



Fonctions de Green et quasi particules

P. Grangé

► To cite this version:

P. Grangé. Fonctions de Green et quasi particules. École thématique. Ecole Joliot Curie "Nucléons dans le noyau, mais encore..", Maubuisson, (France), du 11-15 septembre 1989 : 8ème session, 1989. cel-00647425

HAL Id: cel-00647425

<https://cel.hal.science/cel-00647425>

Submitted on 2 Dec 2011

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.

FONCTIONS DE GREEN ET QUASIPARTICULES

P. Grangé

Institut Laue-Langevin Grenoble

FONCTIONS DE GREEN ET QUASIPARTICULES

P. Grangé

Institut Laue-Langevin Grenoble

Résumé :

Les propriétés des fonctions de Green à une particule sont exposées pour un système de particules indépendantes et en interaction. Les équations du mouvement pour cette fonction conduisent au développement perturbatif de l'énergie propre (self-énergie) et à l'introduction du concept de quasi-particules. Diverses approximations usuelles pour calculer cette énergie propre sont présentées et discutées en relation avec la nature de l'interaction entre les constituants du système. Les propriétés spécifiques des quasi-particules obtenues dans ces approximations sont précisées.

Abstract :

Properties of single particle Green's functions are displayed for systems of independent or interacting particles. The equations of motion for these Green's functions lead to the perturbative expansion of the self-energy and to the introduction of the quasi-particle concept. Usual approximations to calculate this self-energy are presented and discussed in relation to the specificities of the interaction among the constituents of the system. Quasi-particles properties obtained in these approximations are pointed out.

I - FONCTIONS DE GREEN : INTRODUCTION, UTILITE

L'utilité des fonctions de Green dans la solution des équations aux dérivées partielles est bien établie depuis leur introduction par Green en 1828 en électromagnétisme. Elles se sont avérées depuis être un outil extrêmement puissant en mécanique quantique pour le traitement des systèmes en interaction et de leur réponse à des perturbations externes. A ce jour encore, elles sont extrêmement utiles dans l'étude des liens entre dynamique classique et quantique¹).

a) Pour une brève introduction à la méthode des fonctions de Green appliquée à la solution d'une équation aux dérivées partielles non homogène, il est utile de considérer le cas électrostatique.

En présence de charges, le potentiel électrostatique $\phi(\underline{r})$ obéit à l'équation de Poisson non homogène :

$$\nabla^2 \phi(\underline{r}) = - \frac{\rho(\underline{r})}{\epsilon_0}, \quad (1-1)$$

ou $\rho(\underline{r})$ est la densité de charge en $\underline{r}$. Si les charges sont ponctuelles de valeur q_i en $\underline{r}_i$, on sait que la solution s'écrit

$$\phi = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \frac{q_i}{r_i}, \quad (1-2)$$

C'est-à-dire la superposition des solutions pour chaque charge individuelle obtenues de la loi de Coulomb pour la force entre 2 charges ponctuelles q_1 et q_2 distante de r .

En remplaçant les charges ponctuelles discrètes par des charges distribuées avec une densité $\rho(\underline{r})$ le potentiel en $\underline{r}_1$ par rapport à l'origine est :

$$\phi(\underline{r}_1) = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{\rho(\underline{r}_2)}{|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|} d^3r_2. \quad (1-3)$$

Dans cette expression

$$G(|\underline{r}_1 - \underline{r}_2|) = [4\pi\epsilon_0 |\underline{r}_1 - \underline{r}_2|]^{-1} \quad (1-4)$$

est la fonction de Green de l'équation (1-1). Utilisant la propriété

$$\nabla^2 \left(\frac{1}{4\pi r} \right) = -\delta(\underline{r}), \quad (1-5)$$

on voit que

$$\nabla_{\underline{r}}^2 G(|\underline{r} - \underline{r}'|) = -\frac{\delta(\underline{r} - \underline{r}')}{\epsilon_0}. \quad (1-6)$$

Donc $G(|\underline{r} - \underline{r}'|)$ est le potentiel en $\underline{r}$ correspondant à une charge ponctuelle unitaire en $\underline{r}'$. En appliquant l'opérateur $\nabla_{\underline{r}_1}^2$ sur $\phi(\underline{r}_1)$ on vérifie que (1-3) est solution de (1-1).

b) Le cas des équations de Maxwell

$$\left\{ \begin{array}{l} \square \underline{A} \equiv \left(\nabla^2 - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \underline{A}(\underline{r}, t) = -\mu_0 \underline{j}(\underline{r}, t) \end{array} \right. \quad (1-7)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \square \phi = -\frac{\rho(\underline{r}, t)}{\epsilon_0} \end{array} \right. \quad (1-8)$$

permet d'introduire la notion de fonction de Green "retardée". En effet posons $\underline{R} = \underline{r} - \underline{r}'$, $s = t - t'$. La fonction de Green commune à (1-7) et (1-8) doit obéir à l'équation

$$G(\underline{R}, s) = -\delta^3(\underline{R})\delta(s) \quad (1-9)$$

dont la solution, compte tenu des conditions aux limites du problème, s'obtient par transformation de Fourier spatiale. Pour $s > 0$, $G(\underline{R}, 0) = 0$ et

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0+} \frac{\partial G(\underline{R}, s)}{\partial s} \Big|_{s=\epsilon} = c^2, \text{ on trouve}$$

$$G(\underline{R}, s) = \Theta(s) \cdot \frac{c}{4\pi R} \delta(R - cs). \quad (1-10)$$

La fonction $\delta(R-cs)$ exprime le temps de retard R/c avec lequel l'interaction a lieu à la distance R du point initial, d'où la dénomination de fonction de Green retardée appliquée à (1-10). Cet aspect apparaît encore mieux dans l'expression du potentiel scalaire électrique (ou vecteur magnétique A). En effet à l'aide de (1-10) la solution de (1-8) s'écrit

$$\begin{aligned}\phi(\underline{r}, t) &= \frac{1}{\epsilon_0} \int d^3r' dt' G(|\underline{r}-\underline{r}'|, t-t') \rho(\underline{r}', t') \\ &= \frac{c}{4\pi\epsilon_0} \int \frac{d^3r'}{|\underline{r}-\underline{r}'|} \rho(\underline{r}', t - \frac{R}{c}).\end{aligned}\quad (1-11)$$

En appliquant le d'Alembertien sur (1-11) et à l'aide de (1-5) on vérifie que $\phi(\underline{r}, t)$ est bien solution de (1.8).

Ces deux exemples nous montrent deux faits importants :

- i) La réponse d'un système à un terme de source, c'est-à-dire une perturbation, est exprimée à l'aide d'une fonction de Green indépendante de la perturbation.
- ii) La fonction de Green elle-même n'est complètement déterminée qu'une fois donnée les conditions aux limites du problème : elle les incorpore alors dans son expression formelle et il n'est plus nécessaire d'y faire référence explicitement par la suite.
- c) La réponse linéaire des systèmes quantiques est décrite par une équation différentielle du premier ordre en temps dont la solution peut naturellement s'exprimer à l'aide d'une fonction de Green. Bien qu'élémentaire ce résultat de mécanique quantique est à la base de l'interprétation de nombreux phénomènes expérimentaux traités dans cette école (cf. Cours de J. Delorme et M. Ericsson). Il est donc utile de le redériver fixant ainsi les notations utilisées ultérieurement. Une application immédiate en est donnée au paragraphe suivant.

Soit H le Hamiltonien du système tel que

$$H = H_0 + H'$$

H_0 est l'hamiltonien du système non perturbé (indépendant du temps) et H' la perturbation (qui peut dépendre du temps). On considère en général que le système est en équilibre avant l'action de H' à $t=t_0$ et que cette situation est caractérisée par un opérateur densité ρ_0 . Aux instants ultérieurs l'opérateur densité obéit à l'équation d'évolution²⁾

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = [H_0 + H', \rho]. \quad (1-12)$$

La situation d'équilibre à $t \leq t_0$ entraîne $\partial \rho_0 / \partial t = 0$ et donc $[H_0, \rho_0] = 0$: ρ_0 est une fonction de $H_0, f(H_0)$, qui pour l'ensemble grand canonique s'écrit

$$\rho_0 = \exp[-\beta(H_0 - \mu N)] / Z, \quad (1-13)$$

avec

$$Z = \text{Tr} \exp[-\beta(H_0 - \mu N)], \quad (1-14)$$

où la trace (Tr) est prise sur les états propres du système à t_0 . Ici $\beta = T^{-1}$, T est la température absolue, μ le potentiel chimique (multiplicateur de Lagrange pour imposer la conservation du nombre de particules), N l'opérateur nombre de particules.

La solution de (1-12) s'obtient en passant dans la représentation de Heisenberg où

$$\hat{H}(t) = U(t) H U^\dagger(t) \quad (1-15)$$

avec $U(t) = e^{iH_0 t / \hbar}$. En définissant $\hat{\rho}(t)$ de façon similaire à $\hat{H}(t)$, on obtient à partir de (1-12) une équation pour $\hat{\rho}(t)$

$$i\hbar \frac{\partial \hat{\rho}(t)}{\partial t} = [\hat{H}'(t), \hat{\rho}], \quad (1-16)$$

dont la solution au 1er ordre en $\hat{H}'$ ($\hat{\rho}(t_0) = \rho_0$) s'écrit

$$\hat{\rho}(t) = \rho_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t [\hat{H}'(t'), \rho_0] dt'. \quad (1-17)$$

donc

$$\rho(t) = \rho_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t U^\dagger(t) [\hat{H}'(t'), \rho_0] U(t) dt'. \quad (1-18)$$

Si M est un opérateur correspondant à une observable, alors sa valeur moyenne est telle que :

$$\begin{aligned} \langle M \rangle &= \text{Tr} \{ \rho(t) M \} \\ &= \text{Tr} \{ \rho_0 M \} - \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \{ M U^\dagger(t) \int_{t_0}^t [\hat{H}'(t'), \rho_0] dt' U(t) \}. \end{aligned} \quad (1-19)$$

Ici le premier terme correspond à la valeur moyenne d'équilibre de M et le deuxième terme donne le changement $\langle \delta M \rangle$ par rapport à cette valeur et induit par la perturbation.

En définissant $\hat{M}(t)$ comme en (1-15) pour $\hat{H}$ et en utilisant la propriété cyclique de la trace, $\langle \delta M \rangle$ s'écrit

$$\langle \delta M \rangle = \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' \text{Tr} \{ \rho_0 [\hat{H}'(t'), \hat{M}(t)] \}. \quad (1-20)$$

Pour $\hat{H}'(t) = A(t) \cdot B$, où $A(t)$ est une fonction scalaire $\langle \delta M \rangle$ devient

$$\begin{aligned} \langle \delta M \rangle &= \frac{i}{\hbar} \int_{t_0}^t dt' A(t') \text{Tr} \{ \rho_0 [\hat{B}(t'), \hat{M}(t)] \} \\ &= \int_0^\infty dt' G(t, t') A(t'), \end{aligned} \quad (1-21)$$

avec

$$G(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \text{Tr} \{ \rho_0 [\hat{M}(t), \hat{B}(t')] \} \Theta(t-t'). \quad (1-22)$$

Le résultat (1-21) est sous une forme analogue à celle obtenue pour le champ électrique $\phi(\underline{r}, t)$. La présence de la fonction $\Theta(t-t')$ montre que la valeur $\langle \delta M \rangle$ ne dépend que de l'histoire du système pour des temps t' antérieur à t : comme pour $\phi(\underline{r}, t)$, $G(t, t')$ est aussi assimilée à une fonction de Green retardée.

D'une façon générale les fonctions de Green permettent de décrire l'émission électromagnétique, les expériences d'absorption et de transmission, l'atténuation acoustique, les expériences de résonance de spins électroniques ou nucléaires, etc...

d) Comme dernier exemple simple d'application des fonctions de Green et qui montre cependant la structure analytique générale des développements ultérieurs, considérons le cas de l'oscillateur harmonique à une dimension de masse unitaire et entraîné par une force dépendante du temps $f(t)$.

Ici la perturbation $H'(t)$ s'écrit

$$H'(t) = - Xf(t) \quad (1-23)$$

Le formalisme précédent s'applique directement et la fonction de Green d'après (1-22) s'écrit

$$G(t, t') = - \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \{ \rho_0 [\hat{X}(t), \hat{X}(t')] \} \theta(t-t'). \quad (1-24)$$

La solution des équations Heisenberg pour $\hat{X}(t)$ donne le même résultat que pour l'oscillateur classique soit

$$\hat{X}(t) = X \cos \omega t + \frac{P}{\omega} \sin \omega t \quad (1-25)$$

et on obtient

$$\begin{aligned} [\hat{X}(t), \hat{X}(t')] &= [X \cos \omega t, \frac{P}{\omega} \sin \omega t'] + [\frac{P}{\omega} \sin \omega t, X \cos \omega t'] \\ &= - \frac{i}{\hbar \omega} \sin \omega (t-t'). \end{aligned} \quad (1-26)$$

Ce commutateur étant un scalaire et tenant compte de la normalisation $\text{Tr} \rho_0 = 1$,

$$G(t, t') = - \frac{1}{\omega} \sin \omega (t-t') \theta(t-t') \quad (1-27)$$

La fonction de Green ne dépend que de $t-t'$, un résultat général que nous démontrerons au chapitre suivant, et oscille avec la fréquence ω de l'oscillateur.

Supposons que nous reconsidérons le même problème avec un terme d'amortissement des oscillations pouvant trouver son origine dans les interactions de l'oscillateur avec son environnement. Quel sera le comportement de $G(t)$ quant $t \rightarrow \infty$? Un tel système est non conservatif et il n'est pas possible d'écrire un hamiltonien et d'utiliser le formalisme précédent pour obtenir la fonction de Green quantique. Cependant l'expression de la fonction de Green classique est instructive en soi par comparaison avec (1-27).

L'équation du mouvement est

$$\frac{d^2 X}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{dX}{dt} + \omega^2 X = f(t), \quad (1-28)$$

dont la fonction de Green doit satisfaire

$$\left[\frac{d^2}{dt^2} + \frac{1}{\tau} \frac{d}{dt} + \omega^2 \right] G(t) = - \delta(t). \quad (1-29)$$

Pour les conditions initiales $X(0) = \dot{X}(0) = 0$, la solution de (1-28) est bien connue (par transformation de Laplace par ex.) et s'écrit

$$x(t) = \frac{1}{\omega_1} \int_0^t dt' e^{-\frac{(t-t')}{2\tau}} \sin \omega_1(t-t') f(t') \quad (1-30)$$

avec $\omega_1^2 = \omega^2 - \frac{1}{4\tau^2}$. On voit que

$$G(t, t') = \theta(t-t') e^{-\frac{(t-t')}{2\tau}} \frac{\sin \omega_1(t-t')}{\omega_1}, \quad (1-31)$$

et

$$\lim_{t \rightarrow \infty} G(t) = 0.$$

La fonction de Green décrit donc le retour vers la position d'équilibre de l'oscillateur sur un temps caractéristique τ .

Par la suite nous serons amenés à considérer les transformées de Fourier par rapport à t des fonctions de Green et il est utile de mettre en évidence les propriétés dans le plan complexe de la transformée d'une expression telle que (1-31).

Soit donc

$$\begin{aligned}
 G(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{i\omega t} G(t) \\
 &= \int_0^{\infty} \frac{dt}{\omega_1} e^{i\omega t} e^{-\frac{t}{\tau}} \sin \omega_1 t
 \end{aligned}
 \tag{1-32}$$

L'intégrale est élémentaire et nous donne

$$G(\omega) = - \frac{1}{\omega + \omega_1 + i/\tau} \cdot \frac{1}{\omega - \omega_1 + i/\tau}
 \tag{1-33}$$

$G(\omega)$ présente des poles simples à $\omega = \pm \omega_1 - i/\tau$ et si $\omega\tau \gg 1$ $\omega_1 \approx \omega$: ces poles sont près de l'axe réel et aux fréquences naturelles du système. Le déplacement par rapport à l'axe réel dépend de la valeur de τ , temps de décroissance exponentielle de $G(t)$.

Nous verrons dans les paragraphes suivants que l'écriture (1-33) de $G(\omega)$ et les propriétés analytiques qui en découlent sont tout à fait génériques des approximations de quasi-particules faites sur les fonctions de Green de systèmes en interaction.

II - DEFINITIONS ET PROPRIETES DES FONCTIONS DE GREEN

Dans ce paragraphe nous allons dériver les propriétés principales des fonctions de Green, nécessaires à l'introduction et à la discussion du concept de quasiparticules. Il ne s'agit pas ici d'être novateur ni même exhaustif (pour cela on pourra consulter les ouvrages de la Réf. 3), mais d'obtenir le plus simplement possible les résultats et formules utilisées dans les différents exposés de cette école et pour lesquels il est souvent utile de ne pas perdre de vue les conditions d'obtention et les limites de validité.

a) fonction de Green à deux temps

Soient $\psi(t)$ et $\psi^\dagger(t')$ deux opérateurs respectivement d'annihilation et de création pris à deux temps différents t et t' (la dépendance spatiale n'est pas indiquée pour alléger la notation). Conformément au paragraphe précédent sur la réponse linéaire, la fonction de Green retardée $G_R(t, t')$ est définie comme

$$G_R(t, t') = -\frac{i}{\hbar} \text{Tr} \{ \rho_0 [\psi(t), \psi^\dagger(t')]_\epsilon \} \theta(t-t') \quad (2-1)$$

$$\equiv -\frac{i}{\hbar} \langle [\psi(t), \psi^\dagger(t')]_\epsilon \rangle.$$

Ici

$$[\psi(t), \psi^\dagger(t')]_\epsilon = \psi(t)\psi^\dagger(t') + \epsilon\psi^\dagger(t')\psi(t) \quad (2-2)$$

avec

$$\begin{cases} \epsilon = 1 & \text{pour des bosons} \\ \epsilon = -1 & \text{pour des fermions} \end{cases}$$

L'opérateur Tr (trace) est celui déjà rencontré et son utilisation sera clarifiée par la suite

La fonction de Green avancée $G_A(t, t')$ est introduite par généralisation de (2-1) et joue un rôle important dans la discussion des propriétés de particules simples. Elle s'écrit

$$G_A = \frac{i}{\hbar} \text{Tr} \{ \rho_0 [\psi(t), \psi^\dagger(t')]_\epsilon \} \theta(t'-t) \quad (2-3)$$

$$\equiv \frac{i}{\hbar} \langle [\psi(t), \psi^\dagger(t')]_\epsilon \rangle \theta(t'-t).$$

Dans le traitement des systèmes à température finie les fonctions de Green peuvent être obtenues sur la base des définitions suivantes en variant t et t' de façon continue et appropriée dans le plan complexe. La température T , ou plus précisément $\beta = T^{-1}$ ($k_B = 1$), est traitée comme un temps imaginaire ($\hbar = 1$). Dans ce cas, on utilise la fonction de Green en température suivante

$$\begin{aligned} G(\tau, \tau') &= -\langle \psi(-i\tau)\psi^\dagger(-i\tau') \rangle \theta(\tau-\tau') \\ &+ \epsilon \langle \psi^\dagger(-i\tau')\psi(-i\tau) \rangle \theta(\tau'-\tau) \end{aligned} \quad (2-4)$$

avec le même ϵ qu'auparavant.

b) Considérons un système dont le Hamiltonien H est indépendant du temps et soit la fonction de corrélation $\sigma(t, t')$ des deux opérateurs $\psi(t)$ et $\psi^\dagger(t')$ aux temps différents t et t' :

$$\sigma(t, t') = \langle \psi(t) \psi^+(t') \rangle.$$

La définition contenue en (2-1) de $\langle A \rangle$ donne

$$\sigma(t, t') = Z^{-1} \text{Tr}[e^{-\beta H} e^{iHt} \psi e^{-iHt} e^{iHt'} \psi^+ e^{-iHt'}];$$

Comme $[e^{-\beta H}, e^{iHt}] = 0$ et $\text{Tr}(ABC) = \text{Tr}(CAB) = \text{Tr}(BCA)$ alors

$$\begin{aligned} \sigma(t, t') &= Z^{-1} \text{Tr}[e^{-\beta H} \psi e^{iH(t'-t)} \psi^+ e^{-iH(t'-t)}] \\ &= \langle \psi(0) \psi^+(t'-t) \rangle \\ &= \langle \psi(t-t') \psi^+(0) \rangle. \end{aligned} \quad (2-5)$$

La corrélation σ ne dépend que de la différence $t-t'$ comme annoncé.

Soit maintenant la transformée de Fourier $G(\omega)$ de $G_R(t-t')$ par rapport à la différence $t-t' = \tau$:

$$\begin{aligned} G(\omega) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} G_R(\tau) \\ &= -i \int_0^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \langle [\psi(\tau), \psi^+(0)]_{\epsilon} \rangle. \end{aligned} \quad (2-6)$$

On voit que l'intégrale (2-6) doit en fait être envisagée au sens d'une transformée de Laplace car sa convergence dépend du comportement de

$$\lim_{\tau \rightarrow \infty} e^{-\eta\tau} |\langle [\psi(\tau), \psi^+(0)]_{\epsilon} \rangle| \quad (2-7)$$

pour tout $\eta > 0$ petit. Si donc cette limite est bornée alors $G(\omega)$ pour $\omega = \text{Re } \omega + i\eta$ converge partout dans le demi plan supérieur de ω . C'est le cas en général pour un système en équilibre thermodynamique où les corrélations entre opérateurs du type (2-5) ne croissent pas exponentiellement avec le temps mais pour les systèmes hors d'équilibre la limite $\tau \rightarrow \infty$ est un problème mathématique délicat⁴). Nous considérons ici que la limite (2-7) existe de telle sorte que l'intégrale (2-6) soit définie (au sens des distributions comme nous verrons plus loin).

c) Il est maintenant possible, partant de la définition des fonctions de Green, de donner une représentation générique de $G(\omega)$, dite forme spectrale.

Soit $|m\rangle$ les états propres de H tels que :

$$H|m\rangle = E_m|m\rangle \quad (2-8)$$

et notons

$$\langle m|\psi(0)|n\rangle \equiv \psi_{mn}$$

$$\langle m|\psi^+(0)|n\rangle \equiv \psi_{mn}^+$$

Alors d'après la définition (2-3) de $\langle [A, B]_\epsilon \rangle$, $G(\omega)$ s'écrit

$$\begin{aligned} G(\omega) &= -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} Z^{-1} \sum_m \langle m | e^{-\beta H} [\psi(t), \psi^+(0)]_\epsilon | m \rangle \\ &= -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} Z^{-1} \sum_m e^{-\beta E_m} \langle m | \{ \psi(t) \psi^+(0) + \epsilon \psi^+(0) \psi(t) \} | m \rangle \\ &= -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} Z^{-1} \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} [\psi_{mn} \psi_{nm}^+ e^{i(E_m - E_n)t} \\ &\quad + \epsilon \psi_{mn}^+ \psi_{nm} e^{i(E_n - E_m)t}] \\ &= -i \int_0^\infty dt e^{i\omega t} Z^{-1} \sum_{m,n} (e^{-\beta E_m} + \epsilon e^{-\beta E_n}) \psi_{mn} \psi_{nm}^+ e^{i(E_m - E_n)t} \\ &= -Z^{-1} \sum_{m,n} \frac{e^{-\beta E_m} + \epsilon e^{-\beta E_n}}{E_n - E_m - \omega} \cdot \psi_{mn} \psi_{nm}^+ \\ &= Z^{-1} \int_{-\infty}^\infty dx \sum_{m,n} \frac{e^{-\beta E_m} + \epsilon e^{-\beta E_n}}{\omega - x} \psi_{mn} \psi_{nm}^+ \delta(x - E_n + E_m) \\ &= \int_{-\infty}^\infty dx \frac{A(x)}{\omega - x} \end{aligned} \quad (2-9)$$

$A(x)$ est appelée fonction spectrale et peut s'écrire

$$A(\underline{r}, \underline{r}'; x) = Z^{-1} (1 + \varepsilon e^{-\beta x}) \sum_m e^{-\beta E_m} \psi_{mn}(\underline{r}) \psi_{nm}^+(\underline{r}') \delta(x - E_n + E_m), \quad (2-10)$$

où nous avons réintroduit explicitement la dépendance spatiale des opérateurs de création et d'annihilation.

d) A partir de cette expression on obtient immédiatement deux règles de somme souvent invoquées :

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{A(\underline{r}, \underline{r}'; x)}{(1 + \varepsilon e^{-\beta x})} &= Z^{-1} \sum_{mn} e^{-\beta E_m} \psi_{mn}(\underline{r}) \psi_{nm}^+(\underline{r}') \\ &= \langle \psi(\underline{r}) \psi^+(\underline{r}') \rangle \end{aligned} \quad (2-11)$$

et

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dx A(\underline{r}, \underline{r}'; x) &= Z^{-1} \sum_{mn} [1 + \varepsilon e^{-\beta(E_n - E_m)}] e^{-\beta E_m} \psi_{mn} \psi_{nm}^+ \\ &= \langle [\psi(\underline{r}), \psi^+(\underline{r}')] \rangle_{\varepsilon} \\ &= \delta^{(3)}(\underline{r} - \underline{r}'). \end{aligned} \quad (2-11)$$

Soit $G'(\omega)$ la transformée de Fourier de la fonction de Green avancée $G_A(\tau)$. Un raisonnement analogue à celui développé pour $G(\omega)$ montre que $G'(\omega)$ est analytique dans le demi plan inférieur de ω (à cause de $\Theta(t' - t)$) et s'écrit comme $G(\omega)$ avec la même fonction spectrale $A(x)$. Ceci est encore vrai pour la fonction de Green en température $G(\tau, \tau')$ de l'expression (2-4).

On a donc

$$G_R(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} G(\omega + i\eta) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{A(x)}{\omega - x + i\eta} \quad (2-12)$$

$$G_A(\omega) = \lim_{\eta \rightarrow 0} G(\omega - i\eta) = \lim_{\eta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{A(x)}{\omega - x - i\eta} \quad (2-13)$$

C'est en ce sens que $G(\omega)$ est dite fonction générique, puisqu'elle conduit aux deux fonctions de Green retardée et avancée. Ces deux relations établissent bien la nature de distribution des fonctions de Green. De plus, au sens des distributions on établit la relation suivante⁵⁾

$$\lim_{\eta \rightarrow 0} \frac{1}{\omega - x \pm i\eta} = \frac{PP}{\omega - x} \mp i\pi \delta(\omega - x) \quad (2-14)$$

ou PP désigne la partie principale au sens de Cauchy.

On obtient donc :

$$\begin{aligned} G_R(\omega) - G_A(\omega) &= -2\pi i \int_{-\infty}^{\infty} dx A(x) \delta(\omega - x) \\ &= 2\pi i A(\omega); \end{aligned} \quad (2-15)$$

Il y a discontinuité de $G(\omega)$ à travers l'axe réel (qui est une coupure) et tenant compte de (2-11), (2-9) nous montre que $G(\omega)$ décroît au moins comme ω^{-1} si $|\omega| \rightarrow \infty$.

e) Revenons à la fonction de Green en température et montrons qu'en effet c'est à nouveau la même fonction spectrale $A(x)$ qui intervient.

Comme en temps réel, en temps imaginaire et pour un hamiltonien indépendant du temps $G(\tau_1, \tau_2)$ ne dépend que de la différence $\tau = \tau_1 - \tau_2$. Considérons τ tel que $0 < \tau \leq \beta$ (β est l'inverse de la température T du système) et donc $-\beta < \tau - \beta \leq 0$. D'après la définition (2-4) et en utilisant l'invariance cyclique de la trace,

$$\begin{aligned} G(\tau - \beta) &= \varepsilon \langle \psi^+(0) \psi(-i\tau + i\beta) \rangle \\ &= \varepsilon Z^{-1} \text{Tr} \{ e^{-\beta H} \psi^+ e^{H(\tau - \beta)} \psi e^{-H(\tau - \beta)} \} \\ &= \varepsilon Z^{-1} \langle e^{-\beta H} \psi e^{-H\tau} \psi^+ e^{H\tau} \rangle \\ &= \varepsilon \langle \psi(0) \psi^+(i\tau) \rangle \\ &= -\varepsilon G(\tau). \end{aligned} \quad (2-16)$$

Nous avons donc à distinguer deux cas

i) $\varepsilon = 1$: $G(\tau)$ est antipériodique pour les fermions, de périodes 2β :

$$G(\tau - \beta) = -G(\tau) \quad (2-17)$$

Posons

$$\zeta_1 = (2l + 1)\pi/\beta, \quad (2-18)$$

$$e^{-i\zeta_1(\tau - \beta)} = e^{i(2l+1)\pi} e^{-i\zeta_1\tau} = -e^{-i\zeta_1\tau}. \quad (2-19)$$

On peut donc décomposer $G(\tau)$ en série de Fourier

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_l \bar{G}(\zeta_1) e^{-i\zeta_1\tau}. \quad (2-20)$$

ii) $\varepsilon = -1$: $G(\tau)$ est périodique pour les bosons de période β

$$G(\tau - \beta) = G(\tau). \quad (2-21)$$

Dans ce cas on pose

$$\zeta_1 = 2\pi/\beta, \quad (2-22)$$

et $G(\tau)$ prend la même forme qu'en (2-20).

Dans les deux cas $\bar{G}(\zeta_1)$ est donné par :

$$\bar{G}(\zeta_1) = \int_0^\beta d\tau e^{i\zeta_1 \tau} G(\tau). \quad (2-23)$$

La forme spectrale de $\bar{G}(\zeta_1)$ s'obtient à partir de la définition de $G(\tau)$, reportée dans (2-23), c'est-à-dire :

$$\begin{aligned} \bar{G}(\zeta_1) &= - \int_0^\beta d\tau e^{i\zeta_1 \tau} Z^{-1} \text{Tr} \{ e^{-\beta H} \psi e^{-H\tau} \psi^+ e^{H\tau} \} \\ &= - \int_0^\beta d\tau e^{i\zeta_1 \tau} Z^{-1} \text{Tr} \{ e^{-\beta H} e^{H\tau} \psi e^{-H\tau} \psi^+ \} \\ &= - \int_0^\beta d\tau e^{i\zeta_1 \tau} Z^{-1} \sum_{mn} e^{-\beta E_m} \psi_{mn} \psi_{nm}^+ e^{(E_m - E_n)\tau} \\ &= - Z^{-1} \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} \psi_{mn} \psi_{nm}^+ \frac{[e^{(E_m - E_n + i\zeta_1)\beta} - 1]}{E_m - E_n + i\zeta_1}. \end{aligned}$$

On utilise la définition de ζ_1 pour écrire

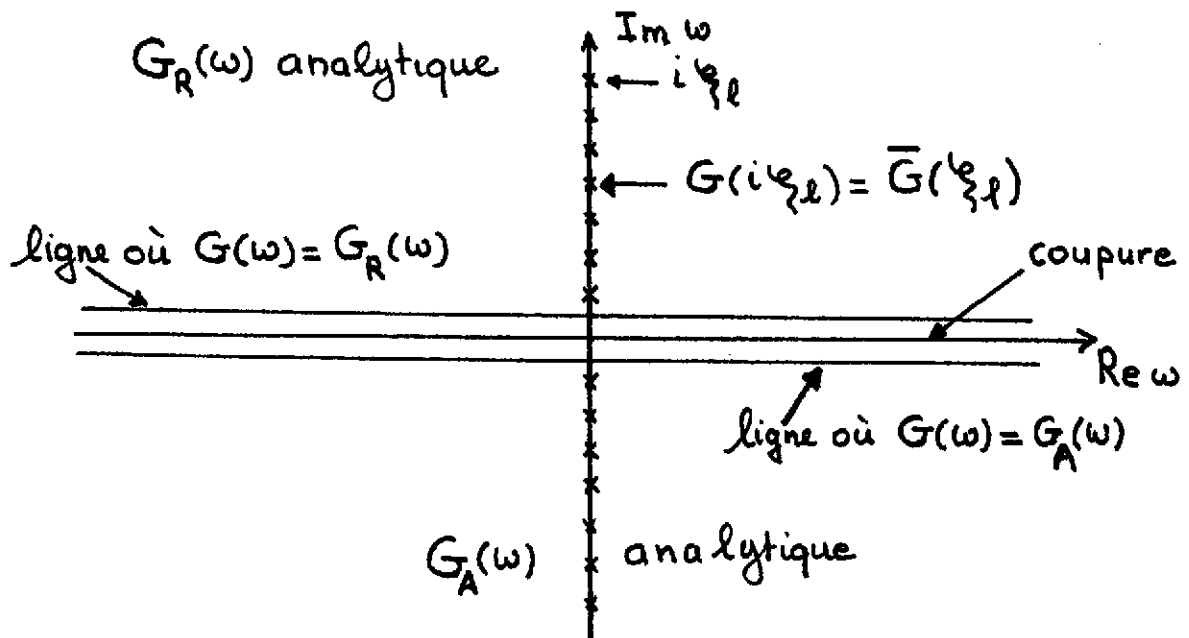
$$\begin{aligned} e^{i\zeta_1 \beta} &= \begin{cases} 1 & \text{si } \varepsilon = -1 \\ -1 & \text{si } \varepsilon = 1 \end{cases} \\ &= -\varepsilon. \end{aligned}$$

Ceci conduit à

$$\begin{aligned} \bar{G}(\zeta_1) &= Z^{-1} \sum_{m,n} \psi_{mn} \psi_{nm}^+ \frac{[\varepsilon e^{-\beta E_n} + e^{-\beta E_m}]}{E_m - E_n + i\zeta_1} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{A(x)}{i\zeta_1 - x} \end{aligned} \quad (2-24)$$

Dans le cas des fonctions de Green à température finie nous avons donc mis en évidence leurs caractères périodiques que nous utiliserons par la suite et établi que la même fonction spectrale $A(x)$ détermine leurs coefficients du développement de Fourier. On montre de plus⁶⁾ que la connaissance des $\bar{G}(\zeta_1)$ aux valeurs discrètes de ζ_1 détermine $G(\omega)$ de façon unique pourvu que l'on impose un comportement en ω^{-1} pour cette fonction si $|\omega| \rightarrow \infty$.

Nous pouvons clore ce paragraphe en résumant les propriétés obtenues dans la figure suivante du plan complexe en ω :



III - FONCTIONS DE GREEN A UNE PARTICULE

Dans ce paragraphe nous allons étudier plus en détail la forme caractéristique de la fonction de Green à une particule pour des systèmes de particules indépendantes et en interaction. Partant des définitions en temps imaginaire nous montrerons comment les propriétés macroscopiques d'un système sont reliées au comportement microscopique décrit par la fonction de Green à une particule.

a) La fonction de Green à une particule et à température finie a été définie en (2-4). On la note sous forme compacte

$$G(\underline{r}\tau; \underline{r}'\tau') = - \langle T_0 \{ \psi(\underline{r}, -i\tau) \psi^\dagger(\underline{r}', -i\tau') \} \rangle \quad (3-1)$$

où T_0 symbolise l'opération de positionnement des opérateurs dans l'expression de la valeur moyenne définie en (2-3), $\psi(\underline{r}, -i\tau)$ venant le premier si $\tau > \tau'$ et vice-versa.

On a vu que

$$\left. \begin{aligned} \psi(\underline{r}, -i\tau) &= e^{H\tau} \psi(\underline{r}) e^{-H\tau} \\ \psi^\dagger(\underline{r}, -i\tau) &= e^{H\tau} \psi^\dagger(\underline{r}) e^{-H\tau} \end{aligned} \right\} \quad (3-2)$$

et donc $[\psi(\underline{r}, -i\tau)]^\dagger = \psi^\dagger(\underline{r}, i\tau) \neq \psi^\dagger(\underline{r}, -i\tau)$.

Pour un système invariant par translation $G(\underline{r}, \tau; \underline{r}', \tau)$ ne dépend en fait que de $\underline{r} - \underline{r}'$. En effet pour un tel système l'opérateur de moment $\underline{P}$, générateur des translations, est donné par

$$\underline{P} = \int d^3r \psi(\underline{r})(-i\nabla)\psi^+(\underline{r}). \quad (3-3)$$

Il commute avec H et son commutateur avec le champ $\psi(\underline{r})$ s'évalue facilement, quelque soit $\varepsilon = \pm 1$, comme,

$$-i\nabla\psi(\underline{r}) = [\psi(\underline{r}), \underline{P}], \quad (3-4)$$

qui peut être réécrit sous la forme intégrale

$$\psi(\underline{r}) = e^{-i\underline{P} \cdot \underline{r}} \psi(0) e^{i\underline{P} \cdot \underline{r}}. \quad (3-5)$$

Reportant dans (3-1), en utilisant $[\underline{P}, H] = 0$ et la propriété cyclique de la trace, on obtient une expression qui ne dépend effectivement que de $\underline{r} - \underline{r}'$.

L'onde plane étant état propre de $\underline{P}$ peut être prise comme base pour l'écriture des opérateurs de champ en terme des opérateurs de création $a_{\underline{k}}^+$ et d'annihilation $a_{\underline{k}}$ pour une particule de moment $\underline{k}$

$$\psi(\underline{r}) = \Omega^{-1/2} \sum_{\underline{k}} e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} a_{\underline{k}}, \quad (3-6)$$

où Ω est le volume de normalisation. Définissons

$$G(\underline{r}, \tau) = \Omega^{-1} \sum_{\underline{k}} e^{i\underline{k} \cdot \underline{r}} G(\underline{k}, \tau). \quad (3-7)$$

Tenant compte du fait que $\langle a_{\underline{k}} a_{\underline{k}'}^+ \rangle = \delta_{\underline{k}, \underline{k}'}$ pour un système invariant par translation (le moment est conservé) et reportant (3-6) dans (3-1) et en utilisant (3-7) on trouve

$$G(\underline{k}, \tau) = - \langle T0 \{ a_{\underline{k}}(-i\tau) a_{\underline{k}}^+(0) \} \rangle. \quad (3-8)$$

De façon identique, à partir de la définition (2-10) de $A(\underline{r}, \underline{r}', \omega) = A(\underline{r} - \underline{r}'; \omega)$, on obtient l'expresssion réelle

$$A(\underline{k}, \omega) = Z^{-1} (1 + \varepsilon e^{-\beta\omega}) \sum_{m,n} e^{-\beta E_m} |(a_{\underline{k}})_{mn}|^2 \delta(\omega - E_n + E_m). \quad (3-9)$$

et donc

$$G_R(\underline{k}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dx \frac{A(\underline{k}; x)}{\omega - x + i\eta}, \quad (3-10)$$

soit en utilisant (2-14)

$$\text{Im}G(\underline{k}, \omega) = - \pi A(\underline{k}, \omega). \quad (3-11)$$

A température nulle l'interprétation physique de $A(\underline{k}, \omega)$ est claire : en effet lorsque $\beta \rightarrow \infty$ dans (3-9) seul le terme $n = 0$ correspondant à l'énergie $E_0 = 0$ c'est à dire le fondamental (pris ici comme origine de l'échelle d'énergie) intervient et

$$A(\underline{k}, \omega) = \sum_n |\langle n | a_{\underline{k}}^+ | 0 \rangle|^2 \delta(\omega - E_n + E_0) \quad (3-12)$$

La somme sur n compte donc le nombre des états ayant une énergie d'excitation ω et reliés à l'état fondamental par addition d'une particule supplémentaire : c'est la densité d'états $N_{\underline{k}}(\omega)$.

La densité totale est donc

$$\begin{aligned} N(\omega) &= \Omega^{-1} \sum_{\underline{k}} A(\underline{k}, \omega) \\ &= - \frac{1}{\pi} \text{Im}G_R(\underline{r}; \omega) \Big|_{\underline{r}=0}. \end{aligned} \quad (3-13)$$

Finalement en terme de $A(\underline{k}, \omega)$, la règle de somme (2-11) prend la forme simple suivante

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega A(\underline{k}, \omega) = \langle [a_{\underline{k}}, a_{\underline{k}}^+]_{\epsilon} \rangle = 1 \quad (3-14)$$

b) pour un système de particules indépendantes le Hamiltonien s'écrit

$$H = \sum_{\underline{k}} e_0(k) a_{\underline{k}}^+ a_{\underline{k}} \quad (3-15)$$

où $e_0(k)$ est l'énergie de particule simple. Soit $\phi_{\underline{k}}(\underline{r})$ l'état normalisé (i.e $\langle \underline{r} | a_{\underline{k}}^+ | 0 \rangle$) de cette particule. L'expression équivalente à (3-6) est

$$\psi(\underline{r}) = \sum_{\underline{k}} \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) a_{\underline{k}}. \quad (3-16)$$

Les particules étant indépendantes, $\langle a_{\underline{k}} a_{\underline{l}}^+ \rangle = \langle a_{\underline{k}} a_{\underline{k}}^+ \rangle \delta_{\underline{k}, \underline{l}}$, et la fonction de Green retardée (ou avancée) s'écrit

$$G_R(\underline{r}t; \underline{r}'t') = -i \sum_{\underline{k}} \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}') \langle [a_{\underline{k}}(t), a_{\underline{k}}^+(t')]_{\epsilon} \rangle \Theta(t-t')$$

$$\equiv \sum_{\underline{k}} \phi_{\underline{k}}(\underline{r}) \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}') G_R(\underline{k}; t-t'). \quad (3-17)$$

Cependant l'équation d'évolution des $a_{\underline{k}}$ donne à partir de (3-15);

$$a_{\underline{k}}(t) = e^{-ie_0(\underline{k})t} a_{\underline{k}}(0), \quad (3-18)$$

soit

$$G_R(\underline{k}; t) = -ie^{-ie_0(\underline{k})t} \langle [a_{\underline{k}}, a_{\underline{k}}^+]_{\epsilon} \rangle \Theta(t)$$

$$= -ie^{-ie_0(\underline{k})t} \Theta(t). \quad (3-19)$$

Par transformée de Fourier, on obtient la fonction de Green générique

$$G(\underline{k}; \omega) = \frac{1}{\omega - e_0(\underline{k})} \quad (3-20)$$

et donc

$$G(\underline{r}, \underline{r}'; \omega) = \sum_{\underline{k}} \frac{\phi_{\underline{k}}(\underline{r}) \phi_{\underline{k}}^*(\underline{r}')}{\omega - e_0(\underline{k})}. \quad (3-21)$$

c) Les systèmes macroscopiques réels (gaz, liquides, électrons dans les métaux, noyaux...) sont en fait constitués de particules en interaction. Or on observe que beaucoup de leurs propriétés peuvent être décrites comme s'ils étaient constitués de particules **presque** indépendantes. Dans le cas des noyaux quelques unes de ces propriétés particulières font l'objet, à cette école, du cours de S. GILES. L'exposé exhaustif, tant du point d'une théorie que des résultats expérimentaux, est donné dans la Réf. 6).

Puisque en réalité les constituants du système ne se déplacent pas de façon totalement indépendante les uns par rapport aux autres, comment ceci peut-il se manifester dans les fonctions de Green ? Les constituants peuvent induire des excitations collectives du système. Ceci implique que les états propres exacts sont des combinaisons linéaires des états de particules simples originaux avec des énergies étalées par rapport aux originales à cause de l'interaction.

L'existence d'une largeur d'étalement Γ , d'autant plus grande que l'interaction est forte, entraîne qu'en moyenne les constituants ne restent qu'un temps fini τ , donné par le principe d'incertitude $\Gamma\tau \sim \hbar$, dans un état

précis. Dans le cas des particules indépendantes $\Gamma \rightarrow \infty$ et τ devient infini (car $\Gamma\tau$ doit rester fini de l'ordre de $\hbar$) : l'expression (3-19) montre bien que la fonction de Green oscille indéfiniment, en complète analogie avec l'exemple de l'oscillateur harmonique du premier paragraphe. Pour le système en interaction nous pouvons donc attendre un comportement en fonction du temps du type

$$G_R(k, t) \sim -iZ_k e^{-ie(k)t - \frac{t}{2\tau(k)}} \theta(t), \quad (3-22)$$

où $\tau(k)$ est la durée de vie de l'état k (cf. l'oscillateur harmonique amorti). Posons

$$W(k) = [2\tau(k)]^{-1}. \quad (3-23)$$

Alors la transformée de Fourier $G(k, \omega)$ prend la forme

$$G_R(k, \omega) \sim \frac{Z_k}{\omega - e(k) + iW(k)}, \quad (3-24)$$

et présente un pôle à $\omega = e(k) - iW(k)$: $W(k)$ étant positif $G_R(k, \omega)$ est analytique dans le demi plan supérieur en ω (comme pour le cas libre où le dénominateur de G_R est $\omega - e_0(k) + i\eta$).

Supposons qu'il n'existe aucune autre contribution à G_R que celles du type pôle simple. Alors d'après (3-11)

$$A(k, \omega) = \frac{1}{\pi} \frac{W(k)Z_k}{(e(k) - \omega)^2 + W^2(k)}. \quad (3-25)$$

$A(k, \omega)$ étant réel et positif (densité d'état), Z_k est aussi positif. De plus intégrant (3-25) sur ω , on obtient

$$\int_{-\infty}^{\infty} A(k, \omega) d\omega = Z_k, \quad (3-26)$$

Cependant on a montré le résultat exact (3-14) et donc on devrait avoir $Z_k = 1$. Cependant il est clair que l'argumentation est incorrecte car l'intégrale de $A(k, \omega)$ reçoit aussi des contributions provenant du comportement de $G(k, \omega)$ non réductible en pôles simples et on peut s'attendre à trouver $Z_k \neq 1$. Un système pour lequel les formes (3-22) et (3-25) sont des bonnes approximations est dit posséder des quasi-particules d'énergie $e(k)$ et durée de vie $\tau(k)$. L'approximation est d'autant meilleure que $W(k)$ est "petit" (devant $e(k)$).

Réécrivons $e(k)$ comme

$$e(k) = \frac{k^2}{2m} + V(k), \quad (3-27)$$

$G(k, \omega)$ a donc des poles de quasiparticules pour

$$\begin{aligned} \omega &= \frac{k^2}{2m} + V(k) - iW(k) \\ &= \frac{k^2}{2m} + \Sigma(k). \end{aligned} \quad (3-28)$$

$\Sigma(k)$ est appelé "opérateur de masse" ou self-énergie (ici indépendante de ω). Le calcul microscopique de cette quantité est donc à la base de l'analyse ultérieure de la fonction de Green selon les approximations (3-22) ou (3-24), que nous aborderons au paragraphe IV.

d) l'opérateur de masse, de façon générale, dépend des deux variables k et ω . Tenant compte de cette dépendance et sans avoir à considérer le calcul explicite de Σ , il est possible de définir des quantités physiques caractéristiques des propriétés du milieu. $\Sigma(k, \omega)$ est introduit généralement en écrivant $G(k, \omega)$ comme :

$$G(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \frac{k^2}{2m} - \Sigma(k, \omega)}. \quad (3-29)$$

Les pôles de $G(k, \omega)$ sont donc solution de l'équation

$$\omega = \frac{k^2}{2m} + \Sigma(k, \omega) \quad (3-30)$$

Il est utile de développer toutes les quantités dans le dénominateur de $G(k, \omega)$ autour de la valeur réelle $e(k)$, solution de l'équation

$$e(k) = \frac{k^2}{2m} + \text{Re } \Sigma(k, e(k)). \quad (3-31)$$

Supposons de plus que la dépendance en ω de $\text{Im } \Sigma(k, \omega)$ est faible de telle sorte que

$$\begin{aligned} \text{Im } \Sigma(k, \omega) &\sim \text{Im } \Sigma(k, e(k)) \\ &\sim -W(k) \end{aligned} \quad (3-32)$$

alors

$$\begin{aligned}\omega - \frac{k^2}{2m} - \Sigma(k, \omega) &= \omega - \frac{k^2}{2m} - \operatorname{Re} \Sigma(k, e(k)) - (\omega - e(k)) \left. \frac{\partial \operatorname{Re} \Sigma}{\partial \omega} \right|_{\omega=e(k)} \\ &\quad + i.W(k) + O((\omega - e(k))^2) \\ &= Z_k^{-1} \{ \omega - e(k) + i Z_k W(k) \} \\ &\quad + O((\omega - e(k))^2)\end{aligned}\tag{3-33}$$

où nous avons défini

$$Z_k = \left[1 - \frac{\partial \operatorname{Re} \Sigma(k, \omega)}{\partial \omega} \right]_{\omega=e(k)}^{-1}.\tag{3-34}$$

On peut donc écrire la forme approchée suivante de la fonction de Green

$$G(k, \omega) \sim \frac{Z_k}{\omega - e(k) + i Z_k W(k)} + G^B(k, \omega).\tag{3-35}$$

Dans $G^B(k, \omega)$ est cachée la partie incohérente de la fonction de Green, c'est à dire celle ne présentant pas de comportement du type oscillatoire amorti en fonction du temps : l'approximation de quasi-particule revient à négliger G^B et à ne prendre en compte que la contribution de pole simple avec son résidu Z_k .

Revenons à l'équation (3-31) donnant $e(k)$. Considérons ω fixé et cherchons la valeur $k_0(\omega)$ telle que

$$\omega = \frac{k_0^2}{2m} + \operatorname{Re} \Sigma(k_0, \omega).\tag{3-36}$$

Faisons l'hypothèse, bien vérifié expérimentalement ⁶⁾, que

$$\operatorname{Re} \Sigma(k_0(\omega), \omega) = V(\omega) = V^0 + a\omega,\tag{3-37}$$

et définissons

$$a = 1 - \frac{m^*}{m},\tag{3-38}$$

alors (3-36) s'écrit

$$\omega = \frac{k_o^2}{2m^*} + \frac{m}{m^*} V^0. \quad (3-39)$$

Pour une dépendance non linéaire de $V(\omega)$ en ω , on définit en général

$$\frac{m^*}{m} = 1 - \frac{dV(\omega)}{d\omega}, \quad (3-40)$$

Ce qui conduit à la vitesse de groupe v_g de la quasiparticule

$$v_g = \frac{k_o}{m^*} = \frac{d\omega}{dk_o}. \quad (3-41)$$

Le libre parcours moyen λ est la distance parcourue par la quasiparticule pendant sa durée de vie τ , soit

$$\begin{aligned} \lambda &= v_g \cdot \tau \\ &= \frac{k_o}{m^*} \cdot 2 \cdot Z_k \cdot \text{Im} \Sigma(k_o(\omega), \omega) \\ &= \frac{k_o}{m_{k_o}} 2 \text{Im} \Sigma(k_o(\omega), \omega). \end{aligned} \quad (3-42)$$

Ici m_{k_o} est tel que

$$\begin{aligned} \frac{m^*}{m} &= \frac{m_{k_o}}{m} \cdot [Z_{k_o}]^{-1} \\ &= \frac{m_{k_o}}{m} \cdot \frac{m_\omega}{m}. \end{aligned} \quad (3-42')$$

On obtient alors les expressions suivantes :

$$\begin{cases} \frac{m_\omega}{m} = \left[1 - \frac{\partial \text{Re} \Sigma(k, \omega)}{\partial \omega} \right] \omega = e(k) \\ \frac{m_k}{m} = \left[1 + \frac{m}{k} \frac{\partial \text{Re} \Sigma(k, \omega)}{\partial k} \right] \omega = e(k). \end{cases} \quad (3-43)$$

On voit donc que pour connaître les propriétés de quasiparticules dans le milieu, caractérisées par la masse effective et le libre parcours moyen, il est nécessaire d'étudier la dépendance en moment k et en énergie ω de l'opérateur de masse. Pour toute approximation de Σ indépendante de ω , $m_{\omega}/m = 1$, et la masse effective de la quasiparticule s'identifie seulement à la masse m_k . Nous reviendrons sur cette particularité aux paragraphes IV et V.

e) Nous allons maintenant dériver en quelques lignes l'équation du mouvement pour la fonction de Green à une particule, qui va nous servir de point de départ pour le calcul microscopique de l'opérateur de masse $\Sigma(k, \omega)$.

Nous considérons un système de particules (fermions ou bosons) interagissant via un potentiel à deux corps $V(r)$. Pour alléger la notation on omet les indices de spin (isospin) affectant les opérateurs de champ $\psi(\underline{r})$ et $\psi^+(\underline{r})$ et sans perdre en généralité le potentiel peut être pris comme un scalaire.

Nous avons donc

$$[\psi(\underline{r}), \psi^+(\underline{r}')]_e = \delta^{(3)}(\underline{r} - \underline{r}'), \quad (3-44)$$

et le Hamiltonien du système s'écrit

$$H = \int d^3r \psi^+(\underline{r}) h_0(\underline{r}) \psi(\underline{r}) + \frac{1}{2} \int d^3r d^3r' \psi^+(\underline{r}) \psi^+(\underline{r}') V(\underline{r} - \underline{r}') \psi(\underline{r}') \psi(\underline{r}). \quad (3-45)$$

Ici $h_0(\underline{r})$ est une densité hamiltonienne à un corps pour les particules pouvant se déplacer dans un potentiel externe scalaire $U(\underline{r})$ et/ou vecteur $\underline{A}(\underline{r})$.

En évaluant les commutateurs $[\psi, H]$ et $[\psi^+, H]$ avec la relation (3-44) on obtient les équations du mouvement pour $\psi(\underline{r}, -i\tau)$ et $\psi^+(\underline{r}, -i\tau)$

$$\begin{cases} -\frac{\partial \psi}{\partial \tau} = e^{H\tau} [\psi(\underline{r}), H] e^{-H\tau} = h_0(\underline{r}) \psi(\underline{r}, -i\tau) + \int d^3r' \psi^+(\underline{r}') V(\underline{r} - \underline{r}') \psi(\underline{r}', -i\tau) \psi(\underline{r}, -i\tau) \\ \frac{\partial \psi^+}{\partial \tau} = h_0(\underline{r}) \psi^+(\underline{r}, -i\tau) + \int d^3r' \psi^+(\underline{r}') V(\underline{r} - \underline{r}') \psi(\underline{r}', -i\tau) \psi^+(\underline{r}, -i\tau) \end{cases} \quad (3-46)$$

Considérons la fonction de Green thermique définie précédemment, soit

$$G(\underline{r}\tau; \underline{r}'\tau') = - \langle \psi(\underline{r}, -i\tau) \psi(\underline{r}', -i\tau') \rangle \Theta(\tau - \tau') \\ + \varepsilon \langle \psi(\underline{r}', -i\tau') \psi(\underline{r}, -i\tau) \rangle \Theta(\tau' - \tau),$$

et en la dérivant par rapport à τ en tenant compte de (3-46) on obtient (la différentiation des fonctions Θ conduit aux δ de Dirac)

$$\frac{\partial}{\partial \tau} G(\underline{r}\tau; \underline{r}'\tau') = - \langle [\psi(\underline{r}, -i\tau), \psi^+(\underline{r}', -i\tau')] \rangle \delta(\tau - \tau') \\ + h_0(\underline{r}) \langle T_0 \{ \psi(\underline{r}, -i\tau) \psi^+(\underline{r}', -i\tau') \} \rangle \quad (3-47)$$

$$+ \int d^3 r'' V(\underline{r} - \underline{r}'') \langle T_0 \{ \psi(\underline{r}, -i\tau) \psi(\underline{r}'', -i\tau) \psi^+(\underline{r}', -i\tau) \psi^+(\underline{r}'', -i\tau_+) \} \rangle$$

Dans cette expression, lors du positionnement des opérateurs indiqués symboliquement par T_0 , celui avec τ_+ doit être positionné avant ceux avec τ (l'ordre pour les deux opérateurs au temps τ est sans importance puisque ceux-ci commutent ou anti-commutent). Nous pouvons réécrire (3-47) en introduisant la fonction de Green à deux particules G_2

$$\left[\frac{\partial}{\partial \tau} + h_0(\underline{r}) \right] G(\underline{r}\tau; \underline{r}'\tau') = - \delta(\underline{r} - \underline{r}') \delta(\tau - \tau') \\ + \int d^3 r'' V(\underline{r} - \underline{r}'') G_2(\underline{r}\tau, \underline{r}''\tau; \underline{r}'\tau', \underline{r}''\tau_+). \quad (3-48)$$

A première vue cette équation ne semble pas très utile puisque G_2 n'est pas connu. On peut continuer et dériver une équation pour G_2 qui va faire intervenir des fonctions de Green d'ordre plus élevé. La suite d'équation est finie ou infinie suivant que le nombre de particules du système est fini ou infini. En pratique, on cherche à résoudre (3-48) par des approximations successives que nous allons développer au paragraphe IV.

6) il est utile de voir que la fonction de Green $G(\underline{r}\tau; \underline{r}'\tau')$ permet d'avoir accès aussi aux **propriétés macroscopiques** du système. Pour cela considérons le potentiel thermodynamique Ω défini comme

$$\Omega = kT \ln Z \quad (3-49)$$

Pour l'ensemble grand canonique la fonction de partition Z a été définie en (1-14). Des quantités macroscopiques telles que l'entropie S et la chaleur spécifique C_V s'obtiennent à partir de Ω

$$\begin{aligned} S &= - (\partial \Omega / \partial T)_{V, \mu} \\ C_V &= T (\partial \Omega / \partial T)_{V, \mu} \end{aligned} \quad (3-50)$$

Nous voulons relier Ω à la fonction de Green $G(\underline{r}\tau; \underline{r}'\tau')$. Pour cela nous allons considérer le Hamiltonien $H(\lambda)$ tel que

$$H(\lambda) = H_0 + \lambda V, \quad (3-51)$$

avec $0 < \lambda \leq 1$. Le problème de départ correspond à $\lambda=1$.

Nous avons

$$\Omega(\lambda) = - kT \ln [\text{Tr} e^{-\beta H(\lambda)}] \quad (3-52)$$

et donc

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Omega}{\partial \lambda} &= Z^{-1} \text{Tr} \{ e^{-\beta H(\lambda)} \beta V \} \\ &= \beta \langle V \rangle. \end{aligned} \quad (3-53)$$

Dans $\langle V \rangle$ quatre opérateurs de champ interviennent et donc la fonction de Green G_2 . Pour relier $\langle V \rangle$ à G , nous pouvons utiliser (3-47) : le terme impliquant quatre opérateurs de champ n'est autre que $2\lambda \langle V \rangle$ si nous faisons $\underline{r}=\underline{r}'$ et $\tau' \rightarrow \tau$ par valeur positive. Donc

$$\lambda \langle V \rangle = - \lim_{\tau' \rightarrow \tau+} \frac{1}{2} \int d^3r \lim_{\underline{r}' \rightarrow \underline{r}} \left\{ \left[\frac{\partial}{\partial \tau} + h_0(\underline{r}) \right] G^{(\lambda)}(\underline{r}\tau; \underline{r}'\tau') \right\} \quad (3-54)$$

En intégrant (3-53) sur λ de 0 à 1 on obtient

$$\begin{aligned} \Omega(1) - \Omega(0) &= - \frac{\beta}{2} \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \int d^3r \left\{ \left[\frac{\partial}{\partial \tau} + h_0(\underline{r}) \right] G^{(\lambda)}(\underline{r}\tau; \underline{r}'\tau') \right\} \\ &\quad \begin{matrix} \underline{r}' = \underline{r} \\ \tau' = \tau+ \end{matrix} \end{aligned} \quad (3-55)$$

Ici $\Omega(o)$ est le potentiel thermodynamique pour le système sans interaction, en général calculable sans difficultés.

L'intérêt de l'étude de $G(\underline{r}\tau; \underline{r}'\tau')$ est donc multiple en raison des aspects microscopiques et macroscopiques du système qu'elle permet d'aborder.

IV - APPROXIMATIONS GENERALES

Dans ce paragraphe nous allons dériver et discuter les approximations d'ordre général pour lesquelles il est possible en principe de résoudre l'équation (3-48). On obtiendra ainsi une approche systématique du calcul microscopique de l'opérateur de masse qui permettra d'explorer quantitativement le bien fondé des arguments qualitatifs précédents.

a) Considérons tout d'abord un système de particules indépendantes caractérisé par la densité hamiltonienne à un corps $h_o(\underline{r})$ et plongé dans un champ extérieur à un corps $U(\underline{r}, \tau)$. Dénotons la fonction de Green correspondante $G(\underline{r}_1\tau_1; \underline{r}_2\tau_2; U)$. Elle obéit à l'équation

$$\left[\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h_o(\underline{r}_1) + U(\underline{r}_1, \tau_1) \right] G(\underline{r}_1\tau_1; \underline{r}_2\tau_2; U) = -\delta(\tau_1 - \tau_2)\delta(\underline{r}_1 - \underline{r}_2) \quad (4-1)$$

avec $h_o(\underline{r}) = \left[-\frac{1}{2m} \nabla^2 - \mu + U_o(\underline{r}) \right]$. Supposons connue la fonction de Green G_o du système avec $U = 0$. Nous allons alléger les notations en écrivant dorénavant

$$\begin{aligned} G(1,2;U) &\equiv G(\underline{r}_1\tau_1; \underline{r}_2\tau_2; U) \\ \delta(1,2) &\equiv \delta(\tau_1 - \tau_2)\delta(\underline{r}_1 - \underline{r}_2) \\ &\dots\dots \end{aligned}$$

Donc le système d'équations

$$\begin{cases} \left[\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h_o(1) + U(1) \right] G(1,2;U) = -\delta(1,2) \\ \left[\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h_o(1) \right] G_o(1,2) = -\delta(1,2) \end{cases} \quad (4-2)$$

doit être résolu pour $G(1,2;U)$, connaissant $G_o(1,2)$, et pour $\tau_1 \geq 0$, $\tau_2 \leq \beta$ avec la condition aux bornes déduite de (2-16)

$$G(0,2;U) = -\varepsilon G(\beta,2;U). \quad (4-3)$$

La solution pour $G(1,2;U)$ s'écrit grâce à $G_0(1,2)$ sous la forme intégrale

$$G(1,2;U) = G_0(1,2) + \int_0^\beta d3 G_0(1,3)U(3)G(3,2;U) \quad (4-4)$$

avec $\int_0^\beta d3 = \int_0^\beta d\tau_3 \int d^3r_3$. On voit que, grâce à la propriété (2-16) satisfaite par G_0 et aux limites d'intégration sur τ_3 , (4-3) est automatiquement satisfait.

Nous allons chercher une solution de (4-4) sous la forme

$$G(1,2;U) = \sum_{n=0}^{\infty} G^{(n)}(1,2;U) \quad (4-5)$$

où l'indice n compte le nombre d'interaction U présent dans $G^{(n)}$. Bien sûr $G^{(0)} = G_0(1,2)$. En reportant dans (4-4) et en identifiant les termes contenant le même nombre d'interaction U on obtient

$$\begin{aligned} G^{(n+1)}(1,2;U) &= \int_0^\beta d3 G_0(1,3) U(3) G^{(n)}(3,2;U) \\ &= \int_0^\beta d3 \int_0^\beta d4 \dots \int_0^\beta d(n+2) G_0(1,3)U(3)G_0(3,4)U(4) \\ &\quad \dots U(n+2)G_0(n+2,2). \end{aligned} \quad (4-6)$$

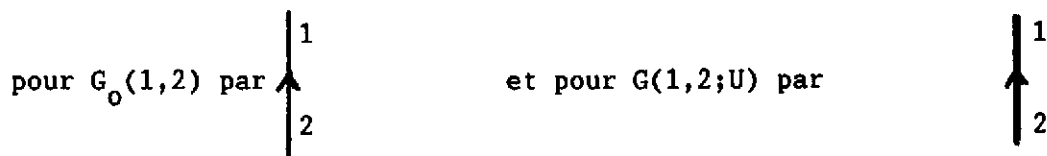
Soit

$$\begin{aligned} G(1,2;U) &= G_0(1,2) + \int_0^\beta d1' G_0(1,1')U(1')G_0(1',2) \\ &\quad + \int_0^\beta d1' \int_0^\beta d2' G_0(1,1')U(1')G_0(1',2')U(2')G_0(2',2) \\ &\quad + \dots \end{aligned} \quad (4-7)$$

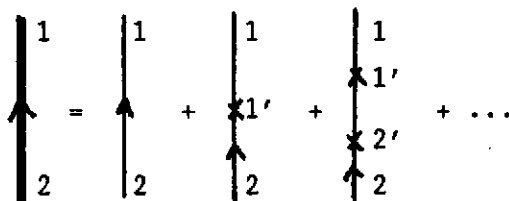
Revenons à la définition de $G_0(1,2)$.

$$\begin{aligned} G_0(1,2) &= - \langle \psi(1)\psi^+(2) \rangle \theta(\tau_1 - \tau_2) \\ &\quad + \varepsilon \langle \psi^+(2)\psi(1) \rangle \theta(\tau_2 - \tau_1) \end{aligned}$$

Dans le premier terme $\psi^+(2)$ crée une particule en "2" et $\psi(1)$ détruit une particule en 1 : ce terme décrit la propagation d'une particule de "2" vers "1". Dans le deuxième terme nous avons destruction d'une particule en "1" ou création d'un trou en "1" et création d'une particule en "2" ou destruction d'un trou en "2" : Ce terme décrit la propagation d'un trou de "1" vers "2". Tenant compte de cet aspect de propagation nous allons représenter le résultat (4-7) sous forme de diagrammes (i.e. de dessin). Tout d'abord pour $\tau_1 > \tau_2$ nous représentons la propagation d'une particule de 2 vers 1



Nous convenons de représenter l'action du potentiel U sur une particule par une croix sur la ligne de cette particule. Ainsi la représentation "hiéroglyphique" de (4-7) sera



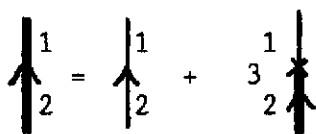
avec la convention qu'à chaque croix l'intégration sur la variable correspondante est à effectuer.

On peut maintenant ne faire que des dessins et obtenir les expressions algébriques correspondantes simplement de la façon suivante

i) pour chaque ligne orientée du vertex b vers a introduire un facteur $G_0(a,b)$.

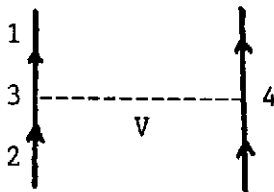
ii) pour chaque vertex n où il y a une croix introduire un facteur $U(n)$ et intégrer sur les variables " n ".

L'équation complète (4-4) prend une forme picturale simple



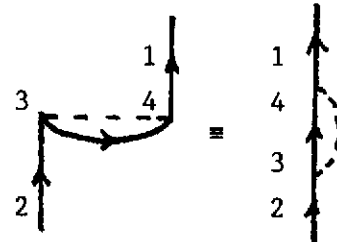
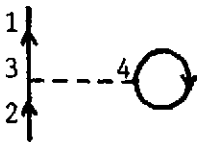
L'étape suivante consiste à étendre ces dessins au cas de particules en interaction mutuelle.

b) Revenons au hamiltonien total écrit en (3-45). Dans cette expression V décrit la diffusion de deux particules l'une en $\underline{r}$ l'autre en $\underline{r}'$. Nous noterons maintenant $G_0(1,2)$ la fonction de Green en rapport avec H_0 (notée $G(1,2;U)$ dans le paragraphe précédent). V relie donc 2 particules : une particule peut voyager de "2" vers "3" et là être diffusée par son interaction avec une autre particule du milieu se trouvant en "4" par exemple. Nous convenons de représenter cette interaction entre les particules en "3" et en "4" par une ligne pointillée, ce qui donne

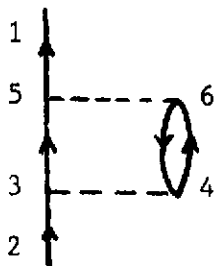


Cependant la fonction de Green décrit la propagation globale de la particule supplémentaire entre un état initial et un état final identique et donc la particule excitée doit retourner à son état de départ. Ceci ne peut s'obtenir que si

- i) la ligne particule en "4" se boucle sur elle-même (ou échange sa place)
- ii) ou au moins une deuxième diffusion à lieu qui ramène la particule "4" à son état initial.



Cas i) du premier ordre en V



Un cas ii) possible (parmi d'autres) du deuxième ordre en V .

Avec les règles d'interprétation précédentes il est facile d'écrire la contribution du cas ci-dessus :

$$\int d3 \int d4 \int d5 \int d6 \quad G_0(1,5)G_0(5,3)G_0(3,2)G_0(4,6) G_0(6,4) \\ V(3,4) V(5,6)$$

avec $V(1,2) = V(r_1 - r_2) \delta(\tau_1 - \tau_2)$: la fonction δ traduit l'action instantanée de V .

Revenons à l'équation différentielle de $G(1,1')$. Avec les notations abrégées elle s'écrit :

$$\left[\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h_0(1) \right] G(1,1') = - \delta(1,1') + \int d2 V(1,2) G_2(12;1'2'). \quad (4-8)$$

On voit qu'elle fait intervenir un facteur V et si nous voulons une équation pour $G(1,1')$ qui ne fasse intervenir que ce seul facteur qu'elle est donc la forme la plus simple de G_2 à l'ordre zéro en V ? Il nous faut donc trouver G_2 pour un système de particules indépendantes décrit par la fonction de Green à une particule. Notons qu'en général

$$G_n^{(0)}(1,2,\dots,n;1',2',\dots,n') \Big|_{\tau_1=0} = - \varepsilon G_n^{(0)}(1,2,\dots,n|1',2',\dots,n') \Big|_{\tau_1=\beta} \quad (4-9)$$

A partir des équations du mouvement pour les champs on obtient sans difficultés l'équation satisfaite par $G_n^{(0)}$. Elle s'écrit

$$\left[\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h_0(1) \right] G_n^{(0)}(1,2,\dots,n;1',2',\dots,n') = - \sum_{i'=1}^n (-\varepsilon)^{i'-1} \delta(1,i') \times G_{n-1}^0(2,3,\dots,n;1',2',\dots,i'-1,i'+1,\dots,n'), \quad (4-10)$$

où le membre de droite vient de la différentiation des fonctions θ contenues dans la définition de $G_n^{(0)}$.

Cette équation peut s'intégrer à l'aide de la fonction de Green à une particule G_0 , la condition aux limites (4-9) étant ainsi automatiquement satisfaite.

On obtient

$$G_n^{(0)}(1,2,\dots,n;1',2',\dots,n') = \sum_{i'=1}^n (-\varepsilon)^{i'-1} G_0(1,i') G_{n-1}^{(0)}(2,3,\dots,n;1',2',\dots,i'-1,i'+1,\dots,n').$$

Dans le cas particulier $n = 2$ ($G_1^{(0)} \equiv G_0$) cela s'écrit :

(4-11)

$$G_2(12;1'2') = G_0(1,1')G_0(2,2') - \epsilon G_0(1,2')G_0(2,1') \quad (4-12)$$

On note que même dans le cas où il n'y a pas d'interaction à 2-corps V , G_2 n'est pas nul. Reportant (4-12) dans (4-8) on peut écrire

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h_0(1) \right] G(1,1') &= \delta(1,1') \\ &+ \int d2 V(1,2) \left[G_0(1,1')G_0(2,2) - \epsilon G_0(1,2)G_0(2,1') \right] \\ &+ \text{termes d'ordre plus élevé en } V. \end{aligned} \quad (4-13)$$

c) Réécrivons cette équation en introduisant la quantité

$$\Sigma(1,2) = \delta(1,2) \int d2' V(1,2')G_0(2',2') - \epsilon V(1,2)G_0(1,2). \quad (4-14)$$

Soit

$$\begin{aligned} \left[\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h_0(1) \right] G(1,1') &= - \delta(1,1') + \int d2 \Sigma(1,2) G_0(2,1') \\ &+ \text{termes d'ordre plus élevé en } V. \end{aligned} \quad (4-13')$$

Comme nous allons le voir Σ est bien la "self-énergie" au premier ordre en V .

A l'aide de la fonction de Green $G_0(1,1')$, solution de

$$\left[\frac{\partial}{\partial \tau_1} + h_0(1) \right] G_0(1,1') = - \delta(1,1') \quad (4-15)$$

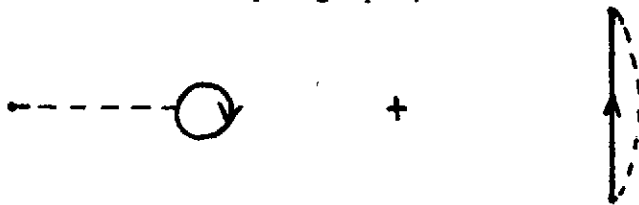
on peut écrire $G(1,1')$ sous la forme

$$\begin{aligned} G(1,1') &= G_0(1,1') + \int d2 d2' G_0(1,2) \Sigma(2,2') G_0(2';1') \\ &+ \text{termes d'ordre plus élevé en } V. \end{aligned} \quad (4-16)$$

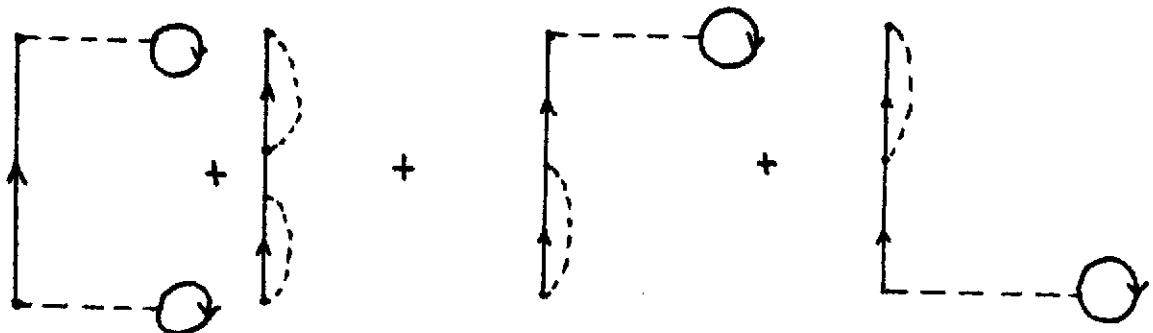
Nous pouvons à nouveau dessiner symboliquement cette relation comme suit :

$$\begin{array}{c} 1 \\ \uparrow \\ \vdots \\ \uparrow \\ 1' \end{array} = \begin{array}{c} 1 \\ \uparrow \\ \vdots \\ \uparrow \\ 1' \end{array} + \begin{array}{c} 1 \\ \uparrow \\ \textcircled{\Sigma} \\ \uparrow \\ 1' \end{array} + \dots$$

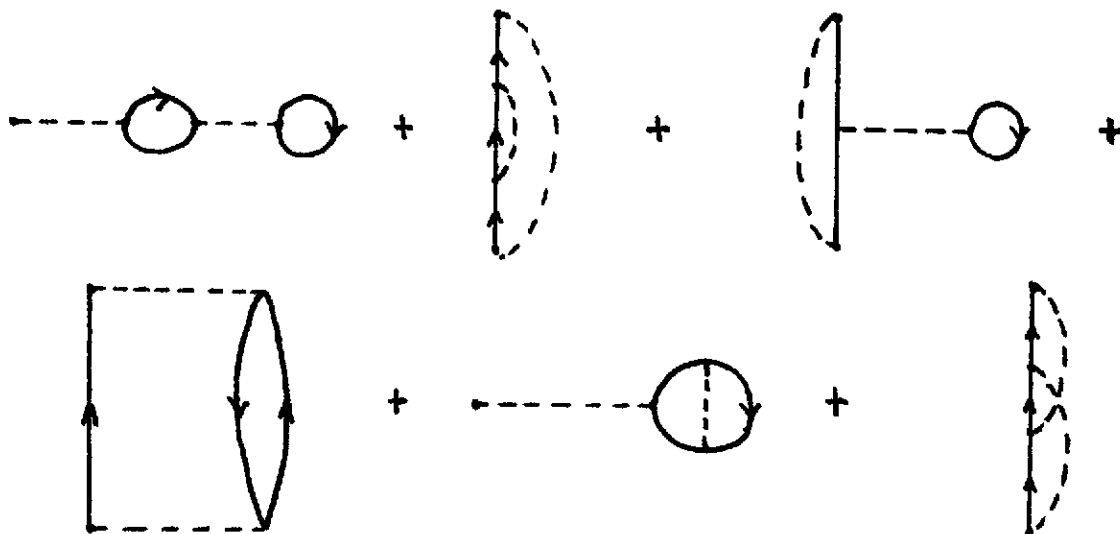
Sous cette forme on voit immédiatement qu'on peut regrouper tous les termes d'ordre plus élevé en V qui représentent juste une itération du terme de base en Σ , comme dans le cas simple précédent avec un potentiel externe à un corps. On obtient ainsi une équation intégrale pour $G(1,1')$, connue sous le nom d'équation de Dyson. Cependant avant de l'écrire, il convient de faire la distinction entre les contributions à la self-énergie qui sont générées automatiquement par la répétition indiquée ci-dessus (contributions inappropriées) et celles qui ne le sont pas (contributions appropriées). Pour illustrer cette distinction reprenons l'expression (4-14) de $\Sigma(1,2)$, du premier ordre en V , qui se représente comme la somme des deux diagrammes suivants (cf. le cas i) au début de ce paragraphe) :



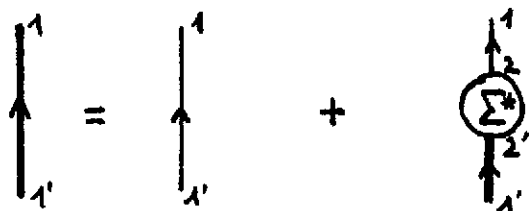
Au deuxième ordre en V , nous avons déjà indiqué une contribution à Σ en dessinant un cas ii) possible. Il y a 10 contributions au total, du deuxième ordre en V , que l'on obtient en développant explicitement l'équation pour G_2 . A cet ordre là, impliquant deux interactions V , on peut encore dessiner ces contributions par simple inspection, sur la base des deux figures ci-dessus. On obtient tout d'abord 4 contributions à Σ :



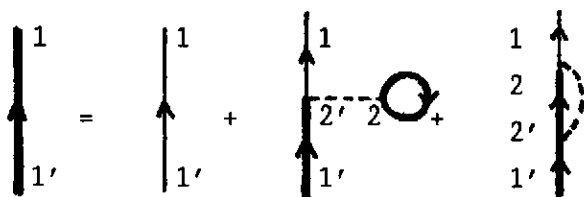
qui apparaissent bien comme une répétition du terme de base de la contribution du premier ordre en V à Σ . On obtient de plus 6 autres contributions :



qui ne peuvent pas être générées itérativement à partir des deux diagrammes à une interaction V de départ : ces contributions à la self-énergie sont irréductibles ou appropriées. On voit en effet que contrairement aux quatre premières, il n'est pas possible de les réduire aux deux formes simples initiales en coupant une ligne particule. Nous noterons par Σ^* la self-énergie battie à partir des contributions appropriées seulement. Au premier ordre en V , Σ^* se confond avec Σ . Cette distinction entre contributions appropriées et inappropriées étant faite, il est clair que l'équation intégrale pour $G(1,1')$ ne doit faire intervenir que Σ^* et se représente sous la forme



Si nous ne prenons en compte que le premier ordre en V (cf. eq. 4-14) pour la self-énergie, on obtient la forme particulière suivante :



Cette équation pour la fonction de Green est connue sous le nom d'approximation self-consistante de Hartree-Fock.

Nous verrons plus loin le contenu physique de cette équation et la nature de la self-consistance invoquée.

Dans l'espace (k, ω) l'équation intégrale de Dyson s'écrit

$$G(k, \omega) = G_0(k, \omega) + G_0(k, \omega) \Sigma^*(k, \omega) G(k, \omega) \quad (4-17)$$

dont la solution formelle est

$$G(k, \omega) = [G_0^{-1}(k, \omega) - \Sigma^*(k, \omega)], \quad (4-18)$$

soit en tenant compte de (3-20)

$$G(k, \omega) = \frac{1}{\omega - e_0(k) - \Sigma^*(k, \omega)} \quad (4-19)$$

Nous avons maintenant une première approximation microscopique à l'opérateur de masse Σ : l'approximation Hartree-Fock (HF) self-consistante. Regardons de plus près son contenu dans le cas d'un système dans un potentiel externe à un corps et d'un potentiel d'interaction indépendants du spin. Reintroduisant les indices de spin, et pour le cas des fermions, on aura

$$\begin{aligned} H_0 &= \int d^3r \psi_{\alpha}^+(\underline{r}) \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + U(\underline{r}) \right] \psi_{\alpha}(\underline{r}) \\ H_1 &= \frac{1}{2} \int d^3r \int d^3r' \psi_{\alpha}^+(\underline{r}) \psi_{\beta}^+(\underline{r}') V(\underline{r}-\underline{r}') \psi_{\beta}(\underline{r}') \psi_{\alpha}(\underline{r}). \end{aligned} \quad (4-20)$$

Soit $\{\phi_j^0\}$ la suite complète des fonctions propres de H_0

$$H_0 \phi_j^0(\underline{r}) = \left[-\frac{\nabla^2}{2m} + U(\underline{r}) \right] \phi_j^0(\underline{r}) = e_j^0 \phi_j^0(\underline{r}). \quad (4-21)$$

Avec nos conventions et en temps réel t , nous avons vu que

$$G_0(\underline{r}t; \underline{r}'t') = - \sum_j \phi_j^0(\underline{r}) \phi_j^{0*}(\underline{r}') e^{-ie_j^0(t-t')} \quad (4-22)$$

$$\cdot \left[\theta(t-t') \langle \Phi_0 | a_j a_j^+ | \Phi_0 \rangle - \theta(t'-t) \langle \Phi_0 | a_j^+ a_j | \Phi_0 \rangle \right]$$

où $|\Phi_0\rangle$ est l'état fondamental du système non interagissant.

Notons

$$\begin{cases} \langle \Phi_0 | a_j a_j^+ | \Phi_0 \rangle = n_j^> \\ \langle \Phi_0 | a_j^+ a_j | \Phi_0 \rangle = n_j^<, \end{cases} \quad (4-23)$$

et introduisons la représentation intégrale de la fonction saut

$$\Theta(t) = - \lim_{\delta \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{e^{-i\omega t}}{\omega + i\delta}. \quad (4-24)$$

La fonction de Green G_0 s'écrit alors

$$G_0(\underline{r}, \underline{r}'; \omega) = \sum_j \phi_j^0(\underline{r}) \phi_j^{0*}(\underline{r}') \left[\frac{n_j^>}{\omega - e_j^0 + i\delta} + \frac{n_j^<}{\omega - e_j^0 - i\delta} \right]. \quad (4-25)$$

L'équation intégrale pour $G(\underline{r}, \underline{r}'; \omega)$ se lit d'après les diagrammes précédents (4-17)

$$G(\underline{r}, \underline{r}'; \omega) = G_0(\underline{r}, \underline{r}'; \omega) + \int d^3r_1 d^3r'_1 G_0(\underline{r}, \underline{r}_1; \omega) \Sigma(\underline{r}_1, \underline{r}'_1) G(\underline{r}'_1, \underline{r}; \omega) \quad (4-26)$$

avec

$$\begin{aligned} \Sigma(\underline{r}_1, \underline{r}'_1) = & (2s+1) \delta(\underline{r}_1 - \underline{r}'_1) \int d^3r_2 V(\underline{r}_1 - \underline{r}_2) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega\delta} G(\underline{r}_1, \underline{r}_2; \omega) \\ & - V(\underline{r}_1 - \underline{r}'_1) \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega\delta} G(\underline{r}_1, \underline{r}'_1; \omega). \end{aligned} \quad (4-27)$$

Ici $(2s+1)$ est la dégénérescence de spin. On voit que dans l'approximation HF (4-27), Σ est indépendant de ω et réel pur : les quasi-particules ont une durée de vie infinie et se comportent donc comme des particules libres de masse effective $\frac{m^*}{m}$ déterminée uniquement par la masse "k" définie en (3-43). On peut donc écrire $G(\underline{r}, \underline{r}'; \omega)$ sous une forme équivalente à l'expression (4-25) de G_0 , soit

$$G(\underline{r}, \underline{r}'; \omega) = \sum_j \phi_j(\underline{r}) \phi_j^*(\underline{r}') \left[\frac{n_j^>}{\omega - e_j + i\delta} + \frac{n_j^<}{\omega - e_j - i\delta} \right], \quad (4-28)$$

où les inconnues sont les $\phi_j(\underline{r})$ et les énergies e_j .

Introduisons l'opérateur L_1 tel que :

$$\begin{aligned} L_1 &= -\omega - \frac{\nabla_1^2}{2m} + U(r_1) \\ &= -\omega + H_0. \end{aligned} \quad (4-29)$$

Alors

$$L_1 G_0(r_1, r'_1; \omega) = -\delta(r_1 - r'). \quad (4-30)$$

Appliquons L_1 sur $G(r, r'; \omega)$ défini en (4-28) et obéissant à (4-26). En utilisant (4-30) on obtient une équation aux valeurs propres pour $\phi_j(r_1)$ et e_j ,

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + U(r_1) \right] \phi_j(r_1) + \int d^3r_2 \Sigma(r_1, r_2) \phi_j(r_2) = e_j \phi_j(r_2). \quad (4-31)$$

On voit que la self-énergie agit comme un potentiel non local. De plus

- i) Σ est hermitique : $\{\phi_j\}$ forme une suite orthonormale d'états propres
- ii) Σ est composé de 2 termes : un terme direct local (terme de Hartree) un terme non local d'échange (terme de Fock)
- iii) La nature de l'auto-consistance est apparente d'après (4-27), (4-28) et (4-31) : Σ s'obtient à partir des $\phi_j(r)$, mais à leur tour les $\phi_j(r)$ s'obtiennent à partir de Σ .

d) Ayant obtenu une première approximation générale pour l'opérateur de masse, nous allons en discuter son domaine d'application et voir ainsi dans quelles conditions et pour quels systèmes il est nécessaire de rechercher une évaluation plus élaborée de Σ .

L'équation intégrale pour la fonction de Green G fait intervenir la fonction de Green à 2 particules G_2 que nous avons écrite en termes de G seulement alors que l'expression complète de G_2 est :

$$G_2(1,2;1'2') = G(1,1')G(2,2') - \epsilon G(1,2')G(2,1') + G_c(12;1'2') \quad (4-32)$$

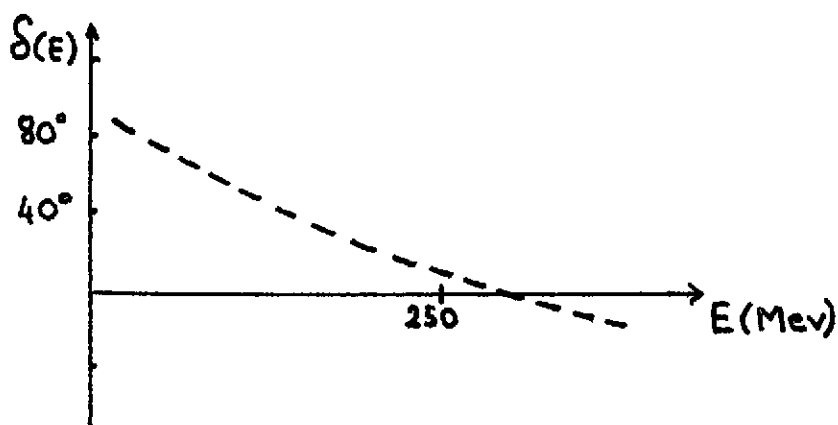
Ici les deux premiers termes du membre de droite représentent la partie non corrélée tandis que G_c représente la partie corrélée que nous avons négligée. Ces corrélations entre les particules peuvent raisonnablement être négligées si la distance moyenne entre 2 particules est beaucoup plus grande que la portée a du potentiel d'interaction. Si ρ est la densité du milieu, la distance moyenne entre 2 particules est de l'ordre de $\rho^{-1/3}$ et donc la condition de non prise en compte des corrélations serait

$$\rho^{-1/3} \gg a$$

$$\text{ou } \rho^{1/3} a \ll 1$$

(4-33)

En chiffre, pour un système nucléaire, le pion détermine la longue portée de l'interaction entre nucléons et donc $a^{-1} = m_{\pi} = 140 \text{ MeV} = 0.7 \text{ fm}^{-1}$; la condition serait donc $\rho \ll 0.34 \text{ fm}^{-3}$. La densité moyenne à l'intérieur des noyaux lourds est de l'ordre de 0.17 fm^{-3} et il semblerait à première vue que l'approximation HF devrait être satisfaisante pour décrire les propriétés statiques des noyaux. Ceci est effectivement le cas, mais c'est seulement après un examen plus approfondi qu'il est possible de répondre affirmativement. En effet un problème majeur se pose lorsqu'on examine de plus près l'interaction nucléon-nucléon, à travers les résultats des déphasages libres dans l'onde 1S_0 ;



que nous avons représenté schématiquement dans la figure ci-dessus. Le changement de signe à $E_{\text{lab}} \sim 250 \text{ MeV}$ indique que l'interaction N-N est fortement répulsive à courte portée et ce comportement est bien représenté par un coeur dur de rayon c voisin de 0.5 fm , suivi d'une forme attractive du type Yukawa,

$$V(r) = \begin{cases} \infty & r < c \\ V_0 e^{-(m_{\pi} r)} / (m_{\pi} r) & r \geq c. \end{cases} \quad (4-34)$$

Pour un tel potentiel, les éléments de matrice de l'interaction ne sont pas finis et il est donc nécessaire de savoir traiter les corrélations de courte portée conduisant à la définition d'une interaction effective finie utilisable dans une approche HF.

D'un autre côté si les forces sont de longue portée, la relation (4-33) indique que, si l'on considère le système pour des densités croissantes, alors il devient nécessaire d'aller au-delà de l'approximation HF standard. Ceci peut

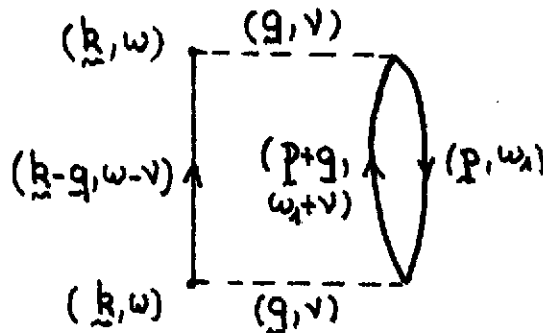
être envisagé à travers les resommations (RPA) d'une suite de diagrammes particuliers contribuant à $\Sigma(k, \omega)$. C'est le cas du potentiel à longue portée de Coulomb pour le gaz d'électron, tandis que le gaz d'Hélium possède essentiellement des corrélations de courte portée (le potentiel de Lenard Jones est pratiquement un coeur dur). Le gaz de nucléon est difficile à traiter car le potentiel nucléon-nucléon a à la fois les caractéristiques de courte et longue portée.

V - RESOMMATIONS PARTICULIERES, D'ORDRE INFINI EN V, POUR L'OPERATEUR DE MASSE

Nous avons vu un exemple de resommation d'ordre infini en nombre d'interaction V donné par l'équation de Dyson. Cette resommation est de caractère purement géométrique. Nous allons examiner maintenant d'autres types de sommations imposées par des considérations physiques.

a) Pourquoi sommer les diagrammes en anneaux souvent mentionnés au cours de cette école (cours de M. Ericsson et de J. Delorme) ?

Considérons le diagramme approprié non-réductible du 2ème ordre en V déjà rencontré et contribuant à la self-énergie Σ . Soit Σ_2^r cette contribution



Pour une interaction scalaire (sans étiquette de spin) d'après les conventions du paragraphe III, nous obtenons facilement que Σ_2^r est tel que

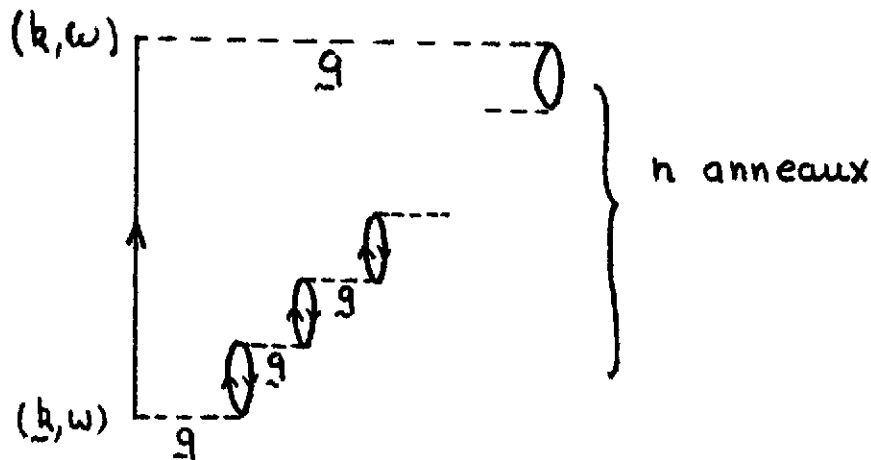
$$\begin{aligned} \Sigma_2^r &\sim \int d\omega_1 \int d\nu \int d^3p \int d^3q [V(q)]^2 G_0(p, \omega_1) \\ &\quad \cdot G_0(p+q, \omega_1+\nu) G_0(k-q, \omega-\nu). \end{aligned} \quad (5-1)$$

Ici $V(q)$ est la transformée de Fourier du potentiel d'interaction

$$V(q) = \int d^3x V(x) e^{-iq \cdot x}. \quad (5-2)$$

Pour le gaz de Coulomb, $V(q) = \frac{e^2}{2q}$, et l'intégrale en (5-1) diverge car elle se comporte en $\int d^3q/q^4$ (la limite $q \rightarrow \infty$ des 3 facteurs G_0 est régulière). Pour un potentiel de portée finie m_π^{-1} du type Yukawa l'intégrale n'est plus divergente, mais la contribution est maintenant dominée par les valeurs de q inférieure ou égale à m_π et c'est aussi la partie de longue portée du potentiel qui rend cette contribution importante.

La situation devient apparemment encore plus catastrophique si on considère des contributions d'ordre plus élevé dans le nombre d'anneaux présents. Soit en effet la contribution suivante



pour laquelle nous aurons une intégrale du type $\int d^3q [V(q)]^n \sim \int \frac{d^3q}{q^{2n}}$ donc encore plus divergente à $q \rightarrow \infty$.

Cependant si nous considérons la somme infinie de tous ces diagrammes en anneaux, alors nous formons une progression géométrique formellement sommable et la somme est finie!

Pour voir ceci définissons

$$\pi^0(q, \nu) = N \int d\omega_1 \int d^3p \ G_0(p, \omega_1) G_0(p+q, \omega+\nu), \quad (5-3)$$

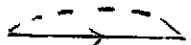
et introduisons un vertex effectif d'interaction tel que :

$$\text{---}\overline{\text{---}}\text{---}(q, \nu) = \text{---}\overline{\text{---}}\text{---} + \begin{matrix} (q, \nu) \\ \text{---}\overline{\text{---}}\text{---} \\ \text{---}\overline{\text{---}}\text{---} \end{matrix} + \dots$$

Soit

$$V_r(q, \nu) = V(q) + V(q) \pi^0(q, \nu) V(q) + \dots \quad (5-4)$$

$$= \frac{V(q)}{1 - V(q) \pi^0(q, v)}.$$

Pour évaluer la contribution totale à Σ_2^r , nous devons soustraire la contribution $V(q)$ seule car elle est déjà présente dans le terme HF (c'est ).

On aura donc

$$\begin{aligned} \Sigma_{2, \text{total}}^r(k, \omega) &\sim \int dv \int d^3q [V_r(q, v) - V(q)] G_0(k-q, \omega - v) \\ &\sim \int dv \int d^3q \frac{[V(q)]^2 \pi^0(q, v)}{1 - V(q) \pi^0(q, v)} G_0(k-q, \omega - v). \end{aligned} \quad (5-5)$$

L'intégrale sur q se comporte comme $\int \frac{q^2 dq}{q^4} \frac{q^2}{q^2 - \alpha(q)}$.

Considérant $\pi^0(q, v)$ on montre³⁾ que la limite $q \rightarrow \infty$ de $\alpha(q)$ est une constante pour les valeurs physiques de v et donc la divergence est levée.

Pour un potentiel de portée finie, c'est la comparaison entre le premier terme de la série donné par $V(q)$ et la somme complète qui permet seulement de décider de la nécessité de la resommation.

Ici, nous avons mis l'accent sur un type particulier de diagrammes, pour mettre en évidence de façon simple les modifications apportées aux propriétés analytiques de $\Sigma(k, \omega)$ par la resommation, ici dite de Tamm-Dancoff. Dans le même cadre, des schémas de resommation plus élaborés existent pour lesquels on pourra consulter les Réf. (3). Nous reviendrons sur cette question à la fin de ce paragraphe.

b) Nous allons examiner maintenant comment traiter le cas d'un potentiel d'interaction à coeur dur (ou fortement répulsif). C'est l'aspect essentiel du problème du gaz de nucleons ou d'atomes d'Hélium.

Le traitement de la diffusion libre par un coeur dur est à la base du traitement en milieu à densité finie et il est utile de rappeler quelques résultats.

Considérons l'équation de Schrödinger pour deux particules de masse m interagissant par un potentiel V . Dans le centre de masse, elle s'écrit

$$\left[\nabla^2 + k^2 \right] \psi(\underline{r}) = v(\underline{r}) \psi(\underline{r}). \quad (5-6)$$

Ici $v(\underline{r}) = 2m_{\text{red}} V(\underline{r}) = mV(\underline{r})$ ($\hbar = 1$). La solution d'onde sortante de (5-6) s'écrit à l'aide de la fonction de Green $G^{(+)}(\underline{r}-\underline{r}')$, satisfaisant à l'équation

$$\left[\nabla^2 + k^2 \right] G^{(+)}(\underline{r}-\underline{r}') = - \delta(\underline{r}-\underline{r}') \quad (5-7)$$

La solution de (5-7) est :

$$G^{(+)}(\underline{r}-\underline{r}') = \frac{e^{ik|\underline{r}-\underline{r}'|}}{4\pi|\underline{r}-\underline{r}'|}. \quad (5-8)$$

Elle permet d'écrire

$$\psi_k^+(\underline{r}) = e^{ik \cdot \underline{r}} - \int d^3r' G^{(+)}(\underline{r}-\underline{r}') v(\underline{r}') \psi_k^+(\underline{r}'). \quad (5-9)$$

De cette expression on en déduit le comportement asymptotique

$$\psi_k^+(\underline{r})_{r \rightarrow \infty} = e^{ik \cdot \underline{r}} + f(k, k') \frac{e^{ikr}}{r}, \quad (5-10)$$

qui définit l'amplitude de diffusion pour une transition d'un vecteur d'onde incident $\underline{k}$ vers un vecteur d'onde final $\underline{k}'$, soit

$$f(k, k') = - \frac{1}{4\pi} \int d^3r' e^{-ik' \cdot \underline{r}'} v(\underline{r}') \psi_k^+(\underline{r}'). \quad (5-11)$$

Si $V(r)$ a un coeur dur à $r=c$ (ie $V(r)$ est infini pour $r < c$) alors la particule ne peut pas pénétrer le coeur dur et $\psi_k(\underline{r}) = 0$ pour $r < c$, de telle sorte que l'amplitude de diffusion (5-11) reste finie. En effet le développement en ondes partielles de f s'écrit :

$$f(k, \theta) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{(2l+1)}{k} e^{i\delta_l} \sin \delta_l P_l(\cos \theta) \quad (5-12)$$

avec (par calcul direct à partir de (5-6))

$$\delta_l(k) = - \frac{(kc)^{2l+1}}{(2l+1)!!(2l-1)!!}. \quad (5-13)$$

Alors

$$\begin{aligned} f(\underline{k}, \underline{k}') &= k^{-1}(1 + i\delta_0)\delta_0 + O(k^2 c^3) \\ |\underline{k}| = |\underline{k}'| &= k \rightarrow 0 \\ &= -c + ik c^2 + O(k^2 c^3). \end{aligned} \quad (5-14)$$

Pour obtenir $f(\underline{k}, \underline{k}')$ fini il faut donc avoir le comportement correct de $\psi_k(\underline{r})$ à $r=c$, ce qui ne peut pas s'obtenir par une solution perturbative de (5-9) (ie un développement en puissance de v).

Considérons maintenant V fini (mais aussi repulsif que voulu) et plaçons nous dans l'espace des moments où

$$\psi_k(\underline{p}) = \int d^3r e^{-i\underline{p}\underline{r}} \psi_k^+(\underline{r}) \quad (5-15)$$

et

$$V(\underline{p}) = \int d^3r e^{-i\underline{p}\underline{r}} v(\underline{r}).$$

L'équation intégrale (5-9) devient

$$\psi_k(\underline{p}) = (2\pi)^3 \delta(\underline{p}-\underline{k}) - \frac{1}{p^2 - k^2 - i\delta} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} v(\underline{q}) \psi_k(\underline{p}-\underline{q}). \quad (5-16)$$

Définissons

$$\begin{aligned} t(\underline{k}, \underline{k}') &= -4\pi f(\underline{k}, \underline{k}') \\ &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int d^3q v(\underline{q}) \psi_k(\underline{k}'-\underline{q}). \end{aligned} \quad (5-17)$$

Multiplions (5-16) par $v(\underline{p}-\underline{q})$ et intégrons sur $\underline{p}$. Ceci donne l'équation intégrale de Lippman Schwinger pour $t(\underline{p}, \underline{k})$:

$$t(\underline{p}, \underline{k}) = v(\underline{p}-\underline{k}) + \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{v(\underline{p}-\underline{q}) t(\underline{p}, \underline{k})}{k^2 - q^2 + i\delta}, \quad (5-18)$$

ou écrite sous forme matricielle équivalente

$$t(\omega) = V + V \sum_{\underline{c}, \underline{d}} \frac{|\underline{c} \underline{d} \rangle \langle \underline{c}, \underline{d}|}{\omega - e_0(\underline{c}) - e_0(\underline{d}) + i\delta} t(\omega). \quad (5-18')$$

Il convient de noter que la solution de (5-18) demande la connaissance de

$t(q, k)$ pour tous les $q^2 > 0$ (hors couche) et pas seulement pour $q^2 = k^2$ (sur couche).

Nous savons donc générer l'amplitude de diffusion libre toujours finie quelque soit la répulsion du potentiel initial V . Comment étendre ceci à un assemblage de particules, de densité finie ? Le coeur dur interdit tout développement perturbatif et la self-énergie au 1er ordre en V n'a pas de sens. Comme pour la diffusion libre, la quantité physique est l'amplitude finie de diffusion à 2 corps dans le milieu. Par rapport à la diffusion libre les différences sont :

i) tous les états intermédiaires $|\underline{c}, \underline{d}\rangle$ ne sont pas permis pour la diffusion car tous ceux dont l'énergie est plus petite que l'énergie de Fermi sont déjà occupés.

ii) les particules ont des énergies $e(c)$ différentes des énergies libres purement cinétiques $e_0(c) = \frac{c^2}{2m}$, en raison de la présence des autres particules.

En fait nous avons vu que

$$e(c) = \frac{c^2}{2m} + \text{Re} \sum (c, e(c)).$$

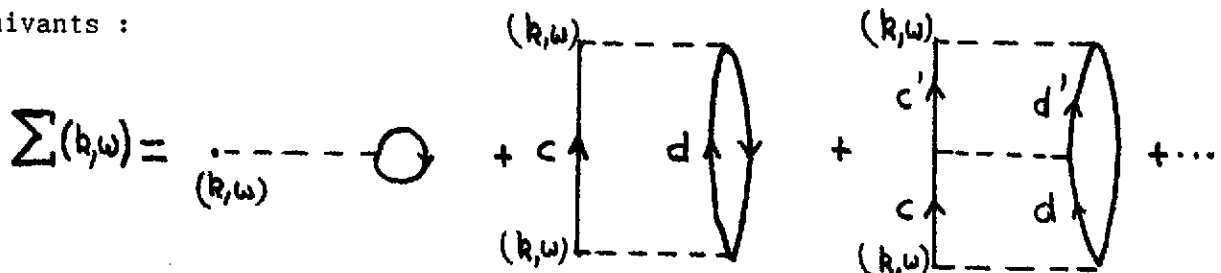
Soit $g(\omega)$ l'amplitude de diffusion dans le milieu.

Une façon (non unique) de définir $g(\omega)$ est d'écrire la généralisation de (5-18) dans le milieu, soit :

$$g(\omega) = V + V \sum_{\underline{c}, \underline{d}} n_c^> n_d^> \frac{|\underline{c}, \underline{d}\rangle \langle \underline{c}, \underline{d}|}{\omega - e(c) - e(d) + i\delta} g(\omega), \quad (5-19)$$

ou $n_c^> = 1(0)$ pour un état c au dessus (dessous) du niveau de Fermi.

Pour la self-énergie, la resommation (5-19) correspond aux diagrammes suivants :



L'approximation obtenue est dite Brueckner Hartree-Fock (BHF) et s'écrit

$$\Sigma_{\text{BHF}}(\underline{k}, \omega) = \sum_{\{j\}} n_j^< \langle \underline{k}, j | g(\omega + e(j)) | \underline{k}, j \rangle_A \quad (5-20)$$

Cette expression garde la dénomination de Hartree-Fock car Σ comporte une contribution directe (Hartree) et d'échange (Fock). Cependant elle étend considérablement la simple approche de Hartree Fock. En effet, nous avons maintenant une interaction effective $g(\omega)$ qui est complexe et qui génère donc une largeur pour les états de particule simple. Nous avons pour la partie imaginaire $W(k)$ du potentiel optique

$$W(k) = Z(k) \cdot \text{Im}[\Sigma(k, e(k))].$$

Un calcul microscopique de $W(k)$ est donc possible et les résultats peuvent être confrontés avec tout un ensemble d'observations empiriques ⁶⁾. Il y a toujours un problème délicat d'autoconsistance entre les énergies des quasi-particules, les fonctions d'onde et l'interaction effective $g(\omega)$.

Considérant (5-19), on voit maintenant, qu'ayant incorporé dans $g(\omega)$ les effets des corrélations de courte portée et la longue portée de g étant celle de V , il est possible d'appliquer à nouveau le critère (4-33) à l'approximation BHF. Les calculs montrent effectivement que les propriétés statiques des noyaux de l'oxygène au plomb sont bien décrites dans une approche de Hartree Fock avec interaction effective ⁷⁾. L'extension (5-19) resomme tous les diagrammes en "échelle" comme dans la diffusion libre. Il est possible de définir une amplitude de diffusion plus générale qui tient compte du fait que la paire de particules dans l'état intermédiaire peut se propager soit comme une paire au dessus du niveau de Fermi (c'est le cas retenu pour écrire 5-19) soit comme une paire de trous sous le niveau de Fermi. L'équation intégrale, dite de Galitskii, est dérivée et discutée dans Fetter et Walecka ³⁾. La majorité des calculs microscopiques de l'opérateur de masse est en fait effectuée à partir de l'équation (5-19), pour la raison que, dans le système infini, les contributions à l'énergie de liaison, générées par les rediffusions trou-trou, sont trouvées négligeables par rapport à celles générées par les rediffusions particule-particule. Nous allons donc poursuivre la discussion sur la base de la définition (5-19) de l'interaction effective.

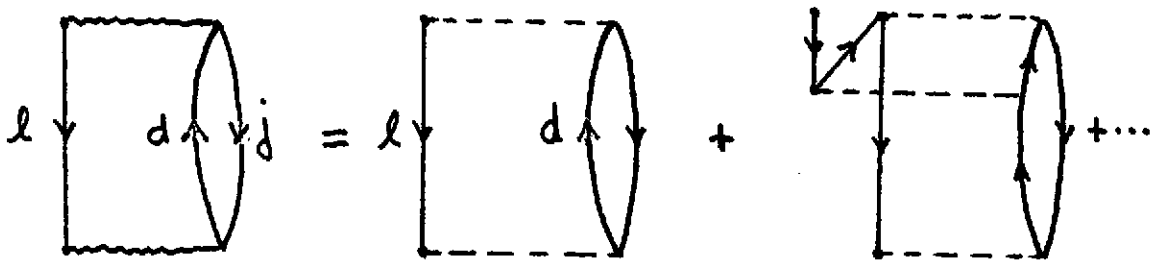
A ce stade, il est légitime de se poser au moins deux questions :

- i) Pourquoi s'arrêter à cet ordre en g (i.e à la définition (5-20)) pour l'approximation de l'opérateur de masse ?

ii) Au début de ce paragraphe nous avons vu que l'interaction nucléon-nucléon a à la fois des caractéristiques de longue et courte portée. Est ce qu'il est possible d'incorporer et de sommer les contributions des diagrammes en anneaux et de traiter les corrélations de courte portée ensemble ?

La réponse à ces deux questions est en fait reliée et peut être donnée à partir de considérations sûr les contributions à l'opérateur de masse d'ordre plus élevé en g .

En raison de la définition de $g(\omega)$ un seul type de contribution à Σ du 2ème ordre en g existe, $\Sigma_{2b}(k, \omega)$, dénommé correction de corrélation. Elle a pour expression graphique

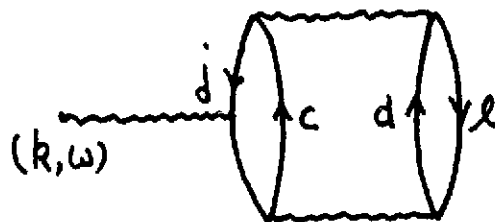


Donc à cet ordre l'énergie de la quasi-particule s'écrit

$$e(k) = \frac{k^2}{2m} + \text{Re} \left[\Sigma_{\text{BHF}}(k, e(k)) + \Sigma_{2b}(k, e(k)) \right]. \quad (5-21)$$

Cette correction joue un rôle important pour la compréhension des propriétés de transport du milieu nucléaire 6).

Il est facile de dessiner et d'écrire une expression algébrique $\Sigma_3^a(k, \omega)$ du 3ème ordre en g . Graphiquement



dont l'expression est 6)

$$\Sigma_3^a(k, \omega) = - \frac{1}{2} \sum_j n_j^< \langle k, j | g(\omega + e(j)) | k, j \rangle_A$$

$$\sum_{l, c, d} n_l^> n_c^> n_d^> \frac{|\langle j, l | g(e(j) + e(l)) | c, d \rangle_A|^2}{[e(j) + e(l) - e(c) - e(d)]^2} \quad (5-22)$$

$$= - \frac{1}{2} \sum_{c, d} n_l^< n_c^> n_d^> \sum_{j, l} \langle j, l | g \frac{Q}{e} | c, d \rangle \langle c, d | \frac{Q}{e} g | j, l \rangle_A$$

$$n_j^< \langle k, j | g | k, j \rangle_A,$$

où nous avons symboliquement écrit le dénominateur d'énergie comme e et représenté les contraintes dues au principe de Pauli par Q .

La fonction d'onde corrélée à 2-corps $\langle r_1 r_2 | \psi_{j1}^{(2)} \rangle$ est telle que

$$\langle r_1, r_2 | \frac{Q}{e} g | j, l \rangle = \langle r_1, r_2 | \psi_{j1}^{(2)} \rangle \quad (5-23)$$

où $\langle r_1, r_2 | j, l \rangle = \phi_{j1}(r_1, r_2)$ est une onde plane à 2 particules.

On peut donc réécrire (5-22) comme

$$\Sigma_3^a(k, \omega) = - \frac{1}{2} \sum_{l, j} n_l^< n_j^< \int d^3 r_1 d^3 r_2 \left| \phi_{j1}(r_1 r_2) - \psi_{j1}^{(2)}(r_1 r_2) \right|^2 \times \langle k, j | g | k, j \rangle_A \quad (5-24)$$

On définit maintenant l'intégrale de "blessure" moyennée κ_2 comme

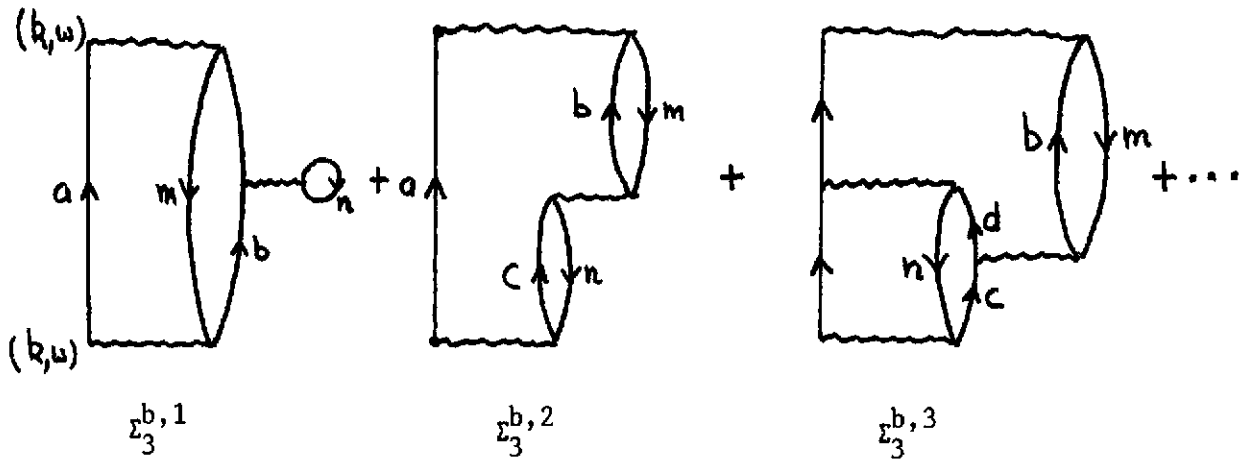
$$\kappa_2 = \rho \langle \int d^3 r_1 d^3 r_2 \left| \phi_{j1}(r_1 r_2) - \psi_{j1}^{(2)}(r_1 r_2) \right|^2 \rangle_{AV} \quad (5-25)$$

où ρ est la densité du milieu et $\langle \cdot \rangle_{AV}$ la moyenne prise sur les états (l, j) en dessous du niveau de Fermi. On voit donc que

$$\Sigma_3^a(k, \omega) \simeq - \kappa_2 \Sigma_{BHF}(k, \omega). \quad (5-26)$$

A cet ordre κ_2 apparaît comme le petit paramètre dans le développement de l'opérateur de masse (pour $\rho \sim 0.17 \text{ fm}^{-3}$, $\kappa_2 \sim 0.2$ mais croît fortement avec ρ).

c) Cependant l'argumentation ci-dessus est incomplète. Bien que chaque contribution à Σ avec une ligne trou supplémentaire (ie $1 \leq k_F$) donne effectivement un facteur κ_2 comme ci-dessus, il existe une suite infinie de contributions avec un nombre croissant de matrice g mais un nombre donné de lignes trous. En effet, considérons la suite des diagrammes suivants à deux lignes trous seulement :



Soit Σ_3^b la contribution globale à l'opérateur de masse

$$\Sigma_3^b = \Sigma_3^{b,1} + \Sigma_3^{b,2} + \Sigma_3^{b,3} + \dots \quad (5-27)$$

L'évaluation directe de $\Sigma_3^{b,2}$ et $\Sigma_3^{b,3}$ montre que ces contributions sont de même importance et il en est ainsi pour tous les termes de la somme Σ_3^b : ces diagrammes doivent être sommé d'une manière analogue à la diffusion à 2 corps par solution d'une équation intégrale à 3-corps dite de Bethe-Faddeev.

La figure ci-dessus montre que Σ_3^b incorpore un diagramme anneau avec $n=2$ mais ne somme pas la série des anneaux puisque les contributions d'ordre supérieur en nombre d'anneaux appartiennent aux ordres supérieurs en nombre de lignes trous et comme telles sont reléguées dans Σ_4 , etc... Cependant il y a une façon d'incorporer tous les anneaux (et bien plus) en considérant les contributions à Σ formées par la somme

$$\Sigma_3^b + (\Sigma_3^b)^2 + (\Sigma_3^b)^3 + \dots = \Sigma_3^b (1 - \Sigma_3^b)^{-1} \quad (5-28)$$

c'est à dire en inversant la matrice $1-\Sigma_3^b$. Ceci est appelé la "sommutation généralisée en anneaux" qui permet de traiter à la fois les corrélations de courte et de longue portée. Ce traitement passe par la solution difficile des équations du problème à 3-corps et n'a été effectuée ⁸⁾ que dans la matière nucléaire infinie.

Nous concluons en mentionnant que l'étude des propriétés de l'opérateur de masse dans le plan (k, ω) , au-delà de l'approximation BHF (5-20) est sans doute nécessaire pour une meilleure compréhension microscopique du modèle en couche. Il existe actuellement des possibilités de pouvoir conduire cette étude ⁹⁾ sans de trop lourds calculs grâce à des représentations séparables du potentiel d'interaction pour le gaz de nucleons ou d'atomes d'Hélium.

Je remercie les organisateurs de cette école pour leur invitation à présenter cet exposé, préparé essentiellement pour des non-spécialistes, suivant les recommandations d'usage. Au prix d'impasses, de démonstrations et de discussions plus ou moins savamment éludées, et donc condamnables sans appel, j'espère néanmoins avoir montré que pour étayer le concept de quasi-particule, il est nécessaire d'étudier microscopiquement l'opérateur de masse et que cette étude est toujours un domaine actif de recherches tant en Physique Nucléaire que dans le domaine voisin de la matière condensée où j'ai puisé la plupart des notations et quelques exemples.

Je remercie Karine Sultan pour le traitement du texte et Y. Grandati pour sa relecture attentive.

REFERENCES

- 1) M.C. GUTZWILLER, Contributions à l'Ecole des Houches "Chaos Quantique", Août 1989.
- 2) A. MESSIAH, "Quantum Mechanics", North Holland, Amsterdam, 1961.
- 3) P. NOZIERES, "Theory of Interacting Fermi Systems", Benjamin, New York, 1964.

L.P. KADANOFF, G. BAYM, "Quantum Statistical Mechanics", Frontiers in Physics Benjamin/Cummings Publishing Company, 1962.

A.L. PETER, J.D. WALECKA, "Quantum Theory of Many Particle Systems", MC Graw Hill Book Company, 1971.

G. RICKAYZEN, "Green's function and condensed matter", Academic Press, 1981.
- 4) P. GRANGE, H.C. PAULI, H.A. WEIDENMÜLLER, Physics Letters 88 B (1979)9.
- 5) G. BAYM, D.N. MERMIN, J. Math. Phys. 2 (1961)233.
- 6) C. MAHAUX, P.F. BORTIGNON, R.A. BROGLIA, C.H. DASSO, Phys. Rep. 120 (1984)1.
- 7) J.W. NEGELE, Phys. Rev. C1 (1970) 1260.

X. CAMPI, D.W.L. SPRING, Nucl. Phys. A 194 (1972) 401.

J. DECHARGE, D. GOGNY, Phys. Rev. C 21 (1980) 1568.
- 8) B.D. DAY, Rev. Mod. Phys. 50 (1978) 500.
- 9) M. BALDO, I. BOMBACI, G. GIANIRACUSA, U. LOMBARDO, C. MAHAUX, R. SARTOR, Preprint Université de Liège, Octobre 1989.