Fonction de Green et poids spectral du modèle de Hubbard

David Sénéchal
30/7/97

Dans cette note on définit la fonction de Green et le poids spectral pour un modèle d'électrons comme le modèle de Hubbard et on calcule ces fonctions dans le cas $t = 0$. On travaille à température nulle.

Poids spectral

Si $|\Omega\rangle$ désigne l'état fondamental de l'hamiltonien H (incluant le potentiel chimique) et que les énergies sont définies par rapport au niveau fondamental, le poids spectral $A_{ab}(\omega)$ est défini comme suit:

$$A_{ab}(\omega) = \sum_m \Big[\langle\Omega|c_a|m\rangle\langle m|c_b^\dagger|\Omega\rangle 2\pi\delta(\omega-\lambda_m) + \langle\Omega|c_b^\dagger|m\rangle\langle m|c_a|\Omega\rangle 2\pi\delta(\omega+\lambda_m)\Big]$$

La somme est prise sur tous les états $|m\rangle$ de l'espace de Hilbert. En pratique, seuls certains sous-espaces contribuent: si le fondamental comporte N particules, seuls les états à $N+1$ particules contribueront à la première somme et seuls les états à $N-1$ particules à la deuxième somme. Le poids spectral donne l'information sur les énergies impliquées dans le mouvement d'une particule entre les sites a et b.

Le poids spectral est normalisé: si on intègre sur toutes les fréquences, on trouve

$$\int_{-\infty}^{\infty}\frac{d\omega}{2\pi}A_{ab}(\omega) = \sum_m \Big[\langle\Omega|c_a|m\rangle\langle m|c_b^\dagger|\Omega\rangle + \langle\Omega|c_b^\dagger|m\rangle\langle m|c_a|\Omega\rangle\Big] = \langle\Omega|(c_a c_b^\dagger + c_b^\dagger c_a)|\Omega\rangle = \delta_{ab} \tag{1}$$

Dans le cas de conditions aux limites périodiques, le poids spectral est plus utile en fonction du vecteur d'onde:

$$\begin{aligned} A(k,\omega) &= \frac{1}{N}\sum_{a,b} e^{-ik(a-b)}A_{ab}(\omega) \\ &= \sum_m \Big[\langle\Omega|c_k|m\rangle\langle m|c_k^\dagger|\Omega\rangle 2\pi\delta(\omega-\lambda_m) + \langle\Omega|c_k^\dagger|m\rangle\langle m|c_k|\Omega\rangle 2\pi\delta(\omega+\lambda_m)\Big] \end{aligned} \tag{2}$$

où on a défini

$$c_k = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_a e^{-ika}c_a \qquad\qquad c_k^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_a e^{ika}c_a^\dagger$$

Dans ce qui précède nous avons omis les indices de spin car ils ne jouent qu'un rôle de spectateur. En effet, on suppose que le spin total est conservé (c'est le cas dans le modèle de Hubbard habituel) et donc les deux opérateurs (c_a et c_b) figurant dans le poids spectral doivent avoir le même indice de spin.

Poids spectral à $U = 0$

Calculons le poids spectral dans le cas des électrons indépendants ($U = 0$) dans le modèle de Hubbard. Dans ce cas, on connait précisément les états propres de l'hamiltonien: $c_k^\dagger|\Omega\rangle$ est soit nul (si $\varepsilon_k < E_F$, où $\varepsilon_k = -2t\cos k$), soit un état propre d'énergie ε_k de plus que le fondamental. De même, $c_k|\Omega\rangle$ est soit nul (si $\varepsilon_k > E_F$), soit un état propre d'énergie ε_k de moins que le fondamental. Donc un seul terme contribue dans la somme (2), avec $|m\rangle = c_k^\dagger|\Omega\rangle$ (si $\varepsilon_k > E_F$) ou $|m\rangle = c_k|\Omega\rangle$ (si $\varepsilon_k < E_F$). Dans les deux cas, on trouve

$$A(k,\omega) = \delta(\omega-\varepsilon_k)$$

L'interprétation physique de $A(k,\omega)$ (dans le cas $U = 0$ ou non) est la densité de probabilité qu'un l'électron de vecteur d'onde k ait une énergie $\hbar\omega$. Dans le cas $U = 0$, on constate que l'électron a une énergie ε_k avec certitude, parce qu'il ne peut pas entrer en collision avec les autres électrons.

Fonction de Green
La fonction de Green $G_{ab}(z)$ peut être définie de diverses façons. Nous choisissons de la définir ici en fonction du poids spectral:

$$G(z) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega'}{2\pi} \frac{A(\omega')}{z - \omega'}$$

Nous avons omis les indices (ab) ou k car la même relation prévaut en fonction des sites ou en transformée de Fourier. La fonction de Green dépend de la variable complexe z et possède des pôles sur l'axe réel. On trouve immédiatement

$$G_{ab}(z) = \sum_m \left[\langle\Omega|c_a|m\rangle\langle m|c_b^\dagger|\Omega\rangle \frac{1}{z - \lambda_m} + \langle\Omega|c_b^\dagger|m\rangle\langle m|c_a|\Omega\rangle \frac{1}{z + \lambda_m} \right]$$

En vertu de la représentation suivante de la fonction delta de Dirac:

$$\pi\delta(x) = \lim_{\eta\to 0} \frac{\eta}{x^2 + \eta^2} = \lim_{\eta\to 0} \mathrm{Im}\ \frac{1}{x - i\eta}\ ,$$

on conclut que

$$A(\omega) = 2\mathrm{Im}\ G_{ab}(\omega - i\eta) = -2\mathrm{Im}\ G_{ab}(\omega + i\eta)$$

Remarquons que l'utilité de la fonction de Green provient de son rôle dans la théorie des perturbations.