'éq. (3.11) montre que l'hamiltonien effectif (3.11) est composé d'une partie instantanée et d'une partie dynamique ou résonnante. Cette dernière est à l'origine des potentiels imaginaires ou dépendants en fréquence qui interviennent dans les processus de diffusion.

Une manière alternative pour accéder à l'hamiltonien effectif est de reporter l'équation du mouvement pour la fonction de Green supérieure, (3.10), directement dans l'éq. du mouvement pour la première fonction de Green, (3.2). Après division par ω, nous obtenons:

$$\begin{aligned} \langle\!\langle\, A;\, B \,\rangle\!\rangle_{\omega} &= \frac{\mathcal{N}}{\omega} \\ &+ \frac{\mathcal{N}}{\omega} \underbrace{\mathcal{N}^{-1} \left\{ \left\langle\, [[A,\, H],\, B]_{-\epsilon} \,\right\rangle \;+\; \langle\!\langle\, [A,\, H];\, [H,\, B] \,\rangle\!\rangle_{\omega} \right\} \mathcal{N}^{-1}}_{\mathcal{T}_{AB}(\omega)} \frac{\mathcal{N}}{\omega} \end{aligned} \tag{3.12}$$

En interprétant $\mathcal{N}/\omega$ comme propagateur "libre", nous reconnaissons en (3.12) l'*équation de la matrice* $\mathcal{T}$ pour la fonction de Green $\langle\!\langle\, A;\, B \,\rangle\!\rangle_{\omega}$. Nous avons ainsi immédiatement accès à l'opérateur de masse du système, qui n'est autre que la partie irréductible de la matrice $T_{AB}(\omega)$. Nous terminons cette analyse avec une petite rectification: Le commutateur $[A,\, H]$ contient généralement une partie proportionelle à l'opérateur A lui-même provenant de l'hamiltonien sans interaction, H_0:

$$[A,\, H_0] \;=\; \Omega_0\, A \tag{3.13}$$

Lorsqu'on parle de propagateur libre, on pense normalement à une expression dans laquelle Ω_0 est déjà inclu:

$$\langle\!\langle\, A;\, B \,\rangle\!\rangle_{\omega}^{0} \;=\; \{\omega - \Omega_0\}^{-1}\, \mathcal{N} \tag{3.14}$$

Ceci nous permet de réécrire l'éq. de Dyson (3.5),

$$\langle\!\langle\, A;\, B \,\rangle\!\rangle_{\omega} \;=\; \langle\!\langle\, A;\, B \,\rangle\!\rangle_{\omega}^{0} \;+\; \langle\!\langle\, A;\, B \,\rangle\!\rangle_{\omega}^{0}\, \mathcal{K}_{AB}(\omega)\, \langle\!\langle\, A;\, B \,\rangle\!\rangle_{\omega} \;, \tag{3.15}$$

dont le noyau intégral $\mathcal{K}_{AB}(\omega)$ peut être considéré comme l'opérateur de masse. En rapprochant les éqs. (3.5) et (3.15), nous voyons que l'hamiltonien effectif est constitué d'une partie libre et de l'opérateur de masse,

$$\mathcal{H}_{AB}(\omega) \;=\; \Omega_0 \;+\; \mathcal{N}\,\mathcal{K}_{AB}(\omega) \tag{3.16}$$

En suivant un cheminement complètement analogue aux éqs. (3.5-3.12), nous adaptons l'équation de la matrice $\mathcal{T}$:

$$\langle\!\langle\, A;\, B\,\rangle\!\rangle_\omega \;=\; \langle\!\langle\, A;\, B\,\rangle\!\rangle^0_\omega \;+\; \langle\!\langle\, A;\, B\,\rangle\!\rangle^0_\omega\; \mathcal{T}_{AB}(\omega)\; \langle\!\langle\, A;\, B\,\rangle\!\rangle^0_\omega \tag{3.17}$$

Dans la nouvelle matrice $\mathcal{T}$, l'interaction V prend la place de l'hamiltonien H:

$$\mathcal{T}_{AB}(\omega) \;=\; \mathcal{N}^{-1}\Big\{\Big\langle\, [[A,\, V],\, B]_{-\epsilon}\,\Big\rangle \;+\; \langle\!\langle\, [A,\, V];\, [V,\, B]\,\rangle\!\rangle_\omega\Big\}\,\mathcal{N}^{-1} \tag{3.18}$$

Finalement, la partie irréductible de la matrice $\mathcal{T}$ peut être identifié à l'opérateur de masse:

$$\mathcal{K}_{AB}(\omega) \;\equiv\; \mathcal{T}^{\rm irr}_{AB}(\omega) \tag{3.19}$$

3.2 Le propagateur à une particule

Dans ce paragraphe, nous traitons à titre d'exemple, le propagateur à une particule afin d'approfondir les arguments du paragraphe précédant.

Considérons un système de fermions non relativistes avec une interaction à deux particules, dont le hamiltonien est donné par:

$$H \;=\; \sum_{12} t_{12}\, a_1^+ a_2 \;+\; \frac{1}{4}\sum_{1234} \bar{v}_{1234}\, a_1^+ a_2^+ a_4 a_3 \tag{3.20}$$

Les opérateurs a_1 et a_1^+, respectivement, créent et annihilent un fermion. Ils obéissent aux règles d'anticommutation habituelles,

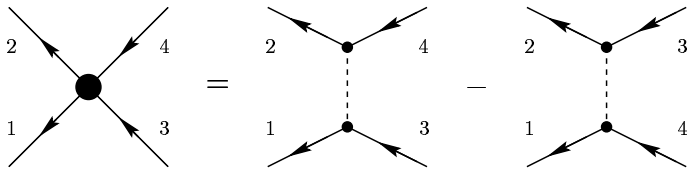
$$\Big[a_1,\, a_{1'}^+\Big] \;=\; \delta_{11'}\;, \tag{3.21}$$

où les indices "1" et "1′" résument l'ensemble des nombres quantiques.

L'énergie cinétique, dont les éléments de matrice sont designés par t_{12}, peut être assimilée à l'hamiltonien libre, H_0. Les éléments de la matrice d'interaction ont été

antisymétrisés, ce que nous indiquons par une ligne de vertex ramenée à un point:

$$\bar{v}_{1234} \;=\; v_{1234} \;-\; v_{1243}$$



(3.22)

Cette notation facilite le traitement des termes d'échange, car elle contient en même temps les termes de Hartree et de Fock. Dans un système homogène, l'énergie cinétique est diagonale en impulsion

$$t_{kk'} \;=\; \delta_{kk'}\,\varepsilon_k \;, \tag{3.23}$$

où k est une abréviation pour l'impulsion $\mathbf{k}$ et d'autres nombres quantiques, par exemple le spin.

Passons à l'examen du propagateur à une particule, $\left\langle\!\left\langle\, a_k;\, a_{k'}^+ \,\right\rangle\!\right\rangle_\omega$. Les opérateurs a_k et a_k^+ couplent l'espace de Hilbert à N particules à celui à $N-1$ ou $N+1$ particules. Par le développement de Lehmann (2.51) on voit qu'il faut faire la différence entre ces deux cas:

$$\omega_{n0} \;=\; \begin{cases} \xi_{n0}^{N+1} \;+\; \left(E_0^{N+1} - E_0^N\right) & \text{pour } |n\rangle \in \mathcal{H}^{N+1} \\ \xi_{n0}^{N-1} \;-\; \left(E_0^N - E_0^{N-1}\right) & \text{pour } |n\rangle \in \mathcal{H}^{N-1} \end{cases} \tag{3.24}$$

$\xi_{n0}^N = E_n^N - E_0^N$ désigne l'énergie d'excitation par rapport au fondamental ayant le même nombre de particules. En supposant que l'énergie du fondamental croît de façon linéaire avec le nombre de particules N, nous définissons le potentiel chimique:

$$E_0^{N+1} - E_0^N \;=\; E_0^N - E_0^{N-1} \;=\; \mu \tag{3.25}$$

Cette relation est juste à l'ordre $1/N$. Comme nous avons vu au chapitre 2.3.3, cela nous incite à traiter la fonction de Green à une particule dans l'ensemble grand-canonique. En remplaçant l'hamiltonien H par $H' = H - \mu \sum_k a_k^+ a_k$, l'éq. du mouvement (3.2) se traduit par:

$$[\omega - (\varepsilon_k - \mu)] \left\langle\!\left\langle\, a_k;\, a_{k'}^+ \,\right\rangle\!\right\rangle_\omega \;=\; \delta_{kk'} + \frac{1}{2}\,\bar{v}_{kq_2q_3q_4} \left\langle\!\left\langle\, a_{q_2}^+\, a_{q_4}\, a_{q_3};\, a_{k'}^+ \,\right\rangle\!\right\rangle_\omega \tag{3.26}$$

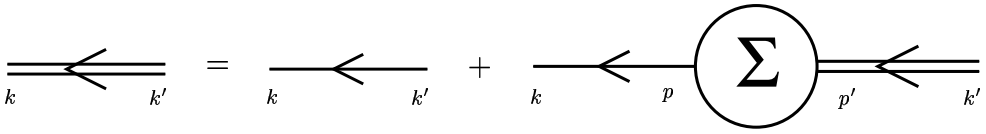
Travaillant avec des opérateurs fermioniques (cf. l'éq. (3.21)), nous avons choisi la fonction de Green d'anticommutateur, $\epsilon = -1$. Comme d'habitude, la convention d'Einstein implique une sommation sur tous les indices q_i.

En analogie avec l'éq. (3.3), nous supposons une factorisation de la fonction de Green supérieure:

$$\frac{1}{2}\,\bar{v}_{pq_2q_3q_4}\,\left\langle\!\left\langle\, a^+_{q_2}\,a_{q_4}\,a_{q_3};\; a^+_{k'}\,\right\rangle\!\right\rangle_\omega \;=\; \Sigma_{pp'}(\omega)\,\left\langle\!\left\langle\, a_{p'};\; a^+_{k'}\,\right\rangle\!\right\rangle_\omega \tag{3.27}$$

La self-énergie $\Sigma_{pp'}(\omega)$ ainsi introduite joue le rôle du noyau intégral $\mathcal{K}(\omega)$. Elle nous permet d'écrire l'éq. du mouvement sous forme d'éq. de Dyson

$$\left\langle\!\left\langle\, a_k;\; a^+_{k'}\,\right\rangle\!\right\rangle_\omega \;=\; \left\langle\!\left\langle\, a_k;\; a^+_{k'}\,\right\rangle\!\right\rangle^0_\omega \;+\; \left\langle\!\left\langle\, a_k;\; a^+_{p}\,\right\rangle\!\right\rangle^0_\omega\,\Sigma_{pp'}(\omega)\,\left\langle\!\left\langle\, a_{p'};\; a^+_{k'}\,\right\rangle\!\right\rangle_\omega$$



(3.28)

où

$$\left\langle\!\left\langle\, a_k;\; a^+_{k'}\,\right\rangle\!\right\rangle^0_\omega \;=\; \frac{\delta_{kk'}}{\omega \;-\; (\varepsilon_k - \mu) \pm \mathrm{i}0^+} \tag{3.29}$$

désigne le propagateur libre. Le signe de la partie imaginaire infinitésimale est déterminé par les conditions aux limites de la fonction de Green. Il est positif pour le propagateur retardé. Pour le propagateur causal, il est positif au-dessus de la surface de Fermi ($\varepsilon_k > \mu = E_F$) et negatif en dessous ($\varepsilon_k < \mu$).

3.2.1 L'approximation Hartree-Fock

Pour nous faire une première idée des termes contribuant à la self-énergie, nous appliquons l'approximation suivante dans le membre de gauche de la fonction de Green supérieure, $\left\langle\!\left\langle\, a^+_{q_2}\,a_{q_4}\,a_{q_3};\; a^+_{k'}\,\right\rangle\!\right\rangle_\omega$:

$$\begin{aligned} a^+_{q_2}\,a_{q_4}\,a_{q_3} \;&\approx\; \left\langle\, a^+_{q_2}\,a_{q_4}\,\right\rangle\,a_{q_3} \;-\; \left\langle\, a^+_{q_2}\,a_{q_3}\,\right\rangle\,a_{q_4} \\ &=\; n_{q_2}\,\left(\delta_{q_2q_4}a_{q_3} \;-\; \delta_{q_2q_3}a_{q_4}\right) \end{aligned} \tag{3.30}$$

Ce découplage est connu sous le nom d'*approximation Hartree-Fock*. Dans la seconde ligne nous avons utilisé la conservation d'impulsion et introduit le nombre d'occupation $n_k = \left\langle\, a^+_k\,a_k\,\right\rangle$.

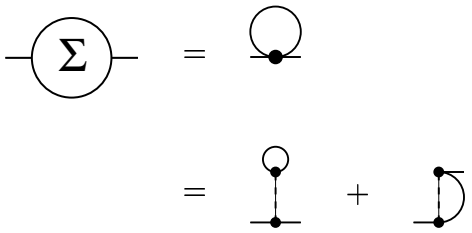
Grâce à cette approximation, l'éq. du mouvement (3.26) se transforme immédiatement en éq. de Dyson:

$$\left\langle\!\left\langle\, a_k;\; a^+_{k'}\,\right\rangle\!\right\rangle^{\mathrm{HF}}_\omega \;=\; \left\langle\!\left\langle\, a_k;\; a^+_{k'}\,\right\rangle\!\right\rangle^0_\omega \;+\; \left\langle\!\left\langle\, a_k;\; a^+_{p}\,\right\rangle\!\right\rangle^0_\omega\,\bar{v}_{pqpq}\,n_q\,\left\langle\!\left\langle\, a_{p'};\; a^+_{k'}\,\right\rangle\!\right\rangle^{\mathrm{HF}}_\omega \tag{3.31}$$

En comparant (3.31) et (3.28), nous identifions la self-énergie en approximation Hartree-Fock:

$$\Sigma^{\rm HF}_{pp'} \;=\; \delta_{pp'} \sum_q \bar{v}_{pqpq}\, n_q \tag{3.32}$$

Son graphe de Feynman est une simple boucle comprenant le terme classique ("de Hartree") et celui d'échange ("de Fock"):



(3.33)

3.2.2 La self-énergie exacte

Nous analysons maintenant l'expression exacte pour la self-énergie que nous avons dérivée au chapitre 3.1. Pour le propagateur à une particule, la matrice norme est la matrice identité:

$$\mathcal{N}_{kk'} \;=\; \left\langle \left[a_k,\, a^+_{k'}\right]_+ \right\rangle \;=\; \delta_{kk'} \tag{3.34}$$

Avec cette information, nous adaptons les éqs. (3.18) et (3.19):

$$\begin{aligned} \Sigma_{pp'}(\omega) \;&=\; \left\langle \left[[a_p,\, V],\, a^+_{p'}\right]_+ \right\rangle \;+\; \left\langle\!\!\left\langle [a_p,\, V];\, \left[V,\, a^+_{p'}\right] \right\rangle\!\!\right\rangle^{\rm irr}_{\omega} \\ &=\; \delta_{pp'} \sum_q \bar{v}_{pqpq}\, n_q \;+\; \tfrac{1}{4}\, \bar{v}_{pq_2q_3q_4} \left\langle\!\!\left\langle a^+_{q_2}\, a_{q_4}\, a_{q_3};\, a^+_{r_3}\, a^+_{r_4}\, a_{r_2} \right\rangle\!\!\right\rangle^{\rm irr}_{\omega} \bar{v}_{r_4r_3r_2p'} \end{aligned} \tag{3.35}$$

La première contribution, venant du double commutateur $\left\langle \left[[a_p,\, V],\, a^+_{p'}\right]_+ \right\rangle$, nous fournit la self-énergie en approximation Hartree-Fock. Le second terme contient la partie irréductible d'une fonction de Green à deux particules et un trou, dont le diagramme est représenté par un rectangle hachuré:



(3.36)

C'est en appliquant ce schéma à des fonctions de Green de plusieurs particules que nous découvrirons une approximation statique pour l'opérateur de masse $\mathcal{K}$ qui sera une généralisation directe de la self-énergie Hartree-Fock.

3.3 L'approximation des phases aléatoires self-consistante (SCRPA)

Nous avons vu au chapitre 3.1 que l'hamiltonien effectif d'une fonction de Green complètement générale est composé d'une partie instantanée, indépendante de l'énergie, et d'une partie dynamique, qui, elle, dépend de l'énergie. Dans le paragraphe précédent, nous nous sommes convaincus que, en analysant cette partie instantanée pour la fonction de Green à une particule, nous retrouvons bien le propagateur Hartree-Fock.

Ce schéma se transporte aisément aux fonctions de Green générales: En négligeant la partie résonnante de l'hamiltonien effectif dans un premier temps, nous pouvons résoudre le problème au niveau d'une approximation Hartree-Fock généralisée. Celle-ci nous fournit une première idée de la fonction de Green.

Nous pouvons ensuite améliorer cette approximation en établissant une équation de Dyson pour la fonction de Green exacte, dans laquelle la fonction de Green à l'approximation instantanée jouera le rôle d'un "propagateur libre". Elle contient toutes les contributions statiques. Le noyau intégral de cette équation de Dyson se limitera alors aux contributions exclusivement dynamiques. Nous aurons ainsi la possibilité de trouver le propagateur exact en deux étapes: d'abord, nous calculerons le propagateur à l'approximation instantanée, ce qui, ensuite, nous servira à attaquer le problème dynamique du propagateur exact.

Pour l'instant, limitons-nous aux contributions instantanées. Les bases de cette approximation ont déjà été décrites dans les articles de Rowe [12] et, plus tard, de Roth [13]. Dans un passé plus récent, elle a été perfectionnée et mise en œuvre indépendamment par différents groupes [15, 16, 17, 18, 20]. Cette approximation est connue dans la littérature anglophone sous le nom de "*Cluster Mean Field*" (CMF) [16] ou "*Self-Consistent Random Phase Approximation*" (SCRPA) [15, 17]. Ce dernier nom tire son origine de l'application du formalisme aux fonctions de Green à deux particules, qui, comme nous le verrons par la suite, nous conduira à une approximation des phases aléatoires self-consistante. Pour cela, nous fixons "SCRPA" comme abréviation pour notre méthode quels que soient les opérateurs constituant la fonction de Green.

Par analogie avec la fonction de Green à une particule, nous définissons une approximation de champ moyen généralisée pour le propagateur à N particules en

reportant la partie instantanée de l'hamiltonien effectif, $\mathcal{H}^{\rm SC}_{AB}$, dans la solution formelle de l'éq. de Dyson (3.6):

$$\begin{aligned} \langle\!\langle\, A;\, B\,\rangle\!\rangle^{\rm SC}_{\omega} &= \left\{\omega - \mathcal{H}^{\rm SC}_{AB}\right\}^{-1} \mathcal{N} \\ &= \left\{\omega - \left\langle\, [[A,\, H],\, B]_{-\epsilon}\,\right\rangle \mathcal{N}^{-1}\right\}^{-1} \mathcal{N} \end{aligned} \tag{3.37}$$

La fonction de Green SCRPA, définie par (3.37), dépend de plusieurs valeurs moyennes, qu'on cherchera à calculer de manière self-consistante. Cette tâche est possible, grâce au théorème spectral. Nous rappelons sa forme à température nulle, décrite par les éqs. (2.53) et (2.57):

$$\begin{aligned} \langle\, A\, B\,\rangle^{\rm c} &\equiv \langle\, A\, B\,\rangle \;-\; \langle\, A\,\rangle\, \langle\, B\,\rangle \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} {\rm d}\omega\ {\rm Im}\ \langle\!\langle\, A;\, B\,\rangle\!\rangle^{\rm ret}_{\omega} \\ \left\langle\, [A,\, B]_{-\epsilon}\,\right\rangle &= -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} {\rm d}\omega\ {\rm Im}\ \langle\!\langle\, A;\, B\,\rangle\!\rangle^{\rm ret}_{\omega} \end{aligned} \tag{3.38}$$

Analysons le nombre maximal d'opérateurs figurant dans un terme du double commutateur $[[A,\, H],\, B]_{-\epsilon}$: pour une fonction de Green à N particules, A et B sont composés de N opérateurs chacun. Il faut ajouter 4 opérateurs provenant de l'interaction à deux particules. Pour chaque commutateur, il y a au moins deux opérateurs qui disparaissent. En tout, ça fait au maximum $2\,N + 4 - 2 \cdot 2 = 2\,N$ opérateurs par terme. Toutes ces valeurs moyennes se calculent alors par le théorème de fluctuation-dissipation (3.38). La matrice norme s'obtient par la seconde de ces équations. L'hamiltonien effectif entier se détermine ainsi à partir de la fonction de Green SCRPA. Le système des éqs. (3.37) et (3.38) est fermé et peut être résolu de manière self-consistante.

3.3.1 Règle de somme pondérée par l'énergie

La règle de somme f exprime la valeur moyenne $\left\langle\, [[A,\, H],\, B]_{-\epsilon}\,\right\rangle$ par le biais d'une intégrale de la partie imaginaire de la fonction de Green $\langle\!\langle\, A;\, B\,\rangle\!\rangle_{\omega}$ pondérée sur toutes les énergies.

Considérons le théorème de fluctuation-dissipation pour la fonction de Green

supérieure $\langle\langle\, [A,\, H];\, B\,\rangle\rangle_\omega$:

$$\left\langle\, [[A,\, H],\, B]_{-\epsilon}\,\right\rangle \;=\; -\frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\ \mathrm{Im}\ \langle\langle\, [A,\, H];\, B\,\rangle\rangle_\omega^{\mathrm{ret}} \tag{3.39}$$

La fonction de Green sous l'intégrale, dans le membre de droite de cette équation, peut être remplacée, grâce à l'éq. du mouvement (3.2). Si nous supposons la matrice norme réelle, nous obtenons directement la *règle de somme pondérée par l'énergie* [27, 30, 33, 34]:

$$\left\langle\, [[A,\, H],\, B]_{-\epsilon}\,\right\rangle \;=\; -\frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\ \omega\ \mathrm{Im}\ \langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_\omega^{\mathrm{ret}} \tag{3.40}$$

Parfois, la structure des opérateurs A et B permet une évaluation analytique de la valeur moyenne $\left\langle\, [[A,\, H],\, B]_{-\epsilon}\,\right\rangle$. Dans ce cas, l'éq. (3.40) pose une condition rigoureuse à la fonction de Green.

Nous montrons par la suite que la fonction de Green SCRPA correspond à cette exigence. Il résulte de l'éq. (3.37) qu'elle satisfait à l'éq. du mouvement

$$\omega\ \langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_\omega^{\mathrm{SC}} = \mathcal{N} \;+\; \left\langle\, [[A,\, H],\, B]_{-\epsilon}\,\right\rangle \mathcal{N}^{-1}\ \langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_\omega^{\mathrm{SC}} \tag{3.41}$$

au lieu de (3.2). Reportons (3.41) dans (3.40): comme d'habitude, la matrice norme et le double commutateur sont réels et ne dépendent pas de ω. Reste à calculer l'intégrale de $\mathrm{Im}\ \langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_\omega^{\mathrm{SC}}$ qui, par le théorème spectral (3.38), donne la matrice norme:

$$-\frac{1}{\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\ \omega\ \mathrm{Im}\ \langle\langle\, A;\, B\,\rangle\rangle_\omega^{\mathrm{SC,ret}} \;=\; \left\langle\, [[A,\, H],\, B]_{-\epsilon}\,\right\rangle \mathcal{N}^{-1}\mathcal{N} \tag{3.42}$$

En rapprochant (3.42) à (3.40) nous constatons que la fonction de Green SCRPA satisfait à la règle de somme pondérée par l'énergie, grâce au double commutateur qui apparaît dans son hamiltonien effectif.

3.4 Le propagateur particule-trou

Dans ce chapitre, nous appliquons la SCRPA à un exemple non trivial: le propagateur particule-trou dans un système fermionique avec une interaction à deux particules. Nous verrons que la fonction de Green ainsi obtenue sera une généralisation directe de celle de l'approximation des phases aléatoires.

Nous considérons la fonction de Green particule-trou $\left\langle\!\left\langle\, a_p^+\, a_k;\, a_{k'}^+\, a_{p'}\,\right\rangle\!\right\rangle_\omega^{\rm ret}$ dans un système fermionique dont l'hamiltonien est défini par l'éq. (3.20). Cette fois, les opérateurs A et B sont des paires de fermions; pour cela, nous posons $\epsilon = +1$, c.à.d. la fonction de Green de commutateurs. Dans un système homogène, la matrice norme est diagonale

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{kpk'p'} &\equiv \left\langle \left[a_p^+\, a_k,\, a_{k'}^+\, a_{p'} \right]_- \right\rangle \\ &= \delta_{kk'}\, \delta_{pp'}\, (n_p - n_k) \quad , \end{aligned} \tag{3.43}$$

Evaluons l'hamiltonien effectif de la SCRPA, défini par l'éq. (3.11), en nous servant de la convention d'Einstein:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{\rm SC}_{kpk'p'} &\equiv \left\langle \left[\left[a_p^+\, a_k,\, H \right],\, a_{k'}^+\, a_{p'} \right]_- \right\rangle \cdot (n_{p'} - n_{k'})^{-1} \\ &= \delta_{kk'}\, \delta_{pp'}\, (e_k - e_p) + (n_p - n_k)\, \bar{v}_{p'kk'p} \\ &\quad + \Big[\tfrac{1}{2}\, \delta_{pp'}\, \bar{v}_{kq_2q_3q_4} \left\langle a_{k'}^+ a_{q_2}^+ a_{q_3} a_{q_4} \right\rangle^{\rm c} + \tfrac{1}{2}\, \delta_{kk'}\, \bar{v}_{q_1q_2q_3p} \left\langle a_{q_1}^+ a_{q_2}^+ a_{q_3} a_{p'} \right\rangle^{\rm c} \\ &\qquad + \tfrac{1}{2}\, \bar{v}_{p'kq_3q_4} \left\langle a_{k'}^+ a_p^+ a_{q_3} a_{q_4} \right\rangle^{\rm c} + \tfrac{1}{2}\, \bar{v}_{q_1q_2pk'} \left\langle a_{q_1}^+ a_{q_2}^+ a_k a_{p'} \right\rangle^{\rm c} \\ &\qquad - \bar{v}_{kq_2q_3k'} \left\langle a_p^+ a_{q_2}^+ a_{q_3} a_{p'} \right\rangle^{\rm c} - \bar{v}_{p'q_2q_3p} \left\langle a_{k'}^+ a_{q_2}^+ a_{q_3} a_k \right\rangle^{\rm c} \Big] \\ &\quad \cdot (n_{p'} - n_{k'})^{-1} \quad , \end{aligned} \tag{3.44}$$

Dans cette expression, nous avons introduit de nouvelles énergies à une particule qui incluent les corrections Hartree-Fock pour la self-énergie (3.32):

$$e_k = \varepsilon_k + \bar{v}_{kqkq}\, n_q \ , \tag{3.45}$$

Nous verrons plus loin que le second terme dans l'éq. (3.44), $(n_p - n_k)\ \bar{v}_{p'kk'p}$, nous mènera vers une théorie qui ressemble à une approximation des phases aléatoires. En revanche, le terme entre crochets est constitué exclusivement de fonctions de corrélation dont on ne tient pas compte dans les théories RPA habituelles:

$$\left\langle a_{q_1}^+ a_{q_2}^+ a_{q_3} a_{q_4} \right\rangle^{\rm c} \equiv \left\langle a_{q_1}^+ a_{q_2}^+ a_{q_3} a_{q_4} \right\rangle - \left[\left\langle a_{q_1}^+ a_{q_4} \right\rangle \left\langle a_{q_2}^+ a_{q_3} \right\rangle - \left\langle a_{q_1}^+ a_{q_3} \right\rangle \left\langle a_{q_2}^+ a_{q_4} \right\rangle \right] \tag{3.46}$$

L'importance de ces fonctions de corrélation a été soulignée par Kubo [35] qui les appela "*cumulants*" ou "moyennes connectées". Cette dernière expression tire son origine des diagrammes de Feynman, comme nous allons le voir par la suite.

D'après la définition (3.37), nous obtenons la fonction de Green SCRPA

$$\mathcal{G}^{\rm SC}_{kpk'p'}(\omega) \equiv \left\langle\!\left\langle\, a_p^+\, a_k;\, a_{k'}^+\, a_{p'}\,\right\rangle\!\right\rangle_\omega^{\rm SC} \tag{3.47}$$

en inversant la matrice

$$\left[\omega - \mathcal{H}^{\rm SC}_{kpk'p'}\right] \ , \tag{3.48}$$

où nous comprenons par *inversion* d'une "matrice" à quatre indices:

$$A_{kpk''p''}\ \left(A^{-1}\right)_{k''p''k'p'} \ = \ \delta_{kk'}\delta_{pp'} \tag{3.49}$$

Dès que nous avons déterminé la fonction de Green nous pouvons évaluer toutes les valeurs moyennes dans l'hamiltonien effectif (3.44) et dans la matrice norme (3.43), grâce au théorème spectral (3.38).

Remarquons que les fonctions de corrélation $\left\langle\, a^+_{q_1}a^+_{q_2}a_{q_3}a_{q_4}\,\right\rangle^{\rm c}$ paraissant dans l'hamiltonien effectif (3.44) ne sont pas tout à fait les mêmes que celles que nous sommes capables de calculer par le théorème de fluctuation-dissipation. Un coup d'œil à l'éq. (3.38) montre que ces dernières sont définies par

$$\left\langle\, (a^+_{q_1}a_{q_4})\cdot(a^+_{q_2}a_{q_3})\,\right\rangle^{\rm c} \equiv \left\langle\, a^+_{q_1}a_{q_4}a^+_{q_2}a_{q_3}\,\right\rangle - \left\langle\, a^+_{q_1}a_{q_4}\,\right\rangle\left\langle\, a^+_{q_2}a_{q_3}\,\right\rangle \ , \tag{3.50}$$

tandis que les premières ont été introduites par (3.46). Avec les règles d'anticommutation, on vérifie facilement que

$$\left\langle\, a^+_{q_1}a^+_{q_2}a_{q_3}a_{q_4}\,\right\rangle^{\rm c} \ = \ \left\langle\, (a^+_{q_1}a_{q_4})\cdot(a^+_{q_2}a_{q_3})\,\right\rangle^{\rm c} \ - \ \left\langle\, a^+_{q_1}a_{q_3}\,\right\rangle\left[\delta_{q_2q_4} - \left\langle\, a^+_{q_2}a_{q_4}\,\right\rangle\right] \ , \tag{3.51}$$

où, pour un système homogène, le second terme dans le membre de droite est lié aux nombres d'occupation. Nous obtenons finalement l'équation spectrale pour les fonctions de corrélation désirées:

$$\begin{aligned}\left\langle\, a^+_{q_1}a^+_{q_2}a_{q_3}a_{q_4}\,\right\rangle^{\rm c} \ &= \ -\frac{1}{\pi}\int_0^\infty {\rm d}\omega\ {\rm Im}\left\langle\!\!\left\langle\, a^+_{q_1}\,a_{q_4};\ a^+_{q_2}\,a_{q_3}\,\right\rangle\!\!\right\rangle^{\rm ret}_{\omega} \\ &\quad - \delta_{q_1q_3}\delta_{q_2q_4}\,n_{q_1}\,(\,1-n_{q_2}\,)\end{aligned} \tag{3.52}$$

Le théorème spectral pour les commutateurs nous fournit non seulement les éléments de la matrice norme, mais nous permet en outre de déterminer directement les nombres d'occupation. Pour cela, calculons la somme pondérée de tous les éléments diagonaux de la matrice norme:

$$\sum_k g(k)\ (\,n_p\ -\ n_k\,) \ = \ -\frac{1}{\pi}\sum_k g(k)\int_{-\infty}^{\infty}{\rm d}\omega\ {\rm Im}\left\langle\!\!\left\langle\, a^+_p\ a_{_k};\, a^+_{_k}\ a_p\,\right\rangle\!\!\right\rangle^{\rm ret}_{\omega} \tag{3.53}$$

Dans un système homogène, la fonction poids $g(k)$ empêche le volume de l'espace des impulsions de diverger:

$$\mathcal{V} \equiv \sum_k g(k) \tag{3.54}$$

Au chapitre 4.4 nous verrons que nous n'avons pas besoin de cette coupure dans des systèmes sur réseau puisque la somme sur k est limitée à la première zone de Brillouin.

Finalement, nous divisons (3.53) par $\mathcal{V}$ et écrivons pour les nombres d'occupation:

$$n_p \;=\; \frac{1}{\mathcal{V}} \sum_k n_k \,-\, \frac{1}{\pi \mathcal{V}} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \;\mathrm{Im}\, \left\langle\!\!\left\langle\, a_p^+ \, a_{_k};\, a_{_k}^+ \, a_p \,\right\rangle\!\!\right\rangle_{\omega}^{\mathrm{ret}} \tag{3.55}$$

Dans cette équation, nous avons omis la fonction poids, et nous considérons les sommes sur k comme moyennes pondérées quand cela s'avère nécessaire.

Nous avons maintenant un système d'équations fermé pour la fonction de Green SCRPA. Pour résoudre ce système de manière self-consistante, nous commençons avec une première hypothèse pour la fonction de Green. Ensuite, nous évaluons les éléments de la matrice norme et de l'hamiltonien effectif, à l'aide des éqs. (3.55) et (3.52). Nous calculons ensuite la nouvelle approximation de la fonction de Green SCRPA par inversion de la matrice (3.48). A la convergence de ce cycle d'itération nous obtiendrons la fonction de Green de l'approximation des phases aléatoires *self-consistante*.

3.4.1 Point communs et différences entre la RPA et la RPA self-consistante

Une fonction de Green générale satisfait à l'équation de Dyson (3.15); pour le propagateur particule-trou, elle se traduit par

$$\mathcal{G}^{\mathrm{SC}}_{kpk'p'}(\omega) \;=\; \mathcal{G}^{0}_{kpk'p'}(\omega) \,+\, \sum_{\substack{k_1 p_1 \\ k_2 p_2}} \mathcal{G}^{0}_{kpk_1p_1}(\omega)\, \mathcal{K}^{\mathrm{SC}}_{k_1p_1k_2p_2}\, \mathcal{G}^{\mathrm{SC}}_{k_2p_2k'p'}(\omega)\;, \tag{3.56}$$

où $\mathcal{G}^{0}_{kpk'p'}(\omega)$ joue le rôle d'une fonction de Green particule-trou libre:

$$\mathcal{G}^{0}_{kpk'p'}(\omega) \;=\; \delta_{kk'}\, \delta_{pp'}\, \frac{n_p \,-\, n_k}{\omega \,-\, (e_k - e_p) \,+ \mathrm{i}0^+} \tag{3.57}$$

Malgré cette structure de propagateur particule-trou libre (voir annexe A), nous insistons sur les différences:

- Pour un propagateur libre, les nombres d'occupation n_k sont fixés par la théorie de Hartree-Fock. Par conséquent, ils valent 1 en dessous de la surface de Fermi et 0 au-dessus:

$$n_k^{\mathrm{HF}} \;=\; \Theta(E_{\mathrm{F}} - e_k) \tag{3.58}$$

Leur unique but est de restreindre l'espace des impulsions au domaine dans lequel existent des excitations particule-trou pour des vecteurs d'onde k et $k+q$ donnés. Il en résulte que le propagateur particule-trou *libre* n'est non nul que si k et $k+q$ désignent deux points de part et d'autre de la surface de Fermi.

Les nombres d'occupation dans notre théorie, en revanche, vont être différents de zéro ou un. Comme l'interaction est à l'origine de cet effet, ceci se produira même à température nulle.

- Contrairement aux énergies à une particule ε_k, les énergies e_k tiennent déjà compte des corrections Hartree-Fock. En reportant leur définition (3.45) dans (3.57), nous voyons que $\mathcal{G}^0(\omega)$ dépend explicitement du potentiel $\bar{v}$.

Par analogie complète avec (3.16), le noyau intégral $\mathcal{K}^{\rm SC}_{k_1p_1k_2p_2}$ peut être assimilé à la partie de l'hamiltonien effectif (3.44) contenant l'interaction:

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}^{\rm SC}_{kpk'p'} &\equiv (n_p - n_k)^{-1} \left[\mathcal{H}^{\rm SC}_{kpk'p'} - \delta_{kk'}\,\delta_{pp'}\,(e_k - e_p)\right] \\
&= \bar{v}_{p'kk'p} \\
&\quad + \Big[\tfrac{1}{2}\,\delta_{pp'}\,\bar{v}_{kq_2q_3q_4} \left\langle a^+_{k'}a^+_{q_2}a_{q_3}a_{q_4}\right\rangle^{\rm c} + \tfrac{1}{2}\,\delta_{kk'}\,\bar{v}_{q_1q_2q_3p} \left\langle a^+_{q_1}a^+_{q_2}a_{q_3}a_{p'}\right\rangle^{\rm c} \\
&\qquad + \tfrac{1}{2}\,\bar{v}_{p'kq_3q_4} \left\langle a^+_{k'}a^+_{p}a_{q_3}a_{q_4}\right\rangle^{\rm c} + \tfrac{1}{2}\,\bar{v}_{q_1q_2pk'} \left\langle a^+_{q_1}a^+_{q_2}a_{k}a_{p'}\right\rangle^{\rm c} \\
&\qquad - \bar{v}_{kq_2q_3k'} \left\langle a^+_{p}a^+_{q_2}a_{q_3}a_{p'}\right\rangle^{\rm c} - \bar{v}_{p'q_2q_3p} \left\langle a^+_{k'}a^+_{q_2}a_{q_3}a_{k}\right\rangle^{\rm c} \Big] \\
&\quad \cdot \left[(n_p - n_k)\,(n_{p'} - n_{k'})\right]^{-1}
\end{aligned} \tag{3.59}$$

Il se décompose de manière naturelle en deux parties. La première partie représente l'interaction RPA

$$\mathcal{K}^{\rm RPA}_{kpk'p'} \equiv \bar{v}_{p'kk'p}\ , \tag{3.60}$$

tandis que la seconde partie, $\mathcal{K}^{\rm c}$, comprend exclusivement des densités corrélées à deux corps. Ceci nous encourage à réécrire l'équation intégrale (3.56) en utilisant une notation matricielle:

$$\mathcal{G}^{\rm SC} = \mathcal{G}^{\rm RPA} + \mathcal{G}^{\rm RPA}\,\mathcal{K}^{\rm c}\,\mathcal{G}^{\rm SC} \tag{3.61}$$

$$\mathcal{G}^{\rm RPA} = \mathcal{G}^{0} + \mathcal{G}^{0}\,\mathcal{K}^{\rm RPA}\,\mathcal{G}^{\rm RPA} \tag{3.62}$$

La structure de l'éq. (3.62) est identique à celle des équations RPA habituelles. Comme nous l'avons déjà mentionné, le propagateur $\mathcal{G}^0$ n'est pas forcément composé

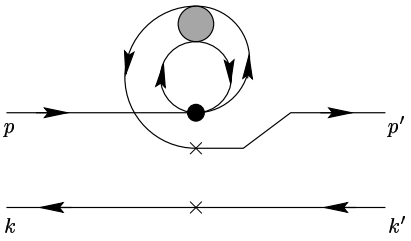
des nombres d'occupation du système libre. Malgré cela, nous considérons (3.62) comme l'équation *générique* pour la RPA quels que soient les nombres d'occupation n_k. Nous appelons *RPA pure* une théorie dans laquelle les nombres d'occupation sont fixés à leurs valeurs Hartree-Fock (3.58). Par contre, lorsque les nombres d'occupation sont déterminés de manière self-consistante à partir de la fonction de Green RPA, ou lorsqu'ils incluent des corrélations d'une autre façon, nous parlerons de *RPA renormalisée*.

La RPA (3.62) peut être améliorée en ajoutant l'éq. (3.61). Ces équations couplées définissent la *RPA self-consistante* (SCRPA). En comparant (3.56) et (3.62), on voit tout de suite que la structure RPA de la solution sera préservée, malgré ces changements:

$$\begin{aligned} \mathcal{G}^{\rm SC}(\omega) &= \left[1 - \mathcal{G}^0(\omega)\,\mathcal{K}^{\rm SC}\right]^{-1} \mathcal{G}^0(\omega) \\ \mathcal{G}^{\rm RPA}(\omega) &= \left[1 - \mathcal{G}^0(\omega)\,\mathcal{K}^{\rm RPA}\right]^{-1} \mathcal{G}^0(\omega) \end{aligned} \tag{3.63}$$

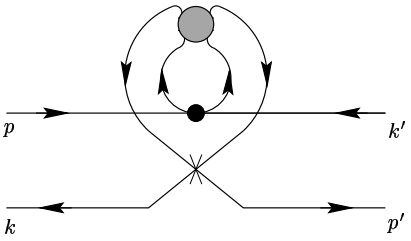
La différence entre la RPA et la SCRPA provient des corrélations contenues dans le noyau intégral $\mathcal{K}^{\rm c}$. En utilisant la représentation diagrammatique de Feynman, ces corrélations peuvent être interprétés de la façon suivante:

$$\delta_{kk'}\,\bar{v}_{q_1 q_2 q_3 p}\left\langle a^+_{q_1} a^+_{q_2} a_{q_3} a_{p'} \right\rangle^{\rm c} \quad \Rightarrow$$



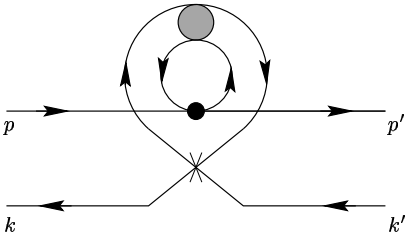
(3.64)

$$\bar{v}_{q_1 q_2 p k'}\left\langle a^+_{q_1} a^+_{q_2} a_k a_{p'} \right\rangle^{\rm c} \quad \Rightarrow$$



(3.65)

$$\bar{v}_{p' q_2 q_3 p}\left\langle a^+_{k'} a^+_{q_2} a_{q_3} a_k \right\rangle^{\rm c} \quad \Rightarrow$$

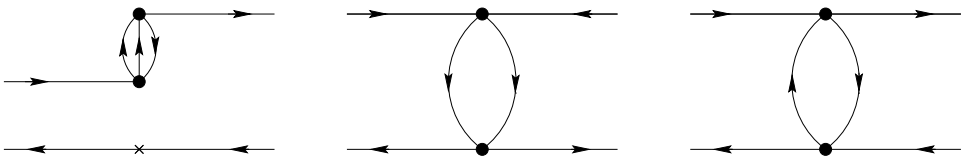


(3.66)

Le cercle hachuré symbolise un propagateur particule-trou corrélé, et le point désigne l'interaction antisymétrisé introduite par l'éq. (3.22). Les croix indiquent que les fonctions de corrélation sont instantanées. Ils représentent donc des fonctions δ en temps. Le cas échéant, ils assurent également la conservation des impulsions et des autres nombres quantiques compris dans k ou p.

Le premier graphe (3.64) illustre l'influence des fluctuations de densité sur la propagation à une particule: il s'agit d'une correction de self-énergie. Les deux autres graphes montrent que l'interaction est affaiblie par les fluctuations de densité: c'est *l'effet d'écran*. Dans le seconde graphe (3.65), le cercle hachuré est un propagateur particule-particule. L'approximation instantanée nous autorise à calculer les fonctions de corrélation de ce graphe par le théorème de fluctuation-dissipation soit pour le propagateur particule-particule, soit pour le propagateur particule-trou (3.52). Bien entendu, il existe aussi des diagrammes analogues pour lesquels l'interaction apparaît sur la ligne du "trou".

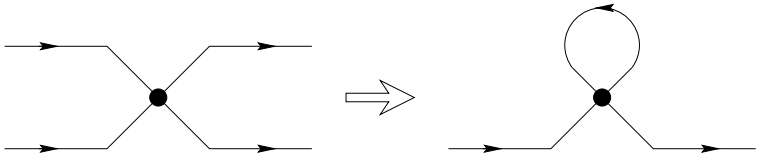
On obtient les contributions du second ordre en ramenant les cercles à un seul point. Les graphes (3.64-3.66) se ramènent à:



(3.67)

Dans chacun des cas, les deux interactions se produisent à des temps infinitésimalement proches. Si nous coupons en deux les graphes entres les points d'interaction, nous voyons le couplage instantané entre les propagateurs à une particule et un trou ($1p1h$) d'un côté, et à deux particules et deux trous ($2p2h$) de l'autre côté. Par conséquent, la solution self-consistante des éqs. (3.61) et (3.62) correspond à une renormalisation de l'interaction comprenant des graphes d'ordres très élevés.

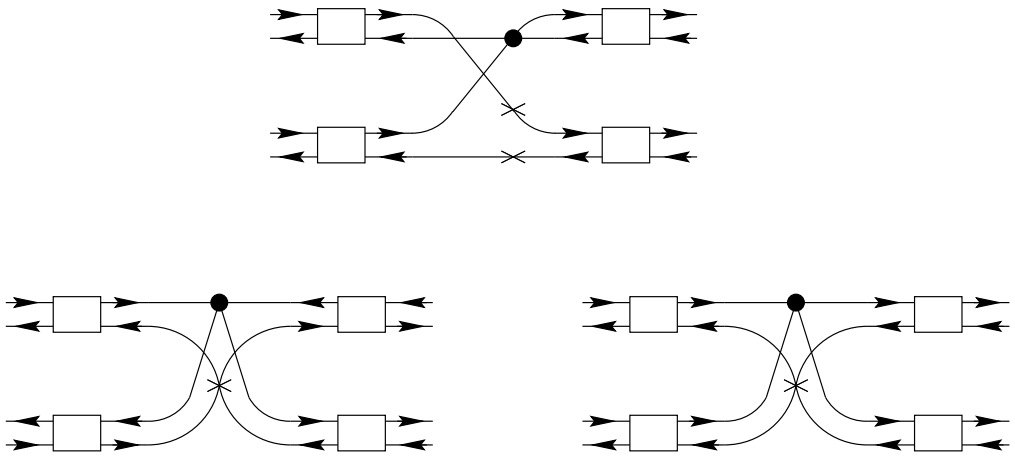
Il est connu qu'on trouve la self-énergie Hartree-Fock en attachant deux lignes, dont une sortant et l'autre rentrant, dans un graphe d'interaction:



(3.68)

Cela nous incite à interpréter les graphes (3.64-3.66) comme champ Hartree-Fock pour les fluctuations de densité. C'est un point de vue qui a été adopté dans les

réfs. [16, 36]. Par analogie avec (3.68), les termes (3.64-3.66) se construisent en formant une boucle avec deux propagateurs particule-trou dans un des graphes suivants:



(3.69)

Ces graphes du premier ordre en interaction se calculent indépendamment avec la théorie de perturbation. En comptabilisant toutes les contributions d'échange, nous retrouvons ainsi exactement l'opérateur de masse (3.59). Ce dernier représente donc le champ moyen pour un gaz de fluctuations quantiques qui existent dans tout système de fermions.

Cette analyse détaillée des propagateurs particule-trou renforce les arguments pour la conception de la SCRPA comme généralisation directe de la théorie de Hartree-Fock. Contrairement à la RPA, la SCRPA contient des termes corrélés qui affaiblissent l'interaction par effet d'écran. Malgré ces contributions supplémentaires, la structure RPA est conservée ce qui justifie a posteriori l'appellation RPA Self-Consistante.

3.4.2 Dérivation de la SCRPA à partir d'un principe variationnel

La SCRPA est intimement liée à un principe variationnel. Pour le propagateur à une particule, ceci est évident: nous avons vu au chapitre 3.2 que la SCRPA à une particule est équivalente à l'approximation Hartree-Fock. Il est bien connu que cette dernière peut être obtenue à partir d'un principe variationnel pour l'énergie du fondamental [33].

Pour la SCRPA à deux particules ainsi que pour la SCRPA à une particule et un trou, il est plus commode de choisir une approche variationnelle qui minimise l'énergie moyenne des *excitations*. Cette variante à été développée par Baranger [37] et appliqué au problème à une particule [38].

En suivant ref. [18], nous introduisons une fonction de Green $\langle\langle\, X;\, X^+ \,\rangle\rangle_\omega$ pour les opérateurs d'excitation particule-trou donnés par

$$X^+ \;=\; \sum_{kp} x_{kp}\, a_k^+ a_p \;. \tag{3.70}$$

L'énergie moyenne des excitations créées par X^+ est donnée par l'expression suivante:

$$\begin{aligned} S_1 \;&=\; \frac{\sum\limits_n \omega_{n0}\, \left(|\langle n|\, X^+\, |0\rangle|^2 \;-\; |\langle n|\, X\, |0\rangle|^2 \right)}{\sum\limits_n \left(|\langle n|\, X^+\, |0\rangle|^2 \;-\; |\langle n|\, X\, |0\rangle|^2 \right)} \\ &=\; \frac{\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\; \omega\, \mathrm{Im}\, \langle\langle\, X;\, X^+ \,\rangle\rangle_\omega^{\mathrm{ret}}}{\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\; \mathrm{Im}\, \langle\langle\, X;\, X^+ \,\rangle\rangle_\omega^{\mathrm{ret}}} \end{aligned} \tag{3.71}$$

Comme il est d'usage, $|n\rangle$ sont les états excités exacts. Leurs énergies par rapport au fondamental $|0\rangle$ sont données par ω_{n0}. L'équivalence entre la première ligne et la seconde peut facilement être vérifiée en utilisant la représentation spectrale de la fonction de Green, l'éq. (2.51). A la seconde ligne, le numérateur est relié au double commutateur $\langle 0|\, [[X,\, H],\, X^+]\, |0\rangle$, suite à la règle de somme f (3.40). Au dénominateur, nous retrouvons la norme $\langle 0|\, [X,\, X^+]\, |0\rangle$. Elle vaudrait 1, si X^+ créait un *vrai* boson.

Pour trouver les opérateurs qui engendrent les excitations avec l'énergie moyenne la plus basse, il suffit de faire varier les amplitudes x_{kp}. Nous obtenons les conditions minimales:

$$\frac{\partial S_1}{\partial x_{kp}} \;=\; 0 \tag{3.72}$$

On vérifie sans problème qu'elles nous amènent aux équations SCRPA du début de ce chapitre.

3.4.3 La self-énergie RPA

Nous dérivons maintenant une expression pour la self-énergie qui est en accord avec l'approximation des phases aléatoires en ce sens que l'énergie du fondamental est la

même dans les deux approches.

Comme nous ne voulons pas trop rentrer dans les détails du calcul, il est commode de se servir des techniques de diagrammes de Feynman. Néanmoins il s'avère nécessaire de respecter les règles de traduction pour ces graphes de façon plus stricte qu'aux paragraphes précédents: par exemple, dans l'éq. (3.28) nous pouvions nous permettre d'associer les diagrammes directement avec les fonctions de Green car les divers facteurs i et $-$i se compensaient. Par la suite, ceci ne va plus être le cas. Nous sommes alors forcés d'appliquer les règles au pied de la lettre. Nous traduisons $\mathrm{i}\left\langle\!\left\langle\, a_k;\, a_k^+ \,\right\rangle\!\right\rangle_\omega^c$ par une ligne à une particule et, surtout, comptons un facteur -1 pour chaque boucle de fermions.

Définissons d'abord un propagateur à une particule "libre":

$$\left\langle\!\left\langle\, a_k;\, a_{k'}^+ \,\right\rangle\!\right\rangle_\omega^0 \;=\; \delta_{kk'}\left[\frac{1-n_k}{\omega-(e_k-\mu)+\mathrm{i}0^+} \;+\; \frac{n_k}{\omega-(e_k-\mu)-\mathrm{i}0^+}\right], \tag{3.73}$$

Ce propagateur a, en effet, la structure d'un propagateur causal libre. D'autre part, d'après (3.45), il prend déjà en considération les corrections Hartree-Fock pour les énergies à une particule. Par ailleurs, nous permettrons aux nombres d'occupation, n_k, d'adopter des valeurs qui diffèrent de 0 ou 1. Nous plaçons cette fonction de Green donc au même niveau que le propagateur particule-trou libre défini par (3.57).

Si nous supposons les nombres d'occupation n_k égaux dans les deux cas, (3.57) et (3.73), il est évident qu'il en résulte la même énergie cinétique $\sum_k \varepsilon_k n_k$.

Il nous reste à analyser l'énergie potentielle. Elle se calcule de la façon suivante:

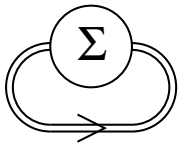
$$\begin{aligned} E_{\mathrm{pot}} &= \frac{1}{4}\,\bar{v}_{q_1q_2q_3q_4}\,\left\langle\, a_{q_1}^+\, a_{q_2}^+\, a_{q_4}\, a_{q_3}\,\right\rangle \\ &= \frac{1}{4}\,\bar{v}_{q_1q_2q_3q_4}\,\lim_{t-t'\to 0^-}(-\mathrm{i})\left\langle\!\left\langle\, \left(a_{q_2}^+\, a_{q_4}\, a_{q_3}\right)_t;\, \left(a_{q_1}^+\right)_{t'} \,\right\rangle\!\right\rangle^c \\ &= \frac{1}{4}\,\bar{v}_{q_1q_2q_3q_4}\,\frac{-\mathrm{i}}{2\pi}\int\limits_{\circlearrowright}\mathrm{d}\omega\,\left\langle\!\left\langle\, a_{q_2}^+\, a_{q_4}\, a_{q_3};\, a_{q_1}^+ \,\right\rangle\!\right\rangle_\omega^c \end{aligned} \tag{3.74}$$

La fonction de Green impliquée est reliée au propagateur à une particule par l'équation du mouvement (3.26). La seconde ligne de (3.74) provient directement de la définition de la fonction de Green causale pour $\epsilon = -1$. La limite $t - t' \to 0^-$ ainsi que la sommation sur q_1 nous invite à boucler les deux bouts du diagramme correspondant. Pour arriver à la dernière ligne, nous avons utilisé l'éq. (2.58).

Comme d'habitude, nous décomposons la fonction de Green supérieure en intro-

duisant la self-énergie (3.27). Après avoir fermé la boucle, nous écrivons:

$$E_{\rm pot} \quad = \quad \frac{1}{2}$$



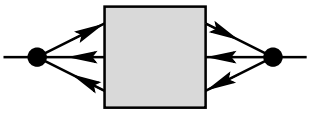
(3.75)

Reportons la self-énergie (3.36) dans (3.75). On vérifie facilement que la partie Hartree-Fock de la self-énergie donne l'énergie potentielle en approximation Hartree-Fock:

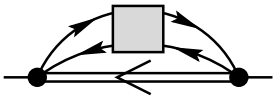
$$E^{\rm HF}_{\rm pot} \;=\; \frac{1}{2}\bar{v}_{pqpq}\, n_p\, n_q \tag{3.76}$$

L'autre terme contient la partie irréductible d'une fonction de Green à deux particules et un trou que nous décomposons de manière approximative:

$$\frac{1}{4}$$



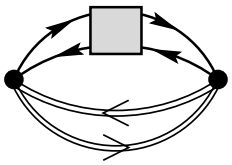
$$\approx \quad \frac{1}{2}$$



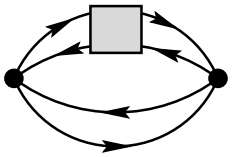
(3.77)

Un calcul au premier ordre, revenant à remplacer toutes les fonctions de Green par des propagateurs libres, montre que le facteur 2 provient des termes d'échange. A partir de (3.77), nous pouvons exprimer l'énergie potentielle uniquement avec des fonctions de Green particule-trou

$$E_{\rm pot} \quad = \quad E^{\rm HF}_{\rm pot} \quad + \quad \frac{1}{4}$$



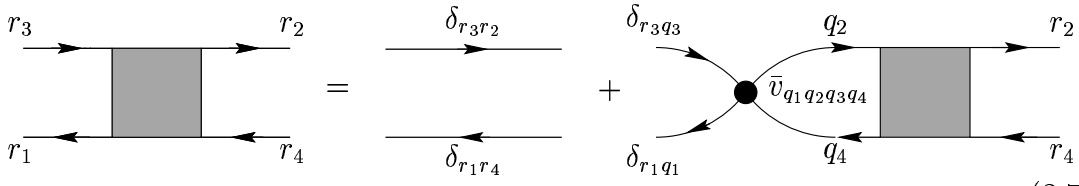
$$\approx \quad E^{\rm HF}_{\rm pot} \quad + \quad \frac{1}{4}$$



(3.78)

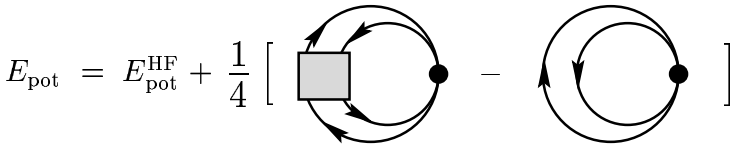
En examinant le dernier diagramme, il est utile de se rappeler que la fonction de

Green RPA satisfait à une équation Bethe-Salpeter linéarisée, l'éq. (3.62):



(3.79)

Grâce à elle, nous substituons le nœud gauche du dernier diagramme dans (3.78) par un propagateur particule-trou corrélée:



$$= E^{\rm HF}_{\rm pot} + \frac{1}{4}\,\bar{v}_{r_4 r_3 r_2 r_1}\,\frac{\mathrm{i}}{2\pi}\int \mathrm{d}\omega\,\left[\mathcal{G}^c(\omega) - \mathcal{G}^{c,0}(\omega)\right]_{r_1 r_3 r_4 r_2} \tag{3.80}$$

C'est exactement la même expression que nous aurions obtenue en évaluant l'énergie potentielle avec la fonction de Green RPA. Les énergies fondamentales sont alors les mêmes dans les deux approches, car nous avons vu plus haut que l'énergie cinétique est identique. De plus, il est possible de pousser ce raisonnement un cran plus loin afin de dériver une expression pour la self-énergie qui soit en accord avec la SCRPA. Une autre façon d'améliorer ces résultats consiste à tenir compte des termes à deux particules dans le découplage (3.77). Ceci introduit des propagateurs de la RPA à deux particules dans la self-énergie. Au premier ordre cette idée à été poursuivie dans la réf. [39].

Chapitre 4

Le modèle de Hubbard

Le modèle de Hubbard est l'un des modèles les plus répandus en physique d'électrons fortement corrélés. Il fournit probablement la description quantique la plus simple incluant le mouvement des électrons et leurs interactions mutuelles sur réseau. En dépit de cette simplicité structurelle, des résultats exacts sont seulement connus dans des conditions très particulières, par exemple à une dimension [10]. Depuis son introduction par Hubbard jusqu'à nos jours, ce modèle a ainsi représenté un défi énorme, stimulant la recherche de nouvelles méthodes à N corps.

Nous commencerons ce chapitre en expliquant le lien entre le problème électronique dans un solide réaliste et le modèle de Hubbard. Ensuite, nous résumerons quelques-unes de ses propriétés essentielles. Après avoir discuté les méthodes approximatives les plus connues, nous appliquerons les différentes variantes de la théorie RPA, telles qu'elles ont été présentées au chapitre 3, au corrélations de charge et de spin du modèle de Hubbard.

4.1 Lien avec le problème électronique d'un solide réaliste

Une description générale d'un solide doit, en principe, inclure le mouvement des noyaux et des électrons, ainsi que l'interaction des noyaux entre eux, des électrons entre eux, et l'interaction entre noyaux et électrons. C'est un problème à N corps extrêmement complexe, non seulement insoluble exactement, mais qui représente une tâche insurmontable dans sa totalité pour les méthodes approximatives. Une théorie

générale devrait expliquer des effets aussi différents que la formation des atomes ou des ions, leur condensation dans l'état solide avec les divers structures amorphes et cristallines, les phénomènes magnétiques et électriques, qui, eux, possèdent des aspects aussi variés que le comportement diélectrique, l'ordre magnétique, la transition métal-isolant et la supraconductivité.

Nous sommes donc invités à estimer les différentes échelles d'énergie impliquées dans ces phénomènes. En physique des solides, on s'intéresse aux propriétés magnétiques et électriques. Elles sont créées par les couches externes des atomes qui ne sont remplies d'électrons qu'en partie et dont l'énergie de liaison atteint l'ordre de 10 électron-Volts (eV). Leur influence sur les électrons des couches internes, qui, eux, sont liés au noyau avec une énergie de quelques dizaines de keV, est très faible. Nous pouvons, par conséquent, nous limiter à décrire un système composé d'électrons et d'ions.

Dans ce système, la condensation dans l'état solide est le processus dominant. Les énergies typiques sont de quelques eV. En chimie inorganique, l'arrangement exact des ions est généralement déterminé par la composition chimique, c.à.d. la stœchiométrie, et par la thermodynamique (pression, température, etc.). Après la condensation, les ions sont fixés sur leurs positions d'équilibre, hormis de petites oscillations autour de ces dernières. Dans un réseau cristallin, les quanta de ces oscillations s'appellent *phonons*.

Si nous nous intéressons au comportement du solide à température ambiante ($300\,\mathrm{K} \approx 30\,\mathrm{meV}$), voir basse ($1\,\mathrm{K} \approx 0.1\,\mathrm{meV}$), la structure cristalline reste fixe. Il suffit alors d'analyser le comportement des électrons des couches extérieures. Dans l'approximation la plus simple, des électrons indépendants évoluent dans le potentiel périodique des ions. Leurs fonctions d'onde sont caractérisées par un indice de bande provenant des nombres quantiques de l'atome isolé. De plus, la fonction d'onde possède une quantité de mouvement. Suite à la périodicité du problème, cette *impulsion de Bloch* ne peut prendre que des valeurs de la première zone de Brillouin. Nous nous retrouvons avec un gaz de Fermi sur réseau, pour lequel les fonctions de Bloch représentent, en quelque sorte, les ondes planes. La diagonalisation numérique de l'hamiltonien des électrons indépendants est appelé "calcul de structure des bandes". L'influence du potentiel des ions se manifeste alors dans les énergies à une particule, qu'on appelle *bandes d'énergie*.

On peut améliorer ces calculs si l'on tient compte du fait que l'interaction entre les

électrons modifie les bandes d'énergie. Au premier ordre, on n'inclut que la contribution classique de cette interaction qui est la répulsion coulombienne entre les électrons: c'est l'approximation de Hartree, qui, pour un cristal réaliste, pose déjà un problème numérique considérable.

Une fois que la structure des bandes est déterminée, nous pouvons nous occuper des phénomènes engendrés par la partie corrélée de l'interaction entre les électrons. La version la plus simple de ce problème purement électronique est réalisé dans le *modèle de Hubbard*. Dans ce prototype, les électrons se propagent dans une seule bande d'énergie. Les autres bandes sont supposées être suffisamment loin de l'énergie de Fermi pour qu'elles n'interviennent pas dans nos considérations. Une seconde hypothèse concerne l'interaction electron-electron: dans le modèle de Hubbard, elle est réduite à une répulsion entre les électrons se trouvant sur le "même site" du réseau cristallin. Nous entendons par là que les deux électrons se trouvent dans le même état de Wannier. Ces fonctions d'onde centrées autour d'un ion précis sont parfois mieux adaptées que les fonctions de Bloch pour la description des phénomènes locaux.

L'hamiltonien de Hubbard [1] est donnée par :

$$H = \sum_{ij\sigma} t_{ij}\, a^{+}_{i\sigma} a_{j\sigma} + U \sum_{i} \hat{n}_{i\uparrow}\hat{n}_{i\downarrow} \tag{4.1}$$

Les opérateurs $a^{+}_{i\sigma}$ et $a_{i\sigma}$, respectivement, créent et annihilent un électron de spin σ dans l'état de Wannier centré autour du site i. L'opérateur de nombre de particules au site i est défini par $\hat{n}_{i\sigma} = a^{+}_{i\sigma} a_{i\sigma}$. Le premier terme de (4.1) décrit la propagation des électrons: le potentiel cristallin ne permet que des transitions directes entre des sites i et j pour lesquelles les éléments de matrice t_{ij} sont non nuls. Le second terme tient compte de l'interaction: si deux électrons se trouvent sur le même site i, ils se repoussent avec l'énergie coulombienne U.

Ce modèle semble être une caricature du problème électronique d'un solide réaliste. Malgré ces sévères simplification, son diagramme de phases est extrêmement riche, et, jusqu'à présent, seulement partiellement compris: nous allons voir au prochain paragraphe, que déjà au niveau Hartree-Fock, il offre une multitude de phases magnétiques, métalliques et isolantes. Pour des interactions attractives, on observe un "crossover" entre une phase supraconductrice et un régime de condensation de Bose-Einstein [40]. Cette richesse explique que, plus de trente-cinq ans après son introduction, le débat sur beaucoup de ses propriétés principales n'est pas

encore clos. Une solution exacte pour le modèle de Hubbard n'a pu être trouvée et n'existe probablement qu'à une dimension [10].

Nous renvoyons le lecteur s'intéressant plus précisément aux origines et à la dérivation de ce modèle aux travaux originaux de Hubbard [1, 41, 42] et d'Anderson [43], ou à des ouvrages plus récents comme, par exemple, les réfs. [3, 44, 45].

Nous terminons ce paragraphe en soulignant qu'il n'existe presque aucun solide réel qui corresponde aux suppositions incorporées dans le modèle de Hubbard. Il doit plutôt être considéré comme un modèle standard pour les systèmes à électrons fortement corrélés, représentant ainsi un ingrédient important pour les modèles plus réalistes [3].

4.2 Quelques propriétés du modèle de Hubbard

Dans ce chapitre, nous résumons brièvement quelques propriétés essentielles du modèle de Hubbard. Nous examinons plusieurs cas limites pour lesquelles existent des résultats exacts et faisons le lien avec d'autres modèles très répandus en physique des solides. Une vue plus complète est donnée dans la réf. [3].

Nous nous limitons à la version la plus simple du modèle de Hubbard dans laquelle les électrons peuvent sauter d'un site i uniquement aux premiers voisins j, c.à.d.

$$t_{ij} = \begin{cases} -t & \text{pour } |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j| = a \\ 0 & \text{dans tous les autres cas} \end{cases} \tag{4.2}$$

ou a est la distance entre deux sites voisins les plus proches. De plus, nous supposons l'interaction répulsive, $U > 0$. Pour des réseaux composés de deux sous-réseaux tels que les électrons sautent toujours d'un site appartenant à un sous-réseau à un site qui appartient à l'autre (réseaux bipartites), ceci n'est pas une restriction: une transformation électron-trou nous fournit la solution pour des interactions attractives à partir de celle pour des U répulsives.

Regardons maintenant quelques cas limites qui permettent des conclusions exactes:

- Dans la limite $U = 0$, le modèle de Hubbard décrit des électrons libres sur réseau. Ils forment *un gaz de Fermi libre*, donc un métal idéal.

- La limite $t \to 0$ empêche les électrons de sauter d'un site à l'autre. Ils restent liés à un ion précis dans un état atomique. Cette *limite atomique* a déjà

été étudiée par Hubbard lui-même [41]. Evidemment, comme tout mouvement des électrons est supprimé, le modèle représente un isolant (voir aussi chapitre 4.3.2).

- La *limite de couplage fort*, $U \gg W$ ou W est la largeur de bande dans laquelle se déplacent les électrons.

  On est tenté de croire que cette limite correspond à la limite atomique. C'est, hélas, faux: dans la limite $U \to \infty$, un électron peut se déplacer librement à condition qu'il reste sur des sites inoccupés. Cette limite, connue comme *modèle* $\hat{T}$, est une projection du modèle de Hubbard sur le sous-espace des états sans double occupation. Sauf s'il y a exactement un électron par site, les électrons restent mobiles. Cela nous signale un fondamental métallique, même si ceci n'est pas prouvé de façon générale (voir réf. [3, chap. 2.5.4]).

  Le prochain terme à considérer dans un développement perturbatif en W/U décrit le passage transitoire d'un électron par un site déjà occupé. Bien entendu, cette double occupation virtuelle est seulement permise si le spin des deux participants est opposé. Par conséquent, elle se traduit par un lien entre spins voisins: ceci est le *modèle* tJ, où $J = 2t^2/U$ est la constante de couplage entre les spin voisins, et t caractérise, comme d'habitude, le mouvement des électrons. En général, on s'attend à un fondamental métallique, sauf dans le cas où il y a exactement un électron par site.

  Ce dernier cas correspond à la situation de *la bande à moitié remplie*. Il représente un isolant, car les électrons se gênent mutuellement dans leurs déplacements. Contrairement à la limite atomique, il subsiste un couplage résiduel entre les spins voisins provenant des visites virtuelles des électrons auprès de leurs voisins. En omettant le terme cinétique du modèle tJ, nous obtenons le *modèle de Heisenberg*

$$H \;=\; J \sum_{<i,j>} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \;, \tag{4.3}$$

  où $\mathbf{S}_i$ sont les opérateurs de spin 1/2. Son fondamental est un isolant antiferromagnétique, car la constante de couplage J est positive.

Nous nous sommes convaincus que le modèle de Hubbard à bande demi-pleine décrit un métal idéal à $U = 0$ et un isolant antiferromagnétique pour $U \to \infty$.

Une transition métal-isolant doit avoir lieu a un certain couplage critique U_c, qui, selon les prédictions de Mott [2], est due aux moments magnétiques locaux crées par l'interaction entre les électrons. Si le "*gap*" pour les excitations de charge est engendré par l'apparition d'un ordre magnétique à longue portée, nous parlons d'un isolant du type *Mott-Heisenberg*. En revanche, si le gap provient des corrélations quantiques de charge ou de spin, il s'agit d'un isolant du type *Mott-Hubbard*.

4.3 Méthodes approximatives

Dans les paragraphes qui suivent, nous jetterons un coup d'œil sur quelques unes des méthodes approximatives les plus répandues pour le modèle de Hubbard. Nous commencerons par les différentes variantes de la théorie Hartree-Fock, dont une partie des résultats sera utilisée au cours des chapitre 4.4 et 5.3. Ensuite nous discuterons brièvement les approximations introduites par Hubbard, qui, tout comme la RPA self-consistante, sont basées sur un découplage de la hiérarchie des équations du mouvement.

Ces approches plutôt anciennes sont loin d'être parmi les plus performantes. Or, notamment les approximations de Hubbard peuvent être considérées comme "méthodes standards", en ce sens qu'elles ont été parmi les premières à prédire une transition du type Mott-Hubbard. Le lecteur s'intéressant aux détails des méthodes présentées ou souhaitant une discussion plus complète d'autres formalismes est prié de consulter des ouvrages standards [3, 46, 47].

En effet, de nombreuses théories ont été développées pour approfondir nos connaissances du modèle de Hubbard, qui, répétons-le, est un modèle standard pour le problème des électrons fortement corrélés sur réseau. Nous citons notamment les approches variationnelles, comme celle de Gutzwiller [48], qui s'attache à déterminer la densité de double occupation optimale en fonction de l'interaction. D'autres méthodes sont issues de la théorie des champs, telle que la transformation de Hubbard et Stratonovich [49]: elle remplace le terme d'interaction de l'hamiltonien de Hubbard par des champs de charge et de spin à caractère bosonique. Les électrons font ainsi naître des champs bosoniques et se propagent en leur presence. Ce traitement *exact* du terme d'interaction permet l'introduction aisée d'approximations très élégantes, telles que les fluctuations autour du point-selle [50], ou encore les Bosons Esclaves [51]. Le dernier formalisme exprime l'occupation d'un site du modèle de

Hubbard (simple, double ou vide) à l'aide de champs bosoniques, qui sont ensuite "condensées" en nombres complexes.

4.3.1 La théorie Hartree-Fock

L'approximation Hartree-Fock pour l'hamiltonien de Hubbard s'obtient en appliquant le découplage

$$A\,B \xrightarrow{\text{HF}} A\,\langle B\rangle + \langle A\rangle\,B - \langle A\rangle\langle B\rangle \tag{4.4}$$

au terme d'interaction dans (4.1). Il en résulte

$$\begin{aligned} H^{\text{HF}} &= \sum_{ij\sigma} t_{ij}\, a^{+}_{i\sigma} a_{j\sigma} \\ &\quad + U \underbrace{\sum_i \left[\hat{n}_{i\uparrow}\,\langle\,\hat{n}_{i\downarrow}\,\rangle + \langle\,\hat{n}_{i\uparrow}\,\rangle\,\hat{n}_{i\downarrow} - \langle\,\hat{n}_{i\uparrow}\,\rangle\,\langle\,\hat{n}_{i\downarrow}\,\rangle\right]}_{\hat{D}^{\text{H}}} \\ &\quad + U \underbrace{\sum_i \left[-S_i^{+}\left\langle S_i^{-}\right\rangle - \left\langle S_i^{+}\right\rangle S_i^{-} + \left\langle S_i^{+}\right\rangle\left\langle S_i^{-}\right\rangle\right]}_{\hat{D}^{\text{F}}} \end{aligned} \tag{4.5}$$

ou les opérateurs $S_i^{+} \equiv a^{+}_{i\uparrow} a_{i\downarrow}$ et $S_i^{-} \equiv a^{+}_{i\downarrow} a_{i\uparrow}$ retournent le spin de l'électron au site i, respectivement, vers le haut et vers le bas. Le terme de la seconde ligne est dénommé de Hartree: il tient compte de la répulsion classique des électrons qui se trouvent sur le même site. Le terme d'échange à la troisième ligne, contenant des contributions non-diagonales en spin, est celui de Fock.

La forme de l'hamiltonien (4.5) nous permet de calculer le propagateur à une particule (voir chapitre 3.2.1). Il dépend de plusieurs valeurs moyennes qu'on cherche à déterminer de manière self-consistante. Une solution complète en fonction de l'interaction U et de la densité d'électrons n pose néanmoins un problème mathématique insurmontable: elle devrait prendre en considération les phases de n'importe quel ordre magnétique. Nous verrons par la suite que la théorie Hartree-Fock de Penn [52], qui n'en inclut que quelques unes, conduit déjà à des diagrammes de phase assez compliqués. Nous sommes ainsi contraints à effectuer des simplifications supplémentaires, par exemple en brisant la symétrie de translation ou de spin de façon simple.

Les théories Hartree-Fock les plus répandues sont:

- **La théorie de Slater pour des cristaux antiferromagnétiques.**

Elle suppose une brisure de la symétrie de translation en divisant le cristal en deux sous-réseaux, A et B (voir Fig. 4.1). On suppose que l'aimantation des

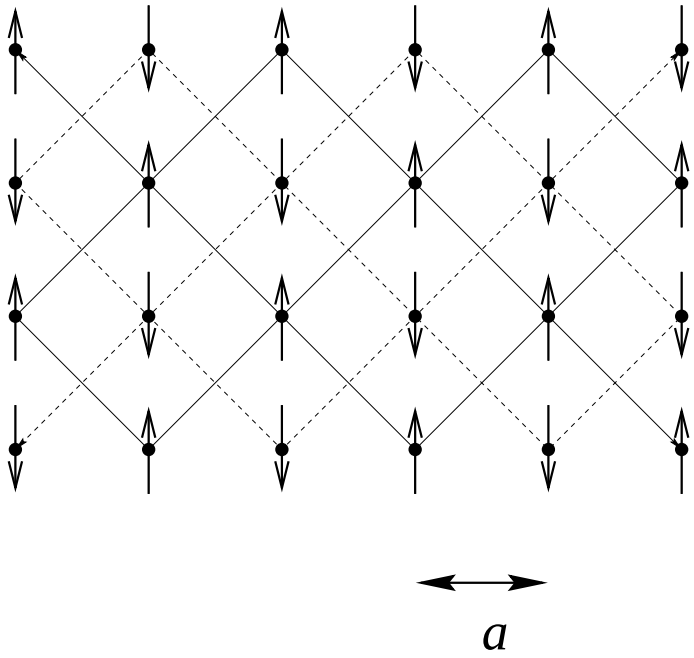


Figure 4.1: *Exemple pour un cristal antiferromagnétique à réseau bipartite: Sous-réseau A en lignes continues, sous-réseau B en lignes pointillées*

deux sous-réseau est de la même valeur absolue, mais d'orientation différente. La périodicité des sous-réseaux est de $2a$ au lieu de a. Par conséquent, les vecteurs d'onde appartiennent à un domaine deux fois inférieur à la première zone de Brillouin. Dans ce domaine, nommé *zone de Brillouin magnétique*, il existe deux bandes d'énergie,

$$E^{\pm}(\mathbf{k}) \;=\; \frac{1}{2}\left[\varepsilon_{\mathbf{k}} \,+\, \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \,\pm \sqrt{\left[\varepsilon_{\mathbf{k}} \,-\, \varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}}\right]^2 \,+\, (Um)^2}\right] \;, \qquad (4.6)$$

ou $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ est la dispersion des particules libres, $m \;=\; \left|n_{\uparrow}^{A} - n_{\downarrow}^{A}\right|$ l'aimantation de l'un des *sous*-réseaux et $\mathbf{Q} = (\pi/a, \ldots)$ la moitié d'un vecteur du réseau réciproque. Les deux bandes (4.6) appartiennent à des quasi-particules occupant de manière prédominante l'un ou l'autre des deux sous-réseaux. Pour un demi remplissage, la bande inférieure est complètement occupée, alors que la bande supérieure est vide. Pour faire passer une particule de la bande inférieure à la bande supérieure, il faut dépenser une énergie au moins égale à celle du

gap, $\Delta^{\mathrm{HF}} = Um$. La valeur absolue de l'aimantation des sous-réseaux étant non nulle dans la solution self-consistante, la théorie décrit un isolant antiferromagnétique pour tout $U > 0$.

- **La théorie de Stoner pour des cristaux ferromagnétiques.**

  Dans cette théorie, la symétrie de translation est préservée, tandis que les valeurs moyennes $n_\uparrow$ et $n_\downarrow$ sont supposées différentes. Les bandes à un électron

$$E_\sigma(\mathbf{k}) \;=\; \varepsilon_{\mathbf{k}} \;+\; \frac{1}{2}Un + \begin{cases} -\frac{1}{2}mU & \text{pour } \sigma = +1 \\ +\frac{1}{2}mU & \text{pour } \sigma = -1 \end{cases} \tag{4.7}$$

  ont la même forme que dans le cas libre, mais se décalent en fonction du spin de l'électron. Dans ce cas, $m = n_\uparrow - n_\downarrow$ désigne l'aimantation uniforme du réseau entier.

  Nous retrouvons le fameux *critère de Stoner* pour l'apparition d'une phase ferromagnétique [53]

$$U\, D_{\sigma,0}(E_F^0) \;\geq\; 1 \tag{4.8}$$

  ou $D_{\sigma,0}(E_F^0)$ est la densité d'états du système sans interaction mesurée à l'énergie de Fermi E_F. A $U^{\mathrm{Stoner}} = 1/D_{\sigma,0}(E_F^0)$, la théorie de Stoner prédit une transition de phase du second ordre entre un métal paramagnétique et un métal ferromagnétique. Une phase isolante est obtenue seulement à remplissage moitié dans la limite $U \to \infty$.

Afin de déterminer laquelle des phases Hartree-Fock s'impose pour une certaine interaction et une certaine densité d'électrons, il faut comparer leurs énergies fondamentales ou libres. Alternativement on peut vérifier la stabilité d'une phase en calculant sa susceptibilité magnétique longitudinale: si elle diverge à faibles impulsions et fréquences, le système a tendance à subir une transition de une phase vers un ordre magnétique différent (voir les chapitres 4.4.1 et 5.3).

La figure 4.2 montre un diagramme de phases simplifié incluant les états Hartree-Fock paramagnétiques, ferromagnétiques et antiferromagnétiques. Une théorie Hartree-Fock plus complète prévoit de plus l'apparition d'un état d'onde de densité de spin spirale (à la limite de la phase antiferromagnétique et de la phase ferromagnétique pour des fortes interactions) et d'une phase ferrimagnétique (dans une partie du domaine désigné "antiferromagnétique" sur la figure 4.2) [52].

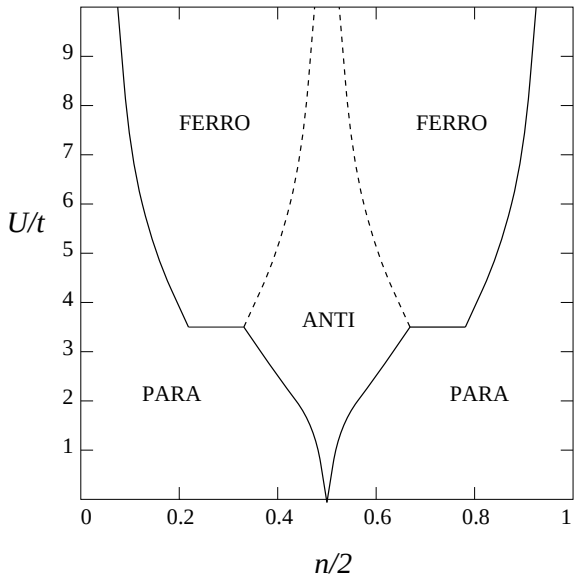


Figure 4.2: *Diagramme de phases Hartree-Fock simplifié pour un cristal tridimensionnel à réseau cubique simple. Les lignes pointillées indiquent des transitions de phase du premier ordre, les lignes continues du second ordre (d'après Penn [52]).*

Le grand défaut de la théorie Hartree-Fock est l'absence totale des corrélations. Par conséquent, elle surestime l'apparition d'un ordre magnétique, qui, en réalité serait contrebalancé par les corrélations entre les électrons. Pour cette raison la théorie Hartree-Fock est, en outre, incapable d'expliquer une transition métal-isolant du type Mott-Hubbard, car cette dernière est gouvernée par des corrélations électroniques.

4.3.2 Les Approximations de Hubbard

Les approximations introduites par Hubbard sont inspirées de la solution atomique du modèle. Contrairement à l'approximation Hartree-Fock, sa méthode inclut des corrélations électroniques dès le départ. Elle est ainsi capable de décrire une transition métal-isolant conforme aux prédictions de Mott: elle est gouvernée par les degrés de liberté de charge et ne nécessite pas l'apparition d'un ordre magnétique pour produire la transition de phase.

Dans les paragraphes qui suivent, nous rappelons brièvement la solution atomique du modèle de Hubbard avant de passer aux approximations Hubbard-I et Hubbard-III.

La limite atomique

La limite atomique se caractérise par l'absence totale du terme cinétique de l'Hamiltonien de Hubbard (4.1). Tout déplacement électronique étant interdit, un électron supplémentaire introduit sur un site quelconque du réseau y reste. Le propagateur à un électron est par conséquent diagonal dans l'espace des positions et devient, après transformation de Fourier, indépendant de la quantité de mouvement:

$$\left\langle\!\left\langle\, a_{\mathbf{k}\sigma};\, a^{+}_{\mathbf{k}\sigma} \,\right\rangle\!\right\rangle^{\mathrm{atom,ret}}_{\omega} \;=\; \frac{1-n_{-\sigma}}{\omega+\mu+\mathrm{i}0^{+}} \;+\; \frac{n_{-\sigma}}{\omega-(U-\mu)+\mathrm{i}0^{+}} \tag{4.9}$$

Le premier terme représente le cas où l'électron supplémentaire de spin σ tombe sur un site vide. L'énergie libre du système ne change qu'à travers le potentiel chimique μ. Le second terme illustre la possibilité suivant laquelle l'électron supplémentaire rencontre un site déjà occupé par un électron de spin opposé. Dans ce cas, outre le potentiel chimique, l'interaction U entre les électrons contribue à l'augmentation de l'énergie libre. Les numérateurs des deux termes rendent compte des probabilités des deux événements considérés.

La partie imaginaire de la fonction de Green (4.9) est constitué de deux pics delta qui, selon les arguments de Mott, devraient s'élargir et se transformer en bandes dès lors que les déplacements d'électrons sont autorisés.

L'Approximation Hubbard-I

Le propagateur à une particule est couplé, par son équation du mouvement, à une fonction de Green plus générale:

$$(\omega+\mu)\left\langle\!\left\langle\, a_{i\sigma};\, a^{+}_{j\sigma} \,\right\rangle\!\right\rangle_{\omega} \;=\; \delta_{ij} \;+\; \sum_{m} t_{im}\left\langle\!\left\langle\, a_{m\sigma};\, a^{+}_{j\sigma} \,\right\rangle\!\right\rangle_{\omega} \;+\; U\left\langle\!\left\langle\, n_{i-\sigma}\, a_{i\sigma};\, a^{+}_{j\sigma} \,\right\rangle\!\right\rangle_{\omega} \tag{4.10}$$

Bien entendu, nous pouvons établir une seconde équation du mouvement pour la fonction de Green $\left\langle\!\left\langle\, n_{i-\sigma}\, a_{i\sigma};\, a^{+}_{j\sigma} \,\right\rangle\!\right\rangle_{\omega}$. Cette procédure nous amène, comme nous l'avons constaté au chapitre 3, à des fonctions de Green de plus en plus générales. L'idée de Hubbard [41] fût d'arrêter cette hiérarchie d'équations en utilisant le découplage suivant pour la fonction de Green la plus générale figurant dans la seconde équation du mouvement:

$$\left\langle\!\left\langle\, a^{+}_{i-\sigma} a_{l-\sigma} a_{m\sigma};\, a^{+}_{j\sigma} \,\right\rangle\!\right\rangle_{\omega} \;\approx\; \left\langle\, a^{+}_{i-\sigma} a_{l-\sigma} \,\right\rangle \left\langle\!\left\langle\, a_{m\sigma};\, a^{+}_{j\sigma} \,\right\rangle\!\right\rangle_{\omega} \tag{4.11}$$

Grâce à cette décomposition, qui ressemble au terme de Hartree de l'éq. (3.30), nous écrivons le propagateur en approximation Hubbard-I sous sa forme finale:

$$\left\langle\!\left\langle\, a_{\mathbf{k}\sigma};\, a^{+}_{\mathbf{k}\sigma} \,\right\rangle\!\right\rangle^{\mathrm{H.-I}}_{\omega} \;=\; \frac{z^{+}_{\sigma}(\mathbf{k})}{\omega - E^{+}_{\sigma}(\mathbf{k})} \;+\; \frac{z^{-}_{\sigma}(\mathbf{k})}{\omega - E^{-}_{\sigma}(\mathbf{k})} \tag{4.12}$$

Les poids et les énergies des quasi-particules sont donnés par

$$E^{\pm}_{\sigma}(\mathbf{k}) \;=\; \frac{1}{2}\left[\varepsilon_{\mathbf{k}} + U \;\pm\; \sqrt{(\varepsilon_{\mathbf{k}} - U)^{2} \;+\; 4U n_{-\sigma}\varepsilon_{\mathbf{k}}}\right] \tag{4.13}$$

$$z^{\pm}_{\sigma}(\mathbf{k}) \;=\; \pm\frac{E^{\pm}_{\sigma}(\mathbf{k}) \;-\; U\,(1 - n_{-\sigma})}{E^{+}_{\sigma}(\mathbf{k}) \;-\; E^{-}_{\sigma}(\mathbf{k})}\,. \tag{4.14}$$

On trouve un certain lien de parenté avec la dispersion des quasi-particules de Slater, l'éq. (4.6). Dans les approximations de Hubbard, à l'encontre de la théorie Hartree-Fock, ces bandes sont dynamiques dans le sens où leur poids $z^{\pm}_{\sigma}(\mathbf{k})$ dépend de l'impulsion $\mathbf{k}$.

Nous constatons que l'approximation Hubbard-I devient exacte dans la limite atomique. Pour s'en convaincre, nous vérifions que sa self-énergie est la même que celle de la limite atomique:

$$\Sigma_{\sigma}(\omega) \;=\; U\,n_{-\sigma} \;+\; U^{2}\frac{n_{-\sigma}\;(1 - n_{-\sigma})}{\omega + \mu - U\;(1 - n_{-\sigma})} \tag{4.15}$$

A remplissage moitié, la solution Hubbard-I décrit une transition de phase d'un métal paramagnétique à un isolant paramagnétique. Comme dans la théorie de Slater, le gap entre la bande inférieure complètement pleine et la bande supérieure vide s'ouvre à $U_{c}^{\mathrm{H.-I}} = 0^{+}$, réduisant la phase métallique à un seul point, $U = 0$.

L'Approximation Hubbard-III

L'approximation Hubbard-I a ensuite été successivement améliorée en tenant compte du fait que les niveaux d'énergie à $-\mu$ et $U - \mu$ se décalent suite à l'interaction entre les électrons [42, 54].

Dans un premier pas, on suppose que l'électron de spin σ se propage dans un milieu d'électrons de spin $-\sigma$ fixés sur des sites arbitraires: c'est l'approximation de l'analogie d'alliage (AAA). L'approximation Hubbard-III abandonne cette idée des électrons gelés en prenant en considération la diffusion résonnante d'un électron ou d'un trou de spin $-\sigma$ par l'électron de spin σ incidant.

Grâce à ces processus, dans le modèle à moitié rempli, la transition Mott-Hubbard se produit à une interaction critique finie qui est du même ordre de grandeur que la largeur de bande, $U_c^{\mathrm{H.-III}} = \sqrt{3}\,W/2$. Malgré ce bon accord avec la conception de la transition métal-isolant de Mott, l'approximation Hubbard-III souffre tout comme Hubbard-I de plusieurs pathologies: en outre, elle est incapable de reproduire les résultats de la théorie Hartree-Fock pour de faibles interactions, elle viole la symétrie électron-trou et plusieurs règles de somme. De plus, son état métallique n'est pas un liquide de Fermi, car elle néglige la répercussion des centres de diffusion (pour des détails voir réf. [3]).

4.4 Application de la théorie RPA

Nous appliquons maintenant la théorie RPA, présentée au chapitre 3 dans ses différentes variantes ("pure", "renormalisée" ou "self-consistante"), au modèle de Hubbard. Bien qu'une généralisation ne pose aucun problème majeur, nous nous restreignons par la suite au modèle à température nulle, avec des déplacements limitées aux voisins les plus proches (voir l'éq. (4.2)) et aux interactions répulsives ($U > 0$). Hormis la convention habituelle $\hbar = 1$, nous posons le paramètre de réseau a=1 et prenons le paramètre de transport électronique t comme unité d'énergie.

Après transformation de Fourier, l'hamiltonien de Hubbard (4.1) devient:

$$H \;=\; \sum_{\mathbf{k}\sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}}\, a^{+}_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma} \;+\; \frac{U}{N} \sum_{\mathbf{kpq}} a^{+}_{\mathbf{k}\uparrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow} a^{+}_{\mathbf{p}\downarrow} a_{\mathbf{p}-\mathbf{q}\downarrow} \tag{4.16}$$

La quantité N désigne le nombre de *sites*, c.à.d. d'ions et non pas d'électrons. Dans la suite et sauf indication contraire, comme dans l'éq. (4.16), toute somme sur les impulsions couvre la première zone de Brillouin. Pour un réseau cubique à d dimensions, la transformée de Fourier du terme de transfert électronique entre sites premiers voisins donne la relation de dispersion

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} \;=\; -2 \sum_{i=1}^{d} \cos k_i \;. \tag{4.17}$$

4.4.1 Corrélations de charge et de spin longitudinal

L'opérateur $\hat{n}_{i\sigma}$ détermine le nombre de particules se trouvant dans l'état de Wannier concentré au site i. Dans l'espace des impulsions il s'écrit

$$\rho_{\mathbf{q}\sigma} \;=\; \sum_{\mathbf{k}} a^{+}_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \;. \tag{4.18}$$

La somme de $\rho_{\mathbf{q}\sigma}$ sur les deux spins nous fournit l'opérateur densité $\rho_{\mathbf{q}}$. Il nous permet d'étudier les fluctuations de densité de charge en introduisant la susceptibilité de charge

$$\chi^{\mathrm{ch}}(\mathbf{q},\omega) \;=\; \frac{1}{N} \left\langle\!\!\left\langle\, (\rho_{\mathbf{q}\uparrow} + \rho_{\mathbf{q}\downarrow});\; (\rho^{+}_{\mathbf{q}\uparrow} + \rho^{+}_{\mathbf{q}\downarrow}) \,\right\rangle\!\!\right\rangle^{\mathrm{ret}}_{\omega} \;. \tag{4.19}$$

Cette fonction décrit la réponse de la densité des électrons, donc de charge, sur un site du système si l'on perturbe cette charge sur un autre site du système. Ses oscillations collectives s'appellent *plasmons*. Désormais nous omettons l'indice "ret", car nous travaillerons exclusivement avec des fonctions de Green retardées.

La composante z du spin au site i n'est autre que la différence entre le nombre d'électrons de spin $\uparrow$ et de spin $\downarrow$ sur ce site. Après transformation de Fourier, nous obtenons

$$S^{z}_{\mathbf{q}} \;=\; \frac{1}{2} \left(\rho_{\mathbf{q}\uparrow} - \rho_{\mathbf{q}\downarrow}\right) . \tag{4.20}$$

Les corrélations entre les composantes z de deux spins s'expriment par le biais de la susceptibilité longitudinale,

$$\begin{aligned} \chi^{\mathrm{sp}}(\mathbf{q},\omega) \;&=\; \frac{1}{N} \left\langle\!\!\left\langle\, S^{z}_{\mathbf{q}};\; S^{z+}_{\mathbf{q}} \,\right\rangle\!\!\right\rangle_{\omega} \\ &=\; \frac{1}{N} \left\langle\!\!\left\langle\, \tfrac{1}{2} \left(\rho_{\mathbf{q}\uparrow} - \rho_{\mathbf{q}\downarrow}\right);\; \tfrac{1}{2} \left(\rho^{+}_{\mathbf{q}\uparrow} - \rho^{+}_{\mathbf{q}\downarrow}\right) \,\right\rangle\!\!\right\rangle_{\omega} \;, \end{aligned} \tag{4.21}$$

avec $S^{z+}_{\mathbf{q}} \equiv S^{z}_{-\mathbf{q}}$. Les singularités de cette quantité à basse énergie et petit impulsion nous signalent une instabilité magnétique.

Nous étudions les susceptibilités $\chi^{\mathrm{ch}}(\mathbf{q},\omega)$ et $\chi^{\mathrm{sp}}(\mathbf{q},\omega)$ en SCRPA à l'aide de la fonction de Green particule-trou

$$\mathcal{G}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q},\omega) \;\equiv\; \left\langle\!\!\left\langle\, a^{+}_{\mathbf{k}\sigma}\, a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma};\; a^{+}_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma'}\, a_{\mathbf{p}\sigma'} \,\right\rangle\!\!\right\rangle_{\omega} \;. \tag{4.22}$$

Par contraste chapitre 3.4, la conservation d'impulsion est déjà assurée dans cette définition.

La fonction de Green SCRPA

Le calcul du propagateur SCRPA s'effectue de façon complètement analogue au chapitre 3.4. Nous nous limitons donc à exposer les résultats. La matrice norme est donnée par

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q}) &\equiv \left\langle \left[a^+_{\mathbf{k}\sigma}\, a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma},\, a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma'}\, a_{\mathbf{p}\sigma'} \right]_- \right\rangle \\ &= \delta_{\mathbf{kp}}\delta_{\sigma\sigma'}\ (n_{\mathbf{k}\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}) \end{aligned} \tag{4.23}$$

où $n_{\mathbf{k}\sigma} \equiv \left\langle a^+_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma} \right\rangle$ est le nombre d'occupation de l'état de Bloch d'impulsion $\mathbf{k}$ et de spin σ. L'hamiltonien effectif de la SCRPA (3.44) devient

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{\mathrm{SC}}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q}) &\equiv \left\langle \left[\left[a^+_{\mathbf{k}\sigma}\, a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma},\, H \right],\, a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma'}\, a_{\mathbf{p}\sigma'} \right]_- \right\rangle \\ &= \delta_{\mathbf{kp}}\delta_{\sigma\sigma'}\ [\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}] \ +\ (n_{\mathbf{k}\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma})\ \mathcal{K}^{\mathrm{SC}}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q}) \end{aligned} \tag{4.24}$$

où $\mathcal{K}^{\mathrm{SC}}$ désigne le noyau intégral introduit dans l'éq. (3.59)

$$\begin{aligned} \mathcal{K}^{\mathrm{SC}}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q}) \ &= \ \delta_{\sigma,-\sigma'}\,\frac{U}{N} \\ &+ \frac{U}{N}\Bigg[-\delta_{\mathbf{kp}}\delta_{\sigma\sigma'} \sum_{\mathbf{q}'} \left\langle \left(a^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'\sigma} a_{\mathbf{k}\sigma} \ +\ a^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\sigma} \right) \rho_{\mathbf{q}-\mathbf{q}',-\sigma} \right\rangle^{\mathrm{c}} \\ &\quad +\delta_{\sigma\sigma'} \left\langle \, a^+_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{p}\sigma}\, \rho_{\mathbf{k}-\mathbf{p},-\sigma} \ +\ a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}\, \rho_{\mathbf{p}-\mathbf{k},-\sigma} \right\rangle^{\mathrm{c}} \\ &\quad +\delta_{\sigma,-\sigma'} \sum_{\mathbf{q}'} \Big\langle \left(a^+_{\mathbf{k}\sigma} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'\sigma} - a^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q}'\sigma} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} \right) \\ &\qquad\qquad \cdot \left(a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{q}',-\sigma} a_{\mathbf{p},-\sigma} - a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{q},-\sigma} a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}',-\sigma} \right) \Big\rangle^{\mathrm{c}} \Bigg] \\ &\cdot \left[\, (n_{\mathbf{k}\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma})\ (n_{\mathbf{p}\sigma'} - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma'}) \, \right]^{-1} \ . \end{aligned} \tag{4.25}$$

Les corrections Hartree-Fock aux énergies à une particule, définies par l'éq. (3.45), sont conformes à celles de la théorie de Stoner (voir l'éq. (4.7)):

$$e_{\mathbf{k}\sigma} \ = \ \varepsilon_{\mathbf{k}} \ +\ U\, n_{-\sigma} \tag{4.26}$$

Elles ne dépendent pas du vecteur d'onde. En conséquence, la différence $e_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma} - e_{\mathbf{k}\sigma}$ reste inchangée par rapport au cas sans interaction. Nous pouvons donc continuer à utiliser les énergies à une particules libres, $\varepsilon_{\mathbf{k}}$.

D'après (3.55), nous écrivons l'équation pour les nombres d'occupation

$$n_{\mathbf{k}\sigma} \ = \ n_\sigma \ - \frac{1}{\pi N} \sum_{\mathbf{q}} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\ \mathrm{Im}\, \mathcal{G}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega) \tag{4.27}$$

où $n_\sigma = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}\sigma}$ désigne le nombre d'électrons de spin σ par site[1]. Les fonctions de corrélation de l'hamiltonien effectif (4.24) se calculent par une équation analogue au théorème de fluctuation-dissipation (3.52):

$$\begin{aligned} \left\langle a^+_{\mathbf{k}\uparrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}\, a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\downarrow} a_{\mathbf{p}\downarrow} \right\rangle^{\mathrm{c}} &\equiv \left\langle a^+_{\mathbf{k}\uparrow} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\uparrow}\, a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\downarrow} a_{\mathbf{p}\downarrow} \right\rangle - \delta_{\mathbf{q}\mathbf{0}} \left\langle n_{\mathbf{k}\uparrow} \right\rangle \left\langle n_{\mathbf{p}\downarrow} \right\rangle \\ &= -\frac{1}{\pi} \int_0^\infty \mathrm{d}\omega\, \mathrm{Im}\, \mathcal{G}_{\mathbf{k}\uparrow\,\mathbf{p}\downarrow}(\mathbf{q},\omega) \end{aligned} \tag{4.28}$$

A la première ligne, nous avons répété la définition précise des moyennes corrélées telles que la fonction de Green nous les fournit et telles que nous les comprenons dans l'éq. (4.25). Nous soulignons que les fluctuations de spin transverse ne sont pas inclues dans cette définition. Elles peuvent être calculées avec une fonction de Green similaire que nous allons présenter au chapitre 4.4.3.

Nous fermons le système d'équations en rappelant que la fonction de Green SCRPA s'obtient par inversion d'une matrice pour chaque $\mathbf{q}$ et ω:

$$\mathcal{G}^{\mathrm{SC}}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q},\omega) = \left[\omega - \mathcal{H}^{\mathrm{SC}}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q})\right]^{-1} (n_{\mathbf{p}\sigma'} - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma'}) \tag{4.29}$$

Elle dépend de l'hamiltonien effectif (4.24), ou encore du noyau intégral (4.25). Toutes les valeurs moyennes figurant dans $\mathcal{H}^{\mathrm{SC}}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q})$ ou dans $\mathcal{K}^{\mathrm{SC}}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q})$ peuvent être évaluées, grâce aux éqs. (4.27) et (4.28), par le biais de la fonction de Green SCRPA. Au chapitre 4.4.3 nous allons voir que cette fermeture du système d'équations n'est pas évidente pour tout ensemble de fonctions de Green: pour le spin transverse, le système d'équations analogue, à lui tout seul, n'est pas fermé, mais reste couplé aux fonctions de charge de ce paragraphe.

La fonction de Green de la RPA renormalisée

Au lieu de résoudre les équations SCRPA d'un seul coup, il est conseillé de passer d'abord par la RPA renormalisée, tel que nous l'avons expliqué au chapitre 3.4.1. Nous négligeons ainsi au premier abord les corrélations à deux corps présentes dans l'hamiltonien effectif de la SCRPA. Un coup d'œil à l'éq. (4.25) nous montre que le noyau intégral $\mathcal{K}^{\mathrm{RPA}}$ est donné par l'interaction de Hubbard

$$\mathcal{K}^{\mathrm{RPA}}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q}) = \delta_{\sigma,-\sigma'} \frac{U}{N} \,. \tag{4.30}$$

[1] Comme nous l'avons constaté au chapitre 3.4, le volume de l'espace des impulsions $\mathcal{V} \equiv \sum_k 1$, équivaut celui de la première zone de Brillouin et reste donc fini sans que nous recourions à une fonction poids.

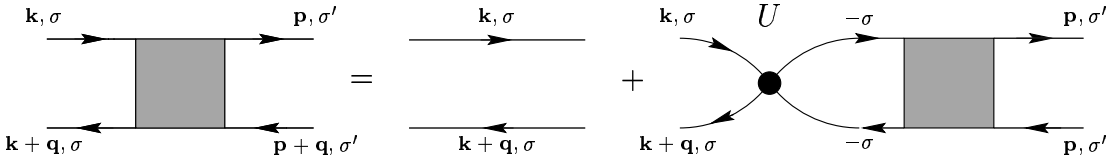
L'équation (3.62) se transforme en une équation intégrale couplant $\mathcal{G}^{\mathrm{RPA}}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{q},\omega)$ et $\mathcal{G}^{\mathrm{RPA}}_{\mathbf{k}-\sigma\,\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{q},\omega)$:

$$\mathcal{G}^{\mathrm{RPA}}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q},\omega) \;=\; \delta_{\mathbf{kp}}\delta_{\sigma\sigma'}\,\mathcal{G}^{0}_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega) \;+\; \mathcal{G}^{0}_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega)\,\frac{U}{N}\sum_{\mathbf{k}'}\mathcal{G}^{\mathrm{RPA}}_{\mathbf{k}'-\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q},\omega) \tag{4.31}$$

Dans cette équation, $\mathcal{G}^{0}_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega)$ prend la place d'un propagateur particule-trou libre,

$$\mathcal{G}^{0}_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega) \;=\; \frac{(n_{\mathbf{k}\sigma}-n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma})}{\omega \;-\; [\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}-\varepsilon_{\mathbf{k}}] \;+\; \mathrm{i}0^{+}}\;, \tag{4.32}$$

qui, malgré son apparence de fonction de Green libre, contient des nombres d'occupation que nous déterminerons de manière self-consistante. En termes de diagrammes de Feynman, l'éq. (4.31) devient:



(4.33)

En RPA renormalisée, l'interaction particule-trou exacte est remplacée par un potentiel retournant le spin de l'électron (et du trou). C'est certainement une bonne approximation pour la diffusion d'un électron supplémentaire dans un cristal antiferromagnétique: la figure 4.3 illustre le fait que l'électron de spin $\downarrow$ introduit sur le site i ne peut pas s'en échapper parce que tous ses voisins sont de même spin. Seul l'électron de spin $\uparrow$, qui occupait le site i avant que l'électron supplémentaire ne s'y introduise, peut se déplacer sur un site voisin. Une fois arrivé, hormis la possibilité de retourner à son site d'origine, l'électron de spin $\uparrow$ est immobilisé, car il est entouré d'autres électrons de spin $\uparrow$. En continuant suivant le même schéma, nous voyons qu'un électron supplémentaire, se déplaçant du site i au site j dans un fondamental antiferromagnétique, retourne tous les spins qui se trouvent sur son chemin. Nous sommes donc capables de reconstituer exactement la trajectoire de l'électron, sauf si elle contient des boucles très compliquées.

Brinkman et Rice ont étudié la situation analogue d'un trou qui se propage dans un milieu antiferromagnétique [55]. Ils en concluent que les trajectoires les plus simples que nous ne pouvons pas reconstituer contiennent au moins douze déplacements: si un trou, comme illustré sur la figure 4.4, fait trois fois le tour d'un carré, nous retrouvons l'état initial. De plus, ils ont démontré que même si

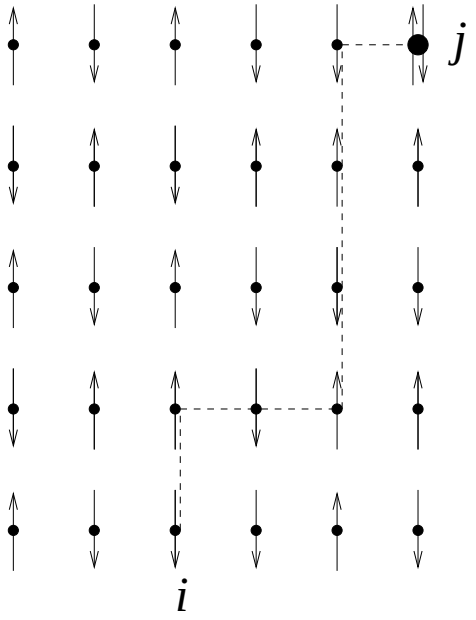


Figure 4.3: *Un électron supplémentaire se propageant, dans un cristal antiferromagnétique, du site i au site j.*

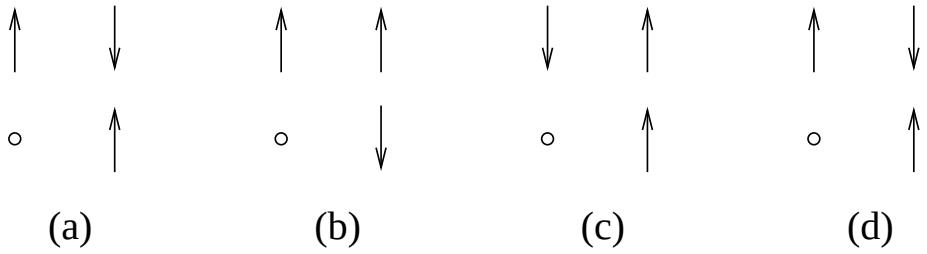


Figure 4.4: *Un trou dans une configuration de spin antiferromagnétique: (a) état initial, (b) après un tour en sens inverse des aiguilles d'une montre, (c) après deux tours, (d) après trois tours (d'après Brinkman et Rice [55]).*

l'arrangement initial des spins est arbitraire, par exemple dans un cristal paramagnétique, le propagateur du trou contient essentiellement des contributions provenant des "trajectoires reconstituables".

La situation reste en gros la même, si nous étudions le comportement d'une excitation particule-trou: ce sont les trajectoires reconstituables qui dominent. Dans une configuration antiferromagnétique, si l'électron et le trou restent proches l'un de l'autre, deux tours suffisent pour décrire une trajectoire que nous n'arriverons pas à reconstituer (voir Fig. 4.5).

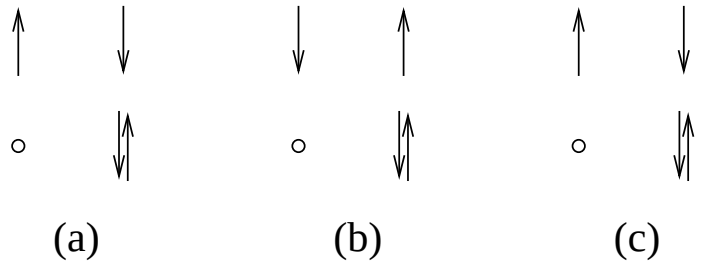


Figure 4.5: *Excitation électron-trou dans une configuration de spin antiferromagnétique: (a) état initial, (b) après un tour en sens inverse des aiguilles d'une montre, (c) après deux tours.*

La dimension spatiale du système joue un rôle crucial dans cette argumentation. Pour des cristaux à une ou à deux dimensions, un ordre magnétique à longue portée, ferromagnétique ou antiferromagnétique, est exclu par le théorème de Mermin-Wagner à toute température finie [56]. Malgré cela, *l'approximation des chemins reconstituables*" est exacte à une dimension ou sur un réseau de Bethe, car il n'existe pas de trajectoire à boucles. Pour des systèmes à trois (ou plus) dimensions, l'erreur provenant des chemins négligés est de l'ordre $\mathcal{O}\left(1/d^4\right)$. Ceci implique que cette approximation devient exacte dans la limite d'un cristal de dimension infinie [3].

La seconde raison pour laquelle nous nous attendons à de meilleurs résultats à dimension haute qu'à basse dimension provient de la moindre importance des corrélations: nous nous rappelons que nous sommes passés de la SCRPA à la RPA renormalisée en négligeant les corrélations à deux corps figurant dans le noyau intégral $\mathcal{K}^{\mathrm{SC}}$. Dans le prochain chapitre nous verrons que la RPA renormalisée prédit, même à une dimension, une transition Mott-Hubbard à une interaction critique finie. Ce scénario, que l'on peut considérer comme générique pour la RPA, est sûrement faux à une dimension. Néanmoins, il pourrait être assez réaliste à dimensions plus élevées,

comme le confirment d'autres méthodes telles que l'approximation Hubbard-III [42] ou les Bosons-Esclaves [51, 50].

Procédons à la solution de l'équation intégrale (4.31). En itérant une fois, nous découplons les équations pour $\mathcal{G}^{\rm RPA}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{q},\omega)$ et $\mathcal{G}^{\rm RPA}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}-\sigma}(\mathbf{q},\omega)$

$$\begin{aligned}
\mathcal{G}^{\rm RPA}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{q},\omega) &= \delta_{\mathbf{kp}}\,\mathcal{G}^{0}_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega) \\
&\quad + \mathcal{G}^{0}_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega)\,U\,\chi^{0}_{-\sigma}(\mathbf{q},\omega)\,\frac{U}{N}\sum_{\mathbf{k}'}\mathcal{G}^{\rm RPA}_{\mathbf{k}'\sigma\,\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{q},\omega) \\
\mathcal{G}^{\rm RPA}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}-\sigma}(\mathbf{q},\omega) &= \mathcal{G}^{0}_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega)\,\frac{U}{N}\,\mathcal{G}^{0}_{\mathbf{p}-\sigma}(\mathbf{q},\omega) \\
&\quad + \mathcal{G}^{0}_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega)\,U\,\chi^{0}_{-\sigma}(\mathbf{q},\omega)\,\frac{U}{N}\sum_{\mathbf{k}'}\mathcal{G}^{\rm RPA}_{\mathbf{k}'\sigma\,\mathbf{p}-\sigma}(\mathbf{q},\omega) \qquad (4.34)
\end{aligned}$$

où nous avons utilisé la susceptibilité "libre",

$$\chi^{0}_{\sigma}(\mathbf{q},\omega) \;=\; \tfrac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}}\mathcal{G}^{0}_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega)\;, \qquad (4.35)$$

qui, bien entendu, contient l'interaction à travers les nombres d'occupation renormalisés. La solution des éqs. (4.34) nous fournit les expressions analytiques suivantes pour les fonctions de Green particule-trou:

$$\mathcal{G}^{\rm RPA}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{q},\omega) \;=\; \mathcal{G}^{0}_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega)\left[\delta_{\mathbf{kp}} \;+\; \frac{U}{N}\,\mathcal{G}^{0}_{\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{q},\omega)\,\frac{U\chi^{0}_{-\sigma}(\mathbf{q},\omega)}{1-U\chi^{0}_{\uparrow}(\mathbf{q},\omega)\,U\chi^{0}_{\downarrow}(\mathbf{q},\omega)}\right] \qquad (4.36)$$

et

$$\mathcal{G}^{\rm RPA}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}-\sigma}(\mathbf{q},\omega) \;=\; \mathcal{G}^{0}_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega)\frac{U}{N}\,\mathcal{G}^{0}_{\mathbf{p}-\sigma}(\mathbf{q},\omega)\,\frac{1}{1-U\chi^{0}_{\uparrow}(\mathbf{q},\omega)\,U\chi^{0}_{\downarrow}(\mathbf{q},\omega)} \qquad (4.37)$$

Sur le plan technique, l'existence de cette solution explicite constitue un grand avantage de la RPA renormalisée par rapport à la SCRPA!

Restent à calculer les nombres d'occupation de manière self-consistante à partir de l'éq. (4.27). Au chapitre 5.3 nous exposerons plus en détail qu'il s'agit une procédure plus délicate qu'il n'y paraît au premier abord: si nous commençons ce cycle d'itérations avec les nombres d'occupation libres (c.à.d. en forme de saut), il y a forcément quelques impulsions pour lesquelles la réponse du spin est instable. Ces instabilités correspondent à des pôles de la fonction de Green RPA à fréquences purement imaginaires. Leurs contributions aux nombres d'occupation, à travers l'éq. (4.27), peuvent parfois conduire à des résultats non physiques. Par exemple, l'intégrale de la partie imaginaire de la fonction de Green $\mathcal{G}^{\rm RPA}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}-\sigma}(\mathbf{q},\omega)$ sur

tout l'axe des ω peut devenir finie à cause de ces instabilités. D'autre part, nous savons que cette intégrale doit s'annuler, car le théorème spectral (3.38) la relie à un commutateur nul. Ce défaut se corrige lorsqu'on itère le système d'équations non-linéaires. Les nombres d'occupation s'arrondissent, ce qui atténue l'interaction de telle façon que les pôles de spin à fréquences imaginaires disparaissent. Dès que la solution self-consistante est atteinte, l'intégrale de $\mathrm{Im}\,\mathcal{G}^{\mathrm{RPA}}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}-\sigma}(\mathbf{q},\omega)$ sur toutes les fréquences se réduit à zéro, en accord avec le théorème spectral.

Mise en œuvre numérique de la SCRPA et de la RPA renormalisée

La solution numérique de chacun des deux systèmes d'équations non-linéaires demande une discrétisation de l'axe des fréquence (en P_ω points) et de l'espace des impulsions (en $P_{\mathbf{k}}$ points).

En SCRPA, pour une seule itération du système d'équations, il faut passer par les étapes suivantes:

- Déterminer les nombres d'occupation selon l'éq. (4.27), c.à.d. évaluer à chaque $\mathbf{k}$ une intégrale sur $\mathbf{q}$ et ω. Le nombre d'opérations élémentaires sollicité par cette tâche est de l'ordre $\mathcal{O}\left(P_{\mathbf{k}}^2 P_\omega\right)$.

- Calculer toutes les densités à deux corps, en évaluant, d'après (4.28), à chaque $\mathbf{k}$, $\mathbf{p}$ et $\mathbf{q}$, une intégrale sur ω. Cette étape implique $\mathcal{O}\left(P_{\mathbf{k}}^3 P_\omega\right)$ opérations élémentaires.

- Reste à calculer la fonction de Green, ce qui, d'après (4.29), implique une inversion d'une matrice $P_{\mathbf{k}} \times P_{\mathbf{k}}$ à chaque $\mathbf{q}$ et ω. L'inversion d'une matrice, même avec des algorithmes plus sophistiqués que Gauss-Jordan [57, 58], nécessite $\mathcal{O}\left(P_{\mathbf{k}}^3\right)$ opérations, impliquant une complexité numérique totale de l'ordre $\mathcal{O}\left(P_{\mathbf{k}}^4 P_\omega\right)$.

Il en résulte qu'une itération implique $\mathcal{O}\left(P_{\mathbf{k}}^4 P_\omega\right)$ opérations numériques élémentaires (additions, soustractions, multiplications etc.). Les plus grandes matrices à stocker sont les fonctions de Green $\mathcal{G}_{\mathbf{k}\uparrow\,\mathbf{p}\downarrow}(\mathbf{q},\omega)$, qui contiennent $P_{\mathbf{k}}^3\, P_\omega$ nombres à virgule flottante.

Posons $P_{\mathbf{k}} = 32$ et $P_\omega = 64$ pour la solution d'un système unidimensionnel. Nous verrons au chapitre 5.3 que ceci est une exigence minimale pour la chaîne de Hubbard, à cause des nombreuses singularités et instabilités. La mémoire nécessaire pour

stocker la fonction de Green $\mathcal{G}_{\mathbf{k}\uparrow\,\mathbf{p}\downarrow}(\mathbf{q},\omega)$ à elle toute seule, est alors déjà de plusieurs Mega-octets ($8 \times 2^{3\times5+6}\,\mathrm{B} = 16\,\mathrm{MB}$ en précision double). Le nombre d'opérations élémentaires à effectuer au cours d'*une seule* itération est de quelques centaines de millions d'opérations.

A deux dimensions ($P_{\mathbf{k}} = 32 \times 32$), la mémoire nécessaire augmente à $2^{39}\,\mathrm{B} \approx 500\,\mathrm{GB}$ et une seule itération demande de l'ordre de 2^{46} additions et multiplications. Inutile de préciser qu'une telle tâche numérique restera, même à moyen terme, insurmontable!

Passons à l'analyse d'une itération du système d'équations de la RPA renormalisée:

- Le nombre d'opérations élémentaires pour le calcul des $n_{\mathbf{k}\sigma}$ reste de l'ordre $\mathcal{O}\left(P_{\mathbf{k}}^2 P_\omega\right)$.

- L'intégration des susceptibilités $\chi^0_\sigma(\mathbf{q},\omega)$ à partir de (4.35) demande $\mathcal{O}\left(P_{\mathbf{k}}^2 P_\omega\right)$ opérations.

- Cette fois, nous n'avons besoin que de la partie diagonale de la fonction de Green, $\mathcal{G}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{k}\sigma'}(\mathbf{q},\omega)$, que, de plus, nous sommes parvenus à déterminer de façon analytique (voir les éqs. (4.36) et (4.37)). Par conséquent, la complexité de cette démarche se limite à $\mathcal{O}\left(P_{\mathbf{k}}^2 P_\omega\right)$ opérations.

Les plus grandes matrices, $\mathcal{G}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega)$ et $\mathcal{G}^0_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega)$, contiennent maintenant "seulement" $P_{\mathbf{k}}^2 P_\omega$ nombres à virgule flottante.

Nous en concluons, qu'en passant de la SCRPA à la RPA renormalisée, le nombre d'opérations numériques se réduit d'un facteur $P_{\mathbf{k}}^2$, tandis que la mémoire demandée diminue d'un facteur $P_{\mathbf{k}}$. Au chapitre 5.3 nous verrons que la solution de la chaîne de Hubbard en RPA renormalisée représente, malgré ces simplifications, une tâche numérique considérable.

La RPA pure

Bien entendu, la *RPA pure* est incluse dans les théories améliorées telles que la RPA renormalisée ou la SCRPA. Nous la retrouvons à partir de la RPA renormalisée en fixant les nombres d'occupation à leurs valeurs Hartree-Fock

$$n^{\mathrm{HF}}_{\mathbf{k}\sigma} \;=\; \Theta(E_{\mathrm{F}} - \varepsilon_{\mathbf{k}})\;. \tag{4.38}$$

Il en résulte que $\mathcal{G}^0_{\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{q},\omega)$ et $\chi^0_\sigma(\mathbf{q},\omega)$ deviennent effectivement des fonctions de Green libres.

La phase paramagnétique

Si nous supposons le système dans la phase paramagnétique, nous avons

$$n_{\mathbf{k}\uparrow} = n_{\mathbf{k}\downarrow} \tag{4.39}$$

et, par conséquent,

$$\mathcal{G}^0_{\mathbf{k}\uparrow}(\mathbf{q},\omega) = \mathcal{G}^0_{\mathbf{k}\downarrow}(\mathbf{q},\omega) \qquad \text{et} \qquad \chi^0_\uparrow(\mathbf{q},\omega) = \chi^0_\downarrow(\mathbf{q},\omega)\,. \tag{4.40}$$

Nous retrouvons la structure de susceptibilité RPA habituelle pour $\chi^{\rm ch}(\mathbf{q},\omega)$ et $\chi^{\rm sp}(\mathbf{q},\omega)$, respectivement, par addition et soustraction des éqs. (4.36) et (4.37). Après sommation sur $\mathbf{k}$ et $\mathbf{p}$, nous obtenons:

$$\begin{aligned}
\chi^{\rm ch}(\mathbf{q},\omega) &= \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}\sigma}\left[\mathcal{G}^{\rm RPA}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{q},\omega) + \mathcal{G}^{\rm RPA}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}-\sigma}(\mathbf{q},\omega)\right] \\
&= \frac{2\chi^0(\mathbf{q},\omega)}{1-U\chi^0(\mathbf{q},\omega)} \qquad (4.41)\\
\chi^{\rm sp}(\mathbf{q},\omega) &= \frac{1}{4N}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{p}\sigma}\left[\mathcal{G}^{\rm RPA}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma}(\mathbf{q},\omega) - \mathcal{G}^{\rm RPA}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}-\sigma}(\mathbf{q},\omega)\right] \\
&= \frac{\frac{1}{2}\chi^0(\mathbf{q},\omega)}{1+U\chi^0(\mathbf{q},\omega)} \qquad (4.42)
\end{aligned}$$

4.4.2 La règle de somme pondérée par l'énergie

Le fait que les opérateurs densité $\rho_{\mathbf{q}\sigma}$ commutent avec l'interaction de Hubbard nous permet d'évaluer les valeurs moyennes $\left\langle \left[[\rho_{\mathbf{q}\sigma},\, H],\, \rho^+_{\mathbf{q}\sigma'}\right]_- \right\rangle$ de façon analytique. Nous établissons ainsi une *règle de somme pondérée par l'énergie* pour les susceptibilités exactes $\chi^{\rm ch}(\mathbf{q},\omega)$ et $\chi^{\rm sp}(\mathbf{q},\omega)$. Dans ce paragraphe nous discutons les circonstances suivant lesquelles les fonctions de Green de la SCRPA, de la RPA renormalisée et de la RPA pure satisfont à cette règle de somme.

Calculons d'abord la valeur moyenne du double commutateur

$$\begin{aligned}
\left\langle \left[[\rho_{\mathbf{q}\sigma},\, H],\, \rho^+_{\mathbf{q}\sigma'}\right]_- \right\rangle &= \delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\mathbf{k}}\left[\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}}\right]\left(n_{\mathbf{k}\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\sigma}\right) \\
&= \delta_{\sigma\sigma'}\, 2\sum_{i=1}^{d}\left(\cos q_i - 1\right)\sum_{k_i}\varepsilon_{\{k_i\}}\, n_{\{k_i\}\sigma} \qquad (4.43)
\end{aligned}$$

où les k_i sont les composantes du vecteur d'onde $\mathbf{k}$. La première ligne est complètement générale, tandis que la seconde n'est valable que pour la dispersion (4.17) d'un réseau cubique simple. La dispersion d'une particule libre dans un système homogène a la forme $\mathbf{k}^2/(2m)$. Elle nous donnerait à la seconde ligne le résultat $n_\sigma\,\mathbf{q}^2/m$ bien connu (voir, par exemple, réf. [30]). Soulignons encore une fois que, dans les deux cas, toutes les contributions du terme d'interaction s'annulent, car $\rho_{\mathbf{q}\sigma}$ commute avec l'opérateur d'interaction.

La règle de somme f, que nous avons dérivée au chapitre 3.3.1 pour une fonction de Green générale, lie le double commutateur (4.43) à la partie imaginaire de la susceptibilité retardée exacte par le biais d'une intégrale pondérée sur toutes les fréquences:

$$\left\langle \left[[\rho_{\mathbf{q}\sigma},\, H],\, \rho^+_{\mathbf{q}\sigma'} \right] \right\rangle \;=\; -\frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\; \omega\; \mathrm{Im} \left\langle\!\!\left\langle \rho_{\mathbf{q}\sigma};\, \rho^+_{\mathbf{q}\sigma'} \right\rangle\!\!\right\rangle^{\mathrm{ret}}_{\omega} \tag{4.44}$$

Nous avons démontré que la fonction de Green SCRPA satisfait à cette règle de somme. L'intégrale apparaissant dans le membre de droite de l'éq. (4.44) nous conduit à l'hamiltonien effectif de la SCRPA multiplié par la matrice norme:

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\pi} \int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\; \omega\; \mathrm{Im} \left\langle\!\!\left\langle \rho_{\mathbf{q}\sigma};\, \rho^+_{\mathbf{q}\sigma'} \right\rangle\!\!\right\rangle^{\mathrm{SC}}_{\omega} \;&=\; \sum_{\mathbf{kp}} \sum_{\mathbf{p}_1\sigma_1} \mathcal{H}^{\mathrm{SC}}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}_1\sigma_1}(\mathbf{q})\, \mathcal{N}_{\mathbf{p}_1\sigma_1\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q}) \\ &=\; \left\langle \left[[\rho_{\mathbf{q}\sigma},\, H],\, \rho^+_{\mathbf{q}\sigma'} \right] \right\rangle \end{aligned} \tag{4.45}$$

On vérifie aisément que la somme sur $\mathbf{k}$ et $\mathbf{p}$ fait disparaître toutes les contributions contenant des corrélations à deux corps. Or, en RPA renormalisée, on néglige ces moyennes corrélées déjà dans l'hamiltonien effectif (4.24), soit dans le noyau intégral (4.25). Le résultat (4.45) reste alors inchangé pour la fonction de Green de la RPA renormalisée. Elle est donc en accord avec la règle de somme pondérée par l'énergie.

Il est bien connu [33, 59] que même la *RPA pure* satisfait à la règle de somme (4.44), si nous calculons la valeur moyenne du double commutateur sur le fondamental de la théorie Hartree-Fock. Cet accord est tout de même soumis à une contrainte: il est seulement assuré si toutes les fréquences RPA sont réelles.

Afin de dériver les règles de somme pondérées par l'énergie pour les susceptibilités $\chi^{\mathrm{ch}}(\mathbf{q},\omega)$ et $\chi^{\mathrm{sp}}(\mathbf{q},\omega)$, nous combinons l'éq. (4.44) pour les différentes configurations de spin, selon les définitions de la susceptibilité de charge (4.19) et de spin longitu-

dinal (4.21):

$$2\sum_{i=1}^{d}(\cos q_i - 1)\left\langle \hat{t^i} \right\rangle = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\ \omega\ \mathrm{Im}\,\chi^{\mathrm{ch}}(\mathbf{q},\omega) \tag{4.46}$$

$$\tfrac{1}{2}\sum_{i=1}^{d}(\cos q_i - 1)\left\langle \hat{t^i} \right\rangle = -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\ \omega\ \mathrm{Im}\,\chi^{\mathrm{sp}}(\mathbf{q},\omega) \tag{4.47}$$

Dans le membre de gauche, nous avons introduit l'abréviation

$$\left\langle \hat{t^i} \right\rangle = \tfrac{1}{N}\sum_{k_i\sigma} \varepsilon_{\{k_i\}}\, n_{\{k_i\}\sigma} \tag{4.48}$$

pour la partie de l'énergie cinétique moyenne provenant du mouvement des électrons dans la direction i. Evidemment cette valeur moyenne dépend des nombres d'occupation, donc implicitement aussi de la fonction de Green. En revanche, pour la dispersion $\mathbf{k}^2/(2m)$, la valeur du double commutateur n'est fonction que du nombre d'électrons par site (c.à.d. du remplissage), qui est une quantité complètement indépendante. Pour une dispersion en forme de cosinus, c'est la dépendance en $\mathbf{q}$ de la règle de somme qui nous fournit ce test absolu.

Nous terminons ce paragraphe en concluant que l'accord de la SCRPA et de la RPA renormalisée avec la règle de somme pondérée par l'énergie est un résultat important. D'autres théories qui cherchent à améliorer la RPA soit violent cette règle de somme, soit l'imposent en ajustant un paramètre libre [60, 61, 62].

4.4.3 Corrélations de spin transverse

Nous consacrons le dernier paragraphe de ce chapitre à la réponse du spin transverse.

Les opérateurs $S_i^{\pm}$ retournent le spin de l'électron au site i. Ils peuvent être remplacés par une combinaison de deux opérateurs fermioniques, dont le premier annihile un électron de spin σ et le second crée un électron de spin $-\sigma$. Dans l'espace des impulsions, ils s'écrivent

$$S_{\mathbf{q}}^{+} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}\uparrow}^{+} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow} \qquad \text{and} \qquad S_{\mathbf{q}}^{-} = \sum_{\mathbf{k}} a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}\downarrow}^{+} a_{\mathbf{q}\uparrow}\ . \tag{4.49}$$

L'étude des corrélations entre deux excitations de spin se fait à partir de la susceptibilité de spin transverse

$$\chi^{+-}(\mathbf{q},\omega) = \frac{1}{N}\left\langle\!\!\left\langle S_{\mathbf{q}}^{+};\, S_{\mathbf{q}}^{-} \right\rangle\!\!\right\rangle_{\omega}\ . \tag{4.50}$$

Ses pôles collectifs sont des ondes de spin ou *magnons*.

En analogie complète avec les corrélations de densité de charge, nous définissons la fonction de Green

$$\mathcal{G}^{\rm trans}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q},\omega) \equiv \left\langle\!\!\left\langle\, a^+_{\mathbf{k}\sigma}\, a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},-\sigma};\; a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{q},-\sigma'}\, a_{\mathbf{p}\sigma'} \,\right\rangle\!\!\right\rangle_\omega \ . \tag{4.51}$$

La matrice norme est donnée par la valeur moyenne du commutateur entre les deux côtés de la fonction de Green

$$\mathcal{N}^{\rm trans}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q}) \;=\; \delta_{\mathbf{k}\mathbf{p}}\delta_{\sigma\sigma'}\;(n_{\mathbf{k}\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},-\sigma}) \ . \tag{4.52}$$

L'hamiltonien effectif de la SCRPA devient

$$\mathcal{H}^{\rm trans}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q}) \;=\; \delta_{\mathbf{k}\mathbf{p}}\delta_{\sigma\sigma'}\;[\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}} - \varepsilon_{\mathbf{k}} + z_\sigma\, Um] \;+\; (n_{\mathbf{k}\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},-\sigma})\;\mathcal{K}^{\rm trans}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q}) \tag{4.53}$$

avec $z_\uparrow = +1$ et $z_\downarrow = -1$. L'aimantation $m = n_\uparrow - n_\downarrow$ apparaît dans la partie "libre" suite aux corrections Hartree-Fock des énergies à une particule (4.26). Le noyau intégral s'écrit

$$\begin{aligned}
\mathcal{K}^{\rm trans}_{\mathbf{k}\sigma\,\mathbf{p}\sigma'}(\mathbf{q}) \;=\; & -\delta_{\sigma\sigma'}\,\frac{U}{N} \\
& + \frac{U}{N}\Bigg[\, -\delta_{\mathbf{k}\mathbf{p}}\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\mathbf{q}'}\Big\langle\, a^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q},-\sigma}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}',-\sigma}\,\rho_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'\sigma} \;+\; a^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'\sigma}a_{\mathbf{k}\sigma}\,\rho_{\mathbf{q}-\mathbf{q}',-\sigma}\,\Big\rangle^{\rm c} \\
& \qquad -\delta_{\sigma\sigma'}\sum_{\mathbf{q}'}\Big\langle\, \Big(a^+_{\mathbf{k}\sigma}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'\sigma} - a^+_{\mathbf{k}+\mathbf{q}',-\sigma}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},-\sigma}\Big) \\
& \qquad\qquad \cdot\Big(a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'\sigma}a_{\mathbf{p}\sigma} - a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{q},-\sigma}a_{\mathbf{p}+\mathbf{q}',-\sigma}\Big)\,\Big\rangle^{\rm c} \\
& \qquad -\delta_{\sigma,-\sigma'}\Big\langle\, a^+_{\mathbf{k}\sigma}a_{\mathbf{p},-\sigma}\,S^\sigma_{\mathbf{k}-\mathbf{p}} \;+\; a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{q}\sigma}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},-\sigma}\,S^\sigma_{\mathbf{p}-\mathbf{k}}\,\Big\rangle^{\rm c}\Bigg] \\
& \cdot\,[(n_{\mathbf{k}\sigma} - n_{\mathbf{k}+\mathbf{q},-\sigma})\;(n_{\mathbf{p}\sigma'} - n_{\mathbf{p}+\mathbf{q},-\sigma'})\,]^{-1}
\end{aligned} \tag{4.54}$$

où, en dehors de l'opérateur densité $\rho_{\mathbf{q}\sigma}$ de l'éq. (4.18), nous avons utilisé l'abréviation

$$S^\sigma_{\mathbf{q}} \;=\; \sum_{\mathbf{k}} a^+_{\mathbf{k}\sigma}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q},-\sigma} \ , \tag{4.55}$$

en suivant la définition (4.49) de $S^+_{\mathbf{q}}$.

La fonction de Green transverse ne nous donne pas la possibilité de déterminer toutes les corrélations à deux corps figurant dans son hamiltonien effectif: des termes telles que $\left\langle a^+_{\mathbf{k}\uparrow}a_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'\uparrow}\,a^+_{\mathbf{p}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'\uparrow}a_{\mathbf{p}\uparrow}\right\rangle^{\rm c}$ ne peuvent pas être obtenus à partir du théorème de fluctuation-dissipation pour la fonction de Green transverse, car elle

possède toujours le même nombre d'opérateurs à spin $\uparrow$ qu'à spin $\downarrow$. C'est la fonction de Green de charge (4.22) qui nous fournit les fonctions de corrélation manquantes. Nous arrivons ainsi à un système d'équations non-linéaires couplant la réponse de spin transverse $\chi^{+-}(\mathbf{q},\omega)$ aux susceptibilités $\chi^{\mathrm{sp}}(\mathbf{q},\omega)$ et $\chi^{\mathrm{ch}}(\mathbf{q},\omega)$. Bien entendu, nous pouvons résoudre ce système de manière self-consistante selon le schéma exposé au chapitre 4.4.1. C'est malgré tout un aspect que nous ne développerons pas plus dans cette thèse.

Chapitre 5

La chaîne de Hubbard

Nous commencerons ce chapitre en rappelant la notion du liquide de Fermi et les problème qui en surgissent à une dimension. Cela nous amènera au modèle de Luttinger, qui représente, en quelque sorte, le prototype des modèles unidimensionnels. Au chapitre 5.2 nous rendrons hommage à la solution exacte de la chaîne de Hubbard par ansatz de Bethe, dont les idées principales se retrouvent dans beaucoup d'autres modèles exactement solubles.

La plus grande partie de ce chapitre sera consacrée aux résultats de la théorie RPA appliquée au modèle de Hubbard à une dimension. Comme cela a déjà été expliqué dans les chapitres précédents, une approche RPA, même améliorée, s'applique plutôt à des dimensions plus élevées. Cependant, pour des raisons numériques, nous restons à une dimension et espérons que les résultats seront génériques pour des dimensions plus élevées. Nous allons néanmoins voir, que même à une dimension, notre théorie permet de produire quelques résultats intéressants et encourageants.

5.1 Les liquides de Fermi et de Luttinger

Nous présenterons par la suite la théorie du liquide de Fermi, tout en insistant sur les hypothèses qu'elle incorpore. A cause des problèmes concernant ces hypothèses, elle doit être substituée, à une dimension, par la théorie de Luttinger.

5.1.1 La théorie de Landau du liquide de Fermi et son collapse à une dimension

Une fonction de Green à une particule complètement générale peut s'écrire, comme nous l'avons rappelé au chapitre 3.2, sous la forme

$$G(\mathbf{k},\omega) \equiv \left\langle\!\!\left\langle a_{\mathbf{k}};\, a_{\mathbf{k}}^{+} \right\rangle\!\!\right\rangle_{\omega} = \frac{1}{\omega - [\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu + \Sigma(\mathbf{k},\omega)]} \,. \tag{5.1}$$

L'interaction entre les particules se manifeste exclusivement dans la self-énergie $\Sigma(\mathbf{k},\omega)$. Les pôles de la fonction de Green nous fournissent les excitations à une particule:

$$\Omega_{\mathbf{k}} - [\varepsilon_{\mathbf{k}} - \mu + \mathrm{Re}\,\Sigma(\mathbf{k},\Omega_{\mathbf{k}})] = 0 \tag{5.2}$$

Aux énergies (ou températures) petites comparées à l'énergie de Fermi, le système avec interactions est constitué par le fondamental libre et par des excitations élémentaires. Selon les idées de Landau, ces excitations se comportent comme un gaz dilué de *quasi-particules* qui apparaissent de façon continue lorsque l'interaction est établie adiabatiquement. De plus, elles correspondent de manière univoque aux particules nues, c.à.d. elles ont les mêmes nombres quantiques et l'interaction modifie uniquement leurs qualités dynamiques par rapport aux particules libres.

Concrètement, nous linéarisons l'éq. (5.2) pour des excitations près de la surface de Fermi, qui, grâce à la représentation grand-canonique, se trouve à $\omega = 0$. La fonction de Green devient alors [30, 63, 64]

$$G(\mathbf{k},\omega) = G_{inc}(\mathbf{k},\omega) + \frac{z_{\mathbf{k}}}{(\omega - \Omega_{\mathbf{k}}) - \tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}}} \,. \tag{5.3}$$

Le résidu de quasi-particule est donné par

$$z_{\mathbf{k}} = \left[1 - \frac{\partial \mathrm{Re}\,\Sigma(\mathbf{k},\Omega_{\mathbf{k}})}{\partial \Omega_{\mathbf{k}}}\right]^{-1} \,. \tag{5.4}$$

La masse effective m^* de la quasi-particule figurant dans a dispersion linéarisée à la surface de Fermi,

$$\tilde{\varepsilon}_{\mathbf{k}} = \frac{k_F}{m^*}\,(|\mathbf{k}| - k_F) \,, \tag{5.5}$$

s'obtient en développant la fonction de Green (5.1) à $|\mathbf{k}| = k_F$ et à la fréquence de pôle $\Omega_{\mathbf{k}}$. Elle est reliée à la masse m de la particule libre par

$$\frac{m^*}{m} = \left[\frac{1 - \dfrac{\partial \mathrm{Re}\,\Sigma(\mathbf{k},\Omega_{\mathbf{k}})}{\partial \Omega_{\mathbf{k}}}}{1 + \dfrac{\partial \mathrm{Re}\,\Sigma(\mathbf{k},\Omega_{\mathbf{k}})}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}}}}\right]_{|\mathbf{k}|=k_F} \,. \tag{5.6}$$

Dans la représentation de la fonction de Green (5.3), *l'hypothèse de la continuité adiabatique* de Landau est incorporée à différents endroits:

- Près de la surface de Fermi, nous supposons la self-énergie $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ suffisamment régulière pour permettre un développement en série. La régularité en $\mathbf{k}$ et ω implique qu'elle ne contient pas des contributions qui décroissent lentement en temps ou en distance [65].

- Nous présumons que, pour chaque $\mathbf{k}$, il existe une solution *unique* de l'éq. (5.2). A chaque particule réelle correspond donc exactement une quasi-particule.

- La self-énergie est purement réelle à la surface de Fermi, car une partie imaginaire limiterait la durée de vie de la quasi-particule. Loin de la surface de Fermi, les quasi-particules subsistent seulement si $\mathrm{Im}\,\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ est petit (ce qui généralement n'est pas le cas).

La distribution des impulsions $n_{\mathbf{k}}$ se calcule à partir du théorème de fluctuation-dissipation (2.58) pour la fonction de Green (5.3). On vérifie aisément que la hauteur du saut à la surface de Fermi est déterminée par le résidu de quasi-particule $z_{\mathbf{k}}$ (voir Fig. 5.1).

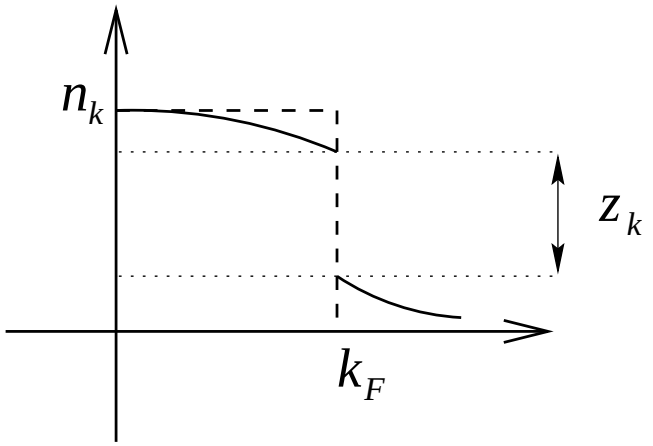


Figure 5.1: *Distribution des impulsions dans un liquide de Fermi sans interactions (lignes pointillées) et avec interactions (lignes continues)*

Bien entendu, l'hypothèse de la continuité adiabatique doit être mise en examen pour chaque application. A trois dimensions, elle est très bien satisfaite pour des

interactions répulsives. Or elle s'effondre pour des interactions attractives, aussi faibles qu'elles soient, car l'instabilité de Cooper entraîne une transition à une phase supraconductrice.

A une dimension, c'est *l'instabilité de Peierls* qui pose problème[1]: elle nous donne la possibilité de créer une excitation particule-trou pratiquement sans dépenser de l'énergie en déplaçant une particule de la surface de Fermi à $-k_F$ à celle à $+k_F$. Bien sûr, cette possibilité existe aussi à deux ou trois dimensions. L'ensemble des vecteurs d'onde $\mathbf{q}$ qui permettent ce genre d'excitations est généralement de mesure zéro (Fig. 5.2a), sauf pour des configurations avec emboîtement de la surface de Fermi (Fig. 5.2b). On parle d'emboîtement, si, pour un certain vecteur d'emboîtement $\mathbf{Q}$,

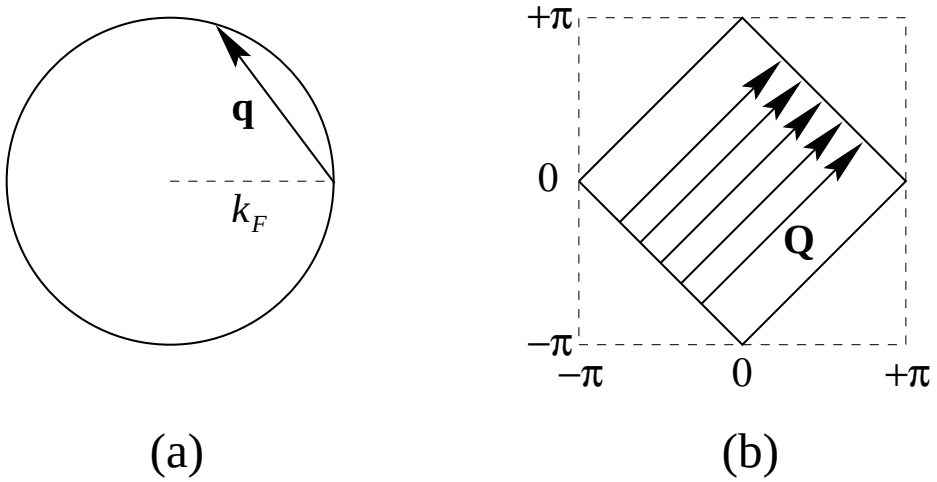


Figure 5.2: *Surfaces de Fermi pour des systèmes à deux dimensions. (a) système homogène (emboîtement négligeable), (b) réseau cubique simple à remplissage moitié (emboîtement parfait pour le vecteur* $\mathbf{Q}$*)*

il existe un nombre considérable de vecteurs $\mathbf{k}$ sur la surface de Fermi qui satisfont à la condition

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = -\varepsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{Q}} \,. \tag{5.7}$$

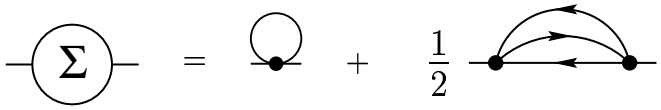
A une dimension, l'emboîtement parfait est garanti par la parité de la dispersion. Des processus de diffusion avec transfert d'impulsion, mais sans transfert d'énergie

[1] L'instabilité de Peierls à été découverte dans une chaîne d'électrons où l'interaction avec les phonons provoque une déformation du réseau. Elle entraîne une légère dimérisation des électrons ouvrant un gap pour les excitations à une particule de l'ordre de l'énergie de liaison des paires [66, 67].

sont donc non négligeables, ou *marginaux* dans le sens de la théorie de groupe de renormalisation [66]. A dimensions plus élevées ou dans des système sans emboîtement considérable, ces processus sont *non pertinents* (irrelevant).

Un autre aspect problématique dans la description d'un système unidimensionnel à base de quasi-particules est mis en évidence par le spectre des excitations particule-trou créées à partir de la mer de Fermi, $a^+_{k+q}a_k|FS\rangle$. La figure 5.3a montre que, à une dimension, des excitations particule-trou à basses énergies existent seulement pour des vecteurs d'onde autour de $q = 0$ et autour du vecteur de Peierls $|q| = 2k_F$. Près de la surface de Fermi, la dispersion à une particule est presque linéaire. Les énergies des excitations particule-trou sont donc presque les mêmes pour des différents k. La superposition cohérente de ces excitations donne lieu à un mode collectif à dispersion linéaire en q (ligne discontinue). Le spectre étant creux à basses fréquences, ce mode ne peut pas se désintégrer en quasi-particules et devient stable [66]. La figure 5.3b illustre une situation analogue pour un système homogène à deux dimensions: pour n'importe quel vecteur d'onde avec $0 \leq |\mathbf{q}| \leq 2k_F$, on peut créer une excitation particule-trou à énergie nulle (il suffit de jeter un coup d'œil sur la figure 5.2a). Le mode collectif évolue dans le continu et s'atténue sensiblement en créant des excitations particule-trou. Dans un système unidimensionnel, ces modes collectifs à caractère bosonique deviennent dominant et invalident l'hypothèse des quasi-particules de Landau.

Un dernier argument pour l'échec de la théorie des liquides de Fermi à une dimension est fourni par la théorie de perturbation. Le terme du second ordre de la self-énergie s'écrit:



(5.8)

Considérons une diffusion en avant à faibles impulsions $q \ll k_F$ en présence d'une interaction indépendante de l'impulsion transférée. La contribution du second diagramme à droite varie en fonction du spin de la particule et celui de l'excitation particule-trou. On peut démontrer que la self-énergie (5.8) nous amène à une fonction de Green à deux pôles [66], ce qui est incompatible avec l'hypothèse du pôle de quasi-particule unique. L'interprétation devient plus clair au prochain paragraphe: c'est la *séparation entre spin et charge* qui est à l'origine de cet effet.

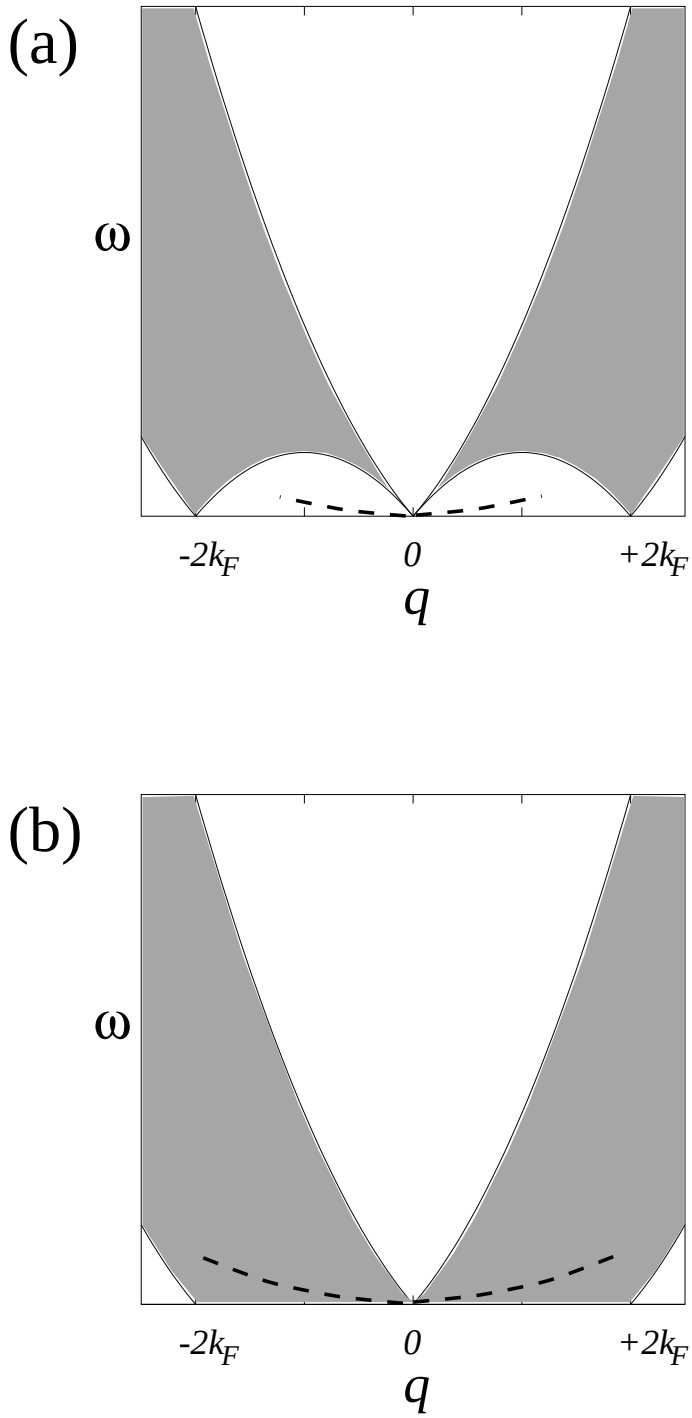


Figure 5.3: *Spectre des excitations particule-trou pour faibles interactions (aire foncée) et mode collectif (ligne discontinue). (a) système homogène à une dimension, (b) système homogène à deux ou à trois dimensions*

5.1.2 La notion du liquide de Luttinger

Une analyse plus systématique des particularités d'un système unidimensionnel devient possible en linéarisant la loi de dispersion à la surface de Fermi: c'est le "*modèle g-ologie*". La dispersion est dorénavant constituée de deux branches indépendantes, l'une contenant des particules évoluant vers la droite, l'autre celles qui se déplacent vers la gauche. A basse énergie, les interactions dominantes proviennent des particules près de la surface de Fermi. Hormis le terme cinétique

$$H_0 \;=\; \sum_{k\sigma} v_F\,(k-k_F)\,a^+_{+,k\sigma} \;+\; \sum_{k\sigma} v_F\,(-k-k_F)\,a^+_{-,k\sigma} \tag{5.9}$$

l'hamiltonien g-ologie retient les processus suivants (voir Fig. 5.4):

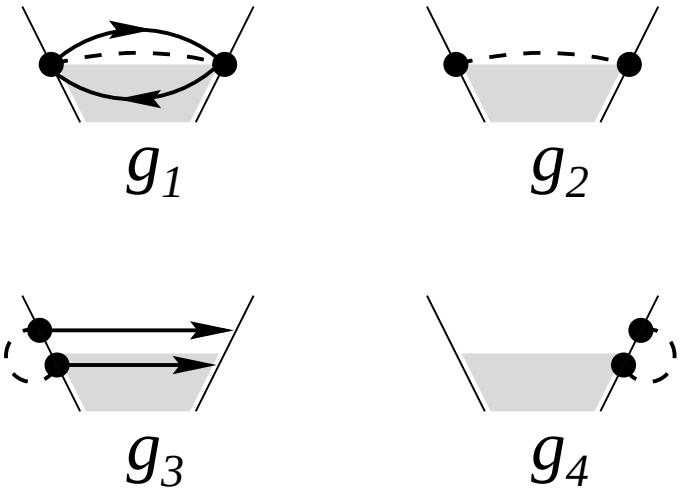


Figure 5.4: *Types d'interactions élémentaires du modèle g-ologie: g_2 et g_4 sont les interactions densité-densité du modèle de Luttinger; g_1 et g_3 sont, respectivement, des processus de diffusion en arrière et en "Umklapp". (La mer de Fermi est représentée par l'aire foncée, l'interaction par une ligne discontinue.)*

g_1: L'interaction d'échange d'une particule de la surface de Fermi gauche avec une autre de la surface droite. C'est le terme de Fock de l'événement g_2 ci-dessous, aussi dénommé *diffusion en arrière*

g_2: L'interaction densité-densité entre deux particules se situant l'une à la surface de Fermi gauche, l'autre à la droite.

g_3: La diffusion simultanée de deux particules de la même surface de Fermi à l'autre. Cette *diffusion "Umklapp"* ne devient importante que sur réseau si $4k_F = G$, c.à.d. lorsque l'impulsion transférée est "zéro" au sens qu'elle correspond à un vecteur du réseau réciproque.

g_4: L'interaction densité-densité de deux particules sur la même branche de dispersion.

Evidemment, toutes ces constantes de couplage g_i vont, en général, encore dépendre des spins des partenaires d'interaction.

L'hamiltonien g-ologie se réduit au *modèle de Tomonaga-Luttinger* [68, 69] en posant $g_1 = g_3 = 0$. Sa solution exacte peut être construite en ajoutant une infinité d'états occupés avec des énergies négatives (voir Fig. 5.5) [70]. On espère, bien entendu, que cette "mer de Dirac" n'a qu'une faible influence sur les propriétés du modèle à basse énergie. Nous définissons d'abord les opérateurs densité pour chaque

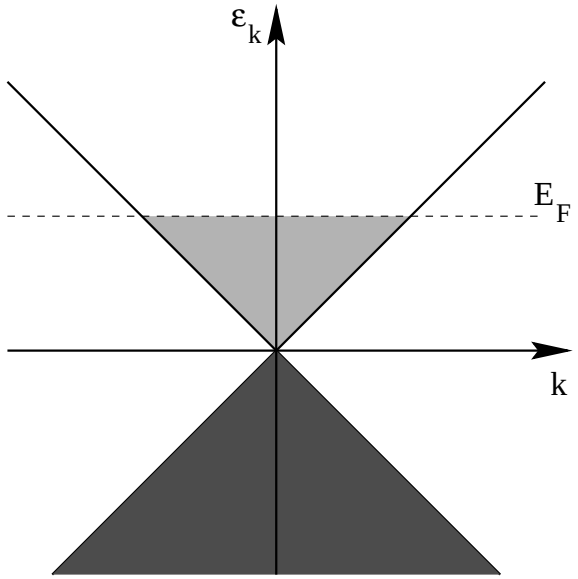


Figure 5.5: *Spectre à une particule du modèle de Luttinger. Les états occupés sont représentés par l'aire grise claire. L'aire grise foncée illustre les états ajoutés afin d'obtenir un modèle exactement soluble. (Figure selon réf. [65])*

branche $\alpha = \pm$:

$$\rho_{\alpha,\sigma}(q) \;=\; \sum_k \left[a^+_{\alpha,k+q\sigma} a_{\alpha,k\sigma} \;-\; \delta_{q0} \left\langle a^+_{\alpha,k\sigma} a_{\alpha,k\sigma} \right\rangle_0 \right] \tag{5.10}$$

La soustraction de la valeur moyenne s'avère nécessaire pour pouvoir compter correctement le nombre de particules sans être dérangé par l'infinité de particules contenu dans la mer de Dirac. Sans vouloir rentrer dans les détails du calcul de la solution exacte, nous rappelons les arguments principaux:

1. Dans un modèle à largeur de bande infinie, les opérateurs densité démontrent un caractère bosonique. Leurs règles de commutation s'écrivent

$$\begin{aligned}[\rho_{\alpha,\sigma}(q),\, \rho_{\alpha',\sigma'}(-q')] &= \delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{qq'}\sum_k [\hat{n}_{k+q\sigma} - \hat{n}_{k\sigma}] \\ &= -\delta_{\alpha\alpha'}\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{qq'}\frac{\alpha q L}{2\pi} \end{aligned} \tag{5.11}$$

   où L désigne la taille du système. Dans un système ordinaire, les deux points de Fermi $\pm k_F$ appartiennent à une seule bande. La première ligne s'évalue alors à zéro, grâce à un simple changement de la variable de somme. Cette opération n'est pas admise dans le modèle de Luttinger, et un calcul plus prudent nous amène au résultat (5.11).

2. Le commutateur entre l'énergie cinétique H_0 et l'opérateur densité a la forme

$$[H_0,\, \rho_{\alpha,\sigma}(q)] = v_F \alpha q\, \rho_{\alpha,\sigma}(q)\ . \tag{5.12}$$

   Apparemment l'état créé par $\rho_{+,\sigma}(q)$ est un état propre de H_0 avec énergie $v_F q$. Ce résultat est compatible avec une représentation de H_0 bilinéaire en opérateurs bosoniques:

$$H_0 = \frac{2\pi v_F}{L}\sum_{\substack{q>0 \\ \alpha=\pm,\sigma}} \rho_{\alpha,\sigma}(q)\rho_{\alpha,\sigma}(-q) + \text{const.} \tag{5.13}$$

En ce qui concerne l'interaction, le modèle de Luttinger inclut uniquement les contributions du type densité-densité g_2 et g_4. La traduction en expressions bosoniques ne pose donc aucun problème.

Arrivé à ce point, nous sommes capables d'exprimer le modèle de Luttinger en termes exclusivement bosoniques. L'hamiltonien de départ était constitué de contribution bilinéaires et quartiques en opérateurs de fermions, tandis que l'hamiltonien bosonique n'est que bilinéaire en opérateurs de bosons. Comme d'habitude, il est préférable d'introduire des variables séparées pour les degrés de liberté de charge et

de spin:

$$\begin{array}{rclcrcl} \rho_\pm(q) & = & \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\rho_{\pm,\uparrow}(q)+\rho_{\pm,\downarrow}(q)\right] & , & g_i^\rho & = & \frac{1}{2}\left[g_i^{\uparrow\uparrow}+g_i^{\uparrow\downarrow}\right] \\ \sigma_\pm(q) & = & \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\rho_{\pm,\uparrow}(q)-\rho_{\pm,\downarrow}(q)\right] & , & g_i^\sigma & = & \frac{1}{2}\left[g_i^{\uparrow\uparrow}-g_i^{\uparrow\downarrow}\right] \end{array} \tag{5.14}$$

L'hamiltonien est composé de deux parties, dont une de charge et l'autre de spin. Ces parties commutent entre elles. Par conséquent, elles peuvent être diagonalisées par deux transformations de Bogoliubov différentes. Le calcul étant exposé point par point dans un article de revue de Voit [66] (entre autres), nous nous contentons d'en résumer les résultats:

- Les excitations bosoniques de charge et de spin se propagent à deux vitesses différentes qui sont fixées par les constantes de couplages respectives:

$$v_\nu(p) = \sqrt{\left[v_F+\frac{g_4^\nu(p)}{\pi}\right]^2-\left[\frac{g_2^\nu(p)}{\pi}\right]^2} \qquad \text{avec} \qquad \nu=\rho,\sigma \tag{5.15}$$

  Cette séparation entre dégrées de liberté de charge et de spin a aussi lieu à dimensions plus élevées. En elle même, elle n'a rien d'exceptionnel. La particularité à une dimension est que cette séparation reste apparente dans la fonction de Green à une particule: à l'encontre de l'hypothèse d'un pôle de quasi-particule unique, ce propagateur possède deux singularités distinctes [71, 72].

- L'absence des quasi-particules se note également dans la distribution des impulsions tracée sur la figure 5.6:

$$n(k) \approx \frac{1}{2} - C_1 \,\text{sign}\,(k-k_F)\,|k-k_F|^\alpha - C_2\,(k-k_F) \tag{5.16}$$

  Rappelons-nous que, dans un liquide de Fermi, n_k a un saut à la surface de Fermi dont la hauteur correspond au résidu de quasi-particule (voir Fig. 5.1). Sur la figure 5.6, ce saut a disparu en faveur d'une variation en loi de puissances. Cette disparition des quasi-particules est due au couplage de Peierls entre les deux points de Fermi.

- Les corrélations à deux corps diminuent algébriquement avec la distance. Les exposants caractéristiques de ces lois de puissances se déterminent à partir des paramètres des transformations de Bogoliubov, qui, eux, ne dépendent que des constantes de couplage g_i^ν et de la vitesse de Fermi. Nous soulignons

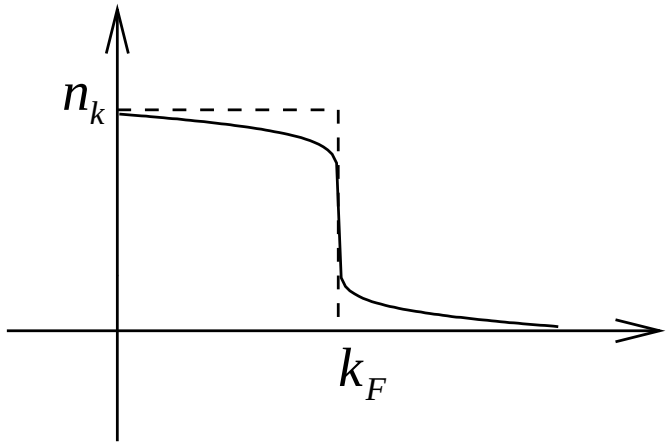


Figure 5.6: *Distribution des impulsions dans un liquide de Luttinger sans interactions (lignes pointillées) et avec interactions (lignes continues). La courbe correspond à l'éq. (5.16) avec les paramètres* $\alpha = 1/8$ *et* $C_2 = 1/2 - C_1 = 1/50$.

que les deux paramètres nous fournissent *tous* les exposants des fonctions de corrélation ainsi que celui de la distribution des impulsions et de la densité d'états.

Les connaissances acquises pendant l'étude du modèle g-ologie peuvent être appliquées aux propriétés de la chaîne de Hubbard à basse énergie. Restent à déterminer les constantes de couplage g_i^ν en fonction de U/t. Pour des remplissages autres que moitié, le modèle de Luttinger se révèle suffisant. Ses constantes de couplage non nulles, g_2^ν et g_4^ν, se déterminent en comparant les vitesses des excitations élémentaires du modèle de Hubbard, connues par l'ansatz de Bethe, à celles de l'éq. (5.15). Pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie, la diffusion Umklapp (g_3) joue un rôle important. C'est elle qui engendre la transformation à une phase isolante déjà à $U_c = 0^+$.

5.2 L'ansatz de Bethe

La chaîne de Hubbard possède, comme beaucoup d'autres modèles unidimensionnels [73, 74], une solution exacte. Sa construction est basée sur *l'ansatz de Bethe* et a été effectuée par Lieb et Wu [10]. Quoique discutée amplement dans divers article de revue [3, 75, 76], il est indispensable de résumer au moins les idées principales de cette célèbre méthode.

Considérons d'abord une chaîne de Hubbard de longueur L avec seulement deux électrons. Nous pouvons imaginer l'interaction entre les électrons comme processus de diffusion. Si les deux électrons sont loin l'un de l'autre, ils se comportent comme des particules libres, car l'interaction de Hubbard est de courte portée. Notre point de départ pour la fonction d'onde des deux électrons consiste donc en ondes planes,

$$\psi\left(x_1 \leq x_2\right) \;=\; A\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_1 x_1 + k_2 x_2)} \;-\; B\,\mathrm{e}^{\mathrm{i}(k_2 x_1 + k_1 x_2)} \tag{5.17}$$

où $x_{1,2}$ sont les coordonnées des électrons. Par un simple argument de symétrie, il est clair que les valeurs absolues des amplitudes de l'onde incidente A et de l'onde diffusée B sont les mêmes. L'interaction se traduit donc exclusivement par un déphasage entre l'onde incidente et l'onde diffusée. Evidemment, ce déphasage dépend du spin des partenaires d'interaction. Pour deux électrons du même spin, le principe de Pauli interdit toute double occupation et exclut ainsi toute interaction: la fonction d'onde n'est autre qu'un déterminant de Slater.

Si les partenaires sont de spin opposé, nous pouvons facilement résoudre les équations de Schrödinger pour $x_1 < x_2$ et $x_1 > x_2$. Nous trouvons la matrice de diffusion en raccordant les deux fonctions d'onde pour $x_1 = x_2$. Nous imposons des conditions aux limites périodiques en bouclant la chaîne. Après un tour complet, le déphasage totale de la fonction d'onde est constitué de Lk_1 ainsi d'une contribution provenant de l'interaction. En tenant compte de l'antisymétrie de la fonction de spin, ceci nous fournit une condition aux limites pour chaque k_i. Les k_i ne sont donc pas des multiples de $2\pi/L$, mais fonction de la constante de couplage U. Pour cette raison, ils sont dénommés *quasi*-impulsions.

L'ansatz de Bethe généralise cette idée pour N électrons sur une chaîne de longueur L. Nous coupons d'abord la chaîne en N bouts à un électron chacune. Ensuite nous résolvons l'équation de Schrödinger pour toutes les permutations possibles. Nous imposons de plus que les quasi-impulsions ne changent pas d'un bout à l'autre. Cette hypothèse peut être satisfaite, car, pour la chaîne de Hubbard, il existe une infinité de constantes de mouvement. Une simplification ultérieure provient de l'équation Yang-Baxter: elle constate que la matrice de diffusion à N électrons qui lie deux permutations différentes ne dépend pas de la manière dont on passe d'une configuration à l'autre. Une nouvelle fois, les conditions aux limites périodiques nous fournissent les contraintes pour les quasi-impulsions k_i. Ces contraintes varient selon l'arrangement des spins.

A l'encontre de la chaîne à deux électrons, où la solution du problème des spins est triviale, il est maintenant nécessaire d'attaquer ce problème avec un autre ansatz de Bethe. Il nous amène à des contraintes pour la variable de spin Λ_α. Les conditions aux limites pour les variables de spin sont influencées par les quasi-impulsions, et vice versa: on parle d'*ansatz de Bethe imbriqué*.

Dans la limite thermodynamique, les quasi-impulsions et les variables de spin sont distribuées de manière continue. Il s'avère commode de passer aux densités respectives $\rho(k)$ et $\sigma(\Lambda)$. Les systèmes de contraintes se traduisent ainsi en deux équations intégrales couplées, les *équations de Lieb et Wu*:

$$\begin{aligned} 2\pi\,\rho(k) &= 1 + \cos(k) \int_{-B_0}^{+B_0} \mathrm{d}\Lambda\,\sigma(\Lambda)\,K\left[\sin(k)-\Lambda; U/(4t)\right] \\ 2\pi\,\sigma(\Lambda) &= \int_{-Q_0}^{+Q_0} \mathrm{d}k\,\rho(k)\,K\left[\sin(k)-\Lambda; U/(4t)\right] \\ &\quad - \int_{-B_0}^{+B_0} \mathrm{d}\Lambda'\,\sigma(\Lambda')\,K\left[\Lambda-\Lambda'; U/(2t)\right] \end{aligned} \tag{5.18}$$

où le noyau intégral est donné par $K[x;y] = 2y/(x^2+y^2)$. Les bornes des intégrales s'obtiennent à partir des conditions suivantes:

$$\begin{aligned} \int_{-Q_0}^{+Q_0} \mathrm{d}k\,\rho(k) &= \frac{N}{L} \\ \int_{-B_0}^{+B_0} \mathrm{d}\Lambda\,\sigma(\Lambda) &= \frac{N_\downarrow}{L} \end{aligned} \tag{5.19}$$

En absence d'un champ magnétique extérieur, le fondamental est un singlet, ce qui implique $B_0 = \infty$. L'intégration numérique des équations de Lieb et Wu ne pose pas de problème majeur. A remplissage autre que moitié, le système possède un fondamental métallique pour toute interaction. En revanche, à remplissage moitié, le système devient isolant pour $U > 0$.

A la base de cette solution exacte, il est possible de calculer d'autres propriétés du fondamental, par exemple la densité de double occupation et l'énergie cinétique [77], ainsi que le spectre des excitations élémentaires [78] et les exposants des corrélations à deux corps [79]. De plus, on en déduit l'énergie libre (et avec elle la thermodynamique toute entière) [80] et les propriétés de transport [81].

L'esprit de l'ansatz de Bethe est également présent dans d'autres travaux consacrés aux modèles unidimensionnels exactement solubles. Récemment, Schulz et Shastry ont découvert toute une classe de systèmes exactement solubles composés de fermions qui interagissent à l'aide d'un champ de gauge [82]. Tout comme dans la chaîne de Hubbard, les fermions se comportent essentiellement comme s'ils étaient libres, et l'interaction fixe les conditions aux limites.

L'ansatz de Bethe s'applique aussi aux chaînes de Hubbard contenant des termes cinétiques généralisés, tels que $t \propto \sinh \kappa / \sinh \kappa r$. A remplissage moitié, ces modèles exhibent une transition métal-isolant à $U_c = 0^+$. Cette valeur est générique pour tous les modèles avec emboîtement parfait de la surface de Fermi. Uniquement le modèle avec $\kappa = 0$, ne possédant pas cette propriété d'emboîtement, a une interaction critique finie qui est égale à la largeur de bande. Pour $\kappa = 0$ des déplacements à longue portée $(1/r)$ sont admis et la dispersion devient linéaire en k dans la zone de Brillouin. Pour ce modèle, une solution exacte, peut alternativement être construite en démontrant l'équivalence avec un hamiltonien de bosons à cœur dur [2] [83, 84]. Cela se comprend par ressemblance avec le modèle de Luttinger où une solution bosonique a pu être obtenue, grâce à la linéarité de la dispersion.

5.3 Résultats de la théorie RPA

Dans ce paragraphe, nous appliquons la théorie RPA aux corrélations de charge et de spin longitudinal de la chaîne de Hubbard. Il est clair, par la construction des propagateur RPA et par la discussion du chapitre 4.4, que la RPA ne sera pas capable de décrire les particularités d'un modèle à une dimension. L'application de la RPA, dans ses différentes variantes, à la chaîne de Hubbard conduira plutôt à des propriétés génériques du modèle, qu'on espère retrouver à dimensions plus élevées.

Nous résoudrons numériquement le système d'équations non linéaires de la *RPA renormalisée*, tel qu'il a été présenté au chapitre 4.4.1. Les détails de la méthode numérique sont exposés dans l'annexe B. Ensuite nous comparerons les résultats de la RPA renormalisée à ceux de la RPA pure pour différentes interactions et remplissages

[2] L'expression de bosons à "cœur dur" (hard-core bosons) signifie que ces particules satisfont à des règles de commutation bosoniques. A l'encontre de bosons ordinaires, il ne peuvent pas s'accumuler au même endroit. Les valeurs propres de l'opérateur nombre $\hat{n}_i$ se limitent alors à zéro et un, comme s'ils étaient des fermions.

de bande. Pour des raisons de simplicité, nous nous limitons à la chaîne infinie dans la phase paramagnétique, c.à.d. $n_{k\uparrow} = n_{k\downarrow}$. Pour la chaîne à moitié remplie, la RPA renormalisée possède une solution analytique dans la limite du couplage fort.

Néanmoins, nous soulignons encore une fois que la RPA renormalisée peut être considérée comme première étape pour la solution de la SCRPA (voir les chapitres 3.4 et 4.4.1).

5.3.1 Méthode numérique

Nous résumons brièvement la méthode numérique utilisée pour la solution self-consistante des équations de la RPA renormalisée. Une description plus détaillée se trouve dans l'annexe B.

D'abord nous initialisons les nombres d'occupation $n_{k\sigma}$ aux valeurs de départ. En suivant les idées exposées au chapitre 4.4.1, nous résolvons le système d'équations non linéaires selon le schéma suivant:

- Nous calculons la fonction de Green "libre" renormalisée à partir de (4.32):

$$\mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega) \;=\; \frac{n_{k\sigma} - n_{k+q\sigma}}{\omega \;-\; [\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k] \;+\; \mathrm{i}0^+} \tag{5.20}$$

- L'éq. (4.35) nous fournit la susceptibilité "libre" renormalisée par le biais d'une intégrale sur k:

$$\chi^0_\sigma(q,\omega) \;=\; \tfrac{1}{N}\sum_k \mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega) \tag{5.21}$$

  Pour évaluer $\mathrm{Im}\,\chi^0_\sigma(q,\omega)$ il s'avère commode d'introduire une partie imaginaire dans le dénominateur de $\mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega)$, c.à.d. de remplacer $\mathrm{i}0^+$ dans l'éq. (5.20) par une valeur imaginaire petite, mais finie. Encore une fois, le lecteur trouvera les détails dans l'annexe B.

- Les fonctions $\mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega)$ et $\chi^0_\sigma(q,\omega)$ nous servent à déterminer la fonction de Green RPA à partir des éqs. (4.36) et (4.37). Comme nous l'avons vu au chapitre 4.4.1, seuls les éléments diagonaux $\mathcal{G}^{\mathrm{RPA}}_{k\sigma\,k\sigma}(q,\omega)$ sont indispensables dans la suite de ce calcul. Alternativement nous pouvons simplifier les équations en effectuant la somme de la fonction de Green sur p. Les éqs. (4.36) et (4.37) peuvent être mises sous la forme suivante:

$$\sum_p \mathcal{G}^{\mathrm{RPA}}_{k\sigma\,p\sigma}(q,\omega) \;=\; \mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega)\frac{1}{1 - U\chi^0_\uparrow(q,\omega)\,U\chi^0_\downarrow(q,\omega)} \tag{5.22}$$

$$\sum_p \mathcal{G}^{\mathrm{RPA}}_{k\sigma\, p-\sigma}(q,\omega) \;=\; \mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega)\frac{U\chi^0_{-\sigma}(q,\omega)}{1-U\chi^0_\uparrow(q,\omega)\,U\chi^0_\downarrow(q,\omega)} \tag{5.23}$$

- La fonction de Green (5.22), nous permet de déterminer les nouvelles valeurs pour les nombres d'occupation. A la place de l'éq. (4.27), nous utilisons

$$n_{k\sigma} \;=\; n_\sigma \;-\frac{1}{\pi N}\sum_{pq}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega\;\mathrm{Im}\,\mathcal{G}_{k\sigma\, p\sigma}(q,\omega)\;. \tag{5.24}$$

  Les termes avec $k \neq p$ sont reliés aux éléments non diagonaux de la matrice norme. Lorsque la solution self-consistante est atteinte, ces termes s'annulent, et les éqs. (4.27) et (5.24) deviennent complètement équivalentes.

- Ce cycle d'itération doit être répété dès son début jusqu'à la convergence.

Normalement nous commençons le calcul à faibles interactions, par exemple à $U = 1$. Nous initialisons les nombres d'occupation à leurs valeurs libres, caractérisées par la fonction échelon à la surface de Fermi. Pour cette valeur de U, nous itérons les équations de la RPA renormalisée, selon le cycle ci-dessus, jusqu'à la solution self-consistante. Le résultat sert ensuite comme point de départ d'un cycle d'itération pour une valeur de U légèrement plus élevée. Nous augmentons ainsi la constante de couplage peu à peu, tout en itérant chaque fois à la solution self-consistante. Cet établissement adiabatique de l'interaction jusqu'à la valeur désirée a le grand avantage de garantir la stabilité de la réponse du spin tout au long du calcul.

Dans la limite thermodynamique, les sommes sur les vecteurs d'onde deviennent des intégrales:

$$\frac{1}{N}\sum_k \;\to\; \int_{-\pi}^{+\pi}\frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \tag{5.25}$$

Nous évaluons ces intégrales en divisant la première zone de Brillouin en grille uniforme. Le nombre de points est normalement de 256. Les intégrales d'énergie se calculent à l'aide d'une grille lorentzienne concentrée à $\omega = 0$. Le nombre de points contenu dans cette grille est typiquement de 2048, et la moitié de sa largeur à mi-hauteur vaut à peu près deux fois la largeur de bande, c.à.d. $\Delta_{\mathrm{hwhm}} \approx 8$.

Comme nous l'avons déjà constaté, il est commode (mais pas strictement nécessaire) de fixer "i0^+" dans le dénominateur de $\mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega)$ à une valeur petite, mais finie. Nous prenons habituellement des valeurs de l'ordre i/16, ce qui correspond à

1/64 de la largeur de bande. Suivant la précision de notre calcul, les résultats ne sont pas sensibles à des petites variations de cette valeur.

Nous rappelons au lecteur intéressé par notre méthode numérique qu'une discussion beaucoup plus complète se trouve dans l'annexe B.

5.3.2 Les nombres d'occupation

La bande à moitié remplie

La figure 5.7 montre la distribution des impulsions

$$n_k = \frac{1}{2} \left(n_{k\uparrow} + n_{k\downarrow} \right) \tag{5.26}$$

pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie. Les résultats de la RPA renormalisée sont comparés aux calculs de Monte-Carlo quantique (QMC).

La RPA renormalisée prévoit, pour des faibles interactions, une discontinuité à la surface de Fermi. Selon la théorie des liquides de Fermi présentée au chapitre 5.1.1, cette discontinuité correspond au poids z_k des quasi-particules. A la surface de Fermi, elles se propagent presque librement. Nous avons donc un comportement métallique.

Pour des fortes interactions, la distribution des impulsions est une fonction continue de l'impulsion, ce qui entraîne un fondamental isolant. La RPA renormalisée prédit une transition métal-isolant avec interaction critique qui peut être obtenue en augmentant le couplage par petits pas ($\Delta U = 1/4$) jusqu'à ce que le saut à k_F disparaisse. Suivant notre précision numérique, nous trouvons $U_c \approx 3$. Le couplage critique de la transition Mott-Hubbard est alors de l'ordre de la largeur de bande ($W = 4$). Au chapitre 5.3.7 nous approfondirons cette discussion en nous appuyant sur la densité d'états.

Ce scénario serait assez réaliste à dimensions plus élevées où il est en accord avec d'autres approximations, telle que Hubbard-III [42, 54] ou la méthode des Bosons Esclaves [51, 50]. A une dimension, il est, hélas, faux! A remplissage moitié, la solution exacte par ansatz de Bethe [10] prévoit un fondamental isolant pour toute interaction finie. La distribution des impulsions exacte, ne possède donc pas de saut à la surface de Fermi. Elle peut être obtenue, pour des interactions intermédiaires, grâce aux calculs QMC [85, 86], et pour des fortes interactions par un développement en série de la solution exacte en t/U [77, 87].

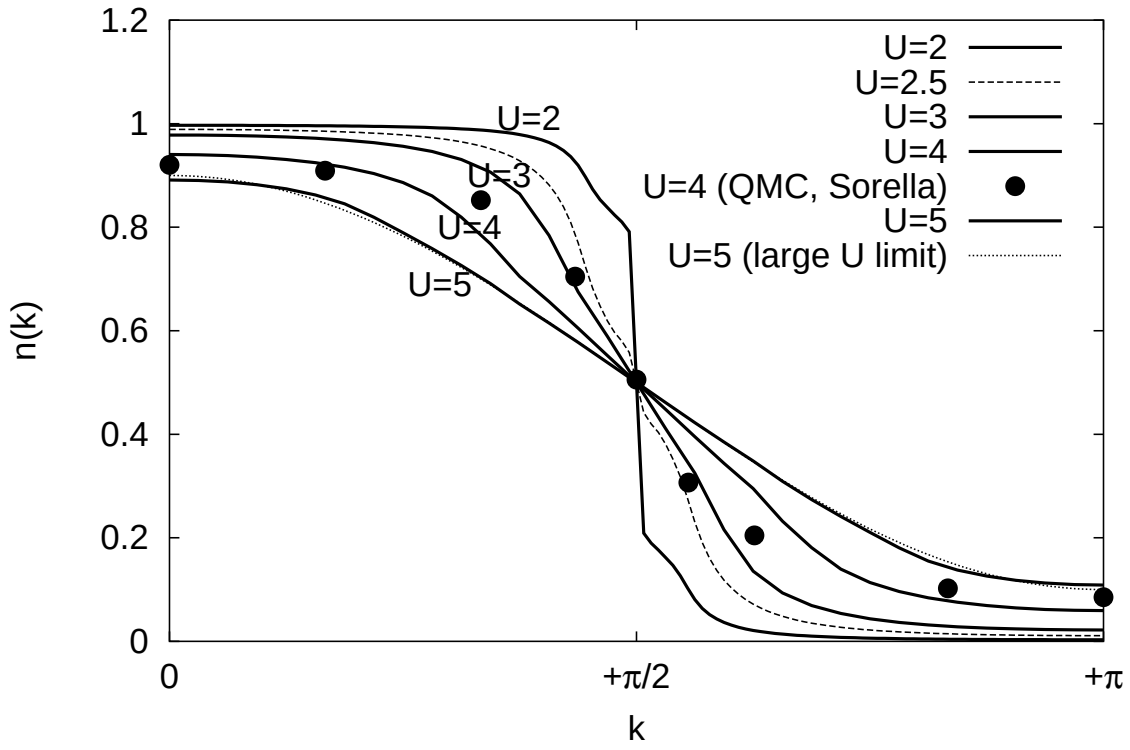


Figure 5.7: *Distribution des impulsions n_k pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie. Résultats de Monte-Carlo quantique (QMC) de Sorella [85]. La ligne pointillée représente la limite du couplage fort de la RPA renormalisée (voir chapitre 5.3.7).*

Si ces résultats paraissent décevants au premier abord, il faut tout de même rappeler que la RPA renormalisée ne retient pas de corrélations à deux corps dans son hamiltonien effectif. Elle néglige notamment les corrélations d'emboîtement $q = 2k_F$ qui sont à l'origine de l'interaction critique nulle de la transition Mott-Hubbard. A dimension plus élevée, il n'est jusqu'à présent pas tout à fait clair, si le rôle joué par l'emboîtement de la surface de Fermi reste aussi important. De plus, nous avons expliqué au chapitre 4.4.1 que la RPA renormalisée est nettement mieux adaptée aux systèmes à dimension plus élevée. Toujours est-il que, même à une dimension, elle reproduit, à un facteur près, le comportement exact des nombres d'occupation dans la limite du couplage fort (voir chapitre 5.3.7).

Remplissages autres que moitié

A remplissages autres que moitié, les prédictions de la RPA renormalisée restent en gros les mêmes: pour de faibles interactions, la distribution des impulsions montre une discontinuité à la surface de Fermi. Elle se produit exactement à la même impulsion $k = k_F$ que dans le gaz de Fermi libre. Cela démontre que la RPA renormalisée satisfait au théorème de Luttinger à une dimension [24, 25]. Le saut disparaît à un couplage critique légèrement plus élevé qu'à remplissage moitié. Par exemple, pour le modèle rempli à un quart, le saut persiste jusqu'à $U_c \approx 4$ (voir Fig. 5.8).

La RPA renormalisée se révèle incapable de reproduire les propriétés de liquide de Luttinger de la solution exacte. A la surface de Fermi, la distribution des impulsions exacte présente une variation en loi de puissances au lieu d'une discontinuité. Les exposants de ces lois de puissances caractéristiques pour le liquide de Luttinger se déduisent, dans la limite $U \to \infty$, à l'aide de l'ansatz de Bethe. Il en résulte $\alpha = 1/8$ pour l'exposant gouvernant les nombres d'occupation dans l'éq. (5.16) [89, 90]. Les exposants de la fonction spectrale [91] et des fonctions de corrélation [92] s'obtiennent de manière similaire. A faible couplage, α est très petit. Par exemple pour $U = 1.8$, on trouve $\alpha = 0.01$ [87]. La distribution des impulsions ressemble donc toujours fortement à la fonction échelon.

Pour des interaction finies, on se sert des techniques QMC pour déduire ces exposants [86, 88]. C'est une procédure assez délicate qui a échouée dans les calculs antérieurs [66]. De même, des résultats QMC pour des chaînes à longueur finie donnent un saut à k_F dans la distribution des impulsions [85]. La hauteur de ce saut décroît très lentement lorsqu'on augmente la longueur de la chaîne. Il existe

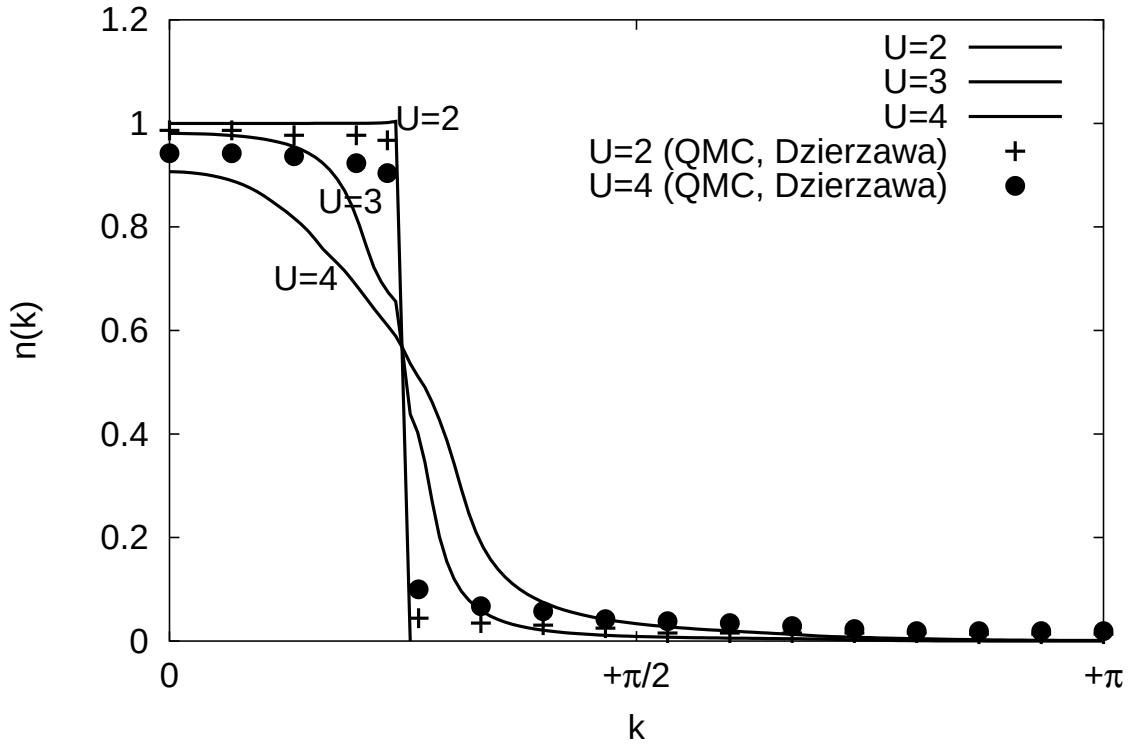


Figure 5.8: *Distribution des impulsions n_k pour la chaîne de Hubbard à remplissage un quart. Résultats de Monte-Carlo quantique (QMC) de Dzierzawa[88].*

certains aspects communs entre les calculs pour des chaînes à longueur finie et la discrétisation de la zone de Brillouin, telle qu'elle se fait, par exemple, dans la solution numérique de la RPA renormalisée. Néanmoins, nous sommes convaincus, notamment par l'allure tout à fait régulière de n_k dans la limite du couplage fort, que nos résultats n'exhibent pas de comportement de liquide de Luttinger. Un autre argument menant à la même conclusion vient du fait que la RPA renormalisée sous-estime les corrélations entre les deux surfaces de Fermi.

5.3.3 La susceptibilité $\chi^0(q,\omega)$

Avant d'analyser les fonctions de réponse de charge et de spin, nous jetons un coup d'œil sur la susceptibilité $\chi^0(q,\omega)$, définie par (5.21). Comme nous le voyons d'après les éqs. (4.41) et (4.42), elle est l'ingrédient principal pour les susceptibilités RPA $\chi^{\rm ch}(q,\omega)$ et $\chi^{\rm sp}(q,\omega)$. Il est alors crucial de comprendre les effets de renormalisation qui se produisent dans cette fonction lorsqu'on passe de la RPA pure à la RPA renormalisée. Comme les points essentiels de ce scénario restent inchangés pour des remplissages autres que moitié, nous nous limitons dans cette discussion à la chaîne à moitié remplie.

Partie imaginaire

Discutons d'abord la susceptibilité libre $\chi^{\rm free}(q,\omega)$, qui dans la RPA pure, joue le rôle de $\chi^0(q,\omega)$. Sa partie imaginaire n'est non nulle que dans le domaine du plan (q,ω) dans lequel des excitations particule-trou sont autorisées. Autrement dit, l'équation de pôle de la fonction de Green libre,

$$\omega \;=\; \varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k \;, \tag{5.27}$$

doit être satisfaite pour au moins un vecteur d'onde k. En faisant varier k, nous obtenons la condition aux limites suivante, que nous appellerons "supérieure":

$$|\omega| \;\leq\; \left|4\sin\frac{q}{2}\right| \tag{5.28}$$

En RPA pure, les nombres d'occupation sont les mêmes que dans le gaz de Fermi libre (sauf un décalage éventuel de la surface de Fermi, provenant des corrections Hartree-Fock). Dans le domaine désigné par (5.28), il doit y avoir au moins un vecteur d'onde pour lequel le numérateur de la fonction de Green libre, $n_{k\sigma} - n_{k+q\sigma}$,

reste fini. Cette restriction de l'espace de phase nous fournit la condition aux limites "inférieure" :

$$|\omega| \geq 2\,|\cos(k_F) - \cos(k_F - |q|)| \tag{5.29}$$

L'appellation supérieure et inférieure devient claire par la figure 5.3a: la contrainte (5.28) détermine l'énergie maximale d'une excitation particule-trou d'impulsion donnée, tandis que (5.29) rend le spectre creux pour de faibles énergies et impulsions.

La figure 5.9 montre la susceptibilité libre d'une chaîne de Hubbard à moitié remplie pour $q = \pi/2$. L'expression analytique de $\mathrm{Im}\,\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$ de l'annexe A.2

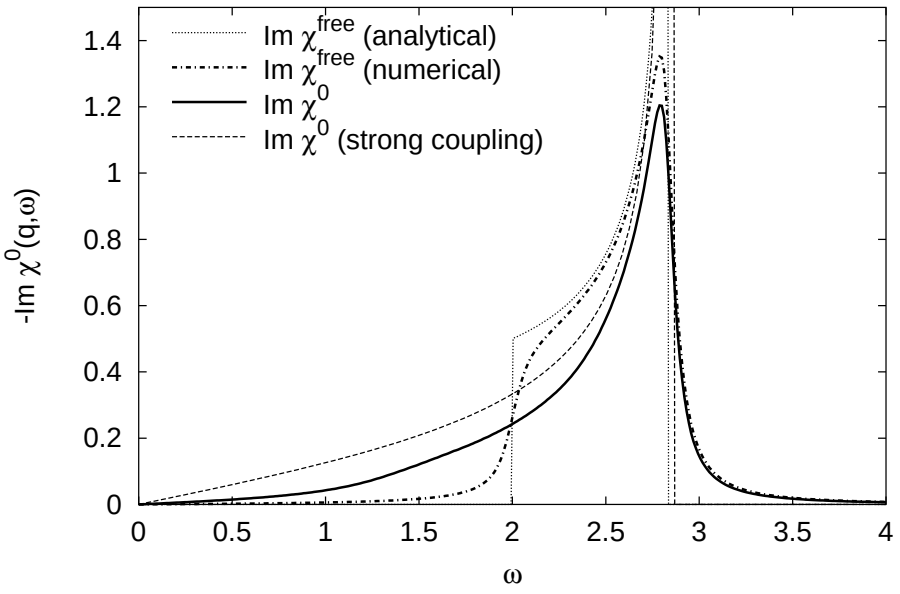


Figure 5.9: *Partie imaginaire de la susceptibilité libre* $\chi^{\mathrm{free}}(q = \pi/2, \omega)$ *et de la susceptibilité* $\chi^0(q = \pi/2, \omega)$ *pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie avec une interaction* $U = 3$.

est représentée par une ligne pointillée. Alternativement, $\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$ se calcule en évaluant numériquement l'intégrale sur $\mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega)$ de l'éq. (5.21), ce qui fournit la ligne en tirets-pointillés. Comme nous l'avons expliqué au début de ce chapitre, cette tâche est facilitée en utilisant une valeur finie pour $\mathrm{i}0^+$ au dénominateur du propagateur particule-trou. Son influence se manifeste par une faible différence entre la ligne en tirets-pointillés et la ligne pointillée.

Que deviennent ces conditions aux limites après renormalisation? Au chapitre

4.4.1 nous avons constaté que les corrections Hartree-Fock des énergies à une particule s'annulent dans le propagateur particule-trou. La contrainte (5.28) reste alors intacte, car le dénominateur de $\mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega)$ ne subit aucun changement au cours de la renormalisation.

La limite inférieure (5.29) est très sensible à la renormalisation: dès que les nombres d'occupation diffèrent de 0 et 1, elle s'adoucit considérablement. Cette situation est illustrée sur la figure 5.9 pour $U = 3$: au-delà de la limite supérieure ($\omega \approx 2.7$), la susceptibilité $\mathrm{Im}\,\chi^0(q,\omega)$ (ligne continue) se comporte à peu de choses près comme la susceptibilité libre (ligne en tirets-pointillés). Or, à la limite inférieure ($\omega \approx 2$), $\mathrm{Im}\,\chi^0(q,\omega)$ est nettement plus étalée que $\mathrm{Im}\,\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$.

Au chapitre 5.3.7, nous discuterons la limite du couplage fort de la RPA renormalisée pour la bande à moitié remplie. Dans cette limite, la susceptibilité $\mathrm{Im}\,\chi^0(q,\omega)$ est décrite par la ligne discontinue sur la figure 5.9. Déjà à $U = 3$, donc pour une interaction plus petite que la largeur de bande, $\mathrm{Im}\,\chi^0(q,\omega)$ ressemble qualitativement davantage à la susceptibilité de la limite $U \to \infty$ qu'à la susceptibilité libre.

Cette tendance se renforce à $U = 6$, comme l'indique la figure 5.10. L'accord entre

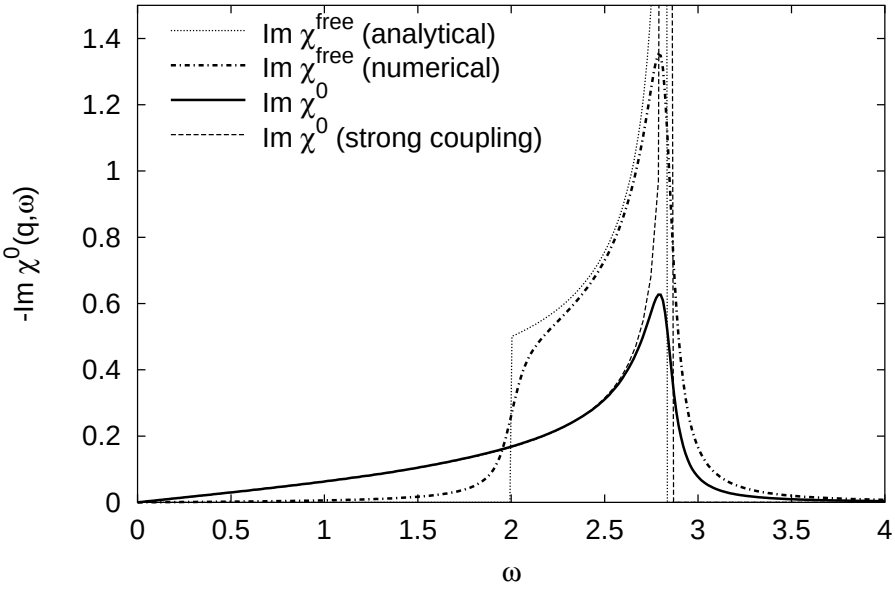


Figure 5.10: *Partie imaginaire de la susceptibilité libre* $\chi^{\mathrm{free}}(q = \pi/2, \omega)$ *et de la susceptibilité* $\chi^0(q = \pi/2, \omega)$ *pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie avec une interaction* $U = 6$.

la susceptibilité $\mathrm{Im}\,\chi^0(q,\omega)$ de la RPA renormalisée et sa limite en couplage fort est maintenant quasiment parfait. La différence restante provient presque entièrement du $\mathrm{i}0^+$ fini.

Partie réelle et construction des modes collectifs

Passons à l'examen de la partie réelle de la susceptibilité $\chi^0(q,\omega)$. Nous voyons à partir des éqs. (4.41) et (4.42) que c'est elle qui gouverne l'existence et la position des modes collectifs de la RPA. Nous commençons la discussion avec la susceptibilité libre, $\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$, qui détermine les fonctions de réponse de la RPA pure. Sa partie réelle est tracée sur la figure 5.11 pour la chaîne à moitié remplie. Par analogie avec le dernier paragraphe, nous avons choisi une ligne pointillée pour l'expression analytique de $\mathrm{Re}\,\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$, donnée dans l'annexe A.2, tandis que la ligne en tirets-pointillés représente le résultat de l'intégration numérique de (5.21).

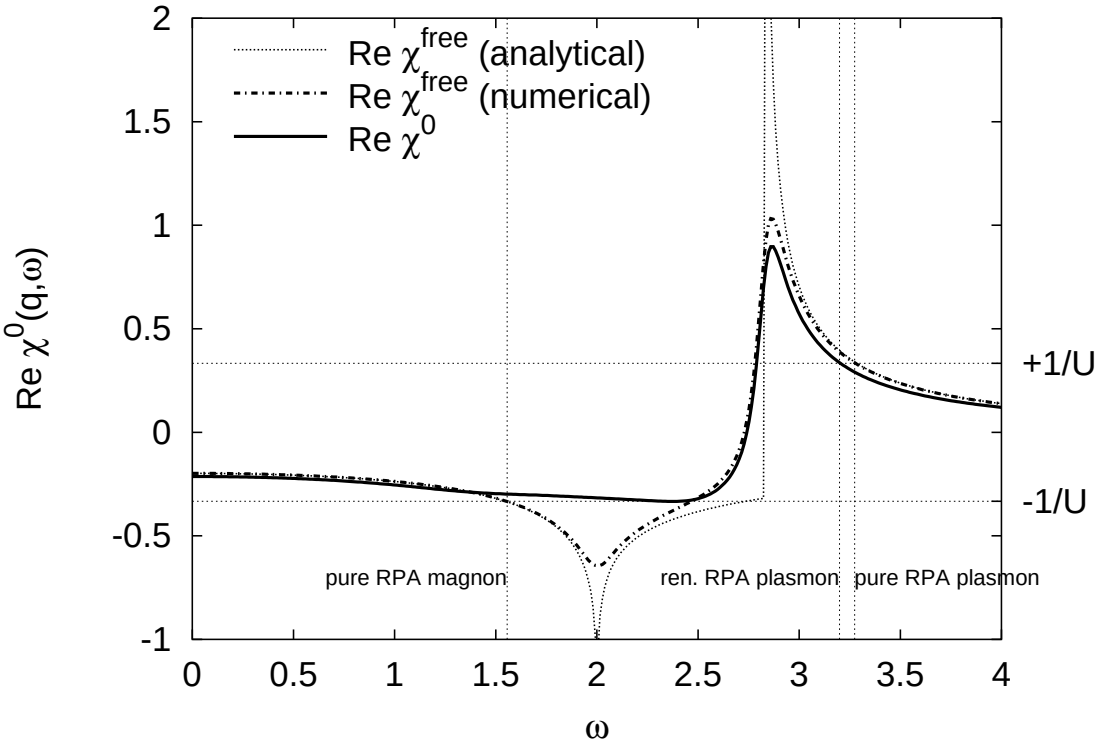


Figure 5.11: *Partie réelle de la susceptibilité libre* $\chi^{\mathrm{free}}(q=\pi/2,\omega)$ *et de la susceptibilité* $\chi^0(q=\pi/2,\omega)$ *pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie avec une interaction* $U=3$.

En rapprochant les figures 5.11 et 5.9, nous remarquons que $\mathrm{Re}\,\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$ diverge aux deux limites de $\mathrm{Im}\,\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$, (5.28) et (5.29). Ceci se vérifie aisément à partir des expressions analytiques de l'annexe A.2.

Observons, sur la figure 5.11, la ligne horizontale à $+1/U$ en pointillés: au point d'intersection avec $\mathrm{Re}\,\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$ (courbe en tirets-pointillés), à $\omega \approx 3.3$, le dénominateur de la susceptibilité de charge, $1 - U\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$, s'annule. Cela crée un pôle collectif de la RPA pure, le *plasmon*. Sa durée de vie est illimitée, car, à cette fréquence, $\mathrm{Im}\,\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$ est nul. Lorsqu'on augmente l'interaction, la ligne horizontale à $+1/U$ est poussée vers le bas et le plasmon se décale à des énergies plus élevées.

L'étude des pôles de spin se fait de manière tout à fait analogue: le dénominateur de la susceptibilité de spin, $1 + U\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$, s'annule aux points d'intersection de la ligne horizontale à $-1/U$ et de $\mathrm{Re}\,\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$. Comme l'indique la figure 5.11, pour $U = 3$ et $q = \pi/2$, il y a deux candidats: $\omega \approx 1.6$ et $\omega \approx 2.8$. Nous ne retenons que le premier, car à $\omega \approx 2.8$, $\mathrm{Im}\,\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$ est grand. Ce mode collectif évolue dans le continu et se désintègre rapidement en excitations de paires particule-trou. En revanche, à $\omega \approx 1.6$, la partie imaginaire est nulle, et nous trouvons un *magnon* non amorti.

Que se devient ce mode collectif, lorsque l'interaction devient plus forte? L'intersection de la ligne horizontale à $-1/U$ se produit à des fréquences de plus en plus basses. Le magnon atteint $\omega = 0$ pour une valeur critique finie du couplage. A partir de la figure 5.11 nous voyons que, pour $q = \pi/2$, cette interaction critique est de l'ordre de $U \approx 1/0.2 = 5$. Au-delà de cette interaction, la fréquence du magnon est purement imaginaire et la RPA devient instable.

Les figures 5.12 et 5.13 montrent la dispersion des plasmons et des magnons à $U = 3$, respectivement, pour remplissage moitié et un quart. Conformément à nos attentes, les plasmons de la RPA pure se situent au-delà de la limite supérieure du continu (5.28), tandis que les magnons apparaissent en dessous de sa limite inférieure (5.29). Les deux bornes possèdent des pentes différentes à $q = 0$, hormis le cas du système rempli à moitié. Les vitesses de magnon et de plasmon, données par les pentes des dispersions respectives à $q = 0$, ne peuvent donc pas être les mêmes: une séparation entre spin et charge a lieu. A remplissage moitié, elle se produit dès lors que l'interaction est établie. Comme déjà discuté, cet effet subsiste dans la solution exacte. Il peut être mis en évidence par des calculs QMC [93].

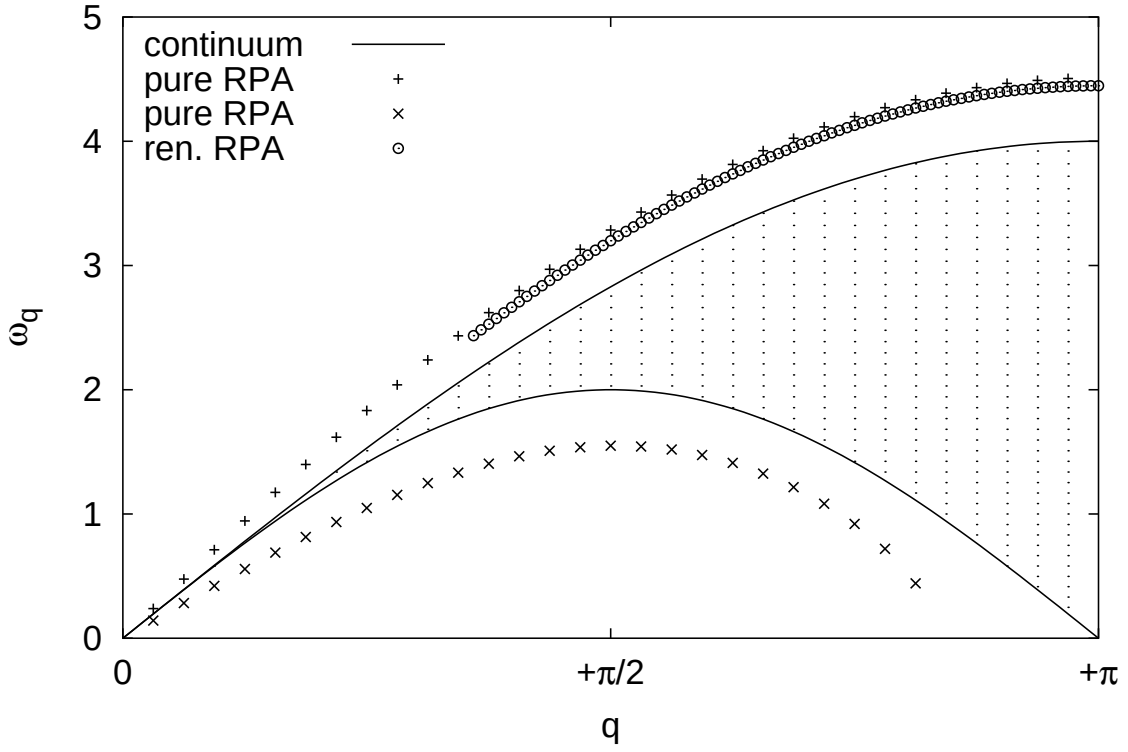


Figure 5.12: *Dispersion des plasmons et des magnons pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie à $U = 3$. En RPA pure, les plasmons sont représentés par des "+", les magnons par des "×". Les plasmons de la RPA renormalisée sont représentés par des "⊙". L'aire pointillée désigne le continu des excitations de paires particule-trou sans interactions. Ses limites, données par les éqs. (5.28) et (5.29), sont tracées en lignes continues.*

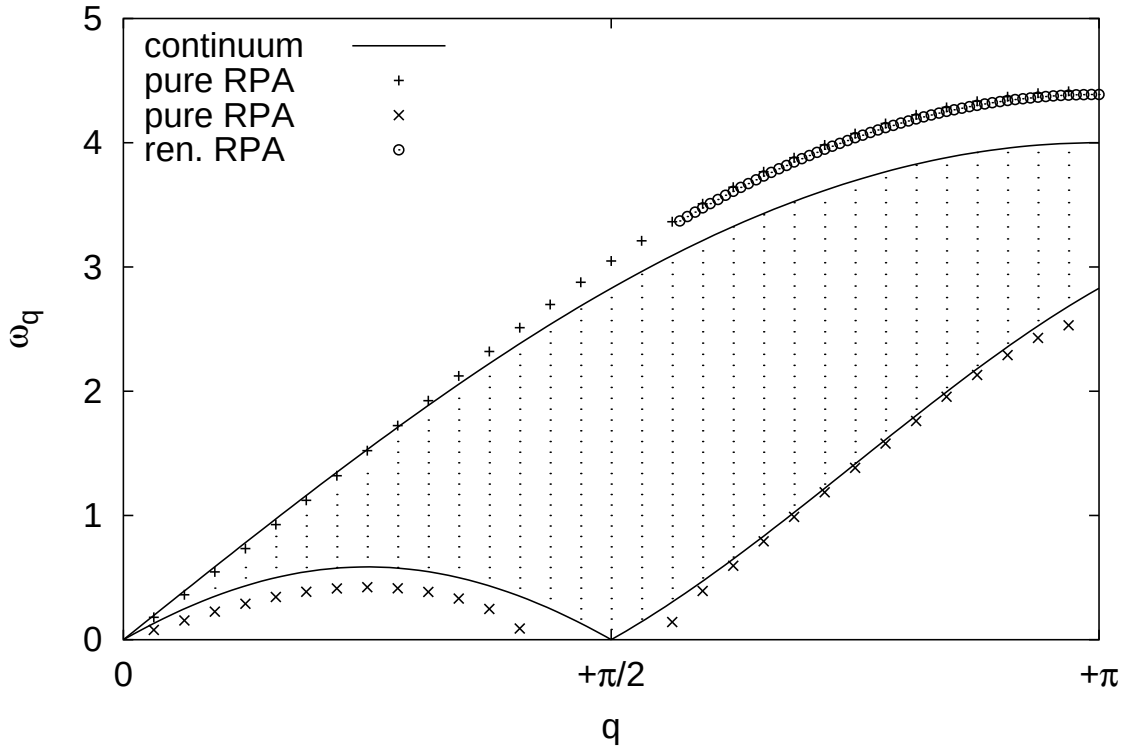


Figure 5.13: *Dispersion des plasmons et des magnons pour la chaîne de Hubbard remplie à un quart avec une interaction $U = 3$. Pour la légende voir Fig. 5.12.*

La limite inférieure du continu atteint l'axe des fréquences lorsque la différence entre l'impulsion de la particule et celle du trou est égale au vecteur de Peierls $q = 2k_F$. Comme la dispersion des magnons est obligé de suivre, il existe une région de vecteurs d'onde, autour de $2k_F$, dans laquelle la création des magnons ne demande aucune énergie: c'est la fameuse instabilité de Peierls qui se manifeste dans la RPA pure. En augmentant l'interaction, cette région d'instabilité s'étale de plus en plus. Elle couvre l'axe des impulsions entier, lorsque U excède une valeur critique donnée par le critère de Stoner [53].

Rappelons qu'en champ moyen, l'énergie moyenne par site devient

$$\begin{aligned} E &= \frac{1}{N}\sum_{k\sigma}\varepsilon_k \;+\; \frac{U}{N^2}\sum_{kp}\langle\, n_{k\uparrow}\,\rangle\,\langle\, n_{p\downarrow}\,\rangle \\ &= -\frac{4}{\pi}\sin\frac{\pi n}{2}\cos\frac{\pi m}{2} \;+\; \frac{U}{4}\left(n^2 - m^2\right)\;, \end{aligned} \tag{5.30}$$

avec $n = n_\uparrow + n_\downarrow$ et $m = n_\uparrow - n_\downarrow$. En dérivant (5.30) par rapport à l'aimantation m, on vérifie que l'état paramagnétique (m=0) est un extremum local pour toute interaction. L'analyse de la seconde dérivée montre qu'il s'agit d'un minimum pour[3]

$$U \;<\; U^{\mathrm{Stoner}} \;=\; 2\pi\sin\frac{\pi n}{2}\;. \tag{5.31}$$

Le lien avec la forme habituelle du critère de Stoner (4.8) se fait facilement en utilisant la densité d'états libre $D^0(\omega) = 1/(\pi\sqrt{4-\omega^2})$ à la surface de Fermi $E_F = \varepsilon_{k_F} = -2\cos(\pi n/2)$. Nous soulignons que, même pour des interactions inférieures à U^{Stoner}, l'état paramagnétique ne correspond pas nécessairement au fondamental. Pour des valeurs du couplage situés dans l'intervalle $U^{\mathrm{MF}} < U < U^{\mathrm{Stoner}}$, avec

$$U^{\mathrm{MF}} \;=\; \frac{16}{\pi n^2}\sin\frac{\pi n}{2}\left(1-\cos\frac{\pi n}{2}\right)\;, \tag{5.32}$$

la phase paramagnétique est métastable, tandis que la phase entièrement magnétisée constitue le fondamental (voir Fig. 5.14).

Cette discussion mène à la conclusion suivante: la RPA pure ne peut produire des résultats valables qu'en dehors de la région instable. L'évaluation de quantités possédant une contribution de la région instable, autour de $2k_F$, peut engendrer des résultats non physiques. Si nous calculons, par exemple, les nombres d'occupation à partir de l'éq. (5.24) avec la fonction de Green de la RPA pure, nous obtenons parfois une fonction non monotone (voir Fig. 5.15). En RPA renormalisée ainsi qu'en

[3]Nous supposons ici le remplissage inférieur ou égal à moitié. Les autres cas s'obtiennent grâce à la symétrie particule-trou.

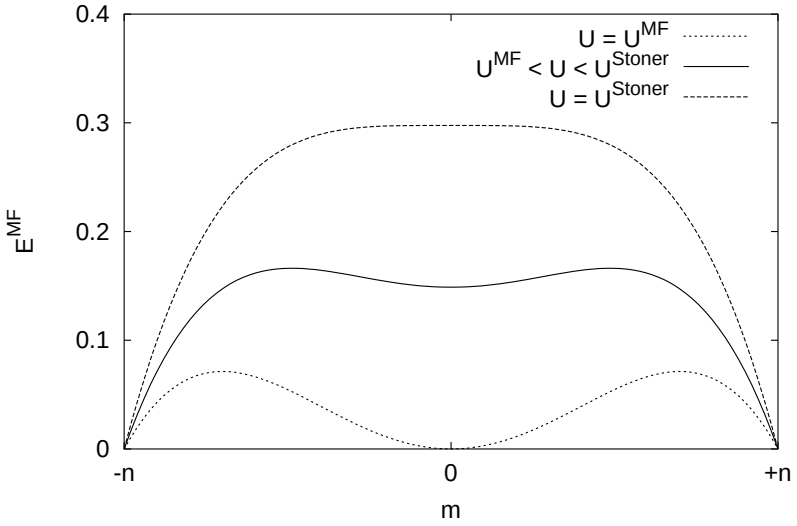


Figure 5.14: *Energie fondamentale, en champ moyen, en fonction de l'aimantation pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie. La ligne continue illustre une situation pour laquelle l'état paramagnétique* ($m = 0$) *est métastable, tandis que le fondamental est ferromagnétique* ($m = n$).

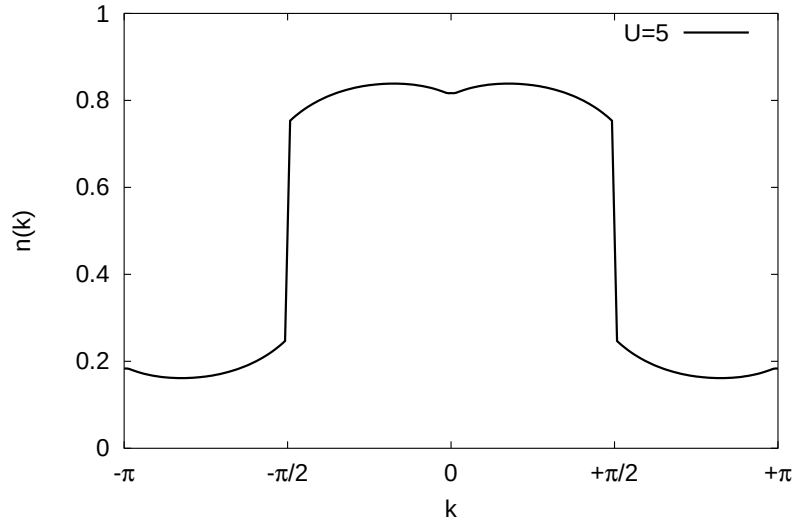


Figure 5.15: *Distribution des impulsions invalidée par les instabilités de la RPA pure. Chaîne de Hubbard à remplissage moitié et à* $U = 5$.

SCRPA, ces défauts se corrigent et les fonctions de réponse deviennent stables à tout q et ω. Au paragraphe 5.3.6, nous approfondirons à nouveau ces arguments, à l'aide de la règle de somme pondérée par l'énergie.

Quels effets de renormalisation s'observent dans la partie réelle de la susceptibilité "libre" de la RPA renormalisée? En comparant, sur la figure 5.11, $\mathrm{Re}\,\chi^0(q,\omega)$ (ligne continue) à $\mathrm{Re}\,\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$ (ligne en tirets-pointillés), nous constatons qu'au-delà de la limite supérieure du continu ($\omega \approx 2.8$), la renormalisation reste faible. Nous trouvons le plasmon renormalisé de la même façon que celui de la RPA pure: son énergie se détermine en cherchant le point où le dénominateur de la susceptibilité de charge (4.41), $1-U\chi^0(q,\omega)$, s'annule. La partie imaginaire de $\chi^0(q,\omega)$ étant nulle en ce point, la durée de vie du plasmon est infinie. Seule son énergie est légèrement plus petite que celle du plasmon pur. Pour des couplages plus forts, ce décalage en énergie s'accentue. Plus précisément, c'est le plasmon de la RPA pure qui se décale vers des fréquences de plus en plus élevées, tandis que celles du plasmon renormalisée convergent vers une limite finie (voir chapitre 5.3.7).

En dessous de la limite supérieure (5.28), les effets de la renormalisation sont plus importants. Souvenons-nous que le continu renormalisé n'a plus de borne inférieure nette. Il s'étale de $\omega \approx 2.8$ jusqu'à $\omega = 0$. Dans ce continuum, $\mathrm{Re}\,\chi^0(q,\omega)$ perd presque toute structure par rapport à $\mathrm{Re}\,\chi^0(q,\omega)$. Nous voyons que, même pour des interactions relativement faibles, telles que $U = 3$, la divergence à $\omega = 2$ s'est atténuée et $\mathrm{Re}\,\chi^0(q,\omega)$ est une fonction quasiment plate. Ces changements modifient, même à faible couplage, la nature de la réponse de spin longitudinale. Essayons de construire le magnon renormalisé, se produisant au point d'intersection de la ligne à $-1/U$ et $\mathrm{Re}\,\chi^0(q,\omega)$: le seul candidat est $\omega \approx 2.4$, mais à cette fréquence $\mathrm{Im}\,\chi^0(q,\omega)$ est grand (voir Fig. 5.9). L'oscillation collective disparaîtra alors dans le continu de spin, et il n'y aura pas de "vrai" magnon renormalisé. Les conséquences sont particulièrement importantes dans le domaine où la RPA pure est instable. Comme on l'a déjà discuté, dans cet intervalle de vecteurs d'onde, le magnon pure a une fréquence purement imaginaire. Il ne contribue donc plus au spectre de spin. En RPA renormalisée le magnon est absorbé par le continu, même dans la région d'instabilité de la RPA pure et même pour des interactions au-delà de U^{Stoner}. Le poids spectral du continu de spin est alors conservé. Dans la limite du couplage fort, la position de son pic est décalée vers les fréquences inférieures.

A faible interaction, on pourrait s'attendre à une réapparition des magnons purs.

Nous soulignons qu'elle n'a pas lieu. La renormalisation se révèle suffisamment forte pour que $\mathrm{Re}\,\chi^0(q,\omega)$ reste au-dessus de la ligne horizontale à $-1/U$. La susceptibilité de spin renormalisée est donc *toujours* constituée d'un continuum à pic large, à la place d'un pôle de magnon bien défini.

Une comparaison qualitative avec des calculs de Monte-Carlo quantique [93] montre que la réponse de spin exacte possède des points communs avec les deux théories RPA: elle ne montre, tout comme la RPA renormalisée, aucune séparation entre continu et magnon. Par ailleurs, en dehors de la région d'instabilité et surtout pour de petites impulsions, le pic du continuum de spin exact évolue selon une loi de dispersion qui ressemble davantage à celle des magnons de la RPA pure qu'à celle du pic du continuum de la RPA renormalisée. De même, les spectres exacts restent quasiment vides pour des petits q et ω, c.à.d. en dessous du continu particule-trou représenté sur les figures 5.12 et 5.13.

5.3.4 La susceptibilité de charge $\chi^{\mathrm{ch}}(q,\omega)$

Nous comparons, dans ce paragraphe, les susceptibilités de charge en RPA pure et en RPA renormalisée.

Suite à la discussion de la partie réelle de $\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$, nous nous attendons, en RPA pure, à une fonction de réponse de charge composée d'un continu et d'un plasmon non amorti. Cela est illustré sur les figures 5.16 et 5.17 pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie, respectivement, à $U=3$ et $U=6$. Sur les deux figures, les expressions analytiques pour la réponse en RPA pure sont tracées en pointillés. Elles s'obtiennent en reportant les expressions de $\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$ de l'annexe A.2 dans la susceptibilité de charge (4.41). Nous voyons que les plasmons purs (lignes verticales en pointillés) sont clairement séparées du continu de charge de la RPA pure (courbe pointillée). A $U=3$, nous observons sur la figure 5.16, que le plasmon pur apparaît à la même énergie que celui de la limite du couplage fort de la RPA renormalisée. Cette coïncidence est due au hasard du choix des paramètres. La séparation entre plasmon et continuum de charge est moins nette, si nous évaluons la susceptibilité de charge avec la susceptibilité libre calculée numériquement (lignes en tirets-pointillés). Encore une fois, la différence entre les lignes pointillées et celles en tirets-pointillés est uniquement due au "$\mathrm{i}0^+$" fini.

D'après les arguments du dernier paragraphe, en RPA renormalisée, la borne

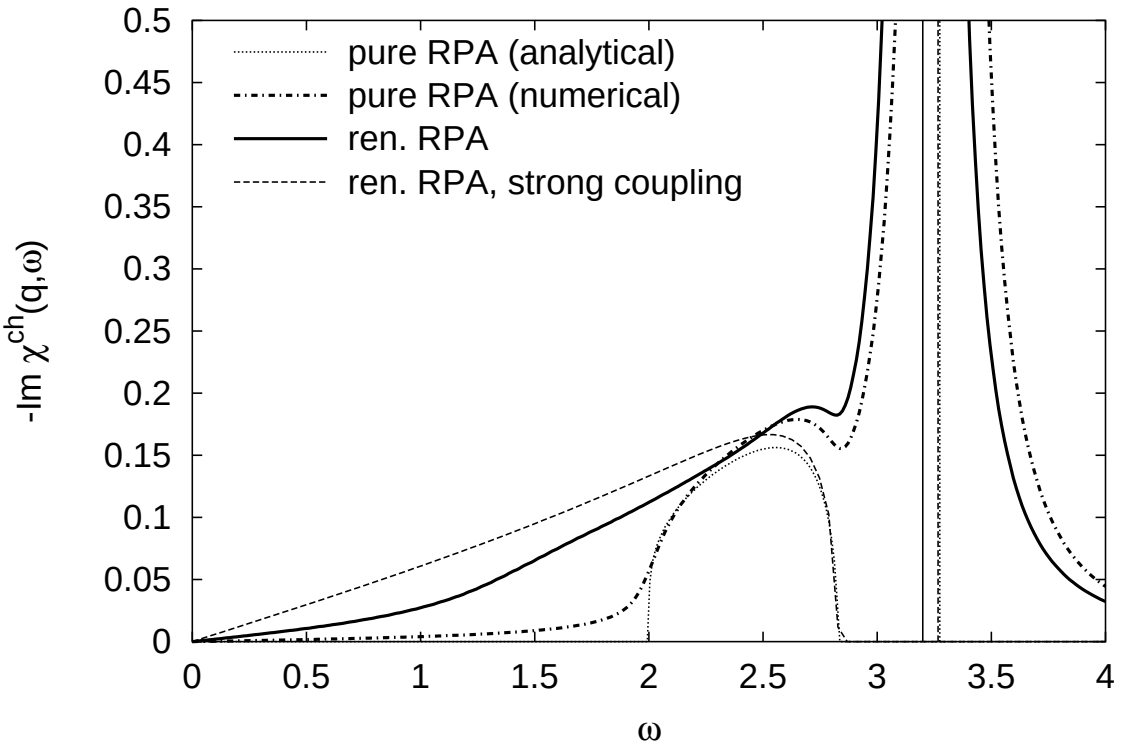


Figure 5.16: *Susceptibilité de charge* $\chi^{\mathrm{ch}}(q = \pi/2, \omega)$ *en RPA pure et en RPA renormalisée pour la chaîne de Hubbard à remplissage moitié pour une interaction* $U = 3$. *Les lignes verticales indiquent les pôles de plasmon. Par pur hasard, le plasmon de la RPA pure (ligne en pointillés) et celui de la limite* $U \to \infty$ *(ligne en tirets) se produisent pratiquement à la même fréquence. Le fin trait vertical continu indique uniquement la position précise du plasmon en RPA renormalisée, qui, lui-même, est représenté par la singularité apparaissant sur la courbe continue.*

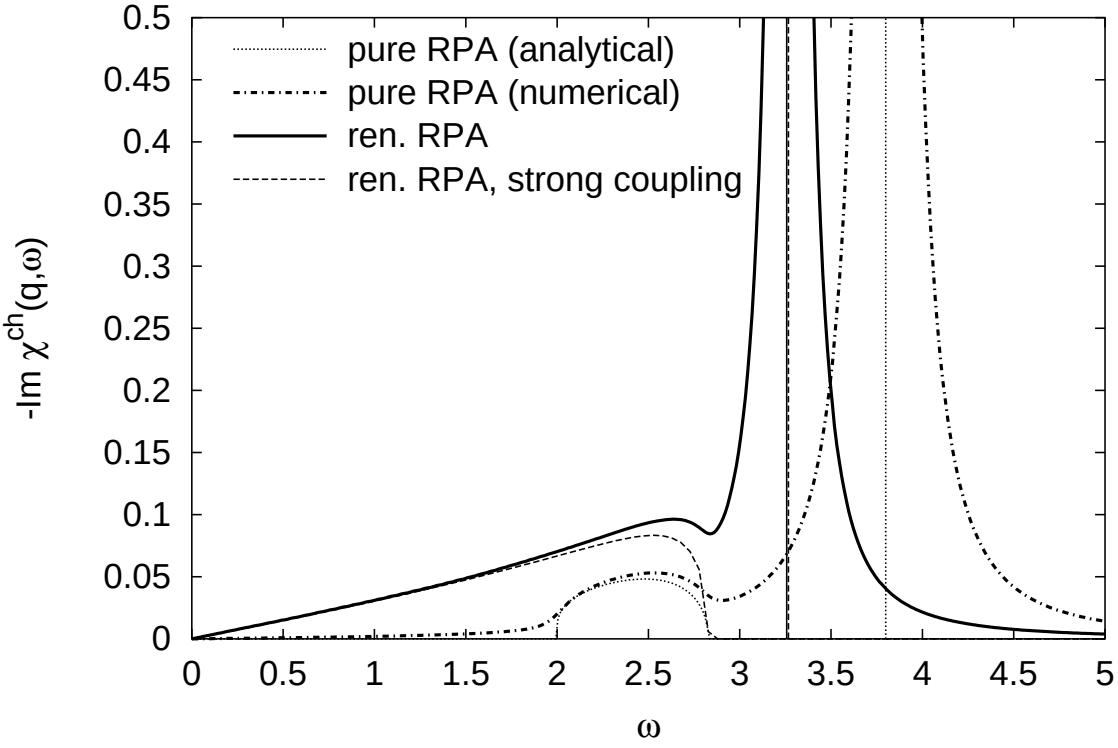


Figure 5.17: *Susceptibilité de charge* $\chi^{\mathrm{ch}}(q = \pi/2, \omega)$ *en RPA pure et en RPA renormalisée pour la chaîne de Hubbard à remplissage moitié pour une interaction* $U = 6$. *Les lignes verticales indiquent les pôles de plasmon. Le pôle de la RPA renormalisée (trait vertical continu) ne se distingue presque plus de celui de sa limite* $U \to \infty$ *(trait vertical discontinu), car la limite du couplage fort de la RPA renormalisée est atteinte.*

inférieure du continu s'adoucit lorsque le couplage augmente. La figure 5.16 montre que, à $U = 3$, le continu de charge renormalisé (ligne continue) s'étend de $\omega = 0$ jusqu'à la limite supérieure à $\omega \approx 2.8$, tandis que le continu de la RPA pure est limité à des fréquences situées entre ces deux limites, (5.28) et (5.29). En dehors de ce phénomène, nous remarquons un léger décalage du plasmon renormalisé, dont la position exacte est repérée par un trait vertical continu, par rapport au plasmon pur. L'accord qualitatif entre les fonctions de réponse en RPA pure et en RPA renormalisée reste néanmoins assez bon. De même, nous trouvons que la description fournie par la limite du couplage fort de la RPA renormalisée (courbe discontinue et plasmon correspondant) reproduit, elle aussi, les caractéristiques essentielles de la RPA renormalisée.

Il est plus facile de juger les résultats dans le cas $U = 6$ (Fig. 5.17): la RPA pure ne possède qu'un faible continuum (courbe pointillée entre $\omega = 2$ et $\omega \approx 2.8$) et presque tout le poids spectral se trouve dans le plasmon qui s'est déplacé à $\omega \approx 3.8$. Quant au continu de la RPA renormalisée, il reste assez prononcé (courbe continue). Le plasmon renormalisé atteint sa position prévue par la limite du couplage fort ($\omega \approx 3.3$), et l'accord général entre la RPA renormalisée (courbe continue) et sa limite du couplage fort (courbe en tirets et ligne de plasmon correspondante) est excellent. La différence restante provient de la valeur "i0^+" supposée finie.

5.3.5 La susceptibilité de spin longitudinal $\chi^{\mathrm{sp}}(q, \omega)$

Examinons maintenant la susceptibilité de spin longitudinal. D'après la discussion de $\mathrm{Re}\,\chi^{\mathrm{free}}(q, \omega)$ et $\mathrm{Re}\,\chi^{0}(q, \omega)$, au paragraphe 5.3.3, nous nous attendons à des modifications plus drastiques que dans le canal de charge.

Débutons avec l'analyse de la réponse de spin en RPA pure: à faibles interactions et dans le régime des transferts d'impulsion q pour lesquels la RPA pure est encore stable, la réponse est constituée d'un continu de spin, borné par les deux contraintes (5.28) et (5.29). En dessous de ce continu se forme un magnon non amorti. Ce scénario est illustré sur la figure 5.18. La susceptibilité de spin en RPA pure est représentée en pointillés, lorsqu'elle est évaluée analytiquement, tandis que la courbe en tirets-pointillés correspond aux résultats numériques (avec un "i0^+" fini). Nous avons vu au chapitre 5.3.3 que, même à faible couplage, le pôle de magnon disparaît en RPA renormalisée. Il est absorbé par le continu (ligne continue), qui s'intensifie

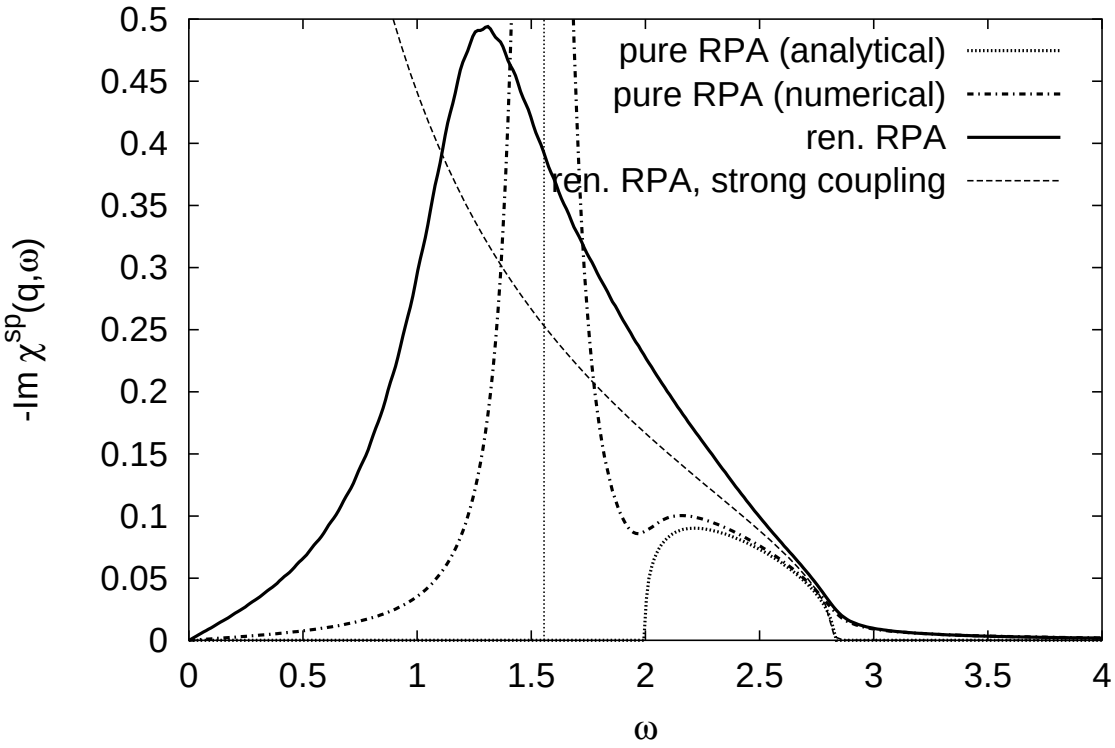


Figure 5.18: *Susceptibilité de spin longitudinal* $\chi^{\mathrm{sp}}(q = \pi/2, \omega)$ *en RPA pure et en RPA renormalisée pour la chaîne de Hubbard à remplissage moitié pour une interaction* $U = 3$. *La ligne verticale en pointillés indique le magnon de la RPA pure.*

considérablement et s'étale de $\omega = 0$ jusqu'à la borne supérieure à $\omega \approx 2.8$. Dans la limite de fortes interactions, le pic de ce continuum atteint $\omega = 0$ (ligne en tirets).

Considérons le cas où la RPA pure est instable, ce qui se réalise pour des interactions fortes ou pour des vecteurs d'onde situés dans la région autour de $2k_F$ (Fig 5.19). Conformément à nos arguments du chapitre 5.3.3, le magnon pur se

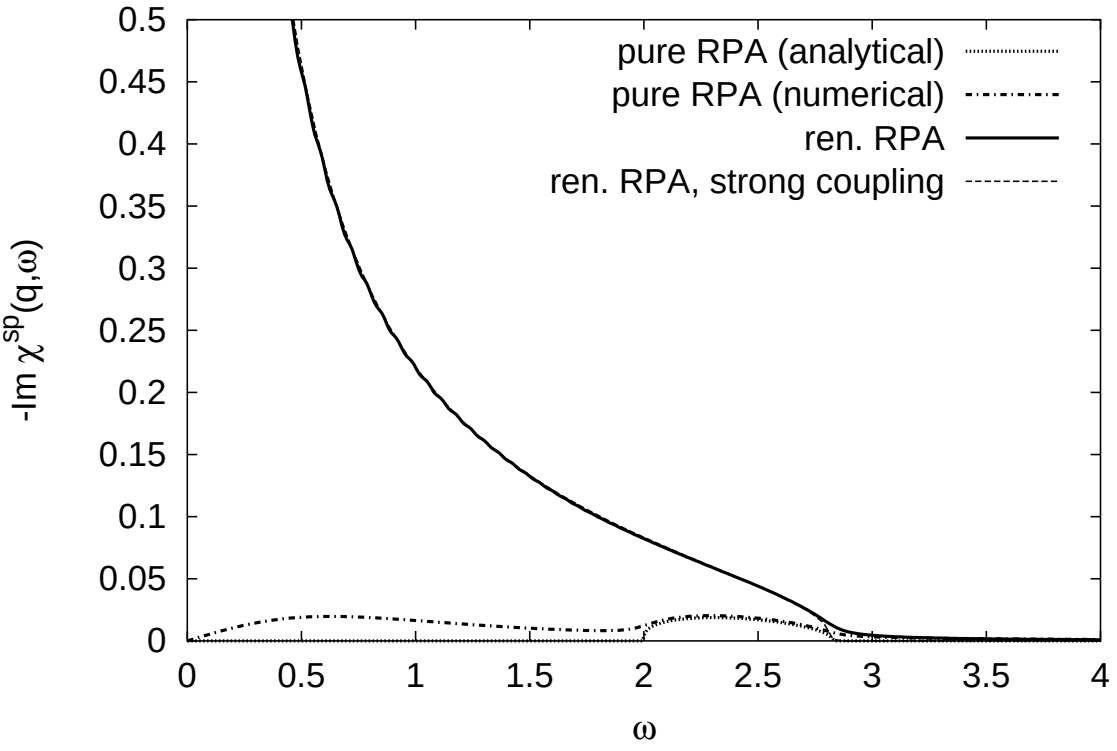


Figure 5.19: *Susceptibilité de spin longitudinal $\chi^{\rm sp}(q = \pi/2, \omega)$ en RPA pure et en RPA renormalisée pour la chaîne de Hubbard à remplissage moitié pour une interaction $U = 6$. Le magnon pur (voir Fig. 5.18) a disparu et la RPA pure devient instable. La courbe continue de la RPA renormalisée ne se distingue presque plus de celle de sa limite du couplage fort (ligne en tirets).*

produit pour des fréquences purement imaginaires et disparaît du spectre. L'unique résidu de la réponse de spin en RPA pure est un faible continuum (ligne pointillée) qui, à lui tout seul, ne dispose évidemment pas de suffisamment de poids spectral pour satisfaire à la règle de somme f (voir le prochain paragraphe).

Les changements se produisant lors du passage de la RPA pure à la RPA renor-

malisée sont maintenant encore plus flagrants: à $U = 6$, la susceptibilité de spin renormalisée (ligne continue sur la Fig. 5.19) est constituée d'un continu divergeant comme $1/\omega$ pour $\omega \to 0$. Cette fonction de réponse est en très bon accord avec la susceptibilité de spin à la limite des grands U, représentée sur la figure 5.19 par une ligne discontinue presque entièrement masquée par la courbe continue. Dans la règle de somme pondérée par l'énergie, la singularité à $\omega = 0$ est contrebalancée d'un facteur ω. Comme nous l'exposerons dans le prochain paragraphe, cette règle de somme est satisfaite en RPA renormalisée pour tout couplage et toute impulsion. Malgré cela, nous expliquerons au chapitre 5.3.7, que cette divergence infrarouge caractérisant la limite $U \to \infty$ de la RPA renormalisée, pose des problèmes dans l'évaluation self-consistante des corrélations à deux corps.

5.3.6 Règle de somme pondérée par l'énergie

Au chapitre 4.4.2, nous avons dérivé la règle de somme f pour les fonctions de réponse de spin longitudinal et de charge:

$$S_1^{\mathrm{ch}}(q): \; -2 \left\langle \hat{t} \right\rangle (1 - \cos q) \;=\; -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \; \omega \; \mathrm{Im}\, \chi^{\mathrm{ch}}(q, \omega) \tag{5.33}$$

$$S_1^{\mathrm{sp}}(q): \; -\tfrac{1}{2} \left\langle \hat{t} \right\rangle (1 - \cos q) \;=\; -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega \; \omega \; \mathrm{Im}\, \chi^{\mathrm{sp}}(q, \omega)\,. \tag{5.34}$$

Elle lie, dans le modèle de Hubbard à une dimension, la partie imaginaire des susceptibilités pondérée sur l'énergie à la valeur moyenne de l'énergie cinétique par site, $\langle\, t \,\rangle$.

Comme nous l'avons exposé auparavant, cette règle de somme n'est pas seulement satisfaite par les susceptibilités exactes. Elle se vérifie aussi pour les fonctions de réponse en RPA renormalisée et en SCRPA, *si* la valeur moyenne $\langle\, t \,\rangle$, figurant dans les membres de gauche des éqs. (5.33) et (5.34), est calculée de manière self-consistante à partir des fonctions de Green correspondantes. De plus, il est bien connu que même les susceptibilités de la RPA pure satisfont à cette règle de somme, si $\langle\, t \,\rangle$ est évalué sur le fondamental Hartree-Fock [33, 59]. Ceci n'est vérifié que si la RPA pure est stable.

Les figures 5.20 et 5.21 montrent, respectivement, les règles de somme (5.33) et (5.34) pour la chaîne de Hubbard à remplissage moitié. Les figures 5.22 et 5.23 illustrent le cas de la chaîne remplie à un quart. Sur toutes ces figures nous avons

choisi une interaction de $U = 3$. Les membres de gauche des règles de sommes

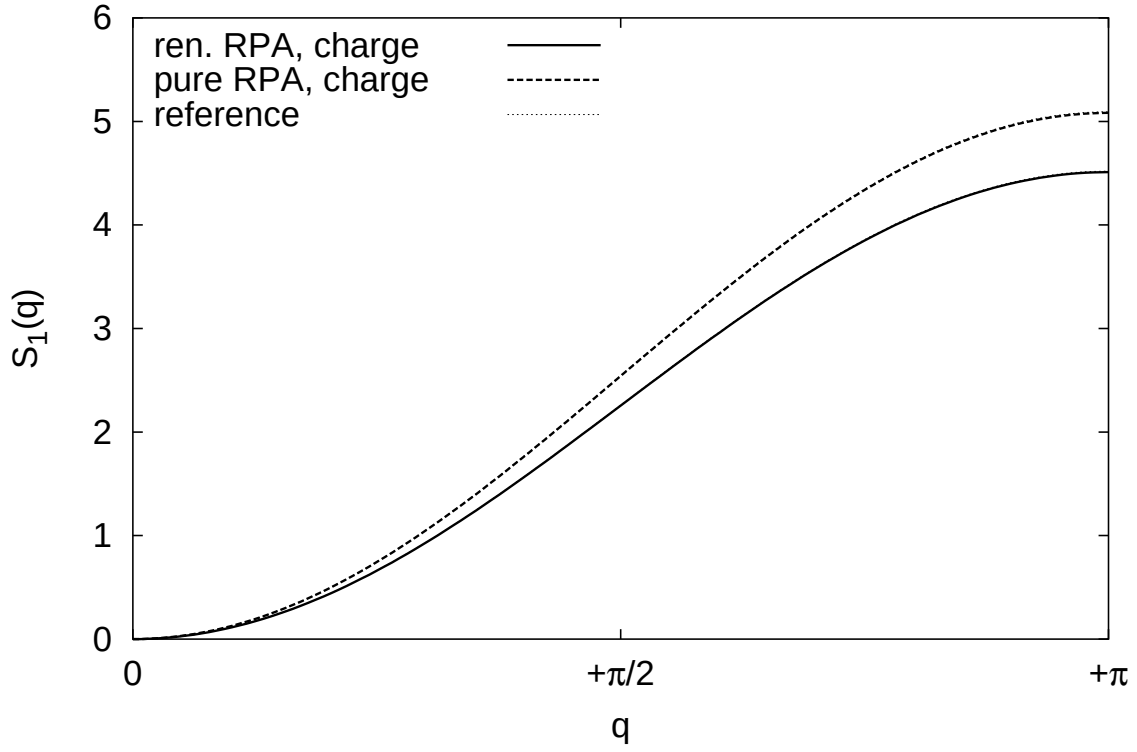


Figure 5.20: *Règle de somme pondérée par l'énergie pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie à $U = 3$, évaluée à partir des susceptibilités de charge de la RPA pure ainsi que de la RPA renormalisée. La courbe continue représente le membre de droite de la règle de somme $S_1^{\rm ch}(q)$ (voir l'éq. (5.33)) évalué avec la susceptibilité de charge de la RPA renormalisée. La courbe discontinue s'obtient en évaluant cette règle de somme avec la susceptibilité de la RPA pure. Dans les deux cas, le membre de gauche de l'éq. (5.33) sont tracées en lignes pointillées. La règle de somme étant satisfaite, ces lignes de référence se confondent avec la courbe continue ou discontinue correspondante.*

sont tracées en pointillés. Leur comportement en $(1 - \cos q)$ sert de référence, car il est indépendant des fonctions de Green. Seul le préfacteur, $\langle\, t\,\rangle$, change d'une approximation à l'autre: en RPA renormalisée, les nombres d'occupation s'adoucissent lorsque le couplage croît par rapport à la fonction échelon (voir Figs. 5.7 et 5.8). Les électrons sont alors diffusés dans des états d'impulsion plus élevées. Par conséquent, l'énergie cinétique moyenne augmente par rapport à sa valeur Hartree-Fock. Cela se

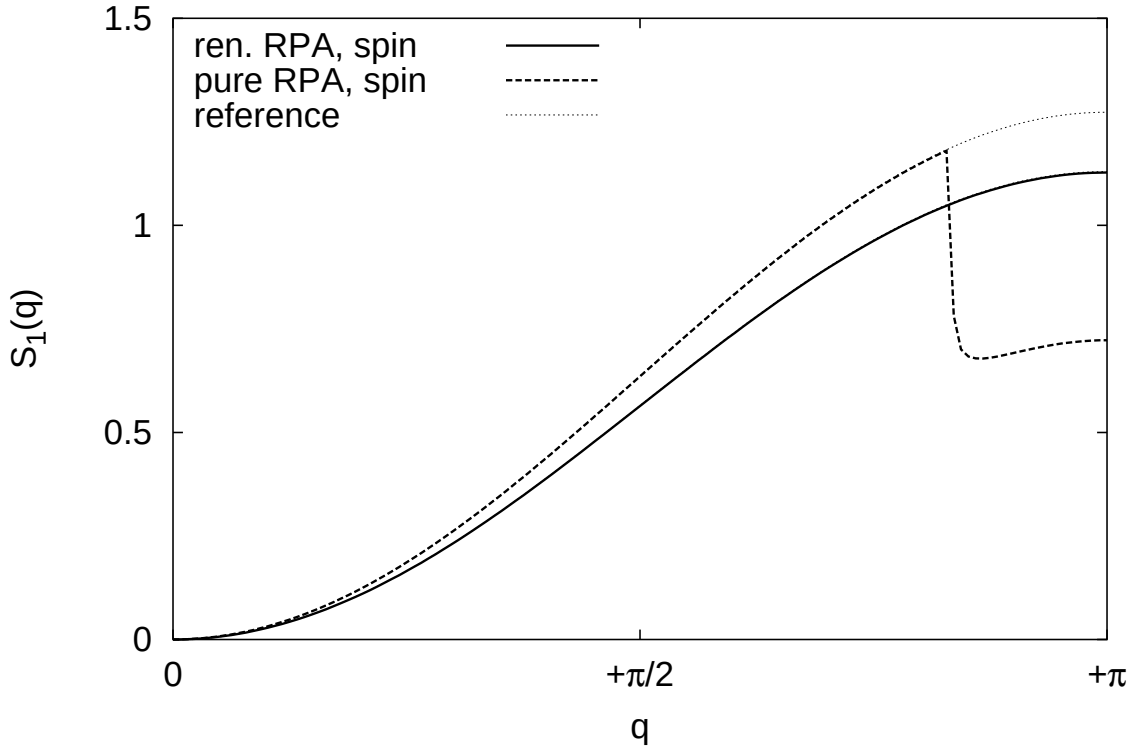


Figure 5.21: *Règle de somme pondérée par l'énergie pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie à $U = 3$, évaluée à partir des susceptibilités de spin longitudinal de la RPA pure ainsi que de la RPA renormalisée. La courbe continue représente le membre de droite de la règle de somme $S_1^{\mathrm{sp}}(q)$ (voir l'éq. (5.34)) évalué avec la susceptibilité de spin de la RPA renormalisée. La courbe discontinue s'obtient en évaluant cette règle de somme avec la susceptibilité de la RPA pure. Dans les deux cas, le membre de gauche de l'éq. (5.34) sont tracées en lignes pointillées. En RPA renormalisée, la règle de somme est satisfaite. Il est alors impossible de distinguer la ligne de référence en pointillés de la courbe continue. En RPA pure, la règle de somme est violée dans un domaine de vecteurs d'onde situés autour de $2k_F = \pi$. On voit ainsi la ligne discontinue s'écarter de sa ligne de référence en pointillés.*

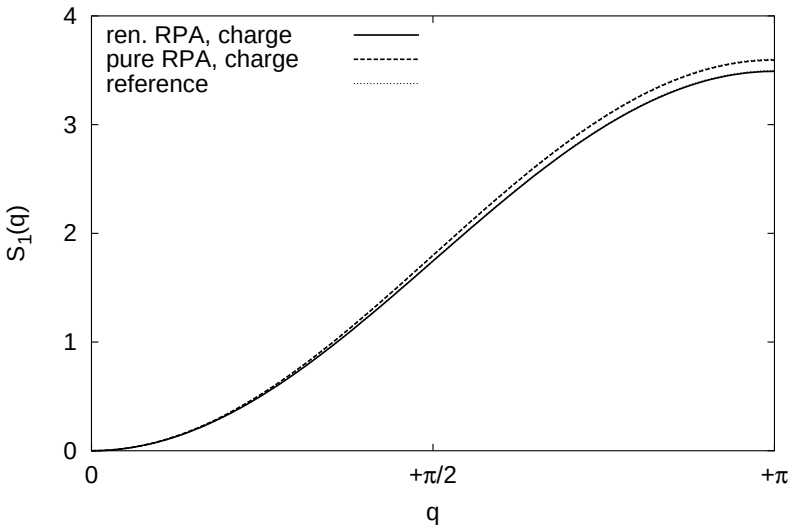


Figure 5.22: *Règle de somme pondérée par l'énergie pour la chaîne de Hubbard à remplissage un quart à $U = 3$, évaluée à partir des susceptibilités de charge de la RPA pure ainsi que de la RPA renormalisée. Description analogue à la figure 5.20.*

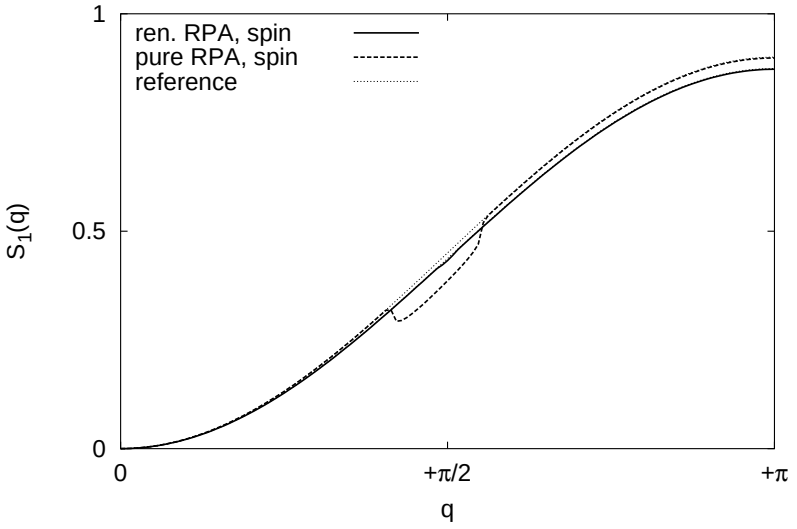


Figure 5.23: *Règle de somme pondérée par l'énergie pour la chaîne de Hubbard à remplissage un quart à $U = 3$, évaluée à partir des susceptibilités de spin longitudinal de la RPA pure ainsi que de la RPA renormalisée. Description analogue à la figure 5.21, mais avec $2k_F = \pi/2$.*

traduit sur les figures 5.20-5.23 par des lignes de référence (en pointillés) plus basses en RPA renormalisée qu'en RPA pure.

Pour les susceptibilités de la RPA renormalisée, les intégrales aux côtés gauches de (5.33) et (5.34) sont tracées en lignes continues. Ces lignes se superposent parfaitement à leurs lignes de référence correspondantes. Nous voyons ainsi que les susceptibilités de charge et de spin de la RPA renormalisée satisfont à la règle de somme f pour toute impulsion q.

Analysons maintenant les règles de somme (5.33) et (5.34) pour les fonctions de réponse de la RPA pure. Les intégrales sur ces susceptibilités mènent aux courbes discontinues sur les figures 5.20-5.23. Pour la réponse de charge pure, la règle de somme (5.33) est satisfaite: nous constatons en effet sur les figures 5.20 et 5.22, qu'elle ne se distingue pas de ses lignes de référence. Considérons finalement la susceptibilité de spin de la RPA pure, représentée sur les figures 5.21 et 5.23: la règle de somme (5.34) est satisfaite pour tout vecteur d'onde q situé en dehors d'une région autour de $2k_F$. Cette région coïncide avec les intervalles d'impulsion, sur les figures 5.12 et 5.13, dans lesquelles la dispersion des magnons atteint l'axe $\omega = 0$. Nous en concluons que la réponse de spin pure satisfait à la règle de somme uniquement pour des impulsions q pour lesquelles la RPA pure est stable. Dès que les fréquences auxquelles se produisent les magnons purs deviennent imaginaires, la règle de somme f est violée.

C'est le mérite de la RPA renormalisée (ainsi que celui de la SCRPA) de corriger ce défaut, et de rétablir la règle de somme pondérée par l'énergie pour toute interaction et impulsion!

5.3.7 La limite du couplage fort

Distribution des impulsions

A remplissage moitié et dans la limite de fortes interactions, les nombres d'occupation de la RPA renormalisée se décrivent, en bonne approximation, par

$$n_{k\sigma} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{4}{U}\cos k\right) . \tag{5.35}$$

Un développement en t/U de la solution exacte par ansatz de Bethe, donne [77, 87]

$$n_{k\sigma} = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{8\ln 2}{U}\cos k\right) + \mathcal{O}\left(\frac{t^2}{U^2}\right) . \tag{5.36}$$

Comme le montre la figure 5.24, l'accord entre la distribution des impulsions de la RPA renormalisée et (5.35) devient très bon pour $U \geq 5$. Nous démontrons

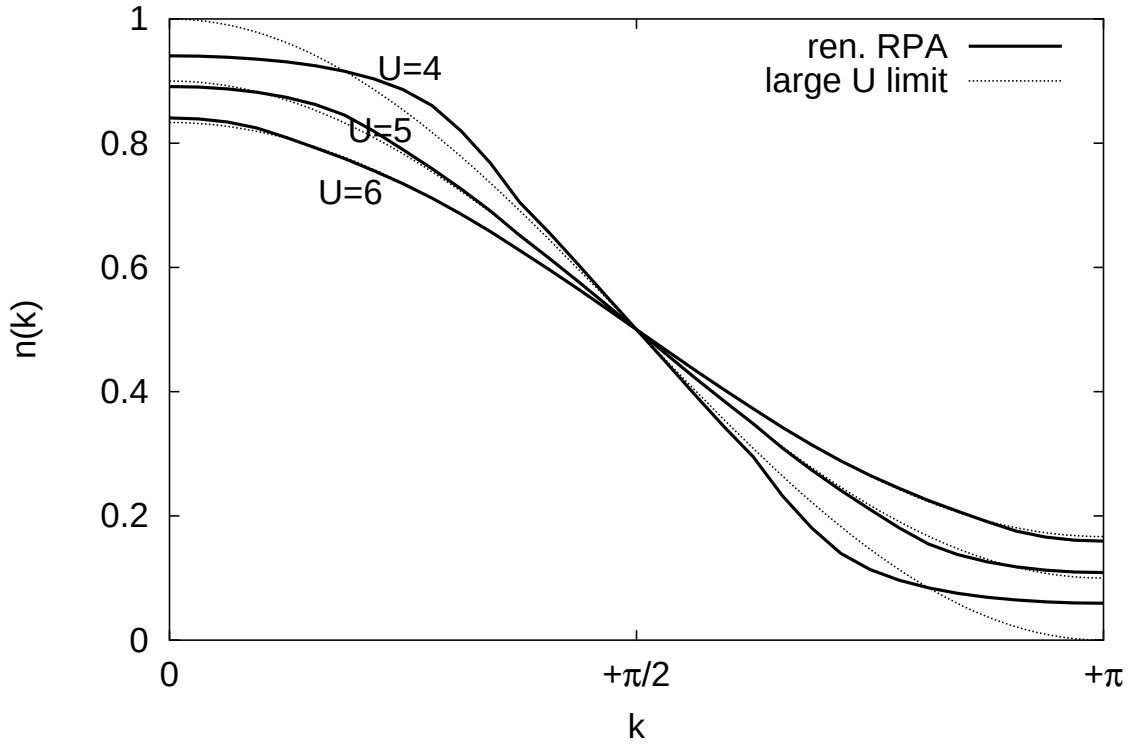


Figure 5.24: *Distribution des impulsions n_k pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie. Comparaison entre les résultats de la RPA renormalisée (lignes continues) et sa limite du couplage fort (lignes pointillées), fournie par l'éq. (5.35).*

dans l'annexe C que l'éq. (5.35), en combinaison avec les susceptibilités que nous présenterons par la suite, constitue une solution self-consistante *exacte* de la RPA renormalisée.

Susceptibilité $\chi^0(q, \omega)$

Commençons d'abord à calculer la susceptibilité $\chi^0(q, \omega)$ dans la limite du couplage fort. Elle est définie par une intégrale sur le propagateur particule-trou "libre", l'éq. (5.21). Pour les nombres d'occupation (5.35), cet intégrale peut être évaluée analytiquement. La simplification essentielle provient du fait que la différence des

nombres d'occupation, $n_{k\sigma} - n_{k+q\sigma}$, figurant au numérateur de $\mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega)$ est proportionelle à l'énergie d'excitation $\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k$ du dénominateur. Autrement dit, la borne inférieure du continu particule-trou (5.29) n'agit plus. Le système s'exprime en fonction d'une seule variable, ξ, définie comme le rapport entre l'énergie ω et la limite supérieure du continuum (5.28):

$$\xi = \frac{\omega}{\left|4 \sin \frac{q}{2}\right|} \tag{5.37}$$

$\chi^0(q,\omega)$ ne dépend alors plus de q et ω séparément. Elle devient

$$\chi^0(\xi) = -\frac{1}{U} \begin{cases} 1 + \mathrm{i}\frac{\xi}{\sqrt{1-\xi^2}} & \text{pour } |\xi| < 1 \\ 1 - \frac{|\xi|}{\sqrt{\xi^2-1}} & \text{pour } |\xi| > 1 \end{cases} . \tag{5.38}$$

En comparant (5.38) aux expressions de $\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$ de l'annexe A.2, nous remarquons que la singularité en racine carrée, à la limite supérieure du continu ($|\xi| = 1$), subsiste. Evidemment, comme la borne inférieure du continu a cessé d'exister, la singularité de $\mathrm{Re}\,\chi^{\mathrm{free}}(q,\omega)$ disparaît dans $\mathrm{Re}\,\chi^0(q,\omega)$: c'est une fonction complètement plate à l'intérieur du continu.

Il peut être démontré que la susceptibilité (5.38) satisfait aux relations de Kramers-Kronig. C'est en évaluant cette susceptibilité pour $U = 3$ ou $U = 6$ que s'obtiennent les lignes en tirets sur les figures 5.9, 5.10 et 5.11.

Réponse de charge

Nous trouvons la susceptibilité de charge dans la limite $U \to \infty$ en substituant (5.38) dans (4.41). Il en résulte

$$\chi^{\mathrm{ch}}(\xi) = -\frac{2}{U} \begin{cases} \frac{2-\xi^2+\mathrm{i}\xi\sqrt{1-\xi^2}}{4-3\xi^2} & \text{pour } |\xi| < 1 \\ \frac{2-\xi^2+|\xi|\sqrt{\xi^2-1}}{4-3\xi^2} & \text{pour } |\xi| > 1 \end{cases} . \tag{5.39}$$

Cette expression est tracée en courbes discontinues sur les figures 5.16 et 5.17. Pour $|\xi| < 1$, le spectre de charge, $\mathrm{Im}\,\chi^{\mathrm{ch}}(\xi)$, est constitué par un continu, dont le poids spectral se résume à

$$-\int_0^1 \mathrm{d}\xi\, \mathrm{Im}\,\chi^{\mathrm{ch}}(\xi) = \frac{2}{3U}\left(1 - \frac{\pi}{3\sqrt{3}}\right) . \tag{5.40}$$

Au-delà de la limite du continu se produit un pôle collectif à $\xi = 2/\sqrt{3}$. Il représente un plasmon non amorti, obéissant à la loi de dispersion

$$\Omega_p \;=\; \frac{8}{\sqrt{3}} \left| \sin \frac{q}{2} \right| . \tag{5.41}$$

Son poids spectral s'élevant à

$$-\int_1^\infty \mathrm{d}\xi \, \mathrm{Im}\, \chi^{\mathrm{ch}}(\xi) \;=\; \frac{2\pi}{U\, 3\sqrt{3}} \,, \tag{5.42}$$

il contient à lui seul plus de 80% du poids du spectre de charge. Nous soulignons que la dispersion (5.41) est indépendante de U, par contraste avec l'énergie du plasmon pur, qui croît proportionnellement à U pour $U \to \infty$.

Réponse de spin

La susceptibilité de spin longitudinal devient, dans la limite d'interactions fortes,

$$\chi^{\mathrm{sp}}(\xi) \;=\; -\frac{1}{2\,U} \begin{cases} -1 \,+\, \mathrm{i}\frac{\sqrt{1-\xi^2}}{\xi} & \text{pour } |\xi| < 1 \\ -1 \,+\, \frac{\sqrt{1-\xi^2}}{|\xi|} & \text{pour } |\xi| < 1 \end{cases} . \tag{5.43}$$

Cette expression fournit les courbes discontinues sur les figures 5.18 et 5.19. Sa partie imaginaire se limite à un continuum pour $|\xi| <= 1$, car il n'y a pas de pôle collectif. Le dénominateur de (5.43) est toujours régulier, sauf pour $\omega = 0$. A cet endroit, la partie imaginaire est nulle. Cette divergence à $\omega = 0$ a tout de même de fâcheuses conséquences que nous discuterons par la suite.

Fonctions de corrélation et énergie fondamentale

La densité de double occupation s'écrit

$$\frac{1}{N} \sum_i \langle\, n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \,\rangle \;=\; \underbrace{\langle\, n_\uparrow \,\rangle \, \langle\, n_\downarrow \,\rangle}_{D^{\mathrm{HF}}} + \frac{w^{\mathrm{c}}}{U} \tag{5.44}$$

où w^{c} dénote l'énergie potentielle de corrélation par site

$$w^{\mathrm{c}} \;=\; \frac{U}{N^2} \sum_{kpq} \left\langle\, a^+_{k\uparrow} a_{k+q\uparrow}\, a^+_{p+q\downarrow} a_{p\downarrow} \,\right\rangle^{\mathrm{c}} . \tag{5.45}$$

Les fonctions de Green à la limite de fortes interactions étant proportionnelles à $1/U$, w^{c} est indépendant de ω. Voilà la première indication que des difficultés apparaissent:

la densité de double occupation est donnée par la somme de la contribution Hartree-Fock et de w^{c}/U. La première ne dépendant pas de l'interaction, cette densité ne peut que converger vers D^{HF}, pour tout w^{c} fini, lorsque $U \to \infty$. D'un autre côté, il est clair que cette densité s'annule dans la limite du couplage fort de la solution exacte.

Nous calculons w^{c} en injectant la fonction de Green de la RPA renormalisée (5.23) dans le théorème de fluctuation-dissipation (4.28). Nous arrivons à une intégrale similaire à (C.1). La différence principale résidant dans le fait que la borne inférieure n'est pas $-\infty$, mais zéro. La singularité en $1/\omega$ de la susceptibilité de spin contamine alors la densité de double occupation w^{c} et crée une divergence logarithmique à $\omega = 0$. Il en résulte que la densité de double occupation et l'énergie fondamentale deviennent égales à $-\infty$ lorsque $U \to \infty$.

Essayons de nous débarrasser de cette singularité en insistant sur le principe de Pauli. La densité de double occupation (5.44) se calcule alternativement à partir de

$$\begin{aligned}
\frac{1}{N}\sum_i \langle\, n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \,\rangle &= \frac{1}{2N}\sum_{i\sigma\sigma'} \langle\, n_{i\sigma} n_{i\sigma'} \,\rangle \;-\; \frac{1}{2N}\sum_{i\sigma} \langle\, n_{i\sigma} n_{i\sigma} \,\rangle \\
&= \frac{1}{2N^2}\sum_{kpq} \left\langle \sum_{\sigma} a^+_{k\sigma} a_{k+q\sigma} \sum_{\sigma'} a^+_{p+q\sigma'} a_{p\sigma'} \right\rangle - \frac{1}{2N}\sum_{i\sigma} \langle\, n_{i\sigma} \,\rangle \\
&= -\frac{1}{U}\frac{1}{2\pi}\frac{1}{N}\sum_q \int_0^\infty \mathrm{d}\omega\, \mathrm{Im}\left[U\,\chi^{\mathrm{ch}}(q,\omega)\right] + \frac{n^2-n}{2} \\
&= \frac{8}{U\pi}\left[\frac{1}{3}\left(\frac{1}{\pi} - \frac{1}{3\sqrt{3}}\right) + \frac{1}{3\sqrt{3}}\right] \approx \frac{0.597}{U}
\end{aligned} \tag{5.46}$$

Pour passer de la première ligne à la seconde, nous avons utilisé le principe de Pauli $\langle\, n_{i\sigma}\, n_{i\sigma} \,\rangle = \langle\, n_{i\sigma} \,\rangle$. Le premier terme à la seconde ligne est relié, par le théorème de fluctuation-dissipation, aux poids spectraux (5.40) et (5.42). Sa contribution en champ moyen est compensé par le second terme, car $n^2 = n = 1$. La densité de double occupation, calculée en s'appuyant sur le principe de Pauli, disparaît alors suivant une loi en $1/U$ pour $U \to \infty$.

Nous obtenons ainsi, certes, qualitativement le bon comportement pour la densité de double occupation. Or, que se passe-t-il avec l'énergie potentielle, $V = \sum \langle\, n_{i\uparrow}\, n_{i\downarrow} \,\rangle$? Dans la limite du couplage fort de la solution exacte, uniquement les occupations doubles *virtuelles* sont admises. Elles sont à l'origine du terme $J = 2t^2/U$ du modèle tJ (cf. chapitre 4.2). L'énergie potentielle de la solution exacte tend alors vers zéro pour $U \to \infty$, tandis que l'éq. (5.46) nous donne la valeur constante

$V/N \approx 0.597$.

Il existe tout de même un moyen d'améliorer ces résultats. Nous évitons les problèmes provenant des densités à deux corps en utilisant le théorème Hellmann-Feynman [94]:

$$E(U) = U \int_U^\infty \mathrm{d}y \, \frac{T(y)}{y^2} \tag{5.47}$$

Ce théorème provient d'une variation du fondamental exact par rapport à la constante de couplage. Il permet d'exprimer l'énergie fondamentale $E(U)$ uniquement à partir de l'énergie cinétique $T(U)$. En général (5.47) améliore le résultat en partant d'une certaine approximation pour l'énergie cinétique. Le prix à payer est qu'il faut connaître cette dernière pour toute la gamme d'interactions.

En RPA renormalisée, l'énergie cinétique s'obtient aisément par les nombres d'occupation. A grand U, nous obtenons à partir de (5.35)

$$T(U) = -\frac{4}{U} \, . \tag{5.48}$$

C'est, à un facteur près, aussi le comportement de la solution exacte [77, 95]:

$$T^{\mathrm{exact}}(U) = -\frac{8 \ln 2}{U} + \mathcal{O}\left(\frac{t^3}{U^3}\right) \tag{5.49}$$

En déterminant l'énergie fondamentale de la RPA renormalisée à partir du théorème Hellmann-Feynman (5.47), nous obtenons les croix sur la figure 5.25. De la même façon, l'éq. (5.48) nous fournit le comportement de l'énergie fondamentale à grand U:

$$E(U) = -\frac{2}{U} \tag{5.50}$$

Elle est tracée en tirets sur la figure 5.25. Ces résultats sont comparés à l'ansatz de Bethe, représenté par la ligne continue, et son développement $-(4 \ln 2)/U$ pour $U \to \infty$, représentée par la ligne en tirets-pointillés. Nous constatons que la RPA renormalisée reproduit ainsi, dans les deux limites $U \to 0$ et $U \to \infty$, le comportement de la solution exacte.

L'énergie potentielle n'est autre que la différence entre $E(U)$ et $T(U)$. Son comportement asymptotique est en $2/U$. Cela implique que la densité de double occupation s'annule suivant $2/U^2$ pour $U \to \infty$. Hormis le préfacteur, ces résultats sont en accord avec la solution exacte. Comme le montre la figure 5.26, la RPA renormalisée, illustrée par des croix, tend vers la bonne valeur dans les limites de fortes et de faibles interactions.

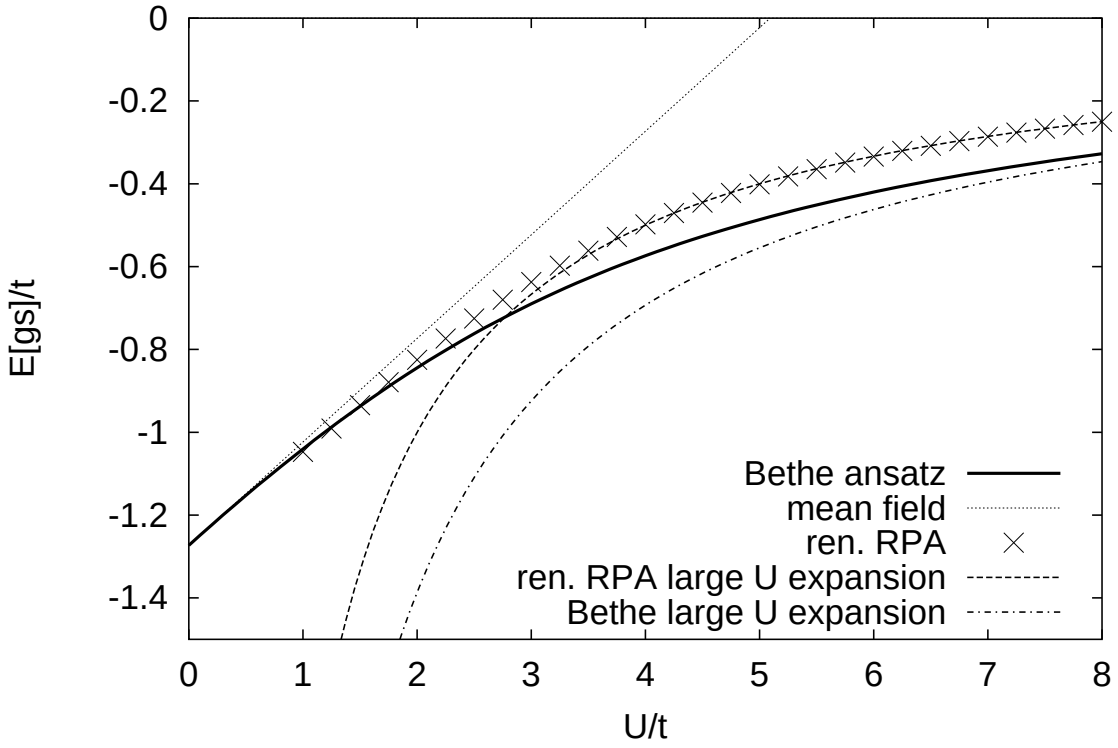


Figure 5.25: *Energie fondamentale (par site) pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie. Les développements en série de l'ansatz de Bethe ont étés effectués par Baeriswyl et al. [77, 95]. La limite du couplage fort de la RPA renormalisée est donnée par l'éq. (5.50).*

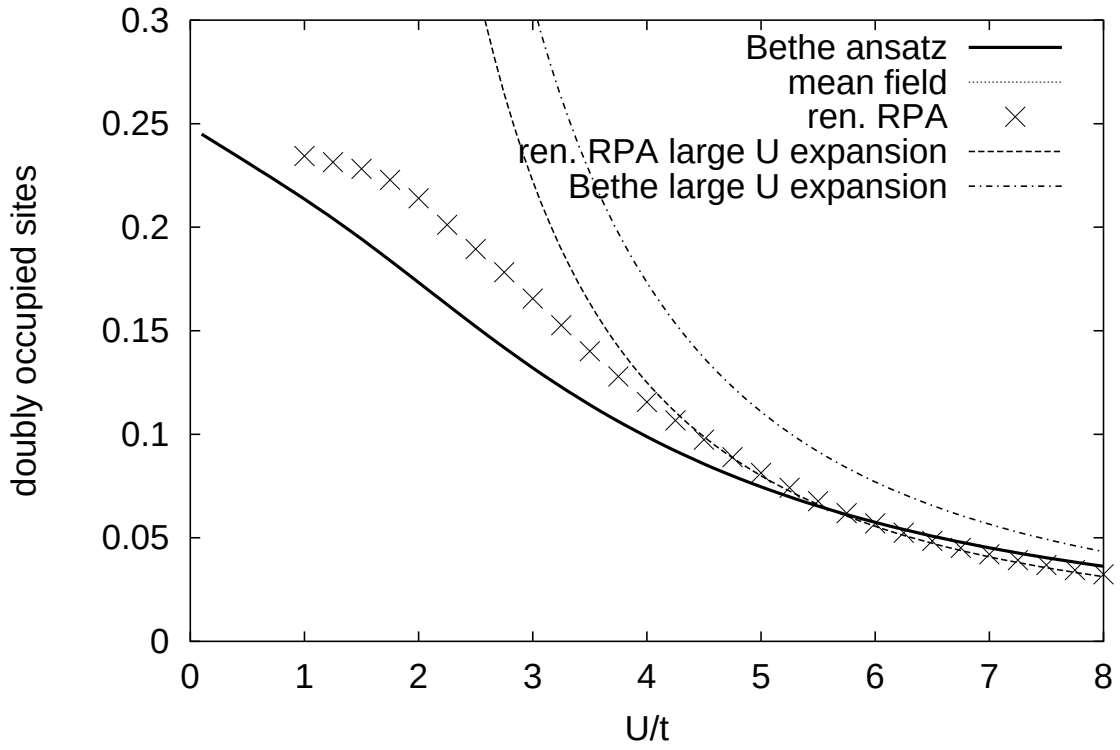
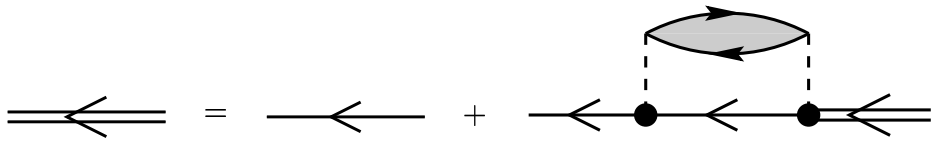


Figure 5.26: *Densité de double occupation pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie. Les développements en série de l'ansatz de Bethe ont étés effectués par Baeriswyl et al. [77, 95].*

5.3.8 Conséquences pour le propagateur à une particule

D'après le chapitre 3.4.3, il est possible de construire un propagateur à une particule conforme à la théorie RPA. En adaptant les éqs. (3.77) et (3.78), nous écrivons l'équation de Dyson suivante:



(5.51)

Rappelons que la ligne simple ne représente pas le propagateur libre, mais celui de l'approximation Hartree-Fock (dans l'ensemble grand-canonique):

$$G^{c,0}_{k\sigma}(\omega) \equiv \left\langle\!\!\left\langle a_{k\sigma};\, a^{+}_{k\sigma} \right\rangle\!\!\right\rangle^{c,0}_{\omega} = \frac{1}{\omega - (\varepsilon_k - \mu) - U n_{-\sigma} + \operatorname{sign}\omega \, \mathrm{i}0^{+}} \tag{5.52}$$

Afin d'assurer une interprétation correcte des diagrammes de Feynman, il est crucial de travailler avec des propagateurs causals.

Au sens strict, le diagramme hachuré inclut les susceptibilités de charge et de spin longitudinal, ainsi que de spin transverse. Pour se faire une première idée de la fonction de Green à une particule, il suffit de tenir compte des deux premières contributions. Dans cette approximation, la self-énergie devient[4]:

$$\begin{aligned} \Sigma_{k\sigma}(\omega) &= \Sigma^{\mathrm{HF}} + \Sigma^{\mathrm{RPA}}_{k\sigma}(\omega) \\ &= U\, n_{-\sigma} + \mathrm{i}\,\frac{U}{N} \sum_{q} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}\omega}{2\pi}\, G^{0,c}_{k-q\sigma}(\omega - \omega')\, U\chi^{c}_{-\sigma\,-\sigma}(q,\omega') \end{aligned} \tag{5.53}$$

Pour de fortes interactions, la self-énergie RPA devient linéaire en U, car $U\chi(q,\omega)$ n'en dépend plus. En décalant l'énergie zéro à la surface de Fermi, nous nous débarrassons de la correction Hartree-Fock et obtenons la fonction de Green

$$G_{k\sigma}\left(\omega = \Omega - \mu + U n_{-\sigma}\right) = \left[\Omega - \varepsilon_k - \Sigma^{\mathrm{RPA}}_{k\sigma}(\Omega)\right]^{-1} . \tag{5.54}$$

[4]Nous insistons à nouveau sur l'importance de travailler avec des fonctions de Green causales. A température nulle, le lien entre les fonctions causales et les fonctions retardées étant donné par:

$$\chi^{c}(\omega) = \begin{cases} \chi^{\mathrm{ret}}(\omega) & \text{pour } \omega > 0 \\ [\chi^{\mathrm{ret}}(\omega)]^{*} & \text{pour } \omega < 0 \end{cases}$$

La position des pôles se détermine à partir de la partie réelle de la self-énergie. L'évaluation de la convolution, dans l'éq. (5.53), avec la susceptibilité de la limite du couplage fort, nous conduit à une self-énergie de la forme (cf. Fig. 5.27)

$$\Sigma^{\mathrm{RPA}}_{k\sigma}(\Omega) \;\approx\; \text{const.}\,\frac{U}{\Omega}\;. \tag{5.55}$$

Sa dépendance en impulsion se révèle assez faible. La densité d'états,

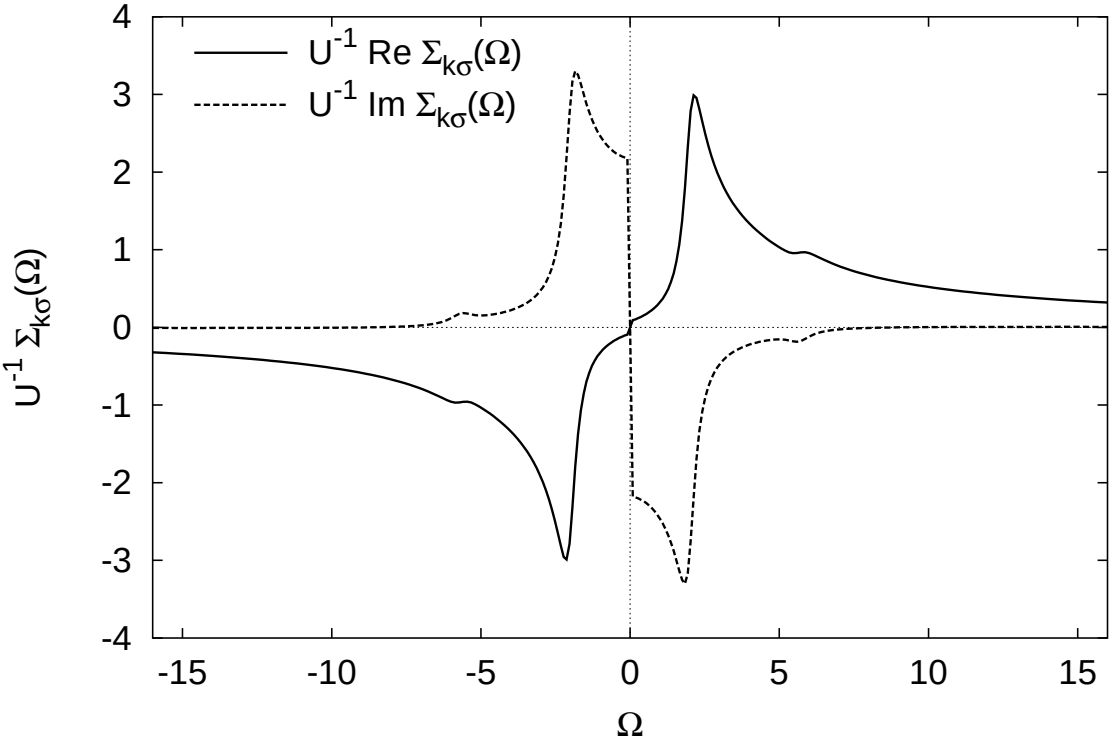


Figure 5.27: *Self-énergie causale* $\Sigma^{\mathrm{RPA}}_{k=\pi/2,\sigma}(\Omega)$ *pour la chaîne de Hubbard à remplissage de bande moitié, obtenue à partir de l'éq. (5.53) avec les susceptibilités de la limite de fortes interactions.*

$$D(\Omega) \;=\; -\frac{\operatorname{sign}\Omega}{\pi}\sum_{k\sigma}\operatorname{Im} G^{c}_{k\sigma}\left(\Omega-\mu+Un_{-\sigma}\right)\;, \tag{5.56}$$

est dominée par deux bandes qui ressemblent à celle du système sans interaction. Selon l'équation des pôles,

$$\Omega-\varepsilon_k \;\approx\; \text{const.}\,\frac{U}{\Omega}\;, \tag{5.57}$$

entre ces bandes apparaît un gap s'ouvrant suivant la racine carrée de l'interaction U. Ce phénomène est illustré sur la figure 5.28. Entre les deux bandes subsiste

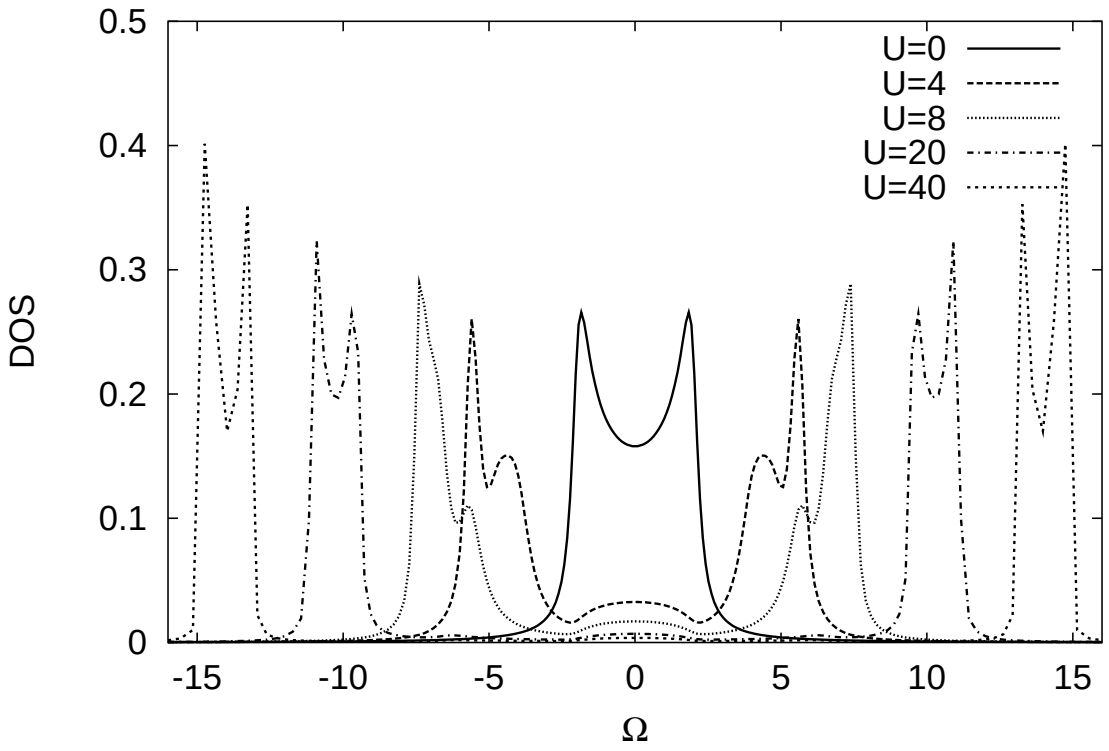


Figure 5.28: *Densité d'états pour la chaîne de Hubbard à moitié remplie, obtenue à partir des susceptibilités de la limite du couplage fort de la RPA renormalisée.*

une densité d'états résiduelle, provenant de la partie imaginaire de la self-énergie (voir Fig. 5.27). Cette partie imaginaire est gouvernée, d'après l'éq. (5.53), par la convolution des pics delta du propagateur Hartree-Fock et de la partie imaginaire de la susceptibilité. Les états résiduels situés au milieu du gap sont pour cela limités à une région d'environ la largeur de bande $W = 4$.

Notre approximation, bien que plutôt grossière, prédit alors une transition de phase quantique du type Mott-Hubbard: à faibles interactions, elle retrouve la densité d'états libre, $D^0(\omega) = 1/(\pi\sqrt{4-\omega^2})$, signalant un métal. Avec un couplage croissant, un gap se creuse. Le système devient, sinon un isolant, ou au moins un mauvais conducteur.

Quoique la valeur du gap, montré sur la figure 5.28, semble assez raisonnable

jusqu'à $U \approx 10$, cette approximation est incapable de reproduire son ouverture linéaire, prévue par la solution exacte [96]. Ce résultat paraît moins décevant en le comparant à la RPA pure: par le même formalisme, elle nous amène à une self-énergie qui, pour grands U, devient indépendante de l'interaction. Cela implique que le gap "pur", s'il existe, possède une ouverture maximale.

Il est évident que notre résultat demande encore beaucoup d'améliorations. Nous rappelons tout de même que notre propagateur à une particule, n'inclut jusqu'à présent aucune contribution self-consistante et seulement la moitié des corrections de polarisation!

Chapitre 6

Conclusions et perspectives

Cette thèse représente une première application de la RPA Self-Consistante au modèle de Hubbard.

Après l'introduction (au chapitre 1), nous avons rappelé, au chapitre 2, les points essentiels de la théorie des fonctions de Green. Au chapitre 3, nous avons dérivé la RPA Self-Consistante (SCRPA) en découplant, de manière approximative, la hiérarchie des équations du mouvement d'une fonction de Green générale. Nous sommes, pour cela, passés par l'Equation de Dyson. Son opérateur de masse exact est composé de deux parties, dont une instantanée (indépendante de l'énergie) et l'autre résonnante (dépendante de l'énergie). La SCRPA n'en retient que la partie instantanée. Appliquée aux fonctions de Green à une particule, la SCRPA nous permet de retrouver la théorie Hartree-Fock, tandis qu'elle nous une conduit à une approximation des phases aléatoires étendue pour des fonctions de corrélation de paires de fermions.

Nous avons démontré la fermeture des équations SCRPA pour le propagateur à N particules en présence d'une interaction à deux corps: toutes les composantes de l'opérateur de masse de la SCRPA s'obtiennent à partir de sa fonction de Green, par le biais du théorème de fluctuation-dissipation. Nous nous retrouvons avec un système d'équations intégrales non-linéaires qui peut être résolu de façon self-consistante. De plus, la SCRPA satisfait d'importants théorèmes, tels que la règle de somme pondérée par l'énergie ou le théorème de Goldstone, et assure un traitement correct des symétries.

Nous nous sommes ensuite concentrés sur le propagateur particule-trou. La SCRPA obéit alors à un principe variationnel, minimisant l'énergie moyenne des

excitations. L'opérateur de masse de la SCRPA inclut, outre les contributions de la RPA standard (ou "pure"), des fonctions de corrélation non locales, qui rendent la solution numérique parfois insurmontable. En négligeant ces corrélations à deux corps, nous nous retrouvons avec une théorie simplifiée, similaire à la RPA standard. A l'encontre de la RPA standard, cette approche, connue sous le nom de *RPA renormalisée* [12, 97], retient des effets de corrélation dans ses nombres d'occupation: ils sont déterminés de façon self-consistante à partir de la fonction de Green, tout comme dans la SCRPA. Une autre vertu commune entre la SCRPA et la RPA renormalisée est l'accord avec la règle de somme pondérée par l'énergie. De plus, les deux théories permettent d'en dériver un propagateur à une particule qui retient des corrélations particule-trou dans sa self-énergie, tout en respectant les prédictions de chacune des théories pour l'énergie fondamentale.

Le chapitre 4 est consacré au modèle de Hubbard. Après une présentation du modèle et de ses caractéristiques, nous avons discuté quelques unes des méthodes approximatives les plus répandues. Ensuite nous avons appliqué la SCRPA et de la RPA renormalisée aux susceptibilités de charge et de spin. Nous obtenons un système d'équations fermé pour la réponse de charge et de spin longitudinal, tandis que le système analogue pour la réponse de spin transverse reste couplé au premier.

Surtout en RPA renormalisée, nous nous attendons à de meilleurs résultats à hautes qu'à basses dimensions, car les corrélations deviennent moins importantes. Hormis ce résultat très général, la RPA renormalisée est plus performante à remplissage de bande moitié et dans un arrangement antiferromagnétique d'électrons. Ceci peut se comprendre à partir d'un argument analogue à celui de l'approximation des chemins reconstituables de Brinkman et Rice [55]. La solution numérique, en revanche, est largement facilitée à basses dimensions: une solution complète de la SCRPA ne peut être envisagée qu'à une dimension (ou à dimension infinie). Cette situation s'améliore nettement à passant de la SCRPA à la RPA renormalisée: grâce à l'absence de corrélations à deux particules et grâce à l'existence d'une expression explicite pour les fonctions de Green, nous gagnons un ordre de grandeur au niveau de la mémoire et deux ordres au niveau du temps de calcul.

La discussion de la règle de somme pondérée par l'énergie nous amène à la conclusion suivante: la RPA *pure* est en accord avec la règle de somme uniquement lorsque sa réponse de spin est stable. Ce défaut est corrigé par la RPA renormalisée, ainsi que par la SCRPA, qui satisfont à cette règle de somme pour toute impulsion et

toute interaction.

Au chapitre 5, nous avons étudié la chaîne de Hubbard dans sa phase paramagnétique à différents couplages et remplissages. Nous avons commencé ce chapitre en expliquant les particularités des modèles à une dimension, notamment les problèmes liés aux hypothèses incorporées dans la théorie des liquides de Fermi. A une dimension, une excitation particule-trou sans dépense en énergie est uniquement possible, si le transfert d'impulsion correspond au vecteur de Peierls. Les modes collectifs deviennent stables, car ils ne peuvent pas se désintégrer en excitations de paires particule-trou. Au lieu des quasi-particules, ce sont ces modes bosoniques qui dominent la physique du système.

Les modèles unidimensionnels sont souvent intégrables. Dans la plupart des cas, ces solutions exactes proviennent, soit de méthodes traduisant l'interaction par un changement des conditions aux limites, comme l'ansatz de Bethe, soit d'une transcription exacte du modèle fermionique en expressions bosoniques. Elles donnent lieu à toute sorte de particularités, telles que des lois de puissances gouvernant les fonctions de corrélation et la distribution des impulsions.

Malgré cela et en dépit de la moins bonne performance de notre méthode à une dimension, nous avons choisi de traiter la chaîne de Hubbard en RPA renormalisée. Les raisons en sont multiples: d'abord, la solution exacte de Lieb et Wu [10] nous sert de référence. Un tel point de repère manque en dimensions plus élevées, et le débat est encore largement ouvert (voir les réfs. [3, 98, 99]). Ensuite, une dimension peut être considéré comme le pire des cas pour notre méthode, du fait que les fluctuations quantiques deviennent extrêmement importantes[1]. Bien entendu, des raisons techniques ont aussi fortement influencé ce choix: ce modèle unidimensionnel nous a permis de tester le fonctionnement de la RPA renormalisée à toutes ses étapes, et surtout la convergence du cycle d'itération. L'expérience acquise peut dorénavant servir pour attaquer le modèle de Hubbard à deux dimensions qui représente une tâche numérique autrement plus difficile.

La RPA renormalisée ne prend pas spécialement soin des particularités liées à la dimension spatiale 1, telles que l'emboîtement de la surface de Fermi. Il n'est donc pas étonnant qu'elle nous fournisse une description similaire à celles d'autres méthodes développées pour des systèmes à dimension plus élevée, comme par exemple l'approximation de Hubbard III [42, 54] ou les Bosons Esclaves [51, 50].

[1] Voir, par exemple, l'application de la SCRPA au modèle de Heisenberg [20].

A faibles interactions, nous trouvons un liquide de Fermi, donc un fondamental métallique. Le système subit une transition à une phase isolante lorsque l'interaction excède une valeur critique finie, légèrement inférieure à la largeur de bande. La valeur exacte dépend du remplissage et croît avec le dopage.

Comme nous l'avons déjà remarqué, la RPA renormalisée est la mieux adaptée à la chaîne à moitié remplie. Pour d'autres remplissages, la chaîne de Hubbard présente un comportement de *liquide de Luttinger* que la RPA renormalisée n'est pas capable de reconstituer. Or, elle reproduit plusieurs résultats intéressants qui sont indépendants du remplissage. Par exemple, la surface de Fermi renormalisée reste (s'il en existe une) à l'endroit où se trouve celle du système libre. Ceci implique que le théorème de Luttinger est satisfait [24, 25].

Nous retrouvons aussi le phénomène de la séparation entre degrés de liberté de spin et de charge: en RPA renormalisée, la réponse de charge est essentiellement constituée d'un pôle de plasmon non amorti qui évolue au-dessus du continu des excitations de paires particule-trou. La réponse de spin longitudinale est composée d'un continuum dont le pic se trouve en dessous de la limite inférieure du continu particule-trou. Il évolue dans cette "partie creuse" qui caractérise les spectres à une dimension (voir Fig. 5.3). Il touche l'axe des impulsions vers $q = 2k_F$. Ce point de vue est qualitativement confirmé par des calculs de Monte-Carlo Quantique (QMC) [93]. Les vitesses de spin trouvées par cette méthode sont, à interaction égale, plus grandes que celles de la RPA renormalisée. Comme le montre aussi la distribution des impulsions, notre méthode surestime la renormalisation.

En revanche, le magnon de la RPA *pure* possède à peu près la bonne vitesse de spin. A l'encontre de la solution QMC, la réponse de spin de la RPA pure est composée de deux parties différentes: un continuum et un magnon non amorti. Rappelons que la RPA pure devient instable lorsque ce magnon atteint l'axe des impulsions. Cette instabilité se produit pour de faibles interactions près de $q = 2k_F$. En augmentant l'interaction, elle s'étend successivement sur toute l'axe des impulsions. Nous avons déjà démontré que la RPA renormalisée élimine ce défaut et rétablit l'accord avec la règle de somme pondérée par l'énergie pour tout transfert d'impulsion.

Dans l'ancienne région d'instabilité, il subsiste néanmoins une divergence de la susceptibilité de spin renormalisée à énergie zéro. Elle engendre une divergence logarithmique lors du calcul des fonctions de corrélation par le théorème de fluctuation-

dissipation. Cette singularité affecte aussi la densité de double occupation et l'énergie fondamentale. En imposant l'accord avec le principe de Pauli, ce point faible peut être corrigé en partie, mais seule l'application du théorème de Hellmann-Feynman donne le comportement correct de l'énergie fondamentale pour toute la gamme d'interactions.

D'autres résultats encourageants concernent la limite du couplage fort de la chaîne à moitié remplie. Dans cette limite, nous avons trouvé une solution analytique de la RPA renormalisée. Sa distribution des impulsions est, à un facteur $2\ln 2$ près, en accord avec le développement pour grands U de la solution exacte. Cet accord tient aussi pour l'énergie fondamentale, l'énergie cinétique et la densité de double occupation, à condition que la RPA renormalisée est combinée au théorème Hellmann-Feynman.

Le préfacteur peut être rectifié en remplaçant l'interaction nue de notre théorie par une interaction affaiblie d'un facteur $2\ln 2$. Cette procédure nous permet aussi de retrouver à peu près la vitesse de spin prévue par les calculs QMC [93]. Nous avons vu au chapitre 3.4 que la SCRPA inclut cet affaiblissement de l'interaction par effet d'écran dès le départ. Tout comme d'autres méthodes similaires [60, 61, 62], elle allait sûrement nous débarrasser des pathologies provenant des singularités de la réponse de spin. Contrairement à ces méthodes, qui se servent d'un effet d'écran ad hoc, la SCRPA a pour grand avantage d'incorporer la renormalisation de l'interaction de façon systématique, par sa construction-même et sa correspondance avec un principe variationnel. Le prix à payer pour cette rigueur est la présence de densités à deux corps non locales, rendant la solution numérique beaucoup plus difficile.

Perspectives

La souplesse de notre méthode permet son extension dans différentes directions.

Au premier abord, nous pourrions nous débarrasser de l'influence subsistante des instabilités de spin en champ moyen, en développant les équations de la RPA renormalisée sur deux sous réseaux différents. Cette méthode, qui tire son origine de la théorie de Stoner [53], a récemment été utilisée à dimension infinie [100].

Ensuite nous pourrions inclure la réponse de spin transverse en couplant les équations RPA correspondantes aux susceptibilités de charge et de spin longitudinal, comme cela a été proposé au chapitre 4.4.3.

Il serait encore plus prometteur de traiter simultanément les propriétés à une et à deux particules: il existe en effet une transcription exacte de la self-énergie en termes de la matrice T à deux particules [101]. La substitution de cette dernière par son homologue SCRPA (ou RPA renormalisée) nous fournit un couplage self-consistant entre les propagateurs à un et à deux électrons. Une première application de cette stratégie se trouve dans la réf. [18]. On pourrait ainsi déterminer les nombres d'occupation à partir de la fonction de Green à une particule, au lieu d'utiliser le théorème spectral pour le propagateur à deux particules. Ces nombres d'occupation apparaissent dans les propagateurs à paires d'électrons, qui, eux, contribuent à la self-énergie. Contrairement à notre première estimation de la fonction de Green à un électron du chapitre 5.3.8, le propagateur à une particule peut alors influencer les propriétés à deux particules, telles que les susceptibilités.

Afin d'améliorer la performance dans des systèmes avec effets d'emboîtement, notamment à une dimension, il s'avère nécessaire de traiter correctement les corrélations, dont le transfert d'impulsion égale le vecteur d'emboîtement $\mathbf{Q}$. Bien entendu, ces corrélations apparaissent déjà, parmi toutes les autres, dans le noyau intégral de la SCRPA. Or, en considérant uniquement celles à transfert d'impulsion $\mathbf{Q}$, nous pourrions perfectionner la RPA renormalisée pratiquement sans changer le degré de difficulté de la solution numérique.

Dans la discussion actuelle des systèmes d'électrons fortement corrélés, le modèle de Hubbard s'est avéré être l'un des modèles de base. Le but principal étant d'améliorer notre compréhension des phénomènes tels que la transition Mott-Hubbard et la supraconductivité à haute température, une description fiable du modèle à deux ou trois dimensions est indispensable. Malheureusement, ce problème est insurmontable de nos jours. Dans les dernières années, le modèle à dimension infinie s'est révélé être une alternative instructive [102, 103]. L'extrapolation de ses propriétés à dimension finie est probablement plus pertinente que ne l'est celle du modèle unidimensionnel.

A dimension infinie, la self-énergie devient diagonale dans l'espace des coordonnées. Dans un système invariant par translation, elle est alors indépendante de l'impulsion, ce qui permet des simplifications considérables. En négligeant l'emboîtement, le modèle correspond à un système unidimensionnel à dispersion aléatoire: voilà une application prometteuse pour notre théorie, d'autant plus que les corrélations du type RPA dominent à dimension infinie [104]. Une idée très at-

trayante serait de combiner la SCRPA avec la méthode des moments locaux, qui a déjà donné des résultats encourageants, surtout pour les phases isolantes du modèle de Hubbard à dimension infinie [105] et pour le modèle d'impureté d'Anderson [106].

Annexe A

Fonction de Green particule-trou libre et susceptibilité libre

A.1 Dérivation à partir du propagateur à une particule

Nous calculons la fonction de Green particule-trou libre ainsi que la susceptibilité libre à partir des propagateurs à une particule. Outre la dérivation des expressions dont nous nous servons constamment, ce calcul montre la rigueur des techniques de diagrammes.

Le propagateur à une particule est diagonale en k, k', grâce à la conservation d'impulsion. Comme il est d'usage [29, 107], nous associons

$$\mathrm{i} \left\langle\!\!\left\langle a_k(t);\, a^+_{k'}(t') \right\rangle\!\!\right\rangle^0 \equiv \underset{k,\,t}{\longleftarrow}\!\!\!\!\!\!\!\!\!\!\underset{k',\,t'}{} \quad . \tag{A.1}$$

Considérons une particule p qui, au temps t', reçoit une impulsion supplémentaire q. Elle est arrachée de la mer de Fermi et se propage librement avec l'impulsion $k = p + q$. Elle laisse un trou en dessous de la surface de Fermi, jusqu'à la recombinaison au temps t. La fonction de Green particule-trou libre est alors composée de deux

lignes fermioniques, dont une de particule et l'autre de trou:

$$\begin{aligned} \mathrm{i}\left\langle\!\!\left\langle (a_p^+\, a_k)_t;\, (a_k^+\, a_p)_{t'} \right\rangle\!\!\right\rangle^0 &\equiv \quad \overset{p}{\longrightarrow} \quad t \qquad t' \quad \overset{k}{\longleftarrow} \\ &= \mathrm{i}\left\langle\!\!\left\langle a_k(t);\, a_k^+(t') \right\rangle\!\!\right\rangle^0 \, \mathrm{i}\left\langle\!\!\left\langle a_p^+(t);\, a_p(t') \right\rangle\!\!\right\rangle^0 \\ &= -\mathrm{i}\left\langle\!\!\left\langle a_k(t);\, a_k^+(t') \right\rangle\!\!\right\rangle^0 \, \mathrm{i}\left\langle\!\!\left\langle a_p(t');\, a_p^+(t) \right\rangle\!\!\right\rangle^0 \end{aligned} \tag{A.2}$$

Chacun des membres de droite ne dépend que de la différence entre t et t'. Avant d'effectuer la transformation de Fourier par rapport à $(t - t')$, nous rappelons la définition du propagateur à une particule libre (cf. l'éq. (3.29)):

$$\left\langle\!\!\left\langle a_k;\, a_{k'}^+ \right\rangle\!\!\right\rangle_\omega^{\overset{\mathrm{ret}}{c}\,0} = \delta_{kk'}\left[\frac{1 - n_k^0}{\omega - (\varepsilon_k - \mu) + \mathrm{i}0^+} + \frac{n_k^0}{\omega - (\varepsilon_k - \mu) \pm \mathrm{i}0^+}\right] \tag{A.3}$$

Les facteurs $1 - n_k^0$ et n_k^0 sont des fonctions saut. Pour la fonction de Green causale, ils servent à faire la différence entre particules et trous en rangeant les pôles en dessous ou au-dessus de l'axe réel. En revanche, pour la fonction retardée, ces facteurs s'annulent. Comme nous l'avons vu au chapitre 3.2, le potentiel chimique μ apparaît suite à l'utilisation de l'ensemble grand-canonique. La transformée de Fourier du propagateur (A.2) s'évalue facilement par le biais du théorème de convolution et du théorème des résidus:

$$\begin{aligned} \left\langle\!\!\left\langle a_p^+\, a_k;\, a_k^+\, a_p \right\rangle\!\!\right\rangle_\omega^{\overset{\mathrm{ret}}{c}\,0} &= -\mathrm{i}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\mathrm{d}\omega'}{2\pi}\, \left\langle\!\!\left\langle a_k;\, a_k^+ \right\rangle\!\!\right\rangle_{\omega+\omega'}^{\overset{\mathrm{ret}}{c}\,0} \left\langle\!\!\left\langle a_p;\, a_p^+ \right\rangle\!\!\right\rangle_{\omega'}^{\overset{\mathrm{ret}}{c}\,0} \\ &= \left[\frac{(1 - n_k^0)\, n_p^0}{\omega\, - (\varepsilon_k - \varepsilon_p) + \mathrm{i}0^+} - \frac{\left(1 - n_p^0\right) n_k^0}{\omega\, - (\varepsilon_k - \varepsilon_p) \pm \mathrm{i}0^+}\right] \end{aligned} \tag{A.4}$$

La susceptibilité libre est caractérisée par l'ensemble des excitations de paires particule-trou qui existent pour une impulsion $q = k - p$ donnée:

$$\begin{aligned} \chi^{\overset{\mathrm{ret}}{c}\,0}(q,\omega) &\equiv \quad \overset{p,\,\omega'}{\circlearrowright} \quad p+q,\,\omega+\omega' \\ &= \sum_p \left\langle\!\!\left\langle a_p^+\, a_{p+q};\, a_{p+q}^+\, a_p \right\rangle\!\!\right\rangle_\omega^{\overset{\mathrm{ret}}{c}\,0} \end{aligned} \tag{A.5}$$

A.2 La susceptibilité libre en une dimension

A une dimension, la susceptibilité libre s'obtient en évaluant la somme sur k dans l'éq. (5.21). Les limites de cette intégrale elliptique sont gouvernées par les nombres d'occupation en forme de saut, qui figurent dans le propagateur particule-trou libre (5.20). Le calcul étant sans intérêt, nous nous contentons d'en résumer le résultat.

La symétrie de la loi de dispersion ε_k mène à une partie réelle de $\chi^0(q,\omega)$ symétrique en q et ω, tandis que la partie imaginaire est symétrique en q et anti-symétrique en ω.

Dans la phase paramagnétique, $n_{k\uparrow} = n_{k\downarrow}$, la partie réelle s'écrit explicitement

$$\begin{aligned} \mathrm{Re}\,\chi^0(q,\omega) \;=\; \frac{1}{\pi\sqrt{|z|}} \quad \Bigg[\quad & \mathrm{atan}\left(\frac{\sqrt{|z|}\sin k_F}{\omega\cos k_F \;-\; 4\sin^2(q/2)}\right) \\ - \quad & \mathrm{atan}\left(\frac{\sqrt{|z|}\sin k_F}{\omega\cos k_F \;+\; 4\sin^2(q/2)}\right) \Bigg] \end{aligned} \tag{A.6}$$

avec $z = \left(4\sin\frac{q}{2}\right)^2 - \omega^2$ et

$$\mathrm{atan}\,x \;=\; \begin{cases} \arctan x & \text{for } z < 0 \\ \mathrm{artanh}\,x & \text{for } z > 0 \text{ and } |x| < 1 \\ \mathrm{arcoth}\,x & \text{for } z > 0 \text{ and } |x| > 1 \end{cases} \tag{A.7}$$

Pour la partie imaginaire, nous trouvons, en accord avec Bénard *et al.* [108], l'expression suivante:

$$\begin{aligned} \mathrm{Im}\,\chi^0(q,\omega) \;=\; -\frac{\Theta(z)}{2\sqrt{|z|}} \quad \Bigg[\quad & \Theta\left(\varepsilon_F + \frac{\omega}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{|z|}\cot\frac{q}{2}\right) \\ + \quad & \Theta\left(\varepsilon_F + \frac{\omega}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{|z|}\cot\frac{q}{2}\right) \\ - \quad & \Theta\left(\varepsilon_F - \frac{\omega}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{|z|}\cot\frac{q}{2}\right) \\ - \quad & \Theta\left(\varepsilon_F - \frac{\omega}{2} - \frac{1}{2}\sqrt{|z|}\cot\frac{q}{2}\right) \Bigg] \end{aligned} \tag{A.8}$$

Annexe B

Solution numérique de la RPA renormalisée

Dans cette annexe, nous examinerons les méthodes numériques utilisées pour la solution self-consistante des équations de la RPA renormalisée.

Cette solution s'effectue par le biais d'un code (en C++) qui a été développé suivant le plan donné au chapitre 5.3.1. Sur la figure B.1, nous rappelons ce plan en forme d'organigramme.

Dans les paragraphes qui suivent, nous exposerons les étapes les plus délicates de ce calcul: l'évaluation de $\chi^0_\sigma(q,\omega)$ (chap. B.1) et la détermination des nombres d'occupation à partir du théorème spectral (chap. B.2).

B.1 Calcul de la susceptibilité libre renormalisée

La susceptibilité $\chi^0_\sigma(q,\omega)$ se calcule à partir d'une intégrale sur la fonction de Green particule-trou "libre" renormalisée (voir l'éq. (5.21)):

$$\begin{aligned} \chi^0_\sigma(q,\omega) &= \tfrac{1}{N}\sum_k \mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega) \\ &= \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi} \frac{n_{k\sigma} - n_{k+q\sigma}}{\omega - [\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k] + \mathrm{i}0^+} \end{aligned} \tag{B.1}$$

Afin d'évaluer cette intégrale, nous divisons la première zone de Brillouin en grille de points uniforme. La fonction de Green $\mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega)$ est alors uniquement connue sur cette grille, c.à.d. pour $k = k_i$ avec $k_{i+1} - k_i = \Delta k$ pour tout $i = 0..P_k$.

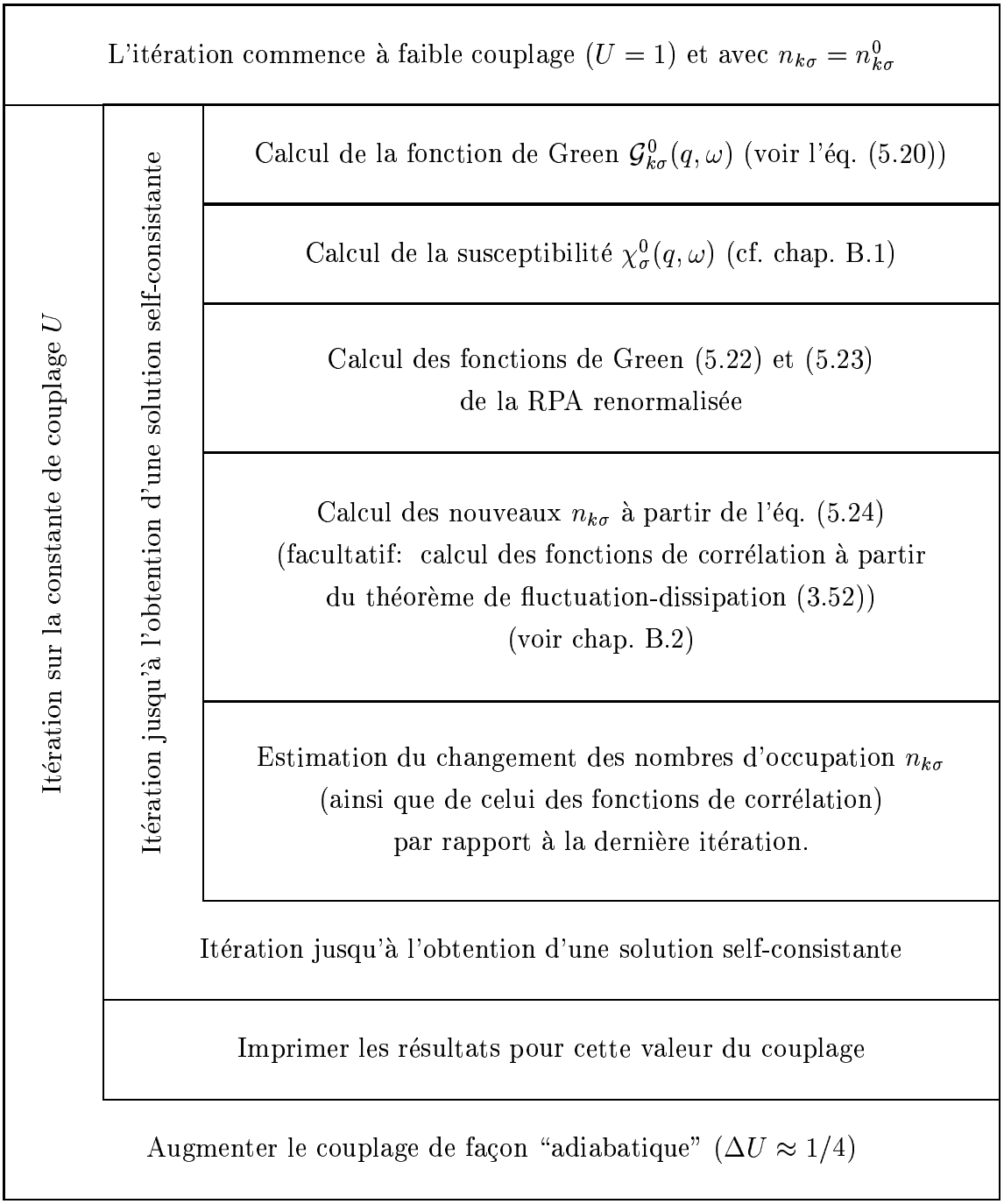


Figure B.1: *Organigramme du code numérique développé pour la solution self-consistante de la RPA renormalisée.*

Dans les paragraphes qui suivent, nous discuterons les différentes méthodes mises au point pour évaluer cette intégrale.

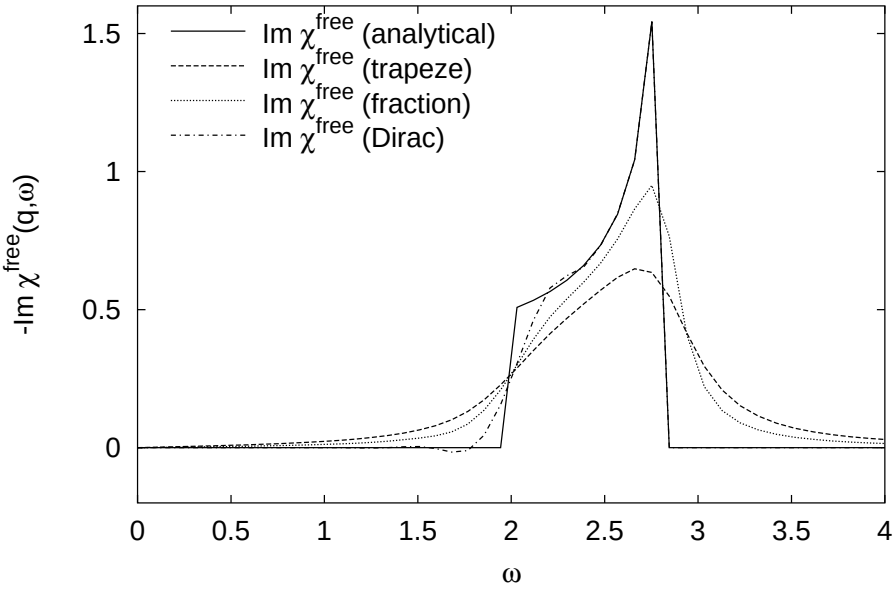


Figure B.2: *Partie imaginaire de la susceptibilité libre* $\chi^{\text{free}}(q = \pi/2, \omega)$ *calculée avec de différentes méthodes. Nous soulignons que la résolution en impulsion est de* $P_k = 64$ *points, tandis que les résultats présentés au chapitre 5.3 ont été obtenus avec une grille de* $P_k = 256$ *points.*

B.1.1 La méthode des trapèzes

Cette méthode standard consiste à linéariser $\mathcal{G}^0_{k\sigma}(q, \omega)$ par segment. L'apport du segment entre les points k_i et k_{i+1} à l'intégrale correspond à la surface du trapèze formé par la fonction interpolée et l'axe des impulsions, et l'intégrale-même est donnée par la surface totale des trapèzes.

L'avantage de cette méthode est sa simplicité qui facilite l'optimisation par des compilateurs, notamment sur les machines vectorielles[1]. Grâce à sa rapidité, elle permet d'obtenir une grande précision en augmentant la résolution élevée en k.

[1]Les compilateurs de quelques machines vectorielles, par exemple le CC du CRAY T90, ne réussissent pas à optimiser l'algorithme des trapèzes s'il s'agit de calculer l'intégrale d'une fonction complexe!

Son côté faible provient de l'interpolation linéaire: elle est moins performante si l'intégrand possède des variations brusques. Pour cela on est contraint à atténuer les pôles de la fonction de Green en utilisant un "i0^+" relativement grand. Bien entendu sa valeur exacte dépend de la résolution en k. Par exemple, pour $P_k = 64$ points, nous choisissons $\mathrm{i}0^+ = \mathrm{i}/4$. Nous obtenons ainsi la ligne pointillée sur la figure. B.2.

Une variante de cette méthode est connue sous le nom d'*intégration de Romberg* [57, 58]. Elle cherche à minimiser l'erreur en calculant la moyenne pondérée des résultats calculés avec différentes résolutions en k. Cette méthode devient exacte pour l'intégrale sur des polynômes d'un certain ordre, qui, évidemment, dépend du nombre de points dans la zone de Brillouin[2]. Or, pour des fonctions périodiques ce mérite se transforme en défaut: *dans* la zone de Brillouin, la procédure de Romberg nous donne le même résultat qu'une interpolation par un polynôme (d'un ordre assez élevé), mais elle ne maintient pas cette souplesse aux points de raccord $\pm\pi$. Son utilisation peut alors avoir de conséquences indésirables, et elle est fortement déconseillée!

B.1.2 La méthode des fractions

Comme nous l'avons vu, l'interpolation de la fonction de Green $\mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega)$ s'avère difficile à cause des pôles. En revanche, son numérateur et son dénominateur sont des fonctions sans singularités, dont l'interpolation ne pose aucun problème.

Soit $a_i k + b_i$ la fonction d'interpolation linéaire du numérateur entre k_i et k_{i+1}, et $c_i k + d_i$ celle du dénominateur. L'intégrale est alors constituée par des contributions qui valent

$$\int_{k_i}^{k_{i+1}} \mathrm{d}k \, \frac{a_i k + b_i}{c_i k + d_i} \;=\; \left[\frac{a_i}{c_i}\, k - \frac{a_i d_i - b_i c_i}{c_i^2} \, \ln\left(c_i k + d_i\right) \right]_{k_i}^{k_{i+1}} \tag{B.2}$$

Cette méthode nous donne la ligne en tirets sur la figure B.2. Elle nous permet de choisir une valeur pour i0^+ qui, à résolution en k égale, est deux fois plus petite que celle de la méthode des trapèzes.

Cette approche se généralise facilement aux fonctions d'interpolation plus sophistiqués, par exemple aux "splines cubiques". Il faut néanmoins mettre le lecteur

[2]Pour $P_k = 2^n$ points, la méthode de Romberg devient exacte pour les polynômes $p \in \mathrm{P}_{2n+1}$ [57].

en garde des problèmes que cela peut provoquer: l'interpolation d'une fonction possédant des discontinuités, comme cela peut être le cas pour le numérateur de la fonction de Green, engendre des splines oscillants, qui peuvent invalider les résultats.

B.1.3 Evaluation par l'identité de Dirac

Cette méthode consiste à calculer la partie imaginaire de la susceptibilité par le biais de l'identité de Dirac (cf. l'éq. (C.5)):

$$\begin{aligned} \operatorname{Im}\chi^0_\sigma(q,\omega) &= \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{\mathrm{d}k}{2\pi}\,(n_{k\sigma}-n_{k+q\sigma})\,(-\pi)\,\delta\left[\omega-(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k)\right] \\ &= -\frac{1}{2}\sum_{k_0}(n_{k\sigma}-n_{k+q\sigma})\left|\frac{\partial\left[\omega-(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k)\right]}{\partial k}\right|^{-1}_{k=k_0} \end{aligned} \tag{B.3}$$

où k_0 désigne les racines $\omega-(\varepsilon_{k+q}-\varepsilon_k)$ du dénominateur. Il s'agit alors de trouver ces racines et de calculer les résidus en évaluant la dérivée du dénominateur pour $k=k_0$. Contrairement aux autres méthodes présentées, nous n'avons pas besoin d'introduire un "i0^+" fini au dénominateur. En interpolant avec des splines cubiques, nous obtenons la ligne tirets-pointillés sur la figure B.2.

La partie réelle de la susceptibilité s'obtient avec la méthode des fractions, présentée au dernier paragraphe. L'unique différence étant que les fonctions d'interpolation sont réelles et non pas complexes.

Alternativement on pourrait essayer de calculer la partie réelle par le biais des relations de Kramers-Kronig (2.63). Cette procédure se révèle très difficile et moins performante, car, pour des petits q, la partie imaginaire de $\chi^0_\sigma(q,\omega)$ n'est non nulle que dans un très petit intervalle de fréquences (voir Fig. 5.3a).

B.2 Calcul des nombres d'occupation

Posons que nous sommes arrivés au stade de l'itération où nous connaissons la fonction de Green $\mathcal{G}^{\mathrm{RPA}}_{k\sigma\,p\sigma}(q,\omega)$. Les nombres d'occupation $n_{k\sigma}$ s'obtiennent alors à partir de l'éq. (5.24):

$$n_{k\sigma} = n_\sigma - \frac{1}{\pi N}\sum_{pq}\int_{-\infty}^{\infty}\mathrm{d}\omega\,\operatorname{Im}\mathcal{G}_{k\sigma\,p\sigma}(q,\omega) \tag{B.4}$$

La somme sur les impulsions se faisant sans difficulté majeure, le problème principale consiste à évaluer l'intégrale sur ω de la partie imaginaire de la fonction de Green.

Comme nous l'avons déjà vu, notamment au chapitre 5.3 et dans l'annexe C, cette intégrale est constituée de plusieurs contributions: celles des continus de spin et de charge, celle du pôle de la fonction de Green "libre" ainsi que celles des pôles collectifs de charge, et théoriquement aussi de spin.

B.2.1 Contribution des continus de spin et de charge

Les contributions des continus s'évaluent en discrétisant l'axe des fréquences de façon analogue comme cela a été discuté au dernier paragraphe pour les sommes sur les impulsions. La structure des susceptibilités étudiées au chapitre 5.3 nous incite à choisir une grille de fréquences non pas uniforme, mais de résolution plus élevée à petits ω qu'à grands. Une distribution lorentzienne satisfait aux exigences:

$$f(\omega) \propto \frac{1}{\omega^2 + \Delta_{\mathrm{hwhm}}^2} \tag{B.5}$$

Afin d'assurer une résolution élevée dans un domaine de à peu près deux fois la largeur de bande ($W = 4$) en dessous et au-dessus de $\omega = 0$, nous choisissons la moitié de la largeur à mi-hauteur $\Delta_{\mathrm{hwhm}} \approx 8$.

L'intégration-même s'effectue soit par la méthode des trapèzes, soit par celle des fractions, présentée au dernier paragraphe, le numérateur et le dénominateur étant donnés par les termes respectifs de la fonction de Green (5.22).

B.2.2 Contribution des pôles

En utilisant une valeur finie pour "i0^+" au dénominateur de la fonction de Green $\mathcal{G}^0_{k\sigma}(q,\omega)$, les contributions des pôles, collectifs ou appartenant à une paire particule-trou, sont déjà incluses dans l'apport des continus à l'intégrale (B.4).

Une considération séparée ne devient nécessaire que si la susceptibilité $\chi^0_\sigma(q,\omega)$ provient d'une fonction de Green qui ne contient pas de "i0^+" fini. Dans ce cas, les pôles en forme de pics delta doivent être pris en compte par une procédure analogue à celle présentée au chapitre B.1.3.

A titre d'exemple pour ce calcul, dont la difficulté principale est de repérer la position précise des pôles dans le plan complexe, sert la preuve de la cohérence de la limite du couplage fort, donnée dans l'annexe C.

Annexe C

Cohérence des équations de la limite du couplage fort

Nous démontrons rigoureusement que les équations de la limite du couplage fort, données au chapitre 5.3.7, représentent effectivement une solution self-consistante de la RPA renormalisée.

Comme nous avons constaté au chapitre 5.3.7, les nombres d'occupation (5.35) nous fournissent, par l'éq. (5.21), la susceptibilité $\chi^0(\xi)$. Cette fonction nous permet d'évaluer le propagateur particule-trou (5.22) qui, par le biais du théorème spectral (5.24), nous donne les nouveaux nombres d'occupation:

$$\begin{aligned}(n_{k\sigma} - n_{k+q\sigma})^{\text{new}} &= -\frac{1}{\pi}\sum_p \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \mathrm{Im}\, \mathcal{G}_{k\sigma\, p\sigma}(q,\omega) \\ &= -\frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\omega\, \mathrm{Im}\left[\frac{(n_{k\sigma} - n_{k+q\sigma})^{\text{old}}}{\omega\, -\, [\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k]\, +\, \mathrm{i}0^+}\right. \\ &\qquad \left.\cdot\frac{1}{1 - U\chi^0_\uparrow(q,\omega)\, U\chi^0_\downarrow(q,\omega)}\right] \end{aligned} \tag{C.1}$$

(Cela n'est pas tout à fait l'éq. (5.24), mais plutôt l'équation équivalente (3.53)).

Il suffit alors de démontrer que, en utilisant les nombres d'occupation (5.35) et les fonctions de Green du chapitre 5.3.7 dans le membre de droite, nous obtenons, comme membre de gauche, à nouveau les nombres d'occupation (5.35). Comme nous nous trouvons dans la phase paramagnétique, nous omettons les indices de spin. Nous transformons l'intégrand en fraction partielle. Après avoir substitué $x = \omega/\left|4\sin\frac{q}{2}\right|$ et $y_{kq} = [\varepsilon_{k+q} - \varepsilon_k]/\left|4\sin\frac{q}{2}\right|$, le rapport entre les nouveaux et les anciens nombres

d'occupation s'écrit:

$$I(y_{kq}) \;=\; -\frac{1}{2\pi}\int\limits_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}x\ \mathrm{Im}\left[\frac{1}{x\;-\;y_{kq}+\,\mathrm{i}0^{+}}\;\left(\frac{1}{1-U\chi^{0}}\;+\;\frac{1}{1+U\chi^{0}}\right)\right] \tag{C.2}$$

Par la suite, nous traitons séparément les deux termes, dont nous appelons le premier de charge et le second de spin. En utilisant la susceptibilité $\chi^0(\xi)$ de l'éq. (5.38), le dénominateur de charge devient:

$$1-U\chi^{0}(x) \;=\; \begin{cases} 2+\mathrm{i}\frac{x}{\sqrt{1-x^{2}}} & \text{for } |x|<1 \\ 2-\frac{|x|}{\sqrt{x^{2}-1}}+\mathrm{i}0^{+}\,\mathrm{sign}\,x & \text{for } |x|>1 \end{cases} \tag{C.3}$$

De la même façon, celui du terme de spin s'écrit:

$$1+U\chi^{0}(x) \;=\; \begin{cases} -\mathrm{i}\frac{x}{\sqrt{1-x^{2}}} & \text{for } |x|<1 \\ \frac{|x|}{\sqrt{x^{2}-1}}-\mathrm{i}0^{+}\,\mathrm{sign}\,x & \text{for } |x|>1 \end{cases} \tag{C.4}$$

Afin de résoudre l'intégrale, nous devons, pour chaque terme, tenir compte de trois contributions. La première vient du pôle de la fonction de Green libre, $1/(x - y_{kq} + i0^+)$, qui se trouve toujours à l'intérieur du continu $|y_{kq}| \leq 1$. En nous servant de l'identité de Dirac,

$$\frac{1}{f(x)\pm\mathrm{i}0^{+}} \;=\; \mathcal{P}\frac{1}{f(x)}\;\mp\mathrm{i}\pi\delta\left[f(x)\right]\ , \tag{C.5}$$

l'apport de charge s'évalue aisément à

$$I_{1}^{\mathrm{ch}}(y_{kq}) \;=\; \frac{1\;-\;y_{kq}^{2}}{4\;-\;3\,y_{kq}^{2}}\,. \tag{C.6}$$

Pour le terme de spin, nous trouvons zéro, car $1 + U\chi^0(x)$ est purement imaginaire dans le continuum.

La seconde contribution est celle des continus de charge et de spin. En combinant la partie imaginaire de $1/(1 \pm U\chi^0)$ avec la partie réelle de la fonction de Green particule-trou libre, nous obtenons:

$$\begin{aligned} I_{2}^{\mathrm{ch}}(y_{kq}) \;&=\; \frac{2\;-\;3\,y_{kq}^{2}}{6\,\left(4\;-\;3\,y_{kq}^{2}\right)} \\ I_{2}^{\mathrm{sp}}(y_{kq}) \;&=\; \frac{1}{2} \end{aligned} \tag{C.7}$$

Reste à calculer la contribution des pôles collectifs. Encore une fois, le terme de spin n'apporte rien, car il n'existe pas de magnon dans la limite du couplage fort. Le plasmon se trouvant à $x = \pm 2/\sqrt{3}$, nous écrivons, grâce à l'identité de Dirac (C.5):

$$I_3^{\mathrm{ch}}(y_{kq}) \;=\; \frac{2}{3\left(4 \;-\; 3\, y_{kq}^2\right)} \tag{C.8}$$

La somme des contributions (C.6), (C.7) et (C.8) étant 1, nous avons démontré que les nouveaux nombres d'occupation ne diffèrent pas des anciens. Par conséquent, nous avons en effet trouvé une solution self-consistante de la RPA renormalisée.

Zusammenfassung der Dissertation

Das *Hubbard-Modell* [1] dient zur Beschreibung stark korrelierter Elektronen in Festkörpern mit schmalen Energiebändern. Als einfachstes vollkommen quantenmechanisches Gittermodell, das sowohl der Wechselwirkung zwischen den Elektronen als auch deren itinerantem Charakter Rechnung trägt, nimmt es eine Schlüsselposition ein, vergleichbar etwa mit dem Heisenberg-Modell für quantenmechanische Spinsysteme.

Schon der einfachste Fall, das Einband-Hubbard-Modell mit elektronischem Hüpfen zwischen nächst-benachbarten Gitterplätzen, besitzt ein sehr reichhaltiges Phasendiagramm, das verschiedenste magnetische sowie metallische, isolierende und sogar supraleitende Phasen aufweist.

In den letzten Jahren hat das Hubbard-Modell viel zum Verständnis des von der Elektron-Elektron-Wechselwirkung hervorgerufenen Phasenübergangs zwischen Metall und Isolator beigetragen. Dieser sogenannte Mott-Übergang [2, 3] findet in einigen Übergangsmetalloxiden in Abhängigkeit von Druck und Temperatur statt. So wird zur Erklärung der Eigenschaften von Vanadiumsesquioxid (V_2O_3) [4] häufig ein Zweiband-Hubbard-Modell herangezogen [5].

Seit der Entdeckung der Hochtemperatur-Supraleitung ($T_c \approx 30$K) in LaBaCuO-Proben durch J. Bednorz und K.A. Müller im Jahre 1986 [6] und der darauffolgenden intensiven Erforschung der Kuprate, die in jüngster Zeit Materialien wie $La_{2-x}Sr_xCuO_4$ (mit $x \approx 0.15$) und $YBa_2Cu_3O_{7-y}$ (mit $y \approx 0.1 \ldots 0.5$) hervorgebracht hat, entstand ein weiteres wichtiges Anwendungsgebiet für das Hubbard-Modell. Die in diesen modernen Hochtemperatur-Supraleitern vorhandenen CuO_2-Schichten werden mit Hilfe eines Dreiband-Hubbard-Modells beschrieben [3, 7], das auch als *Emery-Modell* [8] bezeichnet wird.

Außerdem sind das Hubbard-Modell und seine Derivate wichtig für die Beschreibung weiterer stark korrelierter Elektronensysteme, wie z.B. Fullerene oder Legie-

rungen Seltener Erden, die aufgrund der hohen effektiven Masse der Ladungsträger auch "Schwere Fermionen" genannt werden [3, 9].

Trotz seiner einfachen Struktur und trotz den Anstrengungen der letzten dreißig Jahre sind noch viele Eigenschaften des Hubbard-Modells, zumindest teilweise, unverstanden. Da bisher nur in einer Dimension eine exakte Lösung gefunden werden konnte [10] (und wahrscheinlich auch nur dort existiert), ist das Hubbard-Modell eine immense Herausforderung für die Näherungsmethoden der Vielteilchenphysik. In der Vergangenheit wurden verschiedenste Methoden entwickelt und auf das Hubbard-Modell angewandt, jede davon mit ihren eigenen Vor- und Nachteilen [3, 11]. Allen Mühen zum Trotz gelang es bisher nicht eine über die Molekularfeldnäherung hinausgehende, allgemein akzeptierte Theorie zu erstellen.

In dieser Dissertation wurde deshalb eine neue Methode untersucht, die als direkte Verallgemeinerung der Hartree-Fockschen Theorie auf Vielteilchen-Korrelationsfunktionen angesehen werden kann.

Auf die Einleitung (Kapitel 1) folgt eine kurze Einführung in die Lineare Antwort-Theorie und in die Greenschen Funktionen (Kapitel 2). Hierbei wird die Definition der wichtigsten Begriffe wiederholt und die für diese Arbeit notwendigen Grundlagen bereitgestellt.

Kapitel 3 enthält eine ausführliche Beschreibung der soeben erwähnten Methode. Als Ausgangspunkt dient hierbei die Dysongleichung einer allgemeinen N-Teilchen-Greenfunktion. Diese Gleichung erlaubt es, eine Greenfunktion in einem System wechselwirkender Teilchen durch die entsprechende "freie" (d.h. unkorrelierte) Greenfunktion und einen Massenoperator auszudrücken. Zwar erlaubt es diese Vorgehensweise, eine formale Lösung für die wechselwirkende Greenfunktion zu finden, doch besteht die eigentliche Schwierigkeit nun darin, den Massenoperator zu bestimmen.

Ein exakter Ausdruck für diesen Massenoperator kann mittels der ersten zwei Bewegungsgleichungen der Greenfunktion hergeleitet werden. Der Massenoperator zerfällt dadurch in zwei Teile, von denen der erste instantan ist und durch Fouriertransformation frequenzunabhängig wird. Der zweite Term ist resonant, also frequenzabhängig, und enthält im wesentlichen den irreduziblen Anteil einer höheren Greenfunktion.

Vernachlässigt man diesen resonanten Beitrag, so gelangt man zur sogenannten *Selbstkonsistenten Random-Phase Approximation* (SCRPA). Diese Näherung, deren

Ursprünge auf die Sechziger Jahre zurückgehen [12, 13, 14], wurde in der jüngeren Vergangenheit vor allen Dingen in der Kernphysik angewandt und erweitert [15, 16, 17, 18, 19]. Im eindimensionalen Heisenberg-Modell konnte mit dieser Methode das vom Bethe-Ansatz her bekannte exakte Ein-Magnon-Spektrum, $\omega_k = \frac{\pi}{2}|\sin k|$, reproduziert werden [20]. Des weiteren stimmen die SCRPA-Ergebnisse für das Modell in zwei Dimensionen mit neueren Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen überein.

Im Falle einer Einteilchen-Greenfunktion ist der instantane Massenoperator der SCRPA-Näherung mit der Hartree-Fock-Selbstenergie identisch. Für Teilchen-Loch-Greenfunktionen erhält man auf analoge Weise eine Hartree-Fock-Näherung für bosonische Dichtefluktuationen. Deshalb wird die SCRPA in einigen Kreisen auch als "Cluster Mean Field" bezeichnet.

Im allgemeinen Fall erscheinen im Massenoperator der SCRPA Erwartungswerte, die unter Zuhilfenahme des Fluktuations-Dissipations-Theorems allesamt mit der entsprechenden Greenfunktion ausgewertet werden können. Ist der Massenoperator vollständig berechnet, so liefert eine Martixinversion die nächste Näherung für die Greenfunktion. Jene wird wiederum zur Bestimmung der Elemente eines neuen Massenoperators verwendet. Wir haben es also mit der selbstkonsistenten Lösung eines geschlossenen Systems nichtlinearer Integralgleichungen zu tun.

Ferner konnte gezeigt werden, daß die SCRPA wichtige Erhaltungssätze, wie beispielsweise die energiegewichtete Summenregel (Kapitel 3.3.1), erfüllt. Im Falle einer Ein- oder Zweiteilchen-Greenfunktion kann die SCRPA aus einem Variationsprinzip hergeleitet werden (Kapitel 3.4.2). Weiterhin können beide Kanäle so gekoppelt werden, daß die Selbstenergiekorrekturen im Einteilchenkanal im Einklang mit der über die Zweiteilchen-Greenfunktion bestimmten Grundzustandsenergie sind (Kapitel 3.4.3).

Vernachlässigt man die korrelierten Zweiteilchendichten des SCRPA-Massenoperators, so gelangt man zu einem System RPA-artiger Integralgleichungen. Obwohl deren Struktur dieselbe ist wie die der reinen RPA, kann dieses Gleichungssystem selbstkonsistent gelöst werden, indem Korrelationseffekte in den Einteilchen-Besetzungszahlen selbstkonsistent berücksichtigt werden. Auch diese sogenannte *renormalisierte RPA* erfüllt die energiegewichtete Summenregel.

Das 4. Kapitel beginnt mit einer allgemeinen Einführung ins Hubbard-Modell und seine Eigenschaften sowie einer Zusammenstellung der für dieses Modell

gebräuchlichsten Näherungsmethoden. Danach untersuchen wir die SCRPA und die renormalisierte RPA für Ladungs- und Spindichtefluktuationen. Während das Gleichungssystem für Ladungs- und longitudinale Spindichte-Greenfunktionen in sich geschlossen ist, ist das entsprechende Gleichungssystem für den transversen Spin nicht unabhängig, sondern bleibt ans erstere gekoppelt.

Wegen der abnehmenden Bedeutung von Korrelationseffekten erwartet man, vor allem in renormalisierter RPA, in hohen Dimensionen bessere Ergebnisse als in niedrigen. Außer diesem sehr allgemeinen Resultat wurde in Kapitel 4.4.1 gezeigt, daß die in der renormalisierten RPA enthaltenen Wechselwirkungsterme am besten die Situation des halbgefüllten Bandes mit antiferromagnetischer Ordnung wiedergeben. Die Begründung erfolgte, ähnlich wie bei Brinkman und Rice [55], über die Betrachtung zurückverfolgbarer Elektronentrajektorien ("retraceable path approximation").

Im Gegensatz dazu vereinfacht sich die numerische Lösung in niedrigen Dimensionen: Eine vollständige Lösung der SCRPA kann überhaupt nur in einer Dimension (oder in unendlichen Dimensionen) in Betracht gezogen werden. Durch das Vernachlässigen der Zweiteilchenkorrelationen im Integralkern, d.h. durch den Übergang von der SCRPA auf die renormalisierte RPA, gewinnt man jedoch zwei Größenordnungen in der Rechenzeit und eine im Speicherplatz (siehe Kap. 4.4.1).

Eine vergleichende Diskussion der energiegewichteten Summenregel zeigt, daß die reine RPA diese Summenregel nur erfüllt, solange ihre Spin-Responsefunktion stabil ist. Dagegen genügen sowohl SCRPA als auch renormalisierte RPA den Anforderungen der Summenregel für *alle* Impulsüberträge und Wechselwirkungen.

Das 5. Kapitel ist dem eindimensionalen Hubbard-Modell gewidmet. Am Anfang dieses Kapitels wurde auf die Besonderheiten eindimensionaler Systeme hingewiesen, vor allem auf den Zusammenbruch der Hypothesen, die der Theorie der Fermiflüssigkeiten zu grunde liegen. In einer Dimension sind Teilchen-Lochanregungen ohne Energiezufuhr nur dann möglich, wenn der Impulsübertrag entweder Null oder vom Betrage des sogenannten Peierlsvektors $q = 2k_F$ ist. Dies führt zu einer Stabilisierung der kollektiven Moden, welche, anders als in höheren Dimensionen, nicht in Teilchen-Loch-Anregungen zerfallen können. Deshalb ist in einer Dimension eine Formulierung in Abhängigkeit der bosonischen Moden dem Quasiteilchenbild meist vorzuziehen.

Eindimensionale Modelle sind oft integrabel. In den meisten Fällen werden die exakten Lösungen entweder dadurch konstruiert, daß man, wie beispielsweise beim

Bethe-Ansatz, die Wechselwirkung zwischen den Fermionen in die Randbedingungen einarbeitet, oder, wie im Tomonaga-Luttinger-Modell, indem man das ursprünglich fermionische Modell eineindeutig in ein bosonisches übersetzt ("Fermion-Boson-Mapping"). Dies führt zu einer Reihe von Besonderheiten wie z.B. von Potenzgesetzen bestimmte Korrelationsfunktionen und Impulsverteilungen.

Hinzu kommt, wie soeben besprochen, daß die renormalisierte RPA eher für Systeme in hohen Dimensionen geeignet ist. Trotzdem gibt es gute Gründe für eine Anwendung dieser Theorie auf die Hubbard-Kette: Einerseits können wir nur in einer Dimension unsere Methode an der exakten Lösung von Lieb und Wu [10] messen. In höheren Dimensionen liegen dagegen noch viele Eigenschaften des Modells im argen. Andererseits stellt das eindimensionale Modell wegen der extrem starken Quantenfluktuationen die härtesten Anforderungen an jedwede Theorie[1]. Der dritte und letzte Grund für diese Entscheidung ist rein technischer Natur: Das eindimensionale Modell erlaubt einen vollständigen, realistischen Test der renormalisierten RPA in allen Etappen. So konnte hierdurch das Konvergenzverhalten des Iterationszykluses explizit überprüft werden. Die gewonnene Erfahrung erscheint für den numerisch schwierigeren Fall des zweidimensionalen Hubbard-Modells unabdingbar.

Die renormalisierte RPA läßt jedoch die spezifisch eindimensionalen Gegebenheiten außer acht. Es ist deshalb nicht verwunderlich, daß sie ein ähnliches Bild wie andere, für höhere Dimensionen entwickelte Näherungsmethoden, beispielsweise die Hubbard III Approximation[42, 54] oder die Methode der Slave Bosons [51, 50], zeichnet.

So ist der Grundzustand der renormalisierten RPA für schwache Wechselwirkungen metallisch. Erhöht man die Wechselwirkung auf knapp die Bandbreite, so findet ein Metall-Isolator-Übergang statt. Der genaue Wert der kritischen Wechselwirkung dieses Mott-Übergangs hängt wiederum von der Bandfüllung ab.

Wie schon erwähnt, eignet sich die renormalisierte RPA am besten für das halbgefüllte Hubbard-Modell. Abseits halber Bandfüllung gehört das Hubbard-Modell zur Klasse der *Luttinger-Flüssigkeiten*, deren Verhalten von der renormalisierten RPA nicht nachvollzogen werden kann. Nichtsdestotrotz konnten einige ermutigende Ergebnisse erzielt werden. So bleibt die Fermikante, wenn es denn eine gibt, an der selben Stelle wie im freien System, was bedeutet, daß das Luttinger-Theorem [24, 25] erfüllt bleibt.

[1] Hierzu siehe auch die Anwendung der SCRPA auf das Heisenberg-Modell [20].

Außerdem konnte auch in renormalisierter RPA die Trennung von Spin- und Ladungsfreiheitsgraden beobachtet werden. Die Ladungssuszeptibilität besteht im wesentlichen aus einem ungedämpften Plasmonpol, der oberhalb des Teilchen-Loch-Kontinuums auftritt, während der Spinresponse durch ein Kontinuum gegeben ist, welches sein Maximum unterhalb der unteren Grenze des Teilchen-Loch-Kontinuums erlangt. Dieses Maximum bleibt also im "hohlen" Bereich des Spektrums, der charakteristisch für eindimensionale Modelle ist und in Fig. 5.3 dargestellt ist. Das Maximum trifft bei $q = 2k_F$ auf die Impulsachse. Zumindest qualitativ stimmt dieses Verhalten mit Quanten-Monte-Carlo-Rechnungen [93] überein. Die Geschwindigkeiten der Spinanregungen sind jedoch, bei gleicher Wechselwirkung, kleiner als diejenigen, die von QMC vorhergesagt wurden. Genau wie das Verhalten der Impulsverteilung deutet dies darauf hin, daß unsere Methode die Renormalisierungseffekte überschätzt.

Dagegen besitzen die Magnonen der *reinen* RPA ungefähr die für Spinanregungen richtige Geschwindigkeit. Trotzdem sollte man darauf hinweisen, daß die Spinsuszeptibilität dieser Theorie aus einem Magnonpol *und* einem Kontinuum besteht, was eindeutig den QMC-Resultaten widerspricht. Hinzu kommt, daß die Magnonendispersion der reinen RPA für jede noch so kleine Wechselwirkung die Impulsachse erreicht und eine Spininstabilität erzeugt. Diese Instabilität taucht für kleine Wechselwirkungen in der Nähe von $q = 2k_F$ auf. Erhöht man die Kopplungskonstante, so erstreckt sich die Instabilität, wie vom f-Summensatz bestätigt, auf alle Impulsüberträge. Dieses Manko wird, wie bereits mehrfach besprochen, von der renormalisierten RPA behoben.

In der ursprünglich instabilen Region verbleibt eine Divergenz der renormalisierten Spinsuszeptibilität bei niedriger Energie. Über das Fluktuations-Dissipations-Theorem bringt sie ein logarithmisch divergentes Verhalten der Korrelationsfunktionen mit sich. Somit wird auch die Dichte der Doppelbesetzungen sowie die Grundzustandsenergie singulär. Durch Aufzwingen des Pauliprinzips kann dieser Mangel teilweise ausgebessert werden, aber ein gänzlich korrektes Verhalten für Grundzustandsenergie und Doppelbesetzungen konnte nur vermittels des Hellmann-Feynman-Theorems erzeugt werden.

Im Grenzfall starker Wechselwirkungen der halbgefüllten Kette konnten mehrere sehr interessante Ergebnisse erzielt werden (Kap. 5.3.7). So wird eine vollkommen analytische Formulierung der renormalisierten RPA in diesem Limes möglich. Die

Impulsverteilungsfunktion ist, abgesehen von einem Faktor $2\ln 2$, im Einklang mit der entsprechenden Entwicklung der exakten Lösung. Das gleiche gilt für die Dichte der kinetischen Energie, der Grundzustandsenergie und der Doppelbesetzungen, vorausgesetzt diese Größen werden mit dem Hellmann-Feynman-Theorem berechnet.

Der Vorfaktor kann durch Einführen einer um einen Faktor $2\ln 2$ abgeschwächten Wechselwirkung berichtigt werden. Mit dieser abgeschirmten Wechselwirkung würden sich auch die Spingeschwindigkeiten der renormalisierten RPA ungefähr mit den QMC-Resultaten decken. In Kapitel 3.4 wurde auseinandergesetzt, daß die SCRPA diesem Abschirmeffekt schon von Anfang an Rechnung trägt. Genau wie andere, ähnliche Methoden [60, 61, 62] würde sie uns der Singularitäten entledigen, die von den Überbleibseln der Spininstabilität herrühren. Im Gegensatz zu diesen Theorien leitet die SCRPA diesen Abschirmeffekt systematisch aus einem Variationsprinzip her. Der Preis hierfür sind allerdings nichtlokale Zweiteilchendichten, die eine numerische Lösung erheblich erschweren.

Ausblick

Die Vielseitigkeit unserer Theorie ermöglicht verschiedene Erweiterungen.

Als ersten Schritt könnten die im Spinkanal immer noch teilweise vorhandenen Schwierigkeiten durch die Einführung zweier Untergitter behoben werden. Diese Methode beruht auf der Stonerschen Theorie [53] und wurde letztens erfolgreich in unendlichen Dimensionen eingesetzt [100].

Wie in Kapitel 4.4.3 vorgeschlagen könnte man anschließend die RPA-Gleichungen der transversen Spinsuszeptibilität an den Ladungs- und longitudinalen Spinresponse koppeln.

Weiterhin wäre eine Verknüpfung der Einteilchen- und Paar-Greenfunktionen äußerst vielversprechend. Dieses Vorgehen würde auf der Möglichkeit basieren, die Selbstenergie exakt durch die Zweiteilchen-T-Matrix auszudrücken [101]. Ersetzt man letztere dann durch den entsprechenden SCRPA-Ausdruck, so führt dies zu einer selbstkonsistenten Kopplung zwischen Ein- und Zweiteilchen-Propagatoren. Eine erste Anwendung dieser Methode wird in Ref. [18] diskutiert. Konkret würde man die Besetzungszahlen mit Hilfe der Einteilchen-Greenfunktion berechnen, und nicht wie bisher über das Spektraltheorem der Zweiteilchen-Greenfunktion. Die so bestimmten Besetzungszahlen gehen in den Zweiteilchen-Propagator ein, der wiederum zur

Selbstenergie beiträgt. Im Gegensatz zur ersten Abschätzung der Einteilcheneigenschaften von Kapitel 5.3.8 könnte der Einteilchen-Propagator somit Zweiteilcheneigenschaften, wie die Suszeptibilitäten, beeinflussen.

Um die Ergebnisse in Systemen mit "nesting" zu verbessern, ist das Berücksichtigen der Korrelationen mit Impulsübertrag $\mathbf{Q}$ (wobei $\mathbf{Q}$ der Nesting-Vektor, d.h. ein halber reziproker Gittervektor, ist) unabdingbar. Die SCRPA enthält diese Korrelationsfunktionen neben vielen anderen. Dagegen wäre in solchen Systemen eine erhebliche Verbesserung der renormalisierten RPA möglich, wenn nur die Korrelationen mit Impulsübertrag $\mathbf{Q}$ eingeschlossen würden. Die numerischen Vorteile der renormalisierten RPA blieben hiervon beinahe unberührt.

In den letzten Jahren erwies sich das unendlichdimensionale Hubbard-Modell als äußerst aufschlußreich [102, 103], vereint es doch die technischen Vorzüge eines eindimensionalen Modells mit einer demgegenüber hohen Aussagekraft bezüglich des zwei- oder dreidimensionalen Hubbard-Modells. In unendlichen Dimensionen ist die Selbstenergie diagonal im Ortsraum. In translationsinvarianten Systemen ist dies gleichbedeutend mit Implusunabhängigkeit, was mit erheblichen Vereinfachungen einhergeht. Läßt man das Nesting außer Betracht, so führt dies zu einem effektiv eindimensionalen Modell mit Zufallsdispersion. Dies wäre ein interessantes Anwendungsgebiet für unsere Theorie, zumal in unendlichen Dimensionen die RPA-artigen Korrelationen dominieren [104]. Attraktiv wäre auch eine Verbindung der SCRPA mit der Lokalen Momenten-Methode. Mit dieser Methode wurden schon einige sehr ermutigende Resultate erzielt, vor allen Dingen in den nichtleitenden Phasen des unendlichdimensionalen Hubbard-Modells [105] und im Anderson-Modell [106].

Abschließend sei darauf hingewiesen, daß Teile dieser Arbeit in Ref. [109] veröffentlicht wurden.

Bibliographie

[1] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. Ser. A **240**, 539 (1957); *ibid.* Proc. Roy. Soc. Ser. A **243**, 336 (1958).

[2] N.F. Mott, *Metal-Insulator Transitions*, Taylor and Francis, London, 2nd. edition (1990).

[3] F. Gebhard, *The Mott Metal Insulator Transition*, Springer Tracts in Modern Physics, Vol. 137 (1997).

[4] D.B. McWhan, T.M. Rice, J.P. Remeika, Phys. Rev. Lett. **23**, 1384 (1969); D.B. McWhan, J.P. Remeika, T.M. Rice, W.F. Brinkman, J.P. Maita, A. Menth, Phys. Rev. Lett. **27**, 941 (1971); D.B. McWhan, A. Menth, J.P. Remeika, W.F. Brinkman, T.M. Rice, Phys. Rev. B **7**, 1920 (1973).

[5] K.I. Kugel, D.I. Khomskii, Sov. Phys. JETP **37**, 725 (1973); C. Castellani, C.R. Natoli, J. Ranninger, Phys. Rev. B **18**, 4945, 4967, 5001 (1978); L. Roth, Phys. Rev **149**, 306 (1966); H. Capellmann, Phys. Rev. B **7**, 4153 (1973); M. Cyrot, C. Lyon-Caen, J. Phys. C **6**, L274 (1975); voir aussi réf. [3, chap. 2.4.2].

[6] J.G. Bednorz, K.A. Müller, Z. Phys. B **64**, 189 (1986).

[7] H. Göbel, *Etude des corrélations électroniques dans la limte du couplage fort et application aux supraconducteurs à oxyde de cuivre*, Thèse, Université Joseph Fourier, Grenoble (1993).

[8] V.J. Emery, Phys. Rev. Lett. **58**, 2794 (1987).

[9] C. Pépin, *Phénomènes critiques autour de la transition magnétique dans les Fermions Lourds*, Thèse, Université Joseph Fourier, Grenoble (1996).

[10] E.H. Lieb, F.Y. Wu, Phys. Rev. Lett. **20**, 1445 (1968).

[11] J.P. Blaizot, G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems, The MIT Press, Cambridge*, 1986 (.)

[12] D.J. Rowe, Rev. Mod. Phys. **40**, 153 (1968).

[13] L.M. Roth, Rhys. Rev. **184**, 451 (1969).

[14] P. Schuck, Z. Phys **241**, 395 (1971).

[15] J. Dukelsky, P. Schuck, Nucl. Phys. A **512**, 466 (1990); J. Dukelsky, P. Schuck, Mod. Phys. Lett. A **26**, 2429 (1991).

[16] G. Röpke, Ann. Physik (Leipzig) **3**, 145 (1994); G. Röpke, Z. Phys. B. **99**, 83 (1995).

[17] J. Dukelsky, P. Schuck, Phys. Lett. B **387**, 233 (1996).

[18] J. Dukelsky, G. Röpke, P. Schuck, Nucl. Phys. A **628**, 17 (1998).

[19] T. Bertrand, *L'approximation des phases aléatoires autocohérente appliquée à un modèle schématique de la théorie des champs*, Thèse, Université Claude Bernard, Lyon (1998).

[20] P. Krüger, P. Schuck, Europhys. Lett. **27**, 395 (1994).

[21] J. Beenen, D.M. Edwards, Phys. Rev. B **52**, 13 636 (1995).

[22] A.L. Kuzemsky, Phys. Lett. A **153**, 466 (1991).

[23] A.L. Kuzemsky, J.C. Parlebas, H. Beck, Physica A **198**, 606 (1993); A.L. Kuzemsky, Il Nuovo Cimento **109 B**, 829 (1994).

[24] A.B. Migdal, Sov. Phys. JETP **5**, 333 (1957).

[25] J.M. Luttinger, J.C. Ward, Phys. Rev. **118**, 1417 (1960); J.M. Luttinger, Phys. Rev. **119**, 1153 (1960); *ibid.* Phys. Rev. **121**, 942 (1961).

[26] P. Nozières, *Le problème à N corps*, Dunod, Paris (1963).

[27] P. Nozières, D. Pines, *The Theory of Quantum Liquids: Normal Fermi Liquids*, Addison-Wesley (1989).

[28] A.L. Fetter, J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems*, Mc-Graw-Hill, Inc. (1971).

[29] W. Nolting, *Grundkurs Theoretische Physik, 7. Viel–Teilchen–Theorie*, Zimmermann–Neufang (1992).

[30] J.W. Negele, H. Orland, *Quantum Many–Particle Systems*, Addison–Wesley (1988).

[31] J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics*, John Wiley & Sons, Second Edition, New York (1975).

[32] J. Bardeen, L.N. Cooper, J.R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957).

[33] P. Ring, P. Schuck, *The Nuclear Many–Body Problem*, Springer, Berlin (1980).

[34] P. Nozières, D. Pines, Phys. Rev **109**, 741 (1958).

[35] R. Kubo, Jour. Phys. Soc. Japan **17**, 1100 (1962).

[36] P. Schuck, S. Ethofer, Nucl. Phys. A **212**, 269 (1973).

[37] M. Baranger, Nucl. Phys. A **149**, 225 (1970).

[38] M.K. Weigel, J. Winter, J. Phys. G: Nucl. Phys. **4**, 1427 (1978).

[39] S. Ethofer, P. Schuck, Z. Phys **228**, 264 (1969).

[40] L. Belkhir, M. Randeria, Phys. Rev. B **49**, 6829 (1994).

[41] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. Ser. A **276**, 238 (1963); *ibid.* Proc. Roy. Soc. Ser. A **277**, 237 (1963).

[42] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc. Ser. A **281**, 401 (1964).

[43] P.W. Anderson, Phys. Rev. **115**, 2 (1959).

[44] P. Fulde, *Electron Correlations in Molecules and Solids*, Springer Series in Solid-State Sciences **100**, Berlin (1991).

[45] A. Auerbach, *Interacting Electrons and Quantum Magnetism*, Springer (1994).

[46] K. Elk, W. Gasser, *Die Methode der Greenschen Funktionen in der Festkörperphysik*, Akademie-Verlag, Berlin (1979).

[47] R.M. White, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer-Verlag, Berlin, 2nd. and updated edition (1983).

[48] M.C. Gutzwiller, Phys. Rev. Lett. **10**, 156 (1963); *ibid.* Phys. Rev. **134**, A923 (1964); *ibid.* Phys. Rev. **137**, A1726 (1965).

[49] R.L. Stratonovich, Sov. Phys. Dokl. **2**, 416 (1957);
pour un résumé voir réf. [3, 30].

[50] M. Lavagna, Phys. Rev. B **41**, 142 (1990); *ibid.* in *The Hubbard Model – Recent Results*, ed. by M. Rasetti, World Scientific, Singapore (1991).

[51] G. Kotliar, A.E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **57**, 1362 (1986).

[52] D.R. Penn, Phys. Rev. **142**, 350 (1966).

[53] E.C. Stoner, Journal de Phys. et Rad. **12**, 372 (1951).

[54] M. Cyrot, Physica B **91**, 141 (1977).

[55] W.F. Brinkman, T.M. Rice, Phys. Rev. B **2**, 1324 (1970).

[56] N.D. Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).

[57] G. Hämmerlin, K.-H. Hoffmann, *Numerische Mathematik*, Springer, Berlin, 2. Auflage (1991).

[58] W.H. Press, B.P. Flannery, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling, *Numerical Recipes in C*, Cambridge University Press, New York (1988).

[59] D.J. Thouless, Nucl. Phys. **22**, 78 (1961).

[60] Y.M. Vilk, L. Chen, A.-M.S. Tremblay, Phys. Rev. B **49**, 13 267 (1994); *ibid.* Physica C **235-240**, 2235 (1994).

[61] Y.M. Vilk, A.-M.S. Tremblay, Europhys. Lett. **33**, 159-164 (1996).

[62] Y.M. Vilk, A.-M.S. Tremblay, J. Phys. I France **7**, 1309-1368 (1997).

[63] G.D. Mahan, *Many-Particle Physics*, Plenum Press, New York (1981).

[64] E.K.U. Gross, E. Runge, O. Heinonen, *Many-Particle Theory*, IOP Publishing (1991).

[65] H.J. Schulz, G. Cuniberti, P. Pieri, *Fermi Liquids and Luttinger Liquids*, Lecture Notes of the Chia Laguna (Italy) Summer School (cond-mat/9807366v2) (1997).

[66] J. Voit, Reports on Progress in Physics **58**, 977 (1995).

[67] S. Roth, *One-Dimensional Metals*, VCH Verlagsgesellschaft, Weinheim (1995).

[68] S. Tomonaga, Prog. Theor. Phys. **5**, 544 (1950).

[69] J.M. Luttinger, J. Math. Phys. **4**, 1154 (1963).

[70] D.C. Mattis, E.H. Lieb, J. Math. Phys. **6**, 304 (1965).

[71] J. Voit in *The Hubbard Model: Its Physics and Mathematical Physics*, ed. by D. Baeriswyl, D.K. Campbell, J.M.P. Carmelo, F. Guinea, and E. Louis, NATO ASI Series B **343**, p263-272, Plenum Press, New York (1995).

[72] J. Voit in *Proceedings of the Ninth International Conference on Recent Progress in Many-Body Theories (Sydney)*, ed. by D. Neilson, World Scientific (1998).

[73] *The Many-Body Problem, An Encyclopedia of Exactly Solved Models in One Dimension*, ed. by D.C. Mattis, World Scientific, Singapore (1993).

[74] *Exactly Solvable Models of Strongly Correlated Electrons*, ed. by V.E. Korepin and F.H.L Eßler, World Scientific, Singapore (1995).

[75] N. Andrei "*Integrable Models in Condensed Matter Physics*, p457, in *Low-Dimensional Quantum Field Theories for Condensed Matter Physicists*, ed. by S, Lundquist, G. Morandi, and Yu Lu, Series on Modern Condensed Matter Physics **6**, World Scientific, Singapore (cond-mat/9408101) (1995).

[76] V.E. Korepin, A.G. Izergin, N.M. Bogoliubov, *Quantum Inverse Scattering Method and Correlation Functions*, Cambridge University Press, New York (1993).

[77] J. Carmelo, D. Baeriswyl, Phys. Rev. B **37**, 7541 (1988).

[78] A. Klümper, A. Schadschneider, J. Zittartz, Z. Phys. B **78**, 99 (1990).

[79] A. Schadschneider, J. Zittartz, Z. Phys. B **82**, 387 (1991).

[80] A. Klümper, R.Z. Bariev, Nucl. Phys. B **458**, 623 (1996).

[81] S. Kirchner, H.G. Evertz, W. Hanke, cond-mat/9804148 (1998).

[82] H.J. Schulz, B.S. Shastry, Phys. Rev. Lett. **80**, 1924 (1998).

[83] F. Gebhard, A.E. Ruckenstein, Phys. Rev. Lett. **68**, 244 (1992).

[84] F. Gebhard, A. Grindt, A.E. Ruckenstein, Phys. Rev. B **49**, 10926 (1994).

[85] S. Sorella, E. Tosatti, S. Baroni, R. Car, M. Parinello, Int. J. Mod. Phys. B **1**, 993 (1988).

[86] S. Sorella, A. Parola, M. Parinello, E. Tosatti, Europhys. Lett. **12**, 721 (1990).

[87] D. Baeriswyl, W. von der Linden in *The Hubbard Model – Recent Results*, ed. by M. Rasetti, World Scientific, Singapore (1991).

[88] M. Dzierzawa in *The Hubbard Model: Its Physics and Mathematical Physics*, ed. by D. Baeriswyl, D.K. Campbell, J.M.P. Carmelo, F. Guinea, and E. Louis, NATO ASI Series B **343**, p327, Plenum Press, New York (1995).

[89] M. Ogata, H. Shiba in *Technical Report of ISSP*, published by The Institute of Solid State Physics, The University of Tokyo, Ser. A, No. 2189, (1989).

[90] M. Ogata, H. Shiba, Phys. Rev. B **41**, 2326 (1990); H. Shiba, M. Ogata, Journ. of Magnetism and Magnetic Materials **90 & 91**, 205-209 (1990); M. Ogata, T. Sugiyama, H. Shiba, Phys. Rev. B **43**, 8401 (1991).

[91] K. Penc, F. Mila, H. Shiba, Phys. Rev. Lett **75**, 894 (1995).

[92] A. Parola, S. Sorella, Phys. Rev. Lett **64**, 1831 (1990).

[93] R. Preuss, A. Muramatsu, W. von der Linden, F.F. Assad, W. Hanke, Phys. Rev. Lett **73**, 732 (1994).

[94] C. Kittel, *Quantum Theory of Solids*, John Wiley & Sons (1987).

[95] D. Baeriswyl, J. Carmelo, A. Luther, Phys. Rev. B **33**, 7247 (1986); *errata* Phys. Rev. B **34**, 8976(E) (1986).

[96] K. Schönhammer, O. Gunnarsson, R.M. Noack, Phys. Rev. B **52**, 2504 (1995).

[97] J. Toivanen, J. Suhonen, Phys. Rev. C **55**, 2314 (1997).

[98] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. Rozenberg, Rev. Mod. Phys. **68**, 13 (1996).

[99] D.E. Logan, P. Nozières, Phil. Trans. Roy. Soc. London A **356**, 249 (1998).

[100] M.A. Tusch, *Interplay between disorder and electron interactions: theoretical studies of an Anderson-Hubbard model*, Thèse, University of Oxford, Michelmas (1993).

[101] A.B. Migdal, *Theory of Finite Fermi Systems and Applications to Atomic Nuclei*, Monographs and Texts in Physics and Astronomy, Interscience Publishers, a division of John Wiley & Sons, New York (1967).

[102] D. Vollhardt in *Correlated Electron Systems, Vol.* **9**, ed. by ed. by. V.J. Emery, World Scientific, Singapore (1993).

[103] E. Müller-Hartmann, Int. J. Mod. Phys. B **3**, 2169 (1989).

[104] P.G.-J. van Dongen, F. Gebhard, D. Vollhardt, Z. Phys. B **76**, 199 (1989).

[105] D.E. Logan, M.P. Eastwood, M.A. Tusch, Phys. Rev. Lett. **76**, 4785 (1996); *ibid.* J.Phys.: Condens. Matter **9**, 9621-9638 (1997).

[106] D.E. Logan, M.P. Eastwood, M.A. Tusch, J.Phys.: Condens. Matter **10**, 2673-2700 (1998).

[107] R.D. Mattuck, *A Guide to feynman Diagrams in the Many-Body Problem*, Dover Publications, New York, 2nd. edition (1976).

[108] P. Bénard, L. Chen, A.-M.S. Tremblay, Phys. Rev. B **47**, 15 217 (1993).

[109] S. Schäfer, P. Schuck, cond-mat/9804011, to be published in Phys. Rev. B. (1998).

Résumé

La RPA Self-Consistante (SCRPA) est appliquée aux fonctions de corrélation particule-trou dans le modèle de Hubbard.

Pour une fonction de Green générale à n corps cette méthode se dérive à partir de l'Equation de Dyson où seules sont retenues les contributions instantanées de l'opérateur de masse. La fonction de Green est alors donnée par un système d'équations intégrales non-linéaires que l'on cherchera à résoudre de façon self-consistante. Elle satisfait, parmi d'autres théorèmes, la règle de somme pondérée par l'énergie. Pour les fonctions de Green à une et à deux particules, la SCRPA obéit à un principe variationnel. Dans le modèle de Hubbard les fonctions de corrélation de charge et de spin sont calculées en SCRPA. En négligeant les densités connectées à deux corps, nous obtenons une théorie self-consistante plus simple, la RPA renormalisée. Les deux méthodes sont étudiées et comparées à la RPA standard.

Nous établissons et résolvons numériquement les équations de la RPA renormalisée pour les fonctions de corrélations de densité de charge dans le modèle de Hubbard à une dimension. Les susceptibilités de charge et de spin longitudinal, la distribution des impulsions et plusieurs propriétés du fondamental sont évaluées et comparées aux résultats exacts. Dans la limite du couplage fort de la bande à moitié remplie, la RPA renormalisée possède une solution analytique qui est, à un facteur près, en accord avec le développement pour fortes interactions de l'ansatz de Bethe. Comme prévu, des particularités liées à la dimension spatiale 1, par exemple un comportement de liquide de Luttinger, n'ont pas pu être retrouvées. Or, la description fournie par notre méthode pourrait être assez réaliste en dimensions plus élevées.

Mots-clefs: systèmes d'électrons fortement corrélés, modèle de Hubbard, chaîne de Hubbard, RPA généralisée, corrélations de charge et de spin, transition de Mott.

Abstract

The so-called Self-Consistent RPA (SCRPA) is applied to particle-hole correlation functions in the Hubbard model.

For a general many-body Green's function, this method is obtained by establishing a Dyson Equation, and by replacing the full mass operator by its instantaneous contributions. The Green's function is then given in terms of a system of non-linear integral equations which can be solved self-consistently. The solution satisfies the energy-weighted sum rule and several other theorems. For single- and two-particle Green's functions, the approach is shown to be connected to a variational principle.

The charge and longitudinal spin correlation functions in the Hubbard model are treated in SCRPA. Neglecting the connected two-body densities in its mass operator yields another, simpler self-consistent theory, the renormalized RPA. Both approaches are discussed and compared to standard RPA.

In the one-dimensional Hubbard model, the renormalized RPA is established and solved numerically for charge-density correlation functions. The charge and the longitudinal spin susceptibility, the momentum distribution function and several ground state properties are calculated and compared to the exact results. At half band filling and for strong interactions, the renormalized RPA has an analytic solution which agrees, apart from a prefactor, with the corresponding series expansion of the Bethe ansatz solution. As expected, specific one-dimensional features, such as Luttinger liquid behaviour, could not be reproduced. Our approach provides a rather generic description, which could be quite realistic in higher dimensions.

Parts of this work can be found in reference [109].

keywords: strongly correlated electron systems, Hubbard model, Hubbard chain, generalized RPA, charge- and spin-density correlations, Mott transition.