

Fonctions de Green

Marc Chamberland
Département de physique
Université de Sherbrooke

4 juillet 2006

Résumé

Brève introduction aux fonctions de Green parsemée d'exercices simples et abordables.

1 Préambules

1.1 Représentation de Schrödinger

On a l'équation suivante :

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\Psi(t)\rangle = H |\Psi(t)\rangle \quad (1)$$

où $|\Psi(t)\rangle$ est donné par :

$$|\Psi(t)\rangle = e^{-\frac{iHt}{\hbar}} |\Psi_o\rangle \quad (2)$$

On peut calculer la moyenne d'un opérateur A quelconque de la façon suivante :

$$\langle A \rangle = \langle \Psi^*(t) | A | \Psi(t) \rangle \quad (3)$$

On voit ici que les états $|\Psi(t)\rangle$ varient dans le temps et que l'opérateur A , au contraire, est fixe. C'est ce qu'on appelle la représentation de Schrödinger.

1.2 Représentation de Heisenberg

Remplaçons l'équation 2 dans la moyenne de l'opérateur :

$$\langle A \rangle = \langle \Psi_o^* | e^{\frac{iHt}{\hbar}} A e^{-\frac{iHt}{\hbar}} | \Psi_o \rangle \quad (4)$$

Cette écriture met en évidence un opérateur $A(t)$ défini de la manière suivante :

$$A(t) \equiv e^{\frac{iHt}{\hbar}} A e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \quad (5)$$

Dans ce cas-ci, l'opérateur $A(t)$ varie dans le temps alors que les états $|\Psi_0\rangle$ sont fixes. Voilà la représentation de Heisenberg qui se révélera très utile dans l'étude des fonctions de Green.

1.3 Dérivée d'un opérateur

La dérivée d'un opérateur par rapport au temps sera nécessaire dans l'analyse qui suit. On la calcule de la façon suivante :

$$\begin{aligned}
 i\hbar \frac{\partial A(t)}{\partial t} &= i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left(e^{\frac{iHt}{\hbar}} A e^{-\frac{iHt}{\hbar}} \right) \\
 &= i\hbar \frac{\partial e^{\frac{iHt}{\hbar}}}{\partial t} A e^{-\frac{iHt}{\hbar}} + i\hbar e^{\frac{iHt}{\hbar}} \frac{\partial A}{\partial t} e^{-\frac{iHt}{\hbar}} + i\hbar e^{\frac{iHt}{\hbar}} A \frac{\partial e^{-\frac{iHt}{\hbar}}}{\partial t} \\
 &= i\hbar \left(\frac{iH}{\hbar} A(t) - \frac{iH}{\hbar} A(t) \right) \\
 &= -HA(t) + A(t)H \\
 &= [A(t), H]
 \end{aligned} \tag{6}$$

où on a utilisé le fait que A ne dépend pas de t , donc que $\frac{\partial A}{\partial t} = 0$. Dans la représentation de Heisenberg, on trouve que la dérivée d'un opérateur par rapport au temps est égale au commutateur de cet opérateur avec l'Hamiltonien.

1.4 Exercice 1 : Dérivée d'un opérateur d'annihilation

Soit un système de N sites indépendants, sans possibilité de saut entre eux. L'Hamiltonien d'un tel système pourrait avoir la forme suivante :

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma}$$

où les opérateurs obéissent aux lois d'anticommuration :

$$\begin{aligned}
 \{c_{k,\sigma}, c_{k',\sigma'}^\dagger\} &= \delta_{k,k'} \delta_{\sigma,\sigma'} \\
 \{c_{k,\sigma}, c_{k',\sigma'}\} &= 0 = \{c_{k,\sigma}^\dagger, c_{k',\sigma'}^\dagger\}
 \end{aligned}$$

D'abord, prouvez que

$$[A, BC] = \{A, B\} C - B \{A, C\}$$

puis trouvez

$$i\hbar \frac{\partial c_{k,\sigma}}{\partial t}$$

2 Fonctions de Green

2.1 Fonction de Green retardée

On définit la fonction de Green retardée comme :

$$G^R(k, t) \equiv -i \left(\langle c_k(t)c_k^\dagger \rangle + \langle c_k^\dagger c_k(t) \rangle \right) \Theta(t) \quad (7)$$

où $c_k^\dagger = c_k^\dagger(0)$ et $\Theta(t)$ est la fonction de Heaviside, i.e.

$$\Theta(t) = \begin{cases} 0 & t < 0 \\ 1 & t > 0 \end{cases}$$

On a laissé tomber les indices de spin afin d'alléger l'écriture. Notons également que l'on prendra désormais $\hbar = 1$ dans le reste de ce document et des exercices.

2.2 Exercice 2 : Dérivée de la fonction de Green retardée

Trouvez

$$i \frac{\partial G^R(k, t)}{\partial t}$$

2.3 Temps imaginaire

Il peut être fort utile de passer à une représentation en temps imaginaire des fonctions de Green. Dans ce cas-ci, on a :

$$\tau \equiv it$$

On définit alors la fonction de Green suivante :

$$G(k, \tau) = \langle c_k(\tau)c_k^\dagger \rangle \Theta(\tau) - \langle c_k^\dagger c_k(\tau) \rangle \Theta(-\tau) \quad (8)$$

La fonction de Heaviside assure ici que les opérateurs apparaissent en ordre chronologique de droite à gauche :

$$G(k, \tau) = \begin{cases} \langle c_k(\tau)c_k^\dagger \rangle & \tau > 0 \\ -\langle c_k^\dagger c_k(\tau) \rangle & \tau < 0 \end{cases}$$

On peut interpréter $\langle c_k(\tau)c_k^\dagger \rangle$ comme la création d'une particule à un instant $\tau = 0$ suivi de sa destruction au temps τ . On peut donc imaginer que $\langle c_k(\tau)c_k^\dagger \rangle$ décrit la propagation d'un trou dans un système. En effet, à l'instant $\tau = 0$ on enlève un trou du site k . Le trou se "balade" dans le système (au sens figuratif, bien entendu!), puis y revient à l'instant τ . On donne parfois le nom de propagateur à cette fonction.

Notons finalement qu'en temps imaginaire, les opérateurs prennent la forme suivante :

$$c_k(\tau) = e^{H\tau} c_k e^{-H\tau} \quad (9)$$

2.4 Exercice 3 : Dérivée de la fonction de Green en temps imaginaire

Trouvez

$$\frac{\partial G(k, \tau)}{\partial \tau}$$

2.5 Trace et moyenne d'opérateur

On définit la trace d'une matrice carrée comme la somme de ses éléments diagonaux, i.e. :

$$Tr(A) = \sum_i A_{ii} \quad (10)$$

La moyenne d'un opérateur O peut être exprimée en termes de traces de la façon suivante :

$$\langle O \rangle = \frac{Tr(e^{-\beta H} O)}{Tr(e^{-\beta H})} \quad (11)$$

où $\beta = \frac{1}{T}$ est la température inverse et où on a pris $k_B = 1$.

2.6 Exercice 4 : Trace et antipériodicité

Prouvez que

$$Tr(AB) = Tr(BA)$$

et que par conséquent, la trace est invariante lorsque l'on change de base, c'est-à-dire lorsqu'on applique une transformation de la forme $U = S^{-1}AS$. En d'autres mots, prouvez que

$$Tr(U) = Tr(A)$$

Utilisez les résultats précédents pour prouver l'antipériodicité de la fonction de Green

$$G(k, \tau + \beta) = -G(k, \tau)$$

lorsque $\tau < 0$ et $(\tau + \beta) > 0$.

2.7 Fréquences de Matsubara

Tel que démontré dans l'exercice précédent, la fonction de Green est anti-périodique de période $\beta = \frac{1}{T}$. On peut donc l'exprimer sous forme de série de Fourier :

$$G(k, \tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n G(k, i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} \quad (12)$$

où

$$\omega_n = \frac{(2n+1)\pi}{\beta} \quad (13)$$

sont les fréquences de Matsubara. Cette définition satisfait la condition d'anti-périodicité de la fonction puisque pour $\tau' = \tau + \beta$, on obtient

$$\begin{aligned} G(k, \tau + \beta) &= \frac{1}{\beta} \sum_n G(k, i\omega_n) e^{-i\omega_n(\tau+\beta)} = \frac{1}{\beta} \sum_n G(k, i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} e^{-i\omega_n \beta} \\ &= \frac{1}{\beta} \sum_n G(k, i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} e^{-i(2n+1)\pi} = \frac{1}{\beta} \sum_n G(k, i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} (-1) \\ &= -G(k, \tau) \end{aligned}$$

Cette nouvelle représentation a l'avantage de simplifier les calculs des fonctions de Green. En effet, on voit que

$$\frac{\partial G(k, \tau)}{\partial \tau} = i\omega_n G(k, \tau) \quad (14)$$

Cela nous permet de simplifier le résultat trouvé à l'exercice 3 et d'écrire pour la fonction de Green impliquant N sites indépendants :

$$\begin{aligned} \frac{\partial G(k, \tau)}{\partial \tau} &= \epsilon_k G(k, \tau) + 1 \rightsquigarrow i\omega_n G_k = \epsilon_k G_k + 1 \\ &\rightsquigarrow G_k = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_k} \end{aligned} \quad (15)$$

2.8 Exercice 5 : Amas et bain

Un amas constitué d'un seul site o d'énergie ϵ_o est entouré de plusieurs "sites" de bain i d'énergie ϵ_i . Il est possible pour une particule de passer de l'amas au bain avec une amplitude de saut t_{io} et vice versa. Or il n'y a aucune interaction entre les sites de bain, i.e. une particule ne peut sauter d'un site de bain à un autre. L'Hamiltonien de ce système peut s'écrire de la façon suivante :

$$H = \epsilon_o c_o^\dagger c_o + \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_i t_{io} c_i^\dagger c_o + \sum_i t_{oi} c_o^\dagger c_i$$

où on assume *a priori* que $t_{io} \neq t_{oi}$.

On définit maintenant les fonctions de Green suivantes :

$$\begin{aligned} G_{oo} &\equiv \langle c_o(\tau) c_o^\dagger \rangle \Theta(\tau) - \langle c_o^\dagger c_o(\tau) \rangle \Theta(-\tau) \\ G_{oi} &\equiv \langle c_o(\tau) c_i^\dagger \rangle \Theta(\tau) - \langle c_i^\dagger c_o(\tau) \rangle \Theta(-\tau) \end{aligned}$$

Trouvez G_{oo} en trouvant d'abord $\frac{\partial G_{oo}}{\partial \tau}$, puis en utilisant la représentation en série de Fourier pour faire disparaître la dérivée. Traitez ensuite le problème comme un système d'équations à résoudre. Vous aurez besoin d'autant d'équations que d'inconnues, bien entendu.

2.9 Exercice 6 : Interactions

On reprend le même système qu'à l'exercice précédent en y ajoutant maintenant des interactions entre les sites de bain. Il peut désormais y avoir des sauts d'amplitude t_{ij} entre les différents sites de bain.

Montrez que dans cette situation, G_{oo} a la *forme* suivante :

$$G_{oo} = \frac{1}{\tilde{G}_{oo}^{-1} - t_{oi} G_{ij} t_{jo}}$$

où

$$\tilde{G}_{oo} = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_o}$$

et où on a adopté la notation d'Einstein, i.e. on sous-entend une somme sur les indices répétés. Par exemple, $t_{oi} G_{ij} t_{jo}$ signifie $\sum_{i,j} t_{oi} G_{ij} t_{jo}$ puisque les indices i et j apparaissent deux fois dans l'expression.

Pour arriver à la solution, considérez d'abord un système qui ne contient que deux sites de bain et trouvez les équations du mouvement pour les différentes fonctions de Green. Généralisez ensuite pour un nombre arbitraire de sites.

Cet exercice est plutôt ardu et vous pouvez librement négliger la rigueur mathématique.

2.10 Interactions : transformation canonique

Il existe une façon plus élégante de résoudre le problème précédent. Il s'agit d'utiliser une transformation canonique pour revenir à une situation analogue au cas sans interaction entre les sites du bain. En effet, dans le cas de deux sites de bain seulement, on a l'Hamiltonien suivant :

$$H = \epsilon_o c_o^\dagger c_o + \underbrace{\epsilon_1 c_1^\dagger c_1 + \epsilon_2 c_2^\dagger c_2 + t_{o1} c_o^\dagger c_1 + t_{o2} c_o^\dagger c_2 + t_{1o} c_1^\dagger c_o + t_{2o} c_2^\dagger c_o}_{\text{interactions}} + \underbrace{t_{12} c_1^\dagger c_2 + t_{21} c_2^\dagger c_1}_{\text{interactions}}$$

Or on voit que la seule différence avec le cas sans interaction est la présence des termes de sauts interbain. On peut réécrire les termes d'énergie et de sauts interbain sous forme matricielle de la façon suivante :

$$\begin{pmatrix} c_1^\dagger & c_2^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_1 & t_{12} \\ t_{21} & \epsilon_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}$$

Remarquons ici que se débarrasser des sauts interbain revient donc à diagonaliser la matrice des coefficients. On procède alors à une transformation canonique telle que

$$\begin{aligned} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix} &= U \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix} \\ \begin{pmatrix} d_1^\dagger & d_2^\dagger \end{pmatrix} &= U^\dagger \begin{pmatrix} c_1^\dagger & c_2^\dagger \end{pmatrix} \\ U^\dagger U &= \mathbf{I} \end{aligned}$$

On peut donc réécrire :

$$\underbrace{\begin{pmatrix} c_1^\dagger & c_2^\dagger \end{pmatrix} U^\dagger U}_{\begin{pmatrix} d_1^\dagger & d_2^\dagger \end{pmatrix}} \begin{pmatrix} \epsilon_1 & t_{12} \\ t_{21} & \epsilon_2 \end{pmatrix} U^\dagger U \underbrace{\begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \end{pmatrix}}_{\begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}}$$

On doit donc choisir U de telle sorte que l'élément du milieu soit diagonal, donc de façon à obtenir :

$$\begin{pmatrix} d_1^\dagger & d_2^\dagger \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \lambda_1 & 0 \\ 0 & \lambda_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} d_1 \\ d_2 \end{pmatrix}$$