

TD 2: Intégrale fonctionnelle pour un gaz quantique sans interaction

On considère un gaz quantique (bosons ou fermions) sans interaction dont l'Hamiltonien grand canonique en seconde quantification s'écrit

$$\hat{H} - \mu \hat{N} = \sum_{\alpha} \xi_{\alpha} \hat{\psi}_{\alpha}^{\dagger} \hat{\psi}_{\alpha} \quad (\xi_{\alpha} = \epsilon_{\alpha} - \mu) \quad (1)$$

dans une base $\{|\alpha\rangle, \epsilon_{\alpha}\}$ qui diagonalise l'Hamiltonien à un corps. On rappelle que la fonction de partition peut s'écrire

$$Z = \lim_{N \rightarrow \infty} \int \prod_{k=1}^N d(\psi_k^*, \psi_k) \exp \left\{ - \sum_{\alpha} \sum_{k=1}^N [\psi_{k,\alpha}^* (\psi_{k,\alpha} - \psi_{k-1,\alpha}) + \frac{\beta}{N} \xi_{\alpha} \psi_{k,\alpha}^* \psi_{k-1,\alpha}] \right\}, \quad (2)$$

où $\psi_{N,\alpha} = \zeta \psi_{0,\alpha}$, $\psi_{N,\alpha}^* = \zeta \psi_{0,\alpha}^*$ et

$$d(\psi_k^*, \psi_k) = \begin{cases} \prod_{\alpha} \frac{d\Re[\psi_{k,\alpha}] d\Im[\psi_{k,\alpha}]}{\pi} & (\text{bosons}), \\ \prod_{\alpha} d\psi_{k,\alpha}^* d\psi_{k,\alpha} & (\text{fermions}). \end{cases} \quad (3)$$

$\psi_{k,\alpha}^{(*)}$ est un nombre complexe pour des bosons ($\zeta = 1$) et une variable de Grassmann pour des fermions ($\zeta = -1$).

1) Calcul direct de la fonction de partition

1.1) Rappeler le résultat de l'intégrale Gaussienne

$$\int \prod_{k=1}^N d(\psi_k^*, \psi_k) e^{-\sum_{k,k'=1}^N \psi_k^* M_{k,k'} \psi_{k'}}, \quad (4)$$

où M est une matrice $N \times N$ et $\psi_k^{(*)}$ une variable de Grassmann ou un nombre complexe (dans ce dernier cas, on supposera que M est une matrice hermitienne définie positive).

1.2) En déduire l'expression de l'intégrale (2) en fonction de N . Que vaut la limite $N \rightarrow \infty$?

2) Limite continue

2.1) Donner l'expression de l'action $S[\psi^*, \psi]$ obtenue à partir de l'équation (2) en prenant la limite continue $\psi_{k,\alpha} \rightarrow \psi_{\alpha}(\tau)$ ($\tau \in [0, \beta]$). Exprimer $S[\psi^*, \psi]$ en fonction du champ transformé de Fourier

$$\psi_{\alpha}(i\omega_n) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \int_0^{\beta} d\tau e^{i\omega_n \tau} \psi_{\alpha}(\tau), \quad \psi_{\alpha}^*(i\omega_n) = \frac{1}{\sqrt{\beta}} \int_0^{\beta} d\tau e^{-i\omega_n \tau} \psi_{\alpha}^*(\tau). \quad (5)$$

2.2) Calculer, dans la limite continue, le propagateur $G_{\alpha}(i\omega_n) = -\langle \psi_{\alpha}(i\omega_n) \psi_{\alpha}^*(i\omega_n) \rangle$ et la fonction de partition. Montrer que le potentiel thermodynamique diverge.

2.3) Quelle est l'expression du nombre moyen de particules $\langle \hat{N} \rangle$ déduit des résultats de la question (2.2)? Comparer avec le résultat obtenu à partir de l'équation (2) avant de prendre la limite continue. Comment doit-on corriger l'expression du potentiel thermodynamique obtenue à la question (2.2)?

3) Sommes sur les fréquences de Matsubara

3.1) Calculer la somme

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \frac{e^{i\omega_n \eta}}{i\omega_n - \xi} \quad (\eta \rightarrow 0^+) \quad (6)$$

en considérant, dans le plan complexe, l'intégrale

$$\oint_{(C)} \frac{dz}{2i\pi} \frac{e^{\eta z}}{z - \xi} n_\zeta(z), \quad n_\zeta(z) = \frac{1}{e^{\beta z} - \zeta} \quad (7)$$

le long du cercle (C) de rayon $R \rightarrow \infty$ autour de l'origine $z = 0$. En déduire l'expression de $\langle \hat{N} \rangle$ en fonction des nombres d'occupation $n_\zeta(\xi_\alpha)$.

3.2) On cherche à calculer la somme

$$\frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \ln(-i\omega_n + \xi) e^{i\omega_n \eta} \quad (8)$$

à partir de l'intégrale dans le plan complexe

$$\oint_{(C)} \frac{dz}{2i\pi} \ln(-z + \xi) n_\zeta(z) e^{\eta z}. \quad (9)$$

Pourquoi ne peut-on choisir le même contour qu'à la question (3.1)? Montrer que le calcul de la somme (8) peut se ramener au calcul d'une intégrale sur une variable réelle. Calculer cette intégrale en utilisant

$$n_\zeta(\epsilon) = \frac{\zeta}{\beta} \frac{d}{d\epsilon} \ln |1 - \zeta e^{-\beta\epsilon}|. \quad (10)$$

À partir des résultats de la question (2.3), retrouver l'expression habituelle du potentiel thermodynamique d'un gaz quantique sans interaction.