

Théorie statistique des champs
ou
quelques applications de l'intégrale fonctionnelle

Pascal SIMON

15 janvier 2010

Table des matières

1	Introduction	5
2	Rappel de physique statistique à l'équilibre	7
2.1	Fonctions de corrélation	7
2.2	Champ extérieur et réponse linéaire statique	9
2.3	Systèmes continus : approche par l'intégrale fonctionnelle.	12
2.4	Exemples des systèmes élastiques	18
3	Calcul d'intégrales fonctionnelles : un zeste de diagrammatique	29
3.1	Méthode du point col	29
3.2	Approche variationnelle	30
3.3	Théorie de perturbation	32
3.3.1	Théorème de Wick	32
3.3.2	Diagrammes de Feynman	34
4	Intégrales fonctionnelles pour les systèmes quantiques à une particule	39
4.1	Formulation en temps réel	39
4.1.1	Généralités	39
4.1.2	Limite semi-classique	43
4.2	Calcul de la fonction de partition : formulation en temps imaginaire	44
4.3	Fonctions de corrélations et fréquences de Matsubara	45
4.4	Quelques exemples	49
4.4.1	Particule dans un puits de potentiel	49
4.4.2	Particule dans un double puits de potentiel	51
4.4.3	Effet tunnel dans un environnement dissipatif	57
4.4.4	Application au problème tunnel d'une particule dans un état métastable	61
5	Systèmes quantiques à plusieurs particules discernables	67
5.1	Systèmes quantiques de particules discernables : exemple des systèmes élastiques	67
5.2	Lien avec les problèmes classiques	68
6	Systèmes quantiques à plusieurs particules indiscernables	73
6.1	États cohérents bosoniques	73
6.2	Intégrale fonctionnelle pour les bosons	75
6.3	États cohérents fermioniques	78
6.3.1	Introduction des variables de Grassmann	78
6.3.2	Quelques propriétés des variables de Grassmann	78
6.3.3	États cohérents	80

6.4	Intégrale fonctionnelle pour les fermions	81
6.5	Applications	82
6.5.1	Bosons en interaction : application à la superfluidité	82
6.5.2	Fermions en interaction : application au blocage de Coulomb	82
6.6	Conclusion	82
7	Perturbation : théorie de la réponse linéaire	83
7.1	Méthode	83
7.2	Continuation analytique	86
7.3	Le théorème fluctuation dissipation	88
7.4	Formule de Kubo	89
8	Exemples d'application de la réponse linéaire dynamique	93
8.1	Compressibilité	93
8.2	Conductivité des cristaux quantiques ; effet Hall	95
8.3	Les systèmes commensurés	100

Chapitre 1

Introduction

Le but de ce cours est d'introduire de manière élémentaire quelques notions de base de théorie statistique des champs et de les appliquer à quelques systèmes concrets relatifs à la matière condensée. Les systèmes en interaction ne sont abordés qu'à la marge dans la mesure où le groupe de renormalisation ne sera pas traité dans ce cours. Ceux intéressés par les systèmes en interaction sont invités à suivre le cours optionnel du second semestre où le groupe de renormalisation sera introduit dans une large mesure et appliqué à des systèmes corrélés, notamment en basse dimension.

Ces notes de cours s'inspirent d'un cours donné par Thierry Giamarchi dans ce Master il y a déjà plusieurs années. Je vous renvoie sur sa page web :

http://dpmc.unige.ch/gr_giamarchi/

Pour plus de détails, le lecteur pourra se référer aux différents ouvrages portant sur le sujet dont voici une liste non exhaustive :

- Théorie statistique des champs et applications aux transitions de phase [1, 2, 3, 4]
- Théorie statistique des champs appliquée à la matière condensée [5, 6]
- Intégrales fonctionnelles [7, 8, 9]
- Problème à N corps [10, 5, 11, 6]

Chapitre 2

Rappel de physique statistique à l'équilibre

2.1 Fonctions de corrélation

L'objet de base en physique statistique est la fonction de partition à partir de laquelle on peut calculer les quantités thermodynamiques ainsi que différentes fonctions de corrélation. Les systèmes qui vont nous intéresser sont des systèmes classiques et quantiques en interaction. Le modèle d'Ising est probablement le paradigme le plus connu des modèles en interaction.

On considère un réseau carré où chaque site i du réseau porte un spin $\sigma_i = \pm 1$. L'état du système est alors décrit par l'ensemble des variables de spin $\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N$, où N représente l'ensemble des sites du réseau. Si Ω désigne le volume et a la distance entre deux sites voisins alors $\Omega = Na^d$ où d est la dimension de l'espace considéré. On notera par la suite $\{\sigma\}$ une configuration particulière des σ_i .

Pour calculer diverses quantités physiques, il nous faut un Hamiltonien qui décrit l'énergie de système pour une configuration $\{\sigma\}$. Nous considérons donc un Hamiltonien de type Ising :

$$H_0 = - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (2.1)$$

où les variables $-J_{ij}$ représente l'énergie d'interaction entre les spins σ_i et σ_j .

La fonction de partition est alors définie par

$$Z = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_0} = \sum_{\sigma_1=\pm} \sum_{\sigma_2=\pm} \dots \sum_{\sigma_N=\pm} e^{-\beta H_0[\{\sigma\}]} \quad (2.2)$$

A partir de la fonction de partition Z , on définit l'énergie libre $F = -T \log(Z)$, où $\beta = 1/T$, ainsi qu'un ensemble de quantités thermodynamiques globale comme la chaleur spécifique, la susceptibilité, etc. La difficulté est bien sûr de calculer cette somme sur l'ensemble des configurations $\{\sigma\}$.

Les quantités qui vont surtout nous intéresser ici sont les fonctions de corrélation qui mesurent la moyenne thermodynamique d'observables locales ou de produits d'observables locales. En prenant pour exemple le modèle d'Ising ci-dessus, on peut définir des fonctions de corrélation à un point :

$$\langle \sigma_1 \rangle_0, \quad (2.3)$$

des fonctions de corrélations à deux points :

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \rangle_0, \quad (2.4)$$

et de manière générale des fonctions de corrélations à n points :

$$\langle \sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_n \rangle_0. \quad (2.5)$$

Les moyennes thermodynamiques $\langle \dots \rangle_0$ sont définies par

$$\langle O[\alpha, \dots, \beta] \rangle_0 = \frac{\sum_{\{\sigma\}} O[\sigma_\alpha, \dots, \sigma_\beta] e^{-\beta H_0}}{\sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta H_0}}, \quad (2.6)$$

où O représente n'importe quel opérateur. Il est important de remarquer que les fonctions de corrélations sont des quantités qui dépendent des positions (ici les indices α, \dots, β).

En fait, on peut obtenir les fonctions de corrélations à partir d'une fonction de partition. Pour ce faire, il faut rajouter au Hamiltonien considéré un terme de source que l'on introduit à la main sous la forme

$$-\beta H_s = \sum_i h_i O_i. \quad (2.7)$$

On peut définir une nouvelle fonction de partition qui va dépendre explicitement des variables thermodynamiques externes h_i (les "sources")

$$Z[h_1, h_2, \dots, h_N] = \sum_{\{\sigma\}} e^{-\beta[H_0 + H_s]}, \quad (2.8)$$

de même que l'énergie libre associée $F[h_1, h_2, \dots, h_N] = -\frac{1}{\beta} \ln Z[h_1, h_2, \dots, h_N]$.

A partir de là, on peut définir les fonctions de corrélation

$$\langle [O_\alpha \dots O_\beta] \rangle = \frac{1}{Z[\{h\} = 0]} \left. \frac{\partial Z[h_1, h_2, \dots, h_N]}{\partial h_\alpha \dots \partial h_\beta} \right|_{\{h\}=0} \quad (2.9)$$

Noter que $\langle \dots \rangle$ est en général ienj différent de $\langle \dots \rangle_0$!

On peut obtenir des formules relativement similaires à partir de l'énergie libre. En particulier, la fonction de corrélation à 1 point s'écrit

$$\langle O_\alpha \rangle = -\beta \left. \frac{\partial F[h_1, h_2, \dots, h_N]}{\partial h_\alpha} \right|_{\{h\}=0} \quad (2.10)$$

En différenciant l'énergie libre par rapport à h_α et h_β , on obtient les fonctions de corrélation

$$-\beta \left. \frac{\partial^2 F[h_1, h_2, \dots, h_N]}{\partial h_\alpha \partial h_\beta} \right|_{\{h\}=0} = \langle O_\alpha O_\beta \rangle - \langle O_\alpha \rangle \langle O_\beta \rangle \quad (2.11)$$

Chaque fois que l'on différencie, on obtient deux termes, l'un provenant du numérateur l'autre du dénominateur. On peut ainsi facilement obtenir les dérivées d'ordre supérieur. Nous avons introduit les fonctions de corrélations à partir du modèle d'Ising. Néanmoins ceci est tout à fait général. Tout ceci est pour l'instant formel car la difficulté réside dans le calcul de ces sommes sur $\{\sigma\}$. Essayons tout d'abord de donner un peu plus de sens physique à ces champs de sources définis par l'Eq. (2.7).

2.2 Champ extérieur et réponse linéaire statique

Supposons qu'une variable physique du système considéré soit couplée à un champ extérieur. Pour le modèle d'Ising, c'est par exemple le cas si l'on plonge le système dans un petit champ magnétique extérieur. La variable naturelle associée à cette perturbation extérieure est alors l'aimantation du système.

Considérons tout d'abord le cas d'un champ magnétique h uniforme. L'hamiltonien résultant H s'écrit maintenant $H = H_0 + H_h$ avec

$$H_h = -h \sum_i \sigma_i \quad (2.12)$$

On peut également calculer l'énergie libre à partir de H . On apprend en thermodynamique standard que l'aimantation du système est donnée par

$$M = -\beta \frac{dF[h]}{dh} \quad (2.13)$$

Cette relation découle simplement de l'Eq. (2.9) avec $O = \sum_i \sigma_i$.

M s'interprète alors comme la réponse du système au champ extérieur h . Même dans ce cas simplifié où h ne dépend pas de l'espace, il s'avère déjà difficile de calculer l'aimantation toujours à cause de cette somme sur $\{\sigma\}$.

On peut généraliser cette notion de réponse à des opérateurs quelconques O_i (qui dépendent a priori de la position) qui se couplent à un champ extérieur h_i (qui peut aussi dépendre de la position) en rajoutant à H_0 l'hamiltonien H_p défini par

$$H_p = - \sum_i h_i O_i \quad (2.14)$$

Nous supposons par commodité qu'en l'absence de H_p nous avons la propriété $\langle O_i \rangle_0 = 0$, où $\langle \rangle_0$ signifie la moyenne thermodynamique vis à vis de l'hamiltonien H_0 . Si ce n'est pas le cas, il suffit de retrancher à l'opérateur O_i sa valeur moyenne.

Dans ce cas, la réponse du système vis à vis du champ extérieur s'écrit

$$\mathcal{O}_i[\{h\}] = \langle O_i \rangle \quad (2.15)$$

La notation $\mathcal{O}_i[\{h\}]$ signifie que la valeur \mathcal{O}_i au point i dépend en fait de la configuration de l'ensemble des h_i c'est à dire de l'ensemble des valeurs de h pour chaque point i . Il est clair que même pour un Hamiltonien H_0 relativement simple, il est en général très difficile voire impossible de calculer la fonction de réponse \mathcal{O}_i .

Par contre, il s'avère déjà très instructif de calculer la réponse *linéaire* au système. Cette réponse permet en général d'apprendre beaucoup de choses sur l'état du système.

L'idée est la suivante : si le champ extérieur est petit, on peut alors développer (2.15), en puissance du champ extérieur. A l'ordre le plus bas, la réponse est linéaire dans le champ extérieur (d'où l'emploi de la terminologie de "réponse linéaire") :

$$\mathcal{O}_i[\{h\}] = 0 + a^d \sum_j \chi_{ij} h_j, \quad (2.16)$$

qui est le terme le plus général que l'on peut écrire. Le facteur de volume a^d est juste là pour des raisons de commodités ultérieures. On peut aussi voir l'équation (2.16) comme une définition de la susceptibilité généralisée χ_{ij} .

Considérons un système invariant par translation. Dans ce cas, χ_{ij} ne peut dépendre que de la distance entre i et j (que l'on notera symboliquement par $|i - j|$). Dans ce cas, l'équation (2.16) n'est rien d'autre qu'une convolution dans l'espace réel qui peut donc se récrire de manière plus transparente dans l'espace de Fourier.

Rappelons dans un premier temps les définitions que nous utiliserons pour les transformées de Fourier discrètes (sur le réseau) et continue. Nous avons fait l'effort (pas encore sur tout le manuscrit) de mettre les vecteurs en caractères gras. Nous considérons un système de volume $\Omega = L^d = Na^d$.

$$h_{\mathbf{q}} = a^d \sum_i e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} h_i \quad (2.17)$$

$$h_i \equiv h_{\mathbf{r}_i} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} h_{\mathbf{q}} \quad (2.18)$$

où a désigne le pas du réseau (que l'on prendra rapidement égal à 1). La somme sur \mathbf{q} correspond à la première zone de Brillouin. En une dimension, $q = 2\pi n/L$ où l'indice n prend N valeurs entières. On peut par exemple prendre q dans l'intervalle $[-\pi/a, +\pi/a]$. La généralisation à d quelconque est immédiate.

Dans ce cas

$$\sum_i e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i} = N\delta_{\mathbf{q},\mathbf{0}} \quad (2.19)$$

où $\delta_{i,j}$ est le symbole de Kronecker, la version discrète de la distribution δ .

Pour un système continue, $\mathbf{r}_i \rightarrow \mathbf{r}$, on définit les transformée de Fourier

$$h(\mathbf{q}) = \int_{\Omega} d^d r e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} h(\mathbf{r}) \quad (2.20)$$

$$h(\mathbf{r}) = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} h(\mathbf{q}). \quad (2.21)$$

Les relations entre variables discrètes et variables continues sont les suivantes :

$$h_i \rightarrow h(\mathbf{r}), \quad (2.22)$$

$$h_{\mathbf{q}} \rightarrow h(\mathbf{q}). \quad (2.23)$$

La relation (2.19) devient

$$\int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} = \Omega\delta_{\mathbf{q},\mathbf{0}} \quad (2.24)$$

toujours avec un δ discret. Dans la limite où le volume devient infini, on peut utiliser

$$\frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d q, \quad (2.25)$$

$$\Omega\delta_{\mathbf{q},\mathbf{0}} \rightarrow (2\pi)^d \delta(\mathbf{q}), \quad (2.26)$$

où $\delta(\mathbf{q})$ est la distribution δ de Dirac. Noter que $\delta(\mathbf{q})$ est bien homogène à un volume.

A partir de ces définitions de la transformée de Fourier, on peut récrire (2.16) comme

$$\mathcal{O}_{\mathbf{q}} = a^d \frac{1}{N} \sum_{ij} \sum_{\mathbf{q}'} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i + i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}_j} \chi_{|i-j|} h_{\mathbf{q}'}. \quad (2.27)$$

En écrivant, $\mathbf{r}_i = \mathbf{r}_j + \mathbf{r}_l$ on a

$$\mathcal{O}_{\mathbf{q}} = a^d \frac{1}{N} \sum_{jl} \sum_{\mathbf{q}'} e^{i(\mathbf{q}' - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}_j} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_l} \chi_{|r_l|} h_{\mathbf{q}'} \quad (2.28)$$

$$= a^d \sum_l e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_l} \chi_{r_l} h_{\mathbf{q}}. \quad (2.29)$$

Par conséquent,

$$\boxed{\mathcal{O}_{\mathbf{q}} = \chi_{\mathbf{q}} h_{\mathbf{q}}} . \quad (2.30)$$

On voit donc que dans l'espace de Fourier, la relation entre fonction de réponse et champ extérieur est vraiment linéaire, chaque mode q étant indépendant. Il faut bien voir que ce résultat remarquable de simplicité est la conséquence directe de

- (i) l'invariance par translation du système qui rend la base de Fourier diagonale
- (ii) l'approximation de la réponse linéaire.

La susceptibilité $\chi_{\mathbf{q}}$ (ou χ_{ij} dans l'espace réel) contient donc toute l'information sur la réponse linéaire du système à une perturbation extérieure. De plus, χ ne dépend pas, par définition, du champ extérieur h_i et se calcule donc à partir de l'hamiltonien H_0 , qui est plus simple que H .

Essayons de trouver une expression simple de χ_{ij} . A l'ordre le plus bas en H_p , nous pouvons écrire à partir de l'Eq. (2.15)

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_i[\{h\}] &\simeq \frac{\sum_{\{\sigma\}} O_i (1 + \beta \sum_j O_j h_j) e^{-\beta H_0}}{\sum_{\{\sigma\}} (1 + \beta \sum_j O_j h_j) e^{-\beta H_0}} \\ &\simeq \langle O_i \rangle_0 + \sum_j \beta [\langle O_i O_j \rangle_0 - \langle O_i \rangle_0 \langle O_j \rangle_0] h_j. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Nous obtenons donc

$$\boxed{a^d \chi_{ij} = \beta [\langle O_i O_j \rangle_0 - \langle O_i \rangle_0 \langle O_j \rangle_0]} , \quad (2.32)$$

qui n'est rien d'autre que la fonction de corrélation connexe rencontrée plus haut, c'est à dire la fonction de corrélation à deux points à laquelle on a retranché le produit des valeurs moyennes à un point. Ceci correspond également à la fonction de corrélation à deux points d'opérateurs dont on a retranché la valeur moyenne. En effet, nous avons pour n'importe quelle valeur moyenne $\langle \dots \rangle$ la propriété

$$\langle O_i O_j \rangle - \langle O_i \rangle \langle O_j \rangle = \langle (O_i - \langle O_i \rangle)(O_j - \langle O_j \rangle) \rangle \quad (2.33)$$

Avec notre hypothèse $\langle O \rangle_0 = 0$, la fonction de corrélation est donc égale à sa partie connexe.

Le résultat donné par l'Eq. (2.32) est remarquable et mérite que l'on s'y attarde. Il montre que la *réponse linéaire* du système est totalement déterminée par les fluctuations de ce même système en l'absence de perturbation extérieure. Ce résultat est complètement général. Il repose uniquement sur le fait que le système a atteint un équilibre thermique.

Comme la partie imaginaire de la susceptibilité nous renseigne sur la dissipation du système, Ce résultat est plus connu sous le nom de théorème fluctuation-dissipation (en fait cela en est plutôt une version simplifiée). Il est d'une grande importance dans la mesure où il permet de connaître la réponse (certes linéaire) du système à une perturbation uniquement à partir des fluctuations du système non perturbé. Nous avons vu dans ce paragraphe la théorie de la réponse linéaire statique. Nous reviendrons au chap. 7 sur la version dynamique de la théorie de la réponse linéaire.

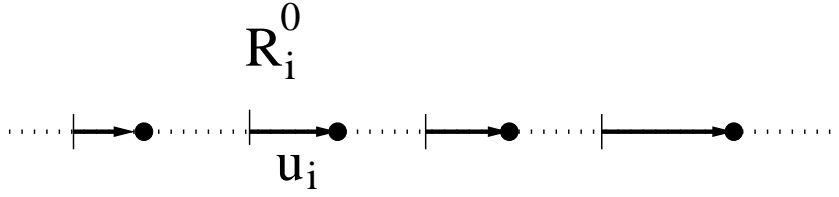


FIG. 2.1 – Vibrations d'une réseau classique unidimensionnel. En chaque site \vec{R}_i^0 , nous avons défini un déplacement u_i .

Appliquons ces considérations à un cas très simple : un spin d'Ising isolé. Dans ce cas, $H_0 = 0$. La réponse au champ magnétique donné par l'Eq. (2.12) peut se calculer exactement dans ce cas trivial

$$m = \frac{e^{\beta h} - e^{-\beta h}}{e^{\beta h} + e^{-\beta h}} = \tanh(\beta h), \quad (2.34)$$

ce qui donne la susceptibilité $\chi = \beta$.

Ce résultat peut aussi s'obtenir à partir de (2.32). En effet, comme $H_0 = 0$, nous avons

$$\langle \sigma \sigma \rangle_0 = 1 \quad (2.35)$$

Une dernière remarque pour conclure ce paragraphe : la susceptibilité uniforme, la réponse à un champ extérieur uniforme $h_i = h$, n'est rien d'autre que la composante $q = 0$ de la susceptibilité χ_q . Cela correspond à l'intégrale de la fonction de corrélation à deux points :

$$\chi = \sum_j \beta \langle O_i O_j \rangle_0 \quad (2.36)$$

Plus les corrélations sont de longue portée, plus la fonction de réponse sera forte, ce qui est somme toute assez intuitif.

Nous allons appliquer les considérations précédentes à un système continu.

2.3 Systèmes continus : approche par l'intégrale fonctionnelle.

Jusqu'à maintenant, nous avons traité de systèmes définis sur le réseau. Quand bien même en matière condensée, le réseau est assez naturel, il est souvent utile de passer à la limite continue. Dans la limite continue, le réseau n'apparaît plus que comme une coupure ultraviolette.

Prendre une limite continue n'est pas une chose aisée en général. La première condition nécessaire est d'avoir une variable qui varie lentement à l'échelle microscopique du réseau auquel cas la limite continue prend du sens.

Considérons l'exemple simple des vibrations d'un réseau classique comme montré sur l'exemple de la Fig. 2.1 Pour décrire cet exemple, nous allons opter pour un modèle simplifié. En chaque site, on définit un déplacement scalaire u_i . En dimension d quelconque, on peut voir u_i comme la projection selon un axe arbitraire du vecteur déplacement. L'énergie élastique s'écrit alors simplement sous la forme

$$H = \sum_{i,z} \frac{k}{2} (u_i - u_{i+z})^2, \quad (2.37)$$

où la somme sur z prend formellement en compte les plus proches voisins, k est la constante élastique. Nous pouvons supposer qu'à basse température, u_i varie lentement par rapport à

l'échelle du réseau a . On peut ainsi définir la variable continue $u(r)$ par $u(r_i) = u_i$. Si $u(r)$ varie lentement, alors

$$u_{i+z} - u_i \approx \mathbf{z} \cdot \nabla u(r) = \sum_{\alpha} z^{\alpha} \partial_{\alpha} u(r). \quad (2.38)$$

Ainsi (2.37) devient

$$H = \frac{k}{2} \rho_0 \int d^d r \sum_{\alpha\beta} \sum_z z^{\alpha} z^{\beta} (\partial_{\alpha} u(r)) (\partial_{\beta} u(r)) \quad (2.39)$$

où ρ_0 est la densité du cristal et les symboles α, β sont associés aux coordonnées x, y, \dots . Sur un réseau carré en dimension d , (2.39) s'écrit

$$H = \frac{c}{2} \int d^d r \sum_{\alpha\beta} (\nabla_{\alpha} u(r)) \cdot (\nabla_{\beta} u(r)), \quad (2.40)$$

où nous avons introduit la constante d'élasticité $c = k\rho_0 a^2$. On peut généraliser cet Hamiltonien élastique en considérant directement les vecteurs déplacements \mathbf{u}_i , auquel cas l'hamiltonien élastique s'écrit maintenant

$$H = \frac{c}{2} \int d^d r \sum_{\alpha\beta} \partial_{\alpha} u^{\alpha}(r) \partial_{\beta} u^{\beta}(r) = \frac{c}{2} \int d^d r (\nabla \cdot \mathbf{u})^2. \quad (2.41)$$

Ceci est la forme la plus simple de l'hamiltonien élastique qui l'on utilisera par la suite.

Comme nous l'avons déjà noté, trouver une limite continue n'est pas toujours un exercice aussi facile. Par exemple, on peut se poser la question de la limite continue du modèle d'Ising sur un réseau carré en dimension d . Dans le modèle d'Ising, les variables σ_i sont discrètes. Donc un développement en gradient comme dans le cas des déformations d'un cristal n'est pas possible. Il nous faut trouver une autre variable que σ_i pour dériver une limite continue. Il existe une manière élégante d'introduire un nouveau jeu de variables pour le modèle d'Ising à l'aide d'une transformation d'Hubbard-Stratonovich. L'intérêt est qu'elle permet de dériver une action de type Ginzburg-Landau en partant du modèle microscopique sur réseau, action que vous étudierez dans le cours de M. Héritier.

En utilisant la limite continue, on peut ainsi calculer les propriétés thermodynamiques des systèmes dans la limite continue. Voyons comment passer de la fonction de partition sur le réseau à la fonction de partition dans le continu.

Sur le réseau, la fonction de partition est définie par

$$Z_a = \left(\prod_i \sum_{u_i} \right) e^{-\beta H(\{u\})} \quad (2.42)$$

$$\langle O(r_i)_a \rangle = \frac{1}{Z} \left(\prod_i \sum_{u_i} \right) O(r_i) e^{-\beta H(\{u\})}, \quad (2.43)$$

où l'indice a est là pour rappeler que ces quantités sont définies sur le réseau. L'intégrale (la somme) multiple se fait sur tous les sites du réseau et sur tous les états possibles des variables microscopiques. On peut maintenant définir la fonction de partition ainsi que les fonctions de corrélation dans la limite continue par

$$Z = \lim_{a \rightarrow 0} Z_a \quad (2.44)$$

$$O(r) = \lim_{a \rightarrow 0} O(r_i)_a \quad (2.45)$$

Selon les normalisations que nous avons prises, la fonction de partition Z peut contenir une constante infinie. Cette constante n'a pas d'importance physique. Elle peut être absorbée par un décalage (parfois infini !) de l'entropie. De plus, ces facteurs de normalisation disparaissent (se simplifient) dans le calcul de la plupart des fonctions de corrélation. Les résultats ainsi obtenus sont définis sans ambiguïté dans la limite continue.

Considérons l'hamiltonien simple suivant :

$$H = \frac{1}{2} \int \int dr dr' V(r - r') u(r) u(r'). \quad (2.46)$$

La fonction de partition discrète s'écrit

$$Z_a = \left(\prod_i \sum_{u_i} \right) e^{-\frac{1}{2} \beta a^{2d} \sum_{ij} V_{i-j} u_i u_j} \quad (2.47)$$

Pour effectuer ces calculs, il nous faut savoir calculer des intégrales Gaussiennes. A peu de choses près, ce sont les seules que l'on sait calculer. Rappelons les formules les plus utilisées (nous supposons $a \in \mathcal{C}^*$ tel que $\text{Re}(a) \geq 0$).

$$\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}} \quad (2.48)$$

$$\frac{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2+bx} dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-ax^2} dx} = e^{\frac{b^2}{4a}} \quad (2.49)$$

$$\frac{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}ax^2} x^2 dx}{\int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\frac{1}{2}ax^2} dx} = \frac{1}{a}. \quad (2.50)$$

La dernière formule s'obtient facilement en dérivant la seconde par rapport à b . La généralisation à la forme matricielle des intégrales Gaussiennes s'écrit

$$\int du_1 \int du_2 \cdots \int du_N e^{-\sum_{ij} u_i M_{ij} u_j} \quad (2.51)$$

où M_{ij} est une matrice $N \times N$ réelle définie positive. Des formules existent pour ces intégrales :

$$\int \frac{du_1 du_2 \cdots du_N}{(2\pi)^{N/2}} e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} u_i M_{ij} u_j + \sum_i u_i b_i} = \frac{1}{(\text{Det} M)^{1/2}} e^{\frac{1}{2} \sum_{ij} b_i M_{ij}^{-1} b_j} \quad (2.52)$$

$$\frac{\int du_1 \int du_2 \cdots \int du_N u_k u_l e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} u_i M_{ij} u_j}}{\int du_1 \int du_2 \cdots \int du_N e^{-\frac{1}{2} \sum_{ij} u_i M_{ij} u_j}} = (M^{-1})_{kl}. \quad (2.53)$$

Pour démontrer ces formules, il suffit de se placer dans la base qui diagonalise M et l'intégrale multiple se décompose en produit d'intégrales scalaire. Le lecteur est invité à démontrer les résultats ci-dessus.

Noter que la fonction de corrélation $G_{ij} = \langle u_i u_j \rangle$ est la solution de l'équation $\sum_j G_{ij} M_{jk} = \delta_{ik}$. G est souvent appelée fonction de Green. C'est un objet que vous nous allons rencontrer de nouveau !

Nous allons avoir également besoin de généraliser les intégrales Gaussiennes précédentes au cas où les variables u sont complexes. Supposons que $u = \text{Re}u + i\text{Im}u$. On note symboliquement l'intégration sur les parties réelles et imaginaires de la manière suivantes :

$$\int \int \frac{d\text{Re}u d\text{Im}u}{\pi} = \int \int \frac{d(u^*, u)}{\pi} = \int \int \frac{idud u^*}{2\pi}. \quad (2.54)$$

On a alors pour l'intégrale Gaussienne sur les nombres complexes u et u^* .

$$\int \int \frac{d(u^*, u)}{\pi} e^{-\frac{1}{2}auu^*} = \frac{2}{a} \quad (2.55)$$

$$\frac{\int \int \frac{d(u^*, u)}{\pi} u e^{-\frac{1}{2}auu^*}}{\int \int \frac{d(u^*, u)}{\pi} e^{-\frac{1}{2}auu^*}} = 0 \quad (2.56)$$

$$\frac{\int \int \frac{d(u^*, u)}{\pi} uu^* e^{-\frac{1}{2}auu^*}}{\int \int \frac{d(u^*, u)}{\pi} e^{-\frac{1}{2}auu^*}} = \frac{2}{a} \quad (2.57)$$

Le fait que $\int \int dud u^*$ soit la bonne notation peut se vérifier en passant en coordonnées polaires.

$$\int \int \frac{d(u^*, u)}{\pi} e^{-\frac{1}{2}auu^*} = \int \int \frac{idud u^*}{2\pi} e^{-\frac{1}{2}auu^*} = \int_0^\infty \rho d\rho \int_0^{2\pi} d\theta \frac{e^{-\frac{1}{2}a\rho^2}}{\pi} = \frac{2}{a}. \quad (2.58)$$

On peut aisément généraliser ces intégrales à N variables complexes :

$$\left(\prod_i \int \frac{d(u_i^*, u_i)}{\pi} \right) e^{-\sum_{ij} u_i^* H_{ij} u_j + \sum_i h_i^* u_i + h_i u_i^*} = \frac{e^{\sum_{ij} h_i^* (H^{-1})_{ij} h_j}}{\text{Det } H}. \quad (2.59)$$

Voyons maintenant quelques applications. Revenons donc à l'hamiltonien (2.46). Il est facile de trouver une base dans laquelle l'hamiltonien (2.46) est diagonal dans la mesure où il est invariant par translation. On passe donc dans l'espace de Fourier. Deux chemins s'offrent à nous.

On peut éventuellement prendre la transformée de Fourier discrète définie par l'Eq. (2.47)

$$\begin{aligned} a^{2d} \sum_{ij} V_{|i-j|} u_i u_j &= \frac{a^d}{N\Omega} \sum_{ij} V_{|i-j|} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} e^{i(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_i + \mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}_j)} u_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}'} \\ &= \frac{a^d}{N\Omega} \sum_{lj} V_l \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} e^{i(\mathbf{q}+\mathbf{q}')\cdot\mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_l} u_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}'} \\ &= \frac{a^d}{\Omega} \sum_l V_l \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}', 0} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_l} u_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}'} \\ &= \frac{a^d}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \left(\sum_l V_l e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_l} \right) u_{\mathbf{q}} u_{-\mathbf{q}} = \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} u_{-\mathbf{q}}. \end{aligned} \quad (2.60)$$

On aurait également pu prendre la transformée de Fourier continue de l'expression (2.46), les deux approches donnant le même résultat. En utilisant (2.60), nous sommes maintenant armés pour calculer la fonction de partition (2.47).

Avant d'effectuer le calcul, une remarque. Lorsque l'on effectue la transformée de Fourier, on passe a priori de N variables u_i à N champs complexes $u_{\mathbf{q}}$. Malgré les apparences, nous

n'avons pas artificiellement doublés le nombre de degré de liberté. En effet comme les variables u_i représentent des déplacements, elles sont donc réelles ce qui entraînent la propriété

$$u_{-\mathbf{q}} = u_{\mathbf{q}}^* \quad (2.61)$$

L'hamiltonien donné par l'Eq. (2.60) est donc réel. Il nous faut par ailleurs diviser par deux le volume d'intégration sur \mathbf{q} c.a.d intégrer sur la moitié de la première zone de Brillouin que l'on notera symboliquement par "BZ/2". Ainsi

$$\int \frac{du_1}{\pi^{1/2}} \int \frac{du_2}{\pi^{1/2}} \cdots \int \frac{du_N}{\pi^{1/2}} \rightarrow J \prod_{\text{BZ}/2} \int \int \frac{d(u_{\mathbf{q}}^*, u_{\mathbf{q}})}{\pi}, \quad (2.62)$$

où J est le Jacobien de la transformation.

Après tous ces préambules, l'Eq. (2.60) devient

$$\frac{1}{2\Omega} \sum_{\mathbf{q} \in \text{BZ}/2} (V_{\mathbf{q}} + V_{-\mathbf{q}})[(\text{Re}u_{\mathbf{q}})^2 + (\text{Im}u_{\mathbf{q}})^2]. \quad (2.63)$$

Comme le potentiel dépend seulement de la distance entre les points, nous avons $V_{\mathbf{q}} = V_{-\mathbf{q}}$ ce qui permet d'écrire (2.47) sous la forme

$$Z_a = J \prod_{\mathbf{q} \in \text{BZ}/2} \left(\frac{\pi\Omega}{\beta V_{\mathbf{q}}} \right), \quad (2.64)$$

et

$$F_a = -T\Omega \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q} \in \text{BZ}/2} \log\left[\frac{1}{\beta V_{\mathbf{q}}}\right] + F_{\text{norm}} \quad (2.65)$$

Le facteur F_{norm} correspond juste à une renormalisation triviale de l'énergie libre. Ce facteur change l'entropie par une simple constante. La partie contenant la physique est contenue dans le premier terme $V_{\mathbf{q}}$. Si l'on oublie le facteur en F_{norm} , l'énergie libre s'écrit

$$\begin{aligned} F_a &= -T\Omega \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q} \in \text{BZ}/2} \log\left[\frac{1}{\beta V_{\mathbf{q}}}\right] \\ &\rightarrow -T\Omega \frac{1}{(2\pi)^d} \int_0^\infty d^d q \log\left[\frac{1}{\beta V_{\mathbf{q}}}\right]. \end{aligned} \quad (2.66)$$

Obtenir la normalisation correcte de l'énergie libre est assez fastidieux. Il faudrait pour cela définir proprement la mesure dans l'intégrale fonctionnelle. Par contre les fonctions de corrélation présentent l'intérêt de ne pas dépendre de ces facteurs de normalisation.

On peut par exemple calculer la fonction de corrélation suivante sur le réseau :

$$\langle [u(\mathbf{r}_1) - u(\mathbf{r}_2)]^2 \rangle = \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\mathbf{q}\mathbf{q}'} (e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_1} - e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}_2})(e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}_1} - e^{i\mathbf{q}'\cdot\mathbf{r}_2}) \langle u_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}'} \rangle. \quad (2.67)$$

En utilisant, (2.60) et (2.50), on montre facilement $\langle u_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}'} \rangle = 0$ si $\mathbf{q} \neq -\mathbf{q}'$. Plus précisément, on a

$$\langle u_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}'} \rangle = \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{q}', \mathbf{0}} \frac{\Omega}{\beta V_{\mathbf{q}}}. \quad (2.68)$$

Ainsi

$$\begin{aligned} \langle [u(\mathbf{r}_1) - u(\mathbf{r}_2)]^2 \rangle &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \frac{[2 - 2 \cos(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2))]}{\beta V_{\mathbf{q}}} \\ &\rightarrow \frac{1}{(2\pi)^d} \int d^d q \frac{[2 - 2 \cos(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2))]}{\beta V(q)} \end{aligned} \quad (2.69)$$

Nous avons pu à travers cet exemple calculé la fonction de partition et les fonctions de corrélations en intégrant sur un nombre infini de degrés de liberté défini par l'Eq. (2.62). On le note formellement de la manière suivante :

$$\prod_i \left(\int du_i \right) = \int \mathcal{D}u[r], \quad (2.70)$$

ceci pour indiquer que l'on doit intégrer sur toutes les réalisations possibles de la fonction $u(r)$. Tant que l'on se préoccupe que des fonctions de corrélation, la normalisation précise n'est pas importante. Nous avons traité cet exemple en utilisant le réseau sous-jacent, ce qui permet un calcul propre. Néanmoins, on peut passer directement à la limite continue. Comme nous l'avons déjà souligné plusieurs fois, cela n'affecte pas les fonctions de corrélation car tous les facteurs de normalisation et autre Jacobien constant se simplifient entre le numérateur et le dénominateur.

En utilisant (2.59), on peut facilement voir

$$\langle u_i u_j^* \rangle = \frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial h_i^* \partial h_j} \Big|_{h, h^* = 0} = H_{i,j}^{-1}. \quad (2.71)$$

On peut maintenant utiliser ce résultat pour chaque valeur de $q \in BZ/2$ ou bien intégrer sur toutes les valeurs de q en gardant en mémoire que

$$\sum_{\mathbf{q}} V_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}}^* = \sum_{\mathbf{q} \in BZ/2} [V(q) + V(-q)] u_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}}^* = \sum_{\mathbf{q} \in BZ/2} 2V(q) u_{\mathbf{q}} u_{\mathbf{q}}^* \quad (2.72)$$

Nous obtenons le résultat final pour la fonction de corrélation

$$\boxed{\langle u(\mathbf{q}_1) u^*(\mathbf{q}_2) \rangle = \frac{\int \mathcal{D}u[q] u(\mathbf{q}_1) u^*(\mathbf{q}_2) e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} A(q) u(\mathbf{q}) u^*(\mathbf{q})}}{\int \mathcal{D}u[q] e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} A(q) u(\mathbf{q}) u^*(\mathbf{q})}} = \frac{1}{A(q_1)} \delta_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2}} \quad (2.73)$$

Ce résultat est un des plus important de ce chapitre ! Notez que résultat coïncide avec le résultat donné par (2.50) pour des variables réelles indépendantes. Noter que \mathbf{q} est un indice qui peut signifier n'importe qu'elle variable, pas seulement le moment.

Le bilan de ces calculs est que les règles que vous avez apprises pour calculer des intégrales normales fonctionnent en général pour l'intégration fonctionnelle. En cas de doute, il suffit de revenir au réseau.

Revenons maintenant à notre fonction de corrélation. Il suffit maintenant d'utiliser (2.73), *i.e.* $\langle u(\mathbf{q}) u^*(\mathbf{q}') \rangle = \frac{\Omega}{\beta V(q)} \delta_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'}$, pour trouver

$$\begin{aligned} \langle [u(\mathbf{r}_1) - u(\mathbf{r}_2)]^2 \rangle &= \frac{1}{\Omega^2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} (e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_1} - e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_2}) (e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}_1} - e^{i\mathbf{q}' \cdot \mathbf{r}_2}) \langle u(\mathbf{q}) u(\mathbf{q}') \rangle \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \frac{[2 - 2 \cos(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2))]}{\beta V(q)} \end{aligned} \quad (2.74)$$

qui est le même résultat que l'Eq. (2.69) obtenu en passant par le réseau. Néanmoins, le calcul demeure beaucoup plus direct et rapide.

Avant d'appliquer ces résultats à des problèmes concrets, donnons quelques propriétés de l'intégrale fonctionnelle. Dériver une intégrale fonctionnelle fonctionne comme une dérivée ordinaire. Pour s'en convaincre, il suffit de repasser au réseau. Par exemple,

$$\frac{\partial H[u]}{\partial u(\mathbf{r}_0)} \quad (2.75)$$

s'écrit sur le réseau

$$\frac{\partial H[u_1, u_2, u_3, u_4, \dots, u_N]}{a^d \partial u_{\mathbf{r}_0}} \quad (2.76)$$

Si l'on considère l'hamiltonien (2.77).

$$H = \int d\mathbf{r} m u^2(\mathbf{r}) \quad (2.77)$$

on a alors

$$\begin{aligned} \frac{\partial H[u]}{\partial u(\mathbf{r}_0)} &= \frac{\partial a^d \sum_i m u_i^2}{\partial a^d u_{\mathbf{r}_0}} \\ &= 2m u_{\mathbf{r}_0} = 2m u(\mathbf{r}_0) \end{aligned} \quad (2.78)$$

qui est le même que celui que nous aurions obtenu dans le continu en utilisant les règles standard de dérivation en oubliant que u est une fonction et en utilisant la règle

$$\frac{\partial u(\mathbf{r}_1)}{\partial u(\mathbf{r}_2)} = \delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2). \quad (2.79)$$

2.4 Exemples des systèmes élastiques

Le paragraphe précédent nous a permis d'introduire tout le formalisme nécessaire pour traiter des systèmes physiques bien décrit par un Hamiltonien quadratique qui donne lieu à des intégrales Gaussiennes. On parle d'ailleurs de modèle Gaussien. En théorie des champs, on se ramène souvent à des systèmes gaussiens puisque ce sont quasiment les seuls que l'on peut traiter exactement. A défaut, ils servent de point de départ pour une théorie de perturbation ou pour des approches variationnelles. Nous verrons ceci au chapitre suivant.

Appliquons le formalisme développé pour décrire les déformations élastiques d'un cristal. Deux raisons guident ce choix. Tout d'abord c'est suffisamment simple pour être enseigné à ce niveau. Mais surtout, l'approche que nous allons formuler est générale et s'applique à un grand nombre de systèmes physiques classiques et quantiques. Nous reviendrons sur le cas quantique plus loin dans le chapitre IV.

Quand on pense aux cristaux, on pense naturellement aux réseaux cristallins naturels. En fait, on rencontre des cristaux beaucoup plus souvent que l'on pourrait naïvement croire en matière condensée. Tout d'abord, on peut fabriquer des cristaux artificiels dans lesquels ce sont des sphères chargées, des colloïdes (certains gels), des bulles de savon, etc., qui jouent le rôle d'atomes. Évidemment, la maille cristalline élémentaire n'est plus de l'ordre de l'Ångström !

La forme cristalline est parfois inattendue et apparaît comme le résultat de fortes interactions. C'est par exemple le cas du réseau d'Abrikosov qui est un réseau formé par les vortex d'un supraconducteur de type II. (voir Fig. 2.2).

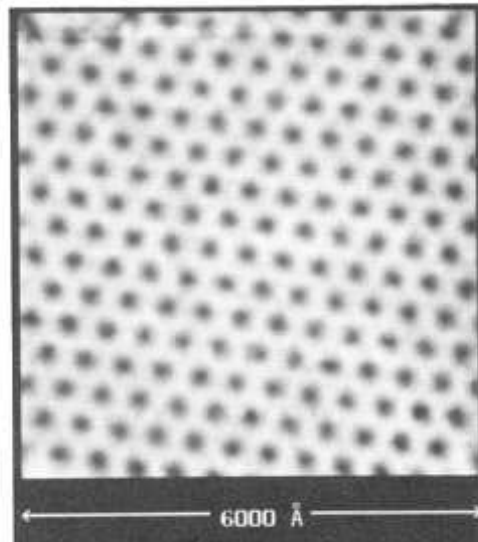


FIG. 2.2 – Dans les supraconducteurs de type II, le champ magnétique peut pénétrer dans le supraconducteur comme des filaments de flux entourés par un supercourant. Cela forme des vortex qui se repoussent, ce qui conduit à la formation d’un cristal de vortex dont la maille élémentaire est contrôlée par le champ magnétique. Ces cristaux artificiels ont été prédit par Abrikosov et portent naturellement le nom de réseau d’Abrikosov. En voici “une image” obtenu par spectroscopie tunnel (d’après H. F. Hess et al., Phys. Rev. Lett 62, 214 (1989)) pour le composé NbSe_2 à $1.8K$ sous un champ magnétique de $1T$.

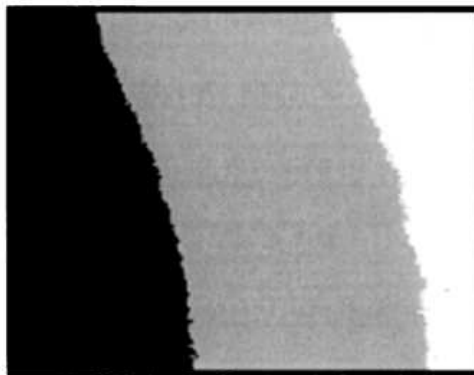


FIG. 2.3 – Une paroi de domaine séparant deux régions d’aimantation opposée dans un film mince (voir S. Lemerle et al., Phys. Rev. Lett. **80**, 849 (1998)). Cette paroi peut également être regardée comme une structure élastique unidimensionnelle immergée dans un espace à deux dimensions. On a également des parois de domaines bidimensionnelles séparant des blocs tridimensionnels.

On peut aussi imaginer des “cristaux” magnétiques. Ce sont des matériaux magnétiques contenant des domaines de spins orientés dans certaines directions. On peut alors s'intéresser aux déformations des parois entre différents domaines magnétiques (voir Fig. 2.3). L'étude de l'évolution des parois de domaine sous l'action d'un courant électrique est actuellement un sujet très actif en électronique de spin. L'idée est de contrôler électriquement (et non magnétiquement) ces parois afin de stocker (écrire) ou de lire l'aimantation de ces domaines. Bien sûr, la vraie vie est beaucoup plus compliquée que notre simple description en tant que cristal continue déformé. Il faut prendre en compte les fluctuations thermiques, le désordre qui comme son nom l'indique n'aime pas trop l'ordre du cristal, et surtout des aspects dynamiques liés au couplage entre la paroi de domaine et le courant d'électrons. Le problème devient évidemment très compliqué et il faut faire des approximations pour avancer. On va rencontrer le même genre de problème pour le réseau d'Abrikosov ou le courant dans le supraconducteur peut causer des déplacements des vortex.

Pour commencer, nous allons considérer un cristal propre. On note R_i^0 les positions à l'équilibre des particules formant et par u_i leurs déplacement par rapport à cette position d'équilibre. On va supposer que l'interaction entre deux particules peut se réduire à l'hamiltonien élastique. On va dès le départ prendre une formulation continue. L'hamiltonien élastique s'écrit

$$H = \frac{1}{2}c \int d^d r (\nabla u(\mathbf{r}))^2 \quad (2.80)$$

où c est une constante de rigidité et $u(\mathbf{r})$ est un champ scalaire défini par $u(\mathbf{r}_i) = u_i$. Il s'agit d'un modèle simplifié : le champ u peut être vu comme la projection. $u(\mathbf{r})$ peut aussi décrire une interface comme celle représentée schématiquement sur la figure 2.4. Dans cas, l'intégrale associée à l'Eq. (2.80) est une intégrale sur les variables internes.

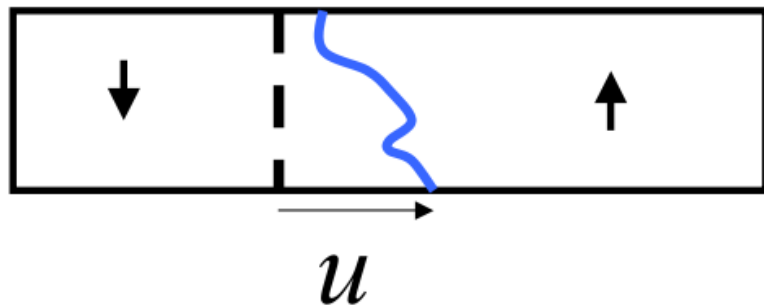


FIG. 2.4 – Schéma d'une interface entre deux blocs de spin. Pour l'interface, $u(z)$ correspond au déplacement par rapport à la position plate et z à des coordonnées internes. La dimension totale d'espace d est alors $d = z + 1$.

Nous allons maintenant chercher à mieux comprendre la physique associée à ce type de modèle élastique. Nous verrons également que ce genre de description a des applications insoupçonnées pour décrire des systèmes quantiques unidimensionnels. Pour ce faire, nous allons calculer diverses fonctions de corrélation.

La première quantité à laquelle on peut naturellement penser est la fonction de corrélation reliée au déplacement relatif :

$$B(r) = \langle [u(\mathbf{r}_1) - u(\mathbf{r}_2)]^2 \rangle. \quad (2.81)$$

Ce corrélateur nous indique comment les fluctuations thermiques peuvent détruire l'ordre cristallin. Nous avons déjà calculé $B(r)$ qui en fait donné par l'Eq. (2.74). En effet, la transformée de Fourier de l'hamiltonien élastique (2.80) est

$$H = \frac{c}{2} \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} q^2 u(\mathbf{q}) u^*(\mathbf{q}) \quad (2.82)$$

donc du même type que l'Eq.(2.60). On en déduit alors immédiatement

$$\begin{aligned} \langle [u(\mathbf{r}_1) - u(\mathbf{r}_2)]^2 \rangle &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \frac{[2 - 2 \cos(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2))]}{\beta c q^2} \\ &= \frac{T}{(2\pi)^d} \int d^d q \frac{[2 - 2 \cos(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2))]}{c q^2} \end{aligned} \quad (2.83)$$

Examinons de plus prêt ce résultat. Nous voyons que la fonction de corrélation est proportionnelle à T . Donc à $T = 0$, le cristal est parfaitement ordonné comme on pouvait s'y attendre. Augmenter la température rend le cristal de moins en moins ordonné. Pour analyser le contenu de l'intégrale, on va supposer $|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$ fixé très grand devant le pas du réseau ; notre but étant de comprendre le comportement à grande distance de ce corrélateur. On sépare l'intégrale sur q en deux morceaux. Lorsque $q \ll 1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, on peut approximer le terme en cosinus par $\cos(\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)) \approx 1 - \frac{1}{2} q^2 |\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|^2$ et ce morceau de l'intégrale converge. Par contre lorsque $q \gg 1/|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|$, le cosinus oscille très vite et est négligeable. L'intégrale est alors triviale ($\propto \int d^d q q^{-2}$) et on trouve tout simplement que l'intégrale converge uniquement pour $d > 2$. En dimension $d = 3$, la fonction de corrélations converge vers une valeur finie. Cela signifie que les fluctuations thermiques, quand bien même elles déplacent fortement les molécules formant le cristal, elles ne le détruisent pas. On peut toujours parler de cristal à température finie.

Par contre, en dimension $d = 1$ ou $d = 2$, dès que l'on branche la température, le comportement cristallin à grande distance est détruit. En effet, le comportement asymptotique de $B(r)$ est le suivant

$$\langle [u(\mathbf{r}_1) - u(\mathbf{r}_2)]^2 \rangle \sim \frac{T}{c} \log[|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|/a] \quad d = 2 \quad (2.84)$$

$$\langle [u(r_1) - u(r_2)]^2 \rangle \sim \frac{T}{c} |r_1 - r_2| \quad d = 1. \quad (2.85)$$

Ce résultat est en fait une conséquence d'un théorème général établi par Mermin et Wagner. le théorème de Mermin-Wagner établit qu'on ne peut pas briser une symétrie continue à température finie en dimension $d \leq 2$ (la symétrie étant ici l'invariance par translation). Les conditions d'applications de ce théorème sont assez générales, la contrainte principale étant que l'hamiltonien soit de courte portée (ce qui est le cas du modèle élastique). Pour plus de précisions, je vous invite à lire l'article original de Mermin et Wagner [12].

Analysons maintenant une autre quantité intéressante qui est la densité du cristal dans la limite continue. Si z est la coordonnée interne de l'interface et x la coordonnée de l'interface à z donné (voir la figure 2.5), alors la densité s'écrit simplement

$$\rho(\mathbf{r} = (z, x)) = \delta(x - u(z)). \quad (2.86)$$

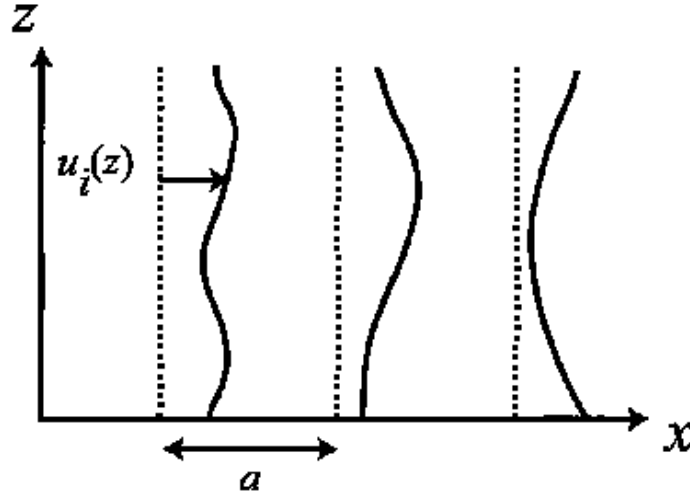


FIG. 2.5 – Des lignes d’interfaces entre différentes phases cristallines. z la direction de l’interface joue le rôle de variable interne et x de coordonnée le long de l’interface.

On peut récrire la densité sous une forme plus pratique

$$\rho(\mathbf{r} = (z, x)) = \int d\lambda e^{i\lambda(x-u(z))}. \quad (2.87)$$

Analysons maintenant le cas du réseau périodique dont la densité s’écrit

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i - \mathbf{u}_i). \quad (2.88)$$

Nous avons choisi de garder la nature discrète du réseau alors que nous sommes passés à la limite continue sur H . Une des raisons que l’on peut invoquer est que pour certains réseaux comme le réseau d’Abrikosov, la maille du réseau est relativement grande comparé à d’autres échelles spatiales. Comme nous sommes intéressés à la densité locale, il s’avère plus judicieux de conserver la trace du réseau. Par contre nous sommes toujours dans l’approximation élastique où u est petit devant a , cela va nous permettre de simplifier (2.88). On introduit alors un champ de déplacement $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ tel que $\mathbf{u}(\mathbf{R}_i) = \mathbf{u}_i$ qui interpole de manière régulière entre les points du réseau. que l’on peut définir dans l’espace des q par

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \int_{BZ} \frac{d^d r}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{r}} \sum_j e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_j} \mathbf{u}_j \quad (2.89)$$

$\mathbf{u}(\mathbf{r})$ n’a pas de composantes de Fourier en dehors de la première zone de Brillouin.

À partir de (2.89), on peut introduire le champ ϕ défini par

$$\phi(\mathbf{r}) = \mathbf{r} - \mathbf{u}(\phi(\mathbf{r})). \quad (2.90)$$

En l’absence de défauts, cette équation possède une solution unique donnant $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ en fonction de $\phi(\mathbf{r})$. ϕ suit les lignes de déplacement et prend une valeur entière à chaque location de particule. En effet, le champ ϕ est défini de telle manière que

$$\phi(\mathbf{R}_i + \mathbf{u}(\mathbf{R}_i)) = \mathbf{R}_i. \quad (2.91)$$

En utilisant la définition (2.90) dans (2.88), on obtient après quelques manipulations

$$\rho(\mathbf{r}) = \sum_i \delta(\mathbf{R}_i - \phi(\mathbf{r})) \det[\partial_\alpha \phi_\beta(\mathbf{r})], \quad (2.92)$$

que l'on peut écrire sous forme intégrale

$$\rho(\mathbf{r}) = \det[\partial_\alpha \phi_\beta] \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \rho_0(q) e^{i\mathbf{q} \cdot \phi(\mathbf{r})}, \quad (2.93)$$

où l'on a défini

$$\rho_0(\mathbf{q}) = \sum_i e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_i} \quad (2.94)$$

la densité du cristal parfait (à température nulle). En effet, pour un cristal parfait $\rho_0(q)$ s'écrit

$$\rho_0(\mathbf{q}) = \rho_0 (2\pi)^d \sum_{\mathbf{K}} \delta(\mathbf{q} - \mathbf{K}). \quad (2.95)$$

En injectant (2.95) dans (2.93) on obtient donc

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_0 \det[\partial_\alpha \phi_\beta] \sum_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot \phi(\mathbf{r})} \quad (2.96)$$

En supposant la limite élastique, c.a.d. $\partial_\alpha u_\beta \ll 1$, on peut alors développer (2.96) pour obtenir

$$\rho(\mathbf{r}) \simeq \rho_0 \left[1 - \sum_{\alpha} \partial_\alpha u_\alpha(\phi(\mathbf{r})) + \sum_{\mathbf{K} \neq \mathbf{0}} e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u}(\phi(\mathbf{r})))} \right]. \quad (2.97)$$

Dans l'Eq. (2.97), on peut remplacer $\mathbf{u}(\phi(\mathbf{r}))$ par $\mathbf{u}(\mathbf{r})$, ce qui revient à négliger des termes d'ordre $O(\partial_\alpha u_\beta) \ll 1$. L'expression de la densité peut donc finalement se mettre sous la forme

$$\rho(\mathbf{r}) \simeq \rho_0 - \rho_0 \sum_{\alpha} \partial_\alpha u_\alpha(\mathbf{r}) + \rho_0 \sum_{\mathbf{K} \neq \mathbf{0}} e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r}))}. \quad (2.98)$$

Le résultat (2.98), obtenu après quelques manipulations algébriques et approximations non évidentes, est certes très intéressant. Quelques commentaires s'imposent. Nous avons obtenu une sorte de décomposition en série de Fourier de la densité, dans laquelle on a séparé les termes variant à l'échelle des grandes longueur d'onde (par rapport au pas du réseau) et les termes de courtes longueur d'onde (de vecteur d'onde correspondant au pas du réseau).

La composante infrarouge correspondant à $q \sim 0$ est proportionnelle à $\propto \nabla \mathbf{u}$ tandis que les variations de la densité à l'échelle du réseau peuvent se décomposer en série de Fourier en $\cos(\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u}))$.

Si l'on compare l'expression (2.98) à l'Eq. (2.87) obtenue pour l'interface, on voit que ces deux équations sont relativement similaires puisque l'on a juste remplacé une somme discrète par une intégrale. Ces deux expressions peuvent d'ailleurs se mettre sous la forme

$$\int d\mathbf{q} \rho_0(\mathbf{q}) e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{u}(\mathbf{r}))} \quad (2.99)$$

où $\rho_0(q)$ est la densité associée au système parfait. Nous allons maintenant utiliser ces développements pour calculer les fonctions de corrélation densité densité.

Pour ce faire, on ajoute au hamiltonien, un champ de source qui se couple à la densité du type

$$H_\mu = - \int d\mathbf{r} \mu(\mathbf{r}) \rho(\mathbf{r}). \quad (2.100)$$

Si ce champ varie lentement à l'échelle du réseau, seul le mode $q \sim 0$ importe donc on peut approximer,

$$H_\mu \simeq \int d\mathbf{r} \mu(\mathbf{r}) \rho_0 \nabla \mathbf{u}(\mathbf{r}). \quad (2.101)$$

Dans ce cas, on peut alors calculer la réponse du système à une variation de la densité. A grande distance, seule la composante $q = 0$ joue un rôle et en utilisant la réponse linéaire donnée par l'Eq. (2.32), on obtient

$$\begin{aligned} \chi(r) &= \beta \rho_0^2 \langle \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}) \nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{0}) \rangle \\ &= \frac{\beta \rho_0^2}{\Omega^2} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}'} (i)^2 \langle (\mathbf{q} \mathbf{u}_{\mathbf{q}}) (\mathbf{q}' \mathbf{u}_{\mathbf{q}'}) e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \rangle \\ &= \frac{\beta \rho_0^2}{\Omega^2} \sum_{\mathbf{q}} q^2 \frac{\Omega}{\beta q^2 c} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} \\ &= \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\rho_0^2}{c} e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}. \end{aligned} \quad (2.102)$$

Ainsi $\chi(q) = \rho_0^2/c$ et on retrouve directement que le coefficient c donne la compressibilité du système.

Une autre observable intéressante expérimentalement est le facteur de structure

$$S(q) = \langle \rho(\mathbf{q}) \rho^*(\mathbf{q}) \rangle \quad (2.103)$$

Cette quantité est directement mesurée dans les expériences de rayon X et de neutrons. La transformée de Fourier de la densité s'écrit (cette fois on s'intéresse aux grand q puisque l'on a à faire à des sondes locales)

$$\rho(\mathbf{q}) = \rho_0 \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{K}} e^{i(\mathbf{K}-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{r} - i\mathbf{K} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r})} \quad (2.104)$$

$\rho(\mathbf{q})$ a naturellement des pics autour des vecteurs du réseau réciproques. Le facteur de structure est donc donné par

$$S(q) = \rho_0^2 \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2)} \sum_{\mathbf{K}_1, \mathbf{K}_2} e^{i(\mathbf{K}_1 \cdot \mathbf{r}_1 - \mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{r}_2)} \langle e^{i(\mathbf{K}_1 \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}_1) - \mathbf{K}_2 \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}_2))} \rangle. \quad (2.105)$$

Pour évaluer $S(q)$, on écrit $\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2$ en fonction des coordonnées relatives et du centre de masse. $\mathbf{r}_1 = \mathbf{R} + \mathbf{r}/2$ et $\mathbf{r}_2 = \mathbf{R} - \mathbf{r}/2$. L'intégration par rapport à \mathbf{R} peut se faire car \mathbf{u} varie lentement vis à vis de l'échelle du réseau. Il reste

$$S(q) = \rho_0^2 \Omega \int d\mathbf{r} \sum_{\mathbf{K}} e^{i(\mathbf{K}-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}} \langle e^{i(\mathbf{K} \cdot (\mathbf{u}(\mathbf{r}/2) - \mathbf{u}(-\mathbf{r}/2))} \rangle. \quad (2.106)$$

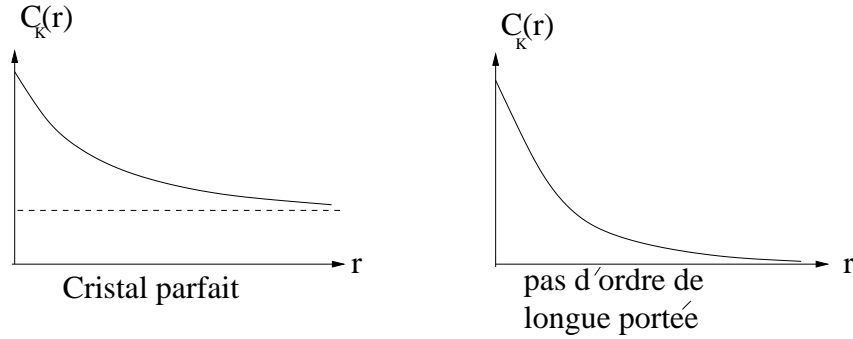


FIG. 2.6 – La fonction de corrélation $C_K(r)$, contrôle la forme des pics dans le facteur de structure $S(q)$. Si $C_K(r)$ tend vers une constante, on retrouve des pics δ dans le facteur de structure mais avec un poids spectral réduit (c'est le facteur de Debye-Waller). C'est par exemple le cas des fluctuations thermiques en dimension $d > 2$. Si $C_K(r) \rightarrow 0$, l'ordre translationnel est perdu. On peut considérer deux cas de figure : Si $C_K(r)$ décroît exponentiellement par exemple, les pics dans $S(q)$ ont un poids fini. Ils ont l'allure d'une Lorentzienne. En mesurant la largeur à mi-hauteur du pic, on peut en extraire une échelle de longueur caractéristique à partir de laquelle l'ordre translationnel est perdu. Si $C_K(r)$ décroît comme une loi de puissance, sa transformée de Fourier sera également une loi de puissance. On aura toujours des pics divergents mais qui n'auront plus une allure de type δ de Dirac. On dira alors que le cristal possède un quasi-ordre à longue portée. C'est par exemple le cas des fluctuations thermiques en dimension $d = 2$. Ce quasi-ordre à température finie est détruit par les défauts (que l'on a complètement ignoré jusqu'ici) qui apparaissent dans le système. La transition de phase est alors de type Berezinskii-Kosterlitz-Thouless, que vous aurez l'occasion de revoir au cours de l'année

Ainsi la forme des pics dans le facteur de structure est donné par la transformée de Fourier de la fonction de corrélation

$$C_K(r) = \langle e^{i\mathbf{K} \cdot [\mathbf{u}(r) - \mathbf{u}(0)]} \rangle. \quad (2.107)$$

Plus le pic est large, plus vite la fonction de corrélation $C_K(r)$ décroît. $C_K(r)$ peut être vu comme une mesure de l'ordre translationnel restant dans le système. Il teste la rigidité du réseau en quelque sorte. On peut distinguer principalement deux cas de figure qui sont résumés schématiquement sur la Fig. 2.6.

$C_K(r)$ peut se calculer facilement en utilisant l'intégrale fonctionnelle.

$$\begin{aligned} C_K(r) &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}u e^{-\frac{c\beta}{2\Omega} \sum_{\mathbf{q}} q^2 \mathbf{u}(\mathbf{q}) \mathbf{u}^*(\mathbf{q})} e^{i\mathbf{K} \cdot [\mathbf{u}(r) - \mathbf{u}(0)]} \\ &= \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}u e^{-\frac{c\beta}{2\Omega} \sum_{\mathbf{q}} q^2 \mathbf{u}(\mathbf{q}) \mathbf{u}(-\mathbf{q}) + \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} (u(\mathbf{q}) \mathbf{A}(-\mathbf{q}) + u(-\mathbf{q}) \mathbf{A}(\mathbf{q}))} \end{aligned} \quad (2.108)$$

avec

$$\mathbf{A}(-\mathbf{q}) = i\mathbf{K} \frac{(e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}} - 1)}{\Omega}. \quad (2.109)$$

En complétant simplement le carré, on obtient

$$C_K(r) = \frac{1}{Z} \int \mathcal{D}u e^{-\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} V(\mathbf{q}) [\mathbf{u}(\mathbf{q}) + \frac{\mathbf{A}(\mathbf{q})}{V(\mathbf{q})}] [\mathbf{u}(-\mathbf{q}) + \frac{\mathbf{A}(-\mathbf{q})}{V(-\mathbf{q})}]} e^{\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\mathbf{A}(\mathbf{q}) \mathbf{A}(-\mathbf{q})}{V(\mathbf{q})}} \quad (2.110)$$

avec $V(\mathbf{q}) = \frac{c\beta q^2}{\Omega}$. Comme le changement de variable $\mathbf{u}(\mathbf{q}) \rightarrow \mathbf{u}(\mathbf{q}) + \mathbf{A}(\mathbf{q})/V(\mathbf{q})$ ne change rien, l'intégrale du numérateur se simplifie exactement avec la fonction de partition Z du

dénominateur. On a donc le résultat final :

$$\begin{aligned}
C_K(r) &= e^{\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\mathbf{A}(\mathbf{q})\mathbf{A}(-\mathbf{q})}{V(\mathbf{q})}} \\
&= e^{-\frac{1}{2} \frac{1}{\Omega} \sum_{\mathbf{q}} K^2 \frac{[2-2\cos(\mathbf{q}\cdot\mathbf{r})]}{c\beta q^2}} \\
&= e^{-\frac{K^2}{2} \langle [\mathbf{u}(\mathbf{r}) - \mathbf{u}(\mathbf{0})]^2 \rangle}.
\end{aligned} \tag{2.111}$$

Nous venons de prouver la propriété importante

$$\langle e^{iK[u(r)-u(0)]} \rangle = e^{-\frac{K^2}{2} \langle [u(r)-u(0)]^2 \rangle}, \tag{2.112}$$

qui est en fait valable dans le cas d'une moyenne Gaussienne.

En dimension $d = 3$ cette intégrale converge et on retrouve le fait que les fluctuations thermiques ne détruisent pas les pics de Bragg mais change le poids spectral qui n'est plus égal à 1. Pour $d = 2$, on a vu que $B(r) = \langle [u(r) - u(0)]^2 \rangle$ diverge logarithmiquement et $C(r)$ se comporte comme une loi de puissance avec un exposant proportionnel à la température. la transformée de Fourier est encore une loi de puissance qui s'obtient par simple analyse dimensionnelle. Il n'y a plus de fonction δ donc plus d'ordre à longue portée mais par contre les pics de Bragg divergent comme des lois de puissance. On parle alors de quasi-ordre à longue portée (voir la légende de la Fig. 2.6. En dimension $d = 1$, $B(r)$ est linéaire. la transformée de Fourier donnant le facteur de structure est une Lorentzienne. Les pics de Bragg ne sont plus divergents et leur largeur à mi-hauteur est inversement proportionnel à la température. C'est donc le cas de la chaîne cristalline.

Pour le cas de l'interface, on obtient des résultats similaires. La transformée de Fourier de la densité est donnée par

$$\begin{aligned}
\rho(q) &= \int dz dx e^{i(\lambda - q_x)x - i\lambda u(z) - iq_z z} \\
&= (2\pi) \int dz e^{-iq_x u(z) - iq_z z}.
\end{aligned} \tag{2.113}$$

Le facteur de structure s'écrit donc

$$\begin{aligned}
S(q) &= \int dz \int dz' e^{iq_z(z'-z)} \langle e^{iq_x[u(z') - u(z)]} \rangle \\
&= \Omega \int dz e^{iq_z z} \langle e^{iq_x[u(z) - u(0)]} \rangle.
\end{aligned} \tag{2.114}$$

Considérons le cas $d = 1 + 1$ (une interface unidimensionnelle en deux dimensions). Dans ce cas, $B(z) \sim |z|$ et le facteur de structure est donné par

$$S(q) = \frac{q_x^2 T}{(q_x^2 T)^2 + q_z^2} \tag{2.115}$$

Ainsi lorsque $q_x = 0$, le facteur de structure est le même que pour une interface parfaite $S(q) = \delta(q_z)$ (à $q_x = 0$, c.a.d. $L_x \rightarrow \infty$, on ne voit pas les déviations de l'interface). Lorsque l'on regarde l'interface à q_x fini, on voit les déviations de l'interface dans la direction x . Dans ce cas, le facteur de structure est une Lorentzienne dont la largeur à mi-hauteur est donnée par la déviation caractéristique dans la direction x .

Nous avons considéré jusqu'ici le cas d'une perturbation constante. Que se passe t'il si l'on perturbe notre réseau périodique ou notre interface par un potentiel désordonné du type

$$H_V = \int dr V(r) \rho(r) \tag{2.116}$$

où V est un potentiel désordonné. Ce cas de figure est plus générique et donc plus intéressant mais évidemment plus compliqué. Nous allons tout de suite comprendre pourquoi. Si l'on veut calculer une valeur moyenne au sens de la fonction de partition, cette valeur moyenne dépend de la réalisation précise du désordre.

$$\langle O \rangle_V = \frac{\int \mathcal{D}u[q] O e^{-\beta(H_0 + H_V)}}{\int \mathcal{D}u[q] e^{-\beta(H_0 + H_V)}}. \quad (2.117)$$

Néanmoins, pour un système donné, on ne pas veut avoir à faire à une réalisation précise du désordre mais plutôt à une moyenne sur toutes les réalisations possibles du désordre, ceci afin d'éviter que le résultat soit aléatoire, ce qui ne serait pas satisfaisant sur le plan de la physique. Bien sûr, cela suppose que le système, supposé grand, soit "auto-moyennant" c'est à dire que les différentes parties composant le système moyenne les différentes configurations du désordre. Il nous faut enfin espérer que cette moyenne d'ensemble coïncide bien avec ce qui est mesuré expérimentalement. Nous sommes donc amener à calculer

$$\overline{\langle O \rangle_V} = \int \mathcal{D}V(r) p(V) \frac{\int \mathcal{D}u[q] O e^{-\beta(H_0 + H_V)}}{\int \mathcal{D}u[q] e^{-\beta(H_0 + H_V)}}. \quad (2.118)$$

Le trait surligné dans $\overline{\langle O \rangle_V}$ signifie moyenne sur le désordre. $p(V)$ est une fonctionnelle donnant la probabilité d'avoir une configuration donnée du désordre. En général, on choisit un désordre Gaussien décorrélé (sans doute car c'est le cas le plus simple qui permet de faire des calculs) donc on suppose que $p(V)$ satisfait

$$p(V) = C e^{-\frac{D-1}{2} \int dr V(r)^2}, \quad (2.119)$$

où C est un facteur de normalisation choisi tel que $\int \mathcal{D}V p(V) = 1$. Cela implique donc que

$$\overline{V(r)V(r')} = D\delta(r - r'). \quad (2.120)$$

D mesure la force du désordre. On parle de bruit blanc ou de bruit décorrélé. Même avec une distribution si simple du désordre, le problème n'en demeure pas moins très complexe dans la mesure où il nous faut moyenner sur le désordre au numérateur et au dénominateur dans (2.118). Pour cela, quelques techniques plus sophistiquées existent mais cela sort du cadre de ce cours.

Chapitre 3

Calcul d'intégrales fonctionnelles : un zeste de diagrammatique

Dans la chapitre précédent, nous avons analysé en détail certaines théories qui avaient la particularité d'être décrites par un hamiltonien quadratique. Hélas, dans le monde réel, c'est rarement le cas. Nous devons donc apprendre à traiter des Hamiltoniens plus compliqués. Dans ce chapitre, je vais présenter certaines méthodes et m'attarderai un peu plus sur la théorie de perturbation qui est sûrement une des plus utilisée. Bien évidemment la liste ci-dessous est non exhaustive.

Le but de ce chapitre est donc d'apprendre à traiter une intégrale fonctionnelle de la forme

$$Z = \int \mathcal{D}u e^{-\beta H}, \quad (3.1)$$

où H est un Hamiltonien.

3.1 Méthode du point col

Commençons par une méthode très utile et relativement simple. Supposons que l'on puisse trouver une paramétrisation telle que l'on puisse écrire l'intégrale fonctionnelle sous la forme

$$H = n\tilde{H}[u] \quad (3.2)$$

avec $n \gg 1$. L'idée est que les configurations avec le plus gros poids de Boltzmann sont celles qui minimisent $\tilde{H}[u]$. Les autres configurations, dans la limite $n \rightarrow \infty$ vont acquérir un poids de Boltzmann négligeable. Les solutions minimales sont solutions de l'équation fonctionnelle

$$\frac{\delta \tilde{H}[u]}{\delta u} = 0. \quad (3.3)$$

Supposons que l'équation ci-dessus ait une solution unique u^* correspondant à un minimum. L'approximation du point col consiste à approximer (3.1) par

$$Z \approx cst * e^{-\beta n \tilde{H}[u^*]}, \quad (3.4)$$

où cst est une constante lié au volume d'intégration. Cette approximation devient exacte dans la limite $n \rightarrow \infty$. A $n \gg 1$, c'est une très bonne approximation dans la mesure où les corrections à

l'énergie libre sont d'ordre $O(\frac{1}{n})$. Pour le voir, il suffit de faire un développement de $\tilde{H}[u]$ autour de la solution extremum :

$$\tilde{H}[u] \approx \tilde{H}[u^*] + \int dx (u(x) - u^*(x)) \left. \frac{\delta \tilde{H}[u]}{\delta u(x)} \right|_{u^*} + \int \int dx dx' \frac{1}{2} (u(x) - u^*(x))(u(x') - u^*(x')) \left. \frac{\delta^2 \tilde{H}[u]}{\delta u(x) \delta u(x')} \right|_{u^*} \quad (3.5)$$

Le deuxième terme est nul par définition de u^* . Néanmoins, en se limitant à cet ordre, on approxime $\tilde{H}[u]$ autour de l'extremum par un Hamiltonien quadratique. On retrouve donc une intégrale Gaussienne du type (2.52). Pour vérifier cela, il suffit de revenir à un réseau de N sites (ne pas confondre N avec n). La fonction de partition sur le réseau s'écrit alors

$$Z \approx e^{-\beta n \sum_i H[u_i^*]} \int dv_1 \int dv_2 \cdots \int dv_N e^{-\frac{\beta n}{2} \sum_{i,j} v_i B_{ij} v_j}, \quad (3.6)$$

où l'on a introduit $v_i = u_i - u_i^*$, et $B_{ij} = \left. \frac{\delta^2 \tilde{H}[u]}{\delta u_i \delta u_j} \right|_{u=u^*}$. Normalement v étant un développement de u autour de u^* , les intégrales sur v_i devraient être limitées à un volume fini petit. Néanmoins, on peut étendre le volume d'intégration des variables v_i à l'infini puisque que l'on a faire à des Gaussiennes. Dans ce cas, on peut utiliser directement (2.52), ce qui permet de calculer l'énergie libre $F = -\frac{1}{\beta} \ln Z$:

$$F \approx F_0 - \frac{N}{2\beta n} \ln(2\pi) + \frac{1}{2n\beta} \ln \det B \quad (3.7)$$

où $F_0 = H[u^*]$ est le résultat d'ordre zéro c.a.d l'énergie du système donnée par le point col. Le deuxième terme est une constante qui ne joue pas de rôle. Le troisième terme est proportionnel à la température (c'est donc un terme de fluctuations) qui apporte une correction au terme d'ordre zéro. En effet F_1/F_0 est bien d'ordre $O(\frac{1}{n})$ avec $n \gg 1$. On peut en général estimer cette correction analytiquement pour un modèle donné en utilisant la formule algébrique $\ln \det = Tr \ln$ et en se plaçant dans une base qui diagonalise la matrice B . Nous verrons en travaux dirigés des exemples d'application de cette approximation de point col.

3.2 Approche variationnelle

Examinons maintenant une autre méthode qui s'avère toujours utile pour avoir une idée du résultat. De manière générale, on peut écrire

$$\begin{aligned} Z &= \int \mathcal{D}u e^{-\beta H} \\ &= \int \mathcal{D}u e^{-\beta H_0} e^{-\beta(H-H_0)} \\ &= Z_0 \langle e^{-\beta(H-H_0)} \rangle_0 \end{aligned} \quad (3.8)$$

où H_0 est un Hamiltonien quelconque, Z_0 la fonction de partition associée et $\langle \cdots \rangle_0$ la moyenne thermodynamique vis à vis de H_0 . Ainsi l'énergie libre peut s'écrire

$$F = F_0 - T \ln[\langle e^{-\beta(H-H_0)} \rangle_0], \quad (3.9)$$

où $F_0 = -T \ln Z_0$. On utilise maintenant la propriété de convexité de l'exponentielle pour démontrer que l'on a toujours l'inégalité

$$\langle e^{-\beta(H-H_0)} \rangle > e^{-\beta \langle (H-H_0) \rangle} \quad (3.10)$$

et donc

$$F \leq F_{\text{var}} \equiv F_0 + \langle H - H_0 \rangle_0 \quad (3.11)$$

Le meilleur Hamiltonien H_0 est évidemment H , c.a.d celui qui minimise l'énergie libre variationnelle F_{var} . L'idée de la méthode variationnelle est de choisir un Hamiltonien H_0 suffisamment simple pour que l'on puisse calculer sa fonction de partition et la quantité $\langle e^{-\beta(H-H_0)} \rangle_0$ et d'optimiser H_0 au maximum pour s'approcher de la physique du modèle original. En général, on prendra pour H_0 un Hamiltonien quadratique. L'idée sera alors d'approcher la physique de H par celle d'hamiltoniens quadratiques aux paramètres judicieusement choisis.

Prenons l'exemple du modèle sinus-Gordon que l'on retrouve énormément en matière condensée. Il est décrit par l'hamiltonien

$$H = \frac{c}{2} \int d^d x (\nabla \phi(x))^2 - g \int d^d x \cos(2\phi(x)), \quad (3.12)$$

avec $g > 0$. A température $T = 0$, on peut s'attendre à ce que $\phi = 0$ soit la configuration optimale

Si la température n'est pas très élevée, on peut raisonnablement s'attendre à explorer les oscillations harmoniques autour de cette position d'équilibre. Dans ce cas, on va prendre un Hamiltonien quadratique pour H_0

$$H_0 = \frac{1}{2\Omega} \sum_q G^{-1}(q) \phi(q) \phi(-q), \quad (3.13)$$

où G^{-1} est l'inverse de G qui est défini dans l'espace réel par

$$\langle \phi(x) \phi(y) \rangle_0 = G(x - y). \quad (3.14)$$

Comme l'hamiltonien H_0 est quadratique, on cherche G^{-1} sous la forme $G^{-1}(q) = cq^2 + m$ où m est un paramètre (une masse effective) que l'on cherche à calculer par la méthode variationnelle.

L'énergie libre variationnelle F_{var} s'écrit

$$F_{\text{var}} = -\frac{T}{2} \sum_{q>0} \log[TG(q)] + \frac{c}{2} T \sum_q q^2 G(q) - g\Omega e^{-\frac{2}{\Omega} \sum_q TG(q)} \quad (3.15)$$

(exercice : montrer le).

La minimisation de F_{var} s'écrit tout simplement

$$\frac{\partial F_{\text{var}}}{\partial G(q)} = 0 \quad (3.16)$$

donne

$$G^{-1}(q) = cq^2 + 4ge^{-\frac{2}{\Omega} \sum_q TG(q)} \quad (3.17)$$

qui est une équation auto-cohérente pour $G(q)$. Ceci se traduit donc en une équation auto-cohérente pour le paramètre m

$$m = 4ge^{-\frac{2}{\Omega} \sum_q \frac{T}{cq^2+m}} \quad (3.18)$$

Examinons le cas bidimensionnel qui est pertinent pour l'expérience. L'intégrale est dans ce cas divergente. On peut la régulariser en se rappelant que ces modèles sont définis à partir d'un réseau qui fournit une coupure ultraviolette naturelle $\Lambda \sim 1/a$. L'intégrale régularisée se met alors sous la forme

$$\begin{aligned} \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^d q \frac{1}{cq^2 + m} &= \frac{1}{(2\pi)} \int_0^\Lambda q dq \frac{1}{cq^2 + m} \\ &\simeq \frac{1}{(4\pi c)} \log\left[\frac{c\Lambda^2}{m}\right] \end{aligned} \quad (3.19)$$

Nous aboutissons donc à une équation auto-cohérente pour la masse m

$$m = 4g \left(\frac{m}{c\Lambda^2} \right)^{\frac{T}{2\pi c}} \quad (3.20)$$

Il est facile de voir que pour $T > 2\pi c$, cette équation a pour seule solution $m = 0$. Le terme en $\cos(2\phi)$ ne semble pas jouer de rôle et on retrouve une théorie libre. En dimension $d = 2$, on a vu que cela donne lieu à un quasi-ordre avec des fonctions de corrélation en loi de puissance où l'exposant dépend de la température (en fait il faudrait prendre en compte la nature périodique du potentiel en cosinus ce que nous avons totalement omis!) On dit alors que le terme en $\cos(2\phi)$ est non pertinent. Par contre, lorsque $T < 2\pi c$, une masse $m \neq 0$ apparaît dans le système donc une longueur de corrélation caractéristique. Cela donne lieu à des fonctions de corrélations avec une décroissance exponentielle. La méthode variationnelle s'avère très puissante dans la mesure où elle est capable de prédictions dans un régime non perturbatif (nous n'avons rien supposé sur g). A contrario, elle est non contrôlée. En effet, qu'est ce qui nous dit que le meilleur H_0 est capable de décrire correctement la physique du modèle sinus-Gordon? (En fait, elle manque une partie de la physique!) Cela implique que la méthode variationnelle doit être en général complétée par d'autres approches plus contrôlée comme par exemple la théorie de perturbation ou bien par des approches numériques. Nous verrons en exercices d'autres applications de la méthode variationnelle.

3.3 Théorie de perturbation

Nous allons maintenant une des méthodes les plus utilisées en théories champ à savoir la théorie de perturbation. Supposons que l'on puisse écrire notre Hamiltonien sous la forme

$$H = H_0 + H_{\text{pert}} \quad (3.21)$$

où H_0 correspond à un Hamiltonien exactement soluble (en général une théorie libre, un Hamiltonien quadratique) et H_{pert} la partie restante.

3.3.1 Théorème de Wick

L'exemple traité dans tous les livres est celui de la théorie de Ginzburg-Laudau (voir le cours de M. Héritier sur les transitions de phases) pour laquelle l'hamiltonien s'écrit

$$H = \frac{1}{2} \int d^d x [c(\nabla u(x))^2 + mu(x)^2] + \frac{\lambda}{4!} \int d^d x u(x)^4. \quad (3.22)$$

Dans la plupart des ouvrages, on remplace u par Φ et on parle de théorie Φ^4 . C'est une théorie générique pour décrire nombre de phénomènes critiques et, en particulier, le modèle d'Ising au voisinage de la transition de phase.

Dans ce cas, le choix de H_0 et de H_{pert} s'imposent naturellement

$$H_0 = \frac{1}{2} \int d^d x [c(\nabla u(x))^2 + mu(x)^2] \quad (3.23)$$

$$H_{\text{pert}} = \frac{\lambda}{4!} \int d^d x [u(x)]^4. \quad (3.24)$$

Si la perturbation est petite, on peut a priori calculer n'importe quelles fonctions de corrélation en développant l'intégrale fonctionnelle en puissance de H_{pert} , c.a.d. en puissance de λ . Nous sommes donc amenés à calculer

$$\langle O_\mu(u) \dots O_\nu(u) \rangle = \frac{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int \mathcal{D}u e^{-\beta H_0} (-\beta H_{\text{pert}})^n O_\mu(u) \dots O_\nu(u)}{\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \int \mathcal{D}u e^{-\beta H_0} (-\beta H_{\text{pert}})^n} \quad (3.25)$$

Comme chaque terme dans les deux sommes (celle du numérateur et du dénominateur) doit être calculé à partir de l'hamiltonien quadratique H_0 , le calcul est donc a priori faisable à un ordre donné de λ moyennant un gros effort.

Mener ce genre de calcul de la sorte n'est pas très astucieux. Grâce aux propriétés des intégrales Gaussiennes, ce genre de calcul se simplifie grandement et permet une formulation diagrammatique élégante.

Avant de dériver un résultat général, considérons l'exemple suivant de la fonction de corrélation à n points

$$\langle u(r_1)u(r_2) \dots u(r_n) \rangle_0, \quad (3.26)$$

où la moyenne $\langle \dots \rangle_0$ est prise par rapport à l'hamiltonien quadratique H_0 . Pour calculer ce genre de corrélateurs, on peut a priori procéder de manière identique à ce que nous avons vu dans la partie 2.1

On repart de l'hamiltonien quadratique (3.13)

$$\beta H_0 = \frac{1}{2} \int dx \int dy u(x) G^{-1}(x-y) u(y) \quad (3.27)$$

où G est la fonction de corrélation à deux points (appelé propagateur) $\langle u(x)u(y) \rangle_0 = G(x-y)$ G et G^{-1} sont des opérateurs inverses l'une de l'autre c.a.d obéissant à

$$\int dx_3 G(x_1 - x_3) G^{-1}(x_3 - x_2) = \delta(x_1 - x_2) \quad (3.28)$$

Ceci n'est rien d'autre que la version continue de ce que l'on a déjà vu sur le réseau dans l'Eq. (2.53).

Si l'on rajoute des sources $h(x)$ comme dans la partie 2.1, la fonction de partition associée à H_0 devient

$$Z_0[h] = \int \mathcal{D}u e^{-\frac{1}{2} \int dx dy u(x) G^{-1}(x-y) u(y) + \int dx h(x) u(x)}, \quad (3.29)$$

que l'on peut récrire sous la forme

$$Z_0[h] = \int \mathcal{D}u e^{-\frac{1}{2} \int dx dy (u(x) - \int dz G(x-z) h(z)) G^{-1}(x-y) (u(y) - \int dz G(y-z) h(z))} e^{\frac{1}{2} \int dx dy G(x-y) h(x) h(y)}. \quad (3.30)$$

En utilisant le changement de variables $\tilde{u}(x) = u(x) - \int dz G(x-z) h(z)$, Z_0 se simplifie

$$Z_0[h] = Z_0[h=0] e^{\frac{1}{2} \int dx dy G(x-y) h(x) h(y)}. \quad (3.31)$$

En utilisant l'Eq. (2.9), la fonction de corrélation à n points (3.26) s'écrit comme une dérivée $n^{\text{ième}}$ par rapport aux champs de source :

$$\langle u(r_1)u(r_2)\dots u(r_n)\rangle_0 = \left. \frac{\partial^n e^{\frac{1}{2} \int dx dy G(x-y)h(x)h(y)}}{\partial h(r_1)\partial h(r_2)\dots \partial h(r_n)} \right|_{h=0} \quad (3.32)$$

On peut alors facilement se convaincre que

$$\langle u(r_1)u(r_2)\dots u(r_n)\rangle_0 = \sum_{\text{appariements}} G(r_\alpha - r_\beta)G(r_\gamma - r_\delta)\dots G(r_\mu - r_\nu). \quad (3.33)$$

Ce résultat important porte le nom de théorème de Wick et est une propriété générale des intégrales Gaussiennes. Par exemple la fonction de corrélation à 4 points vaut simplement

$$\Lambda(r_1, r_2, r_3, r_4) = \langle u(r_1)u(r_2)u(r_3)u(r_4)\rangle_0 = G(r_1-r_2)G(r_3-r_4) + G(r_1-r_3)G(r_2-r_4) + G(r_1-r_4)G(r_2-r_3). \quad (3.34)$$

le théorème de Wick rend les calculs de l'Eq.(3.25) complètement systématiques, ceci à tous les ordres.

Une autre simplification majeure a lieu lorsque l'on calcule les fonctions de corrélations en perturbation. Considérons la fonction à deux points $\langle u(r_1)u(r_2)\rangle$ (attention $\langle \dots \rangle$ et non $\langle \dots \rangle_0$!) et utilisons (3.25) au premier ordre en perturbation. On a alors

$$\begin{aligned} \langle u(r_1)u(r_2)\rangle &= \frac{\int \mathcal{D}u u(r_1)u(r_2)e^{-\beta H_0}(1 - \beta H_{\text{pert}})}{\int \mathcal{D}u e^{-\beta H_0}(1 - \beta H_{\text{pert}})} \\ &= \frac{\langle u(r_1)u(r_2)\rangle_0 - \beta \langle u(r_1)u(r_2)H_{\text{pert}}\rangle_0}{1 - \beta \langle H_{\text{pert}}\rangle_0} \\ &= \langle u(r_1)u(r_2)\rangle_0 - \beta [\langle u(r_1)u(r_2)H_{\text{pert}}\rangle_0 - \langle u(r_1)u(r_2)\rangle_0 \langle H_{\text{pert}}\rangle_0] \end{aligned} \quad (3.35)$$

On voit donc que la correction induite par la perturbation (le terme entre crochet) fait apparaître uniquement les fonctions de corrélations connexes. Le dénominateur élimine tous les termes qui n'ont pas connections (on utilise plus souvent le terme de contractions) entre la fonction de corrélation et l'hamiltonien d'interaction. Ce résultat est général à tous les ordres de la théorie de perturbation. Donc lorsque l'on écrit toutes les contractions possibles à un ordre donné, on ne conserve que les termes connexes. Cela permet de traiter du même coup le dénominateur dans (3.25). On peut encore simplifier le calcul en associant une représentation diagrammatique au calcul de (3.25). C'est le but de la prochaine partie.

3.3.2 Diagrammes de Feynman

Dans un représentation diagrammatique, on représente le propagateur $G(x-y)$ par une ligne joignant les points x et y (voir Fig. 3.1). Une contraction est alors représentée également

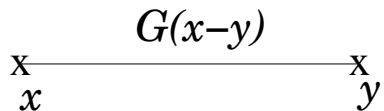


FIG. 3.1 – Représentation schématique de la fonction à deux points $G(x-y)$

par une ligne. L'équation (3.34) donnant $\Lambda(r_1, r_2, r_3, r_4)$ se traduira de manière diagrammatique comme représentée sur la Fig. 3.2. Pour illustrer la représentation diagrammatique, nous allons

$$\Lambda(r_1, r_2, r_3, r_4) = \begin{array}{c} \begin{array}{cc} r_1 & r_2 \\ \mathbf{x} & \mathbf{x} \end{array} \\ \hline \begin{array}{cc} \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ r_3 & r_4 \end{array} \end{array} + \begin{array}{c} \begin{array}{c} r_1 \\ \mathbf{x} \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} \mathbf{x} \\ r_3 \end{array} \end{array} + \begin{array}{c} \begin{array}{c} r_2 \\ \mathbf{x} \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} \mathbf{x} \\ r_4 \end{array} \end{array} + \begin{array}{c} \begin{array}{cc} r_1 & r_2 \\ \mathbf{x} & \mathbf{x} \end{array} \\ \hline \begin{array}{cc} \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ r_3 & r_4 \end{array} \end{array}$$

FIG. 3.2 – Représentation diagrammatique de l'Eq. (3.34).

considérer l'exemple de la théorie de Ginzburg-Landau introduit dans (3.23). Nous serons amenés à calculer des contractions entre plusieurs champs au même points. Par exemple, au premier ordre dans la théorie de perturbation, nous sommes amenés à calculer une fonction de corrélation du type $A(x, z, y) = \langle u(x)(u(z))^4 u(y) \rangle_0$. En appliquant le théorème de Wick, on montre facilement que

$$A(x, z, y) = 3G(x - y)G^2(0) + 12G(x - z)G(0)G(z - y) \quad (3.36)$$

La représentation diagrammatique de cette équation est donnée en Fig. 3.3 Le facteur 3 dans

$$A(x, z, y) = 3 \begin{array}{c} \begin{array}{cc} \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{x} & \mathbf{y} \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} \mathbf{x} \\ \mathbf{z} \end{array} \end{array} + 12 \begin{array}{c} \begin{array}{ccc} \mathbf{x} & \mathbf{x} & \mathbf{x} \\ \mathbf{x} & \mathbf{z} & \mathbf{y} \end{array} \\ \hline \begin{array}{c} \mathbf{x} \\ \mathbf{z} \end{array} \end{array}$$

FIG. 3.3 – Représentation diagrammatique de l'Eq. (3.36).

l'Eq. (3.36) correspond à contracter 4 champs deux à deux soit trois paires possibles. Le facteur 12 peut être obtenu de la manière suivante : il nous faut contracter $u(x)$ avec un des quatre champs $u(z)$ soit quatre choix possibles ; pour $u(y)$ il nous reste donc trois choix possibles ce qui explique le facteur 12. Calculer le facteur de symétrie associé à un diagramme peut être parfois un peu compliqué. Nous verrons d'autres exemples en travaux dirigés

Revenons maintenant à la théorie de perturbation associée par exemple à la théorie de Ginzburg-Landau donnée par l'Eq. (3.22). Nous avons vu à l'aide de (3.35) que le calcul de la fonction de corrélation $\langle u(x)u(y) \rangle$ faisait appel uniquement aux diagrammes connexes. Nous avons représenté sur la Fig. 3.4 le développement diagrammatique de la fonction à 2 points $\langle u(x)u(y) \rangle$ au second ordre en λ .

A un diagramme donné, correspond une intégrale. Considérons par exemple le diagramme du premier ordre contenant une boucle. Nous avons déjà rencontré ce diagramme sur la Fig. 3.4. Pour l'obtenir, nous avons contracté $u(x)$ avec $u(z)$, $u(y)$ avec $u(z)$ et deux champs $u(z)$ entre eux. Les variables externes sont x et y , ce qui signifie que l'on intègre sur z . L'intégrale qui en résulte s'écrit :

$$-\beta\lambda S_1 \int d^d z G(x - z)G(z - y)G(0), \quad (3.37)$$

où S_1 est un facteur de symétrie associé au diagramme. En tenant compte du facteur $4!$, $S_1 = \frac{12}{4!} = \frac{1}{2}$. De la même manière, le dernier diagramme de la figure 3.4 correspond à l'intégrable double suivante :

$$(-\beta\lambda)^2 S_2 \int \int d^d z_1 d^d z_2 G(x - z_1)G^3(z_1 - z_2)G(z_2 - y), \quad (3.38)$$

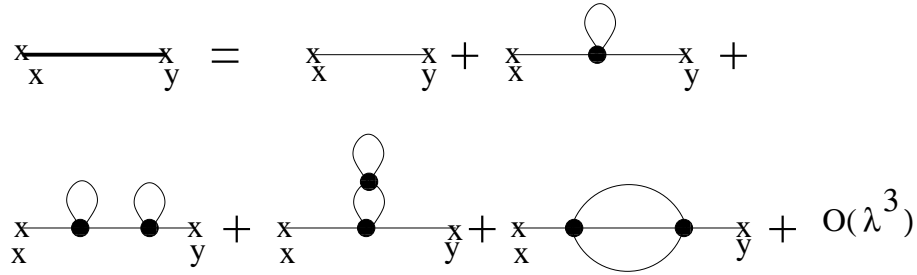


FIG. 3.4 – Représentation diagrammatique du calcul de $\langle u(x)u(y) \rangle$ dans la théorie de Ginzburg Landau au second ordre. La ligne en trait épais correspond à $\langle u(x)u(y) \rangle$. Les lignes en trait fin correspondent à $\langle u(x)u(y) \rangle_0$. A chaque vertex, on associe un point épais. les diagrammes correspondant au second ordre contiennent donc deux points épais Puisque l'on considère une théorie de perturbation en u^4 , nous avons quatre lignes reliées à ce vertex.

où S_2 est un facteur de symétrie qui tient compte du facteur $\frac{1}{2}$ qui vient du développement du second ordre de l'exponentielle, du facteur $\frac{1}{4!}$ et du facteur de comptage. Le lecteur vérifiera que $S_2 = \frac{1}{6}$. On peut ainsi traduire l'ensemble des diagrammes en intégrales.

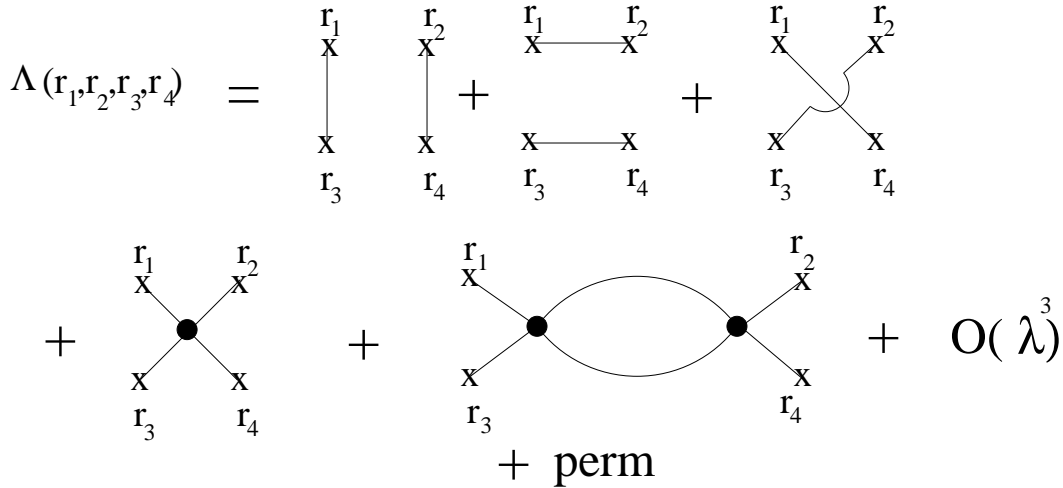


FIG. 3.5 – Représentation diagrammatique du calcul de $\Lambda(r_1, r_2, r_3, r_4)$ dans la théorie de Ginzburg Landau au second ordre.

Cette correspondance entre un diagramme et une intégrale se résume à travers des quelques règles suivantes que l'on appelle règles de Feynman :

- Tracer tous les diagrammes topologiquement inéquivalents à un ordre donné de la théorie de perturbation
- Chaque ligne correspond à un propagateur
- Chaque vertex correspond un facteur $(-\beta\lambda)$ (il est commode d'absorber le facteur redondant β par une redéfinition de λ).
- Intégrer sur toutes les lignes internes
- Multiplier par le bon facteur de symétrie

Quand bien même cet approche diagrammatique donne une vision plus concrète de la théorie de la théorie de perturbation, il ne faut pas oublier les difficultés inhérentes à la méthode :

- Le nombre de diagrammes augmente exponentiellement avec l'ordre de la perturbation

- Les intégrales deviennent de plus en plus compliquées.
- Last but not the least : ces intégrales sont truffées de divergences !

Afin de compléter cette section, nous avons représenté sur la figure 3.5 le calcul au second ordre de la fonction de corrélation à 4 points $\Lambda(r_1, r_2, r_3, r_4) = \langle u(r_1)u(r_2)u(r_3)u(r_4) \rangle$ au second ordre en perturbation. Je laisse le soin au lecteur d'écrire les intégrales correspondantes avec les bons facteurs de symétrie.

Nous avons exposé les diagrammes de Feynman dans l'espace réel. Néanmoins, il est souvent beaucoup plus commode de calculer les intégrales associées dans l'espace de Fourier. Il apparaît alors pratique de représenter les diagrammes de Feynman directement dans l'espace de Fourier. Pour commencer, écrivons (3.22) dans l'espace de Fourier.

$$H = \frac{1}{2} \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} [ck^2 + m]u(k)u(-k) \quad (3.39)$$

$$+ \frac{\lambda}{4!} \prod_{i=1}^4 \int \frac{d^d k_i}{(2\pi)^d} [u(k_1)u(k_2)u(k_3)u(k_4)(2\pi)^2 \delta(k_1 + k_2 + k_3 + k_4)]$$

Cela change légèrement nos diagrammes. Tout d'abord un propagateur sera représenté par une ligne portant un moment comme représenté sur la figure 3.6

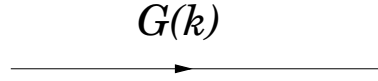


FIG. 3.6 – Représentation schématique du propagateur $G(k)$ dans l'espace des impulsions

A part ce changement, il y a assez peu de différence entre la représentation des diagrammes dans l'espace réel et ceux dans l'espace des k . Nous avons par exemple représenté la correction à une boucle (c.a.d en λ^2) à la fonction à 4 points sur la Fig. 3.7 que nous avons noté $\Lambda_4^{(2)}(k_1, k_2, k_3, k_4)$. L'intégrale associée à ce diagramme vaut :

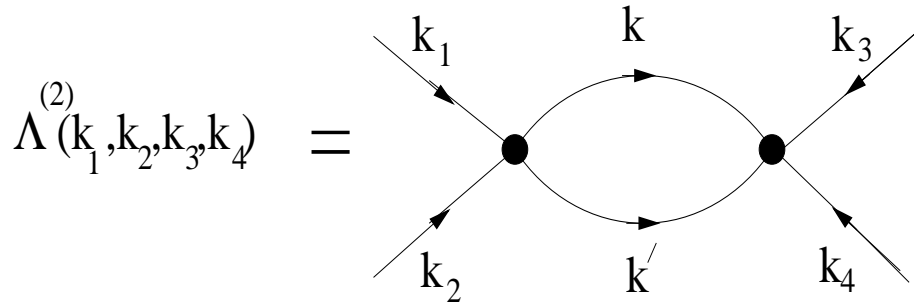


FIG. 3.7 – Représentation diagrammatique dans l'espace des k de la correction en λ^2 à la fonction à 4 points $\Lambda(k_1, k_2, k_3, k_4)$.

$$\Lambda_4^{(2)}(k_1, k_2, k_3, k_4) = (-\beta\lambda)^2 S_4 \left(\prod_{i=1}^4 \frac{1}{k_i^2 + m^2} \right) \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \int \frac{d^d k'}{(2\pi)^d} \frac{1}{k^2 + m^2} \frac{1}{k'^2 + m^2}$$

$$(2\pi)^d \delta(k_1 + k_2 - k - k') (2\pi)^d \delta(k_3 + k_4 + k + k'). \quad (3.40)$$

Il est important de s'assurer qu'à chaque vertex, le moment est conservé. C'est le rôle des fonctions δ dans l'intégrale. Noter que cela impose de manière implicite que $k_1 + k_2 + k_3 + k_4 = 0$

auquel cas le corrélateur vaut zéro. Comme dans l'espace réel, nous pouvons donc résumer ces règles de Feynman dans l'espace des k de la manière suivante :

- Tracer tous les diagrammes topologiquement inéquivalents à un ordre donné de la théorie de perturbation
- Chaque ligne correspond à un propagateur $G(k)$
- Chaque vertex correspond un facteur $(-\beta\lambda)(2\pi)^d\delta(\sum_i q_i)$
- Intégrer sur toutes les lignes internes avec une mesure d'intégration $\int \frac{d^d k}{(2\pi)^d}$
- Multiplier par le bon facteur de symétrie

Dans ces quelques bases, nous avons résumé comment développer de manière systématique la théorie de perturbation à l'aide d'une représentation diagrammatique élégante et nous avons esquissé quelques règles élémentaires qui permettent d'associer une intégrale à un diagramme donné. D'autres exemples seront vus en travaux dirigés. Hélas, nous n'avons pas résolu grand chose. Une première difficulté consiste à calculer ces intégrales qui sont de plus en plus compliquées au fur et à mesure que l'ordre de la perturbation est élevé. Regardons par exemple ...

Nous voyons donc que cette intégrale contient de type de divergences. Toute les intégrales que nous rencontrons dans notre théorie de perturbation sont divergentes. Notre théorie de perturbation ne semble ne faire aucun sens. Ceci pose évidemment un sérieux problème ! Résoudre ces problèmes de divergence et leur donner un sens physique fut sûrement un des problèmes les plus importants de la physique théorique dans les années 60-70. Le groupe de renormalisation permettra d'y remédier et surtout de donner une explication physique très profonde à ce qui peut sembler n'être qu'un problème mathématique. Hélas, ceci sort du cadre de ce cours du premier semestre.

Chapitre 4

Intégrales fonctionnelles pour les systèmes quantiques à une particule

Dans ce chapitre, nous allons traiter le problème quantique. Notre but ultime est de comprendre le problème d'un grand nombre d'objets quantiques en interaction. Il existe un grand nombre de techniques pour aborder ces problèmes fondamentaux (voir par exemple [11]). Dans ce cours, notre stratégie consiste à comprendre comment utiliser l'intégrale fonctionnelle. Avant d'attaquer le problème de N particules quantiques, essayons déjà de mettre en place notre formalisme d'intégrale fonctionnelle pour traiter les problèmes à **une** particule quantique. Cette approche, due à Feynman, permet de formuler la mécanique quantique comme une intégrale de chemin.

4.1 Formulation en temps réel

Nota bene : Afin de ne pas alourdir les notations, je n'ai pas différencié les opérateurs (qui l'on note dans certains ouvrages avec un chapeau) de leurs valeurs propres.

4.1.1 Généralités

Considérons un système quantique décrit par une fonction d'onde $|\psi\rangle$ et un Hamiltonien H . L'évolution temporelle de la fonction d'onde est donnée par l'équation de Schroedinger

$$H|\psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi(t)\rangle. \quad (4.1)$$

H peut en principe dépendre explicitement du temps (par exemple si le système est soumis à un potentiel externe dépendant du temps). L'équation de Schroedinger (4.1) définit l'opérateur d'évolution qui fait passer le système du temps t_1 au temps t_2 :

$$|\psi(t_2)\rangle = U(t_2, t_1)|\psi(t_1)\rangle. \quad (4.2)$$

L'opérateur d'évolution obéit à l'équation

$$i\hbar \frac{\partial U(t, 0)}{\partial t} = H(t)U(t, 0), \quad (4.3)$$

avec la condition initiale $U(0, 0) = 1$. Si l'on traitait une équation purement algébrique, la solution serait simplement

$$U(t, 0) = e^{-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' H(t')}. \quad (4.4)$$

Néanmoins, $H(t)$ est un opérateur et, en général, $H(t)$ et $H(t')$ ne commutent pas. Par contre si l'hamiltonien est indépendant du temps, on a alors

$$U(t_2, t_1) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t_2-t_1)}. \quad (4.5)$$

L'opérateur d'évolution possède la propriété suivante : pour $t_1 < t_2 < t_3$

$$U(t_3, t_1) = U(t_3, t_2)U(t_2, t_1). \quad (4.6)$$

Nous allons utiliser cette propriété pour diviser l'intervalle $[t_i, t_f]$ en N segments de même durée $\epsilon = (t_f - t_i)/N$ pour obtenir

$$U(t_f, t_i) = U(t_f, t_N)U(t_N, t_{N-1}) \cdots U(t_2, t_i) \quad (4.7)$$

Pour N suffisamment grand, on a $\epsilon \rightarrow 0$ et donc

$$U(t + \epsilon, t) = e^{-\frac{i}{\hbar}H(t)\epsilon} \approx 1 - \frac{i}{\hbar}H(t)\epsilon \quad (4.8)$$

Noter que cette propriété reste valable également si H dépend du temps. Donc les équations (4.7) et (4.8) permettent en principe de calculer complètement l'opérateur d'évolution.

Un calcul plus rigoureux de l'opérateur d'évolution peut être mené à partir de l'équation (4.3). L'idée consiste à résoudre (4.3) par itération successive :

$$U(t_f, t_i) = 1 + (-i/\hbar) \int_{t_i}^{t_f} dt_1 H(t_1) + (-i/\hbar)^2 \int_{t_i}^{t_f} dt_1 \int_{t_i}^{t_1} dt_2 H(t_1)H(t_2) + \cdots \quad (4.9)$$

Remarquez que dans l'Eq.(4.9) les opérateurs sont toujours ordonnés de telle manière à ce que l'opérateur le plus à gauche ait le temps le plus grand. On peut récrire formellement cette expression en introduisant un opérateur T qui ordonne les opérateurs en temps de la manière suivante :

$$T(O(t_1)O(t_2)) \equiv \theta(t_1 - t_2)O(t_1)O(t_2) + \theta(t_2 - t_1)O(t_2)O(t_1) \quad (4.10)$$

Avec cette notation, on peut alors écrire (4.9) de cette manière :

$$U(t_f, t_i) = 1 + (-i/\hbar) \int_{t_i}^{t_f} dt_1 H(t_1) + \frac{(-i/\hbar)^2}{2!} \int_{t_i}^{t_f} dt_1 \int_{t_i}^{t_1} dt_2 T[H(t_1)H(t_2)] + \cdots \quad (4.11)$$

On reconnaît le développement formel de l'exponentielle

$$U(t_f, t_i) = T[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt H(t)}]. \quad (4.12)$$

Cette expression coïncide bien évidemment avec l'expression (4.4) lorsque les opérateurs commutent mais aussi avec (4.5) quand H ne dépend pas du temps. On peut aussi montrer que (4.12) et (4.7) coïncident dans la limite N grand.

Jusqu'à maintenant nous avons donné diverses expressions formelles de l'opérateur d'évolution. Essayons d'évaluer explicitement (4.8). Pour ce faire, nous allons traiter le cas le plus simple d'un Hamiltonien totalement séparable en u et P , où u est l'opérateur position et P l'opérateur impulsion. Cet Hamiltonien prend la forme de

$$H = H_0(P) + V(u), \quad (4.13)$$

qui est un cas assez générique (typiquement $H_0(P) = P^2/(2m)$). Le cas général est analysé dans [6, 1].

Calculons les éléments de matrice $\langle u_f | U(t_f, t_i) | u_i \rangle$. On utilise le fait que les $\{u_i\}$ forment une base complète

$$\langle u_f | U(t_f, t_i) | u_i \rangle = \int du_N \int du_{N-1} \cdots \int du_2 \langle u_f | U(t_f, t_N) | u_N \rangle \langle u_N | U(t_N, t_{N-1}) | u_{N-1} \rangle \cdots \langle u_2 | U(t_2, t_i) | u_i \rangle \quad (4.14)$$

Nous avons donc réduit le calcul de l'opérateur d'évolution au calcul d'un élément de matrice de la forme

$$\langle u_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} H(t)\epsilon} | u_1 \rangle. \quad (4.15)$$

On effectue le calcul à l'ordre ϵ dans la mesure où l'on veut prendre à la fin du calcul la limite $\epsilon \rightarrow 0$.

$$e^{-\frac{i}{\hbar}(H_0(P)+V(u))\epsilon} \simeq e^{-\frac{i}{\hbar}H_0(P)\epsilon} e^{-\frac{i}{\hbar}V(u)\epsilon}. \quad (4.16)$$

Noter que ce résultat est valable même si H_0 et V ne commutent pas, car $\epsilon \rightarrow 0$. Ainsi,

$$\begin{aligned} \langle u_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} H(t)\epsilon} | u_1 \rangle &= \int dp \langle u_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} H_0(P)\epsilon} | p \rangle \langle p | e^{-\frac{i}{\hbar} V(u)\epsilon} | u_1 \rangle \\ &= \int dp \langle u_2 | p \rangle \langle p | u_1 \rangle e^{-\frac{i}{\hbar} H_0(p)\epsilon} e^{-\frac{i}{\hbar} V(u_1)\epsilon} \\ &= \int dp \frac{1}{(2\pi)^d} e^{\frac{i}{\hbar} p(u_2 - u_1)} e^{-\frac{i}{\hbar} [H_0(p) + V(u_1)]\epsilon} \\ &= \int dp \frac{1}{(2\pi)^d} e^{\frac{i}{\hbar} \epsilon [p \frac{(u_2 - u_1)}{\epsilon} - [H_0(p) + V(u_1)]]}. \end{aligned} \quad (4.17)$$

Dans l'expression ci-dessus, nous avons considéré une dimension d'espace $d = 1$. En dimension d quelconque il suffit de remplacer $u \rightarrow \mathbf{u}$ et $P \rightarrow \mathbf{P}$.

Revenant à (4.7), on peut formellement décrire les éléments de matrice de l'opérateur d'évolution $\langle u_f | U(t_f, t_i) | u_i \rangle$ en définissant une trajectoire arbitraire $u(t)$ commençant à u_i au temps t_i et finissant à u_f au temps t_f . Si l'on discrétise la variable temporelle comme représenté sur la Fig. 4.1, u_k correspond alors à la valeur de u au temps t_k .

Dans ce cas

$$\frac{u_{k+1} - u_k}{\epsilon} = \frac{u(t_k + \epsilon) - u(t_k)}{\epsilon} \simeq \left. \frac{du}{dt} \right|_{t_k}. \quad (4.18)$$

Considérons par exemple le cas où $H_0(P) = P^2/(2m)$. Dans ce cas, on peut facilement effectuer l'intégrale sur p dans (4.17) car elle est Gaussienne (noter que $\int dp e^{-iap^2} = \sqrt{\frac{\pi}{ia}}$ avec a réel)

$$\langle u_2 | e^{-\frac{i}{\hbar} H(t)\epsilon} | u_1 \rangle = \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar} \right)^{d/2} e^{\frac{i}{\hbar} \left[\frac{m}{2} \left(\frac{u_2 - u_1}{\epsilon} \right)^2 - V(u_1) \right] \epsilon}. \quad (4.19)$$

Donc (4.7) devient (avec la convention $u_1 = u_i$, $u_f = u_{N+1}$) :

$$\begin{aligned} \langle u_f | U(t_f, t_i) | u_i \rangle &= \prod_{j=2}^N \int \frac{du_j}{A} e^{\frac{i}{\hbar} \sum_{i=1}^N \epsilon \left[\frac{m}{2} \left(\frac{u_{i+1} - u_i}{\epsilon} \right)^2 - V(u_i) \right]} \\ &= \int_{u(t_i)=u_i}^{u(t_f)=u_f} \mathcal{D}u e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt \left[\frac{m}{2} \left(\frac{du(t)}{dt} \right)^2 - V(u(t)) \right]} \end{aligned} \quad (4.20)$$

où $A \equiv \left(\frac{2\pi i \epsilon \hbar}{m}\right)^{d/2}$ est la normalisation définie dans (4.19). On reconnaît dans la forme de l'Eq. (4.20) l'action S du système

$$S = \int dt L[u, \dot{u}] = \int dt \left[\frac{m}{2} \left(\frac{du(t)}{dt} \right)^2 - V(u(t)) \right], \quad (4.21)$$

où $L[u, \dot{u}]$ est le Lagrangien du système. Dans cette formulation, l'élément de matrice se met finalement sous la forme

$$\langle u_f | U(t_f, t_i) | u_i \rangle = \int_{u(t_i)=u_i}^{u(t_f)=u_f} \mathcal{D}u[t] e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt L[u, \dot{u}]}. \quad (4.22)$$

Noter qu'il n'est pas nécessaire d'effectuer l'intégrale sur p auquel cas on peut récrire (4.22) sous la forme

$$\langle u_f | U(t_f, t_i) | u_i \rangle = \int_{u(t_i)=u_i}^{u(t_f)=u_f} \mathcal{D}u \mathcal{D}p e^{\frac{i}{\hbar} \int_{t_i}^{t_f} dt [p \left(\frac{du(t)}{dt} \right) - H[u, P]]}, \quad (4.23)$$

où l'on peut reconnaître l'expression plus générale du Lagrangien défini comme la transformée de Legendre du hamiltonien

$$p \left(\frac{du(t)}{dt} \right) - H[u, P] = L[u, \dot{u}] \quad (4.24)$$

L'équation (4.22) est tout à fait remarquable. Cela prouve que l'opérateur d'évolution peut être vu comme une somme sur toutes les trajectoires (ou chemins) possibles de la particule. Le poids de chaque trajectoire est $e^{iS/\hbar}$. Dans cette image, toutes les trajectoires contribuent et interfèrent. L'équation (4.22) fournit ainsi une belle illustration des différences entre le monde quantique et le monde classique. De plus, ce formalisme est finalement relativement proche de notre perception de la mécanique quantique dans sa version ondulatoire. D'un point de vue plus pratique, l'Eq. (4.22) remplace le problème du calcul d'éléments de matrice par une intégrale sur des nombres, ce qui implique que l'on peut utiliser toutes les techniques et astuces connues sur le calcul d'intégrales. Il s'agit donc non seulement d'une formulation élégante de la mécanique quantique mais également d'une technique puissante d'un point de vue prédictif. Néanmoins, le prix à payer est parfois l'apparition de divergences¹ y compris pour les problèmes simples. Il faut alors régulariser l'intégrale de chemin notamment en repassant au réseau.

Revenons par exemple sur le cas d'une particule libre décrite par l'hamiltonien $H_0 = \frac{p^2}{2m}$. Définissons $G(u_f, u_i; t) = \langle u_f | U(t) | u_i \rangle$ l'amplitude pour qu'une particule injectée en u_i à $t = 0$ soit en u_f à l'instant $t > 0$. La notation G n'est pas le fruit du hasard car cette amplitude peut être vue comme un propagateur ou fonction de Green. Pour effectuer ce calcul, le plus simple est en fait de discrétiser de nouveau l'intégrale de chemin comme dans l'Eq. (4.19). On obtient alors directement le résultat

$$G(u_f, u_i; t) = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar t} \right)^{\frac{1}{2}} e^{\frac{i}{\hbar} \frac{m}{2t} (u_f - u_i)^2}. \quad (4.25)$$

¹ Noter notamment que $\int \mathcal{D}u \equiv \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \prod_{j=2}^N \int \frac{du_j}{A}$ où $\frac{1}{A} = \left(\frac{m}{2\pi i \epsilon \hbar}\right)^d \rightarrow \infty!$

4.1.2 Limite semi-classique

Revenons à l'équation (4.22). On prendra $t_i = 0$ et $t_f = t$. Dans la limite $\hbar \rightarrow 0$, seule la trajectoire qui minimise l'action survit dans cette limite. Les autres trajectoires non stationnaires impliquent de grandes fluctuations de phase dans l'intégrale qui se moyennent à zéro.

Cette trajectoire vérifie

$$\delta S[u] = 0 \implies \left(\frac{d}{dt} \partial_{\dot{u}} - \partial_u \right) L(u, \dot{u}) = 0,$$

qui est l'équation de mouvement classique (Euler-Lagrange). Les solutions sont donc les trajectoires classiques. Ces équations doivent être résolues avec des conditions de bord déterminées, par exemple $u(0) = u_i$ et $u(t) = u_f$. Il est bien sûr satisfaisant de voir que l'intégrale de chemin comporte la trajectoire classique. Dans la limite où \hbar est petit, cela n'implique pas pour autant que la mécanique quantique a disparu. Comme nous l'avons déjà vu dans l'approximation du point col au chap. 3, ce n'est pas seulement le point col qui fournit la physique mais aussi les fluctuations autour du point col. De la même manière, l'intégrale de chemin nous permet d'analyser de manière systématique les fluctuations autour de la trajectoire classique. Pour ce faire, introduisons la variable $x(t) = u(t) - u_{cl}(t)$ où u_{cl} désigne la trajectoire classique. la variable x décrit la déviation par rapport à la trajectoire classique et vérifie $x(0) = 0$ et $x(t) = 0$. Nous supposons pour simplifier la discussion, qu'il n'existe qu'une seule trajectoire classique connectant les points u_i et u_f dans un temps t . Nous effectuons un développement au second ordre de l'action autour de la trajectoire classique et utilisons l'approximation de la phase stationnaire pour négliger les trajectoires non stationnaires. Nous obtenons alors

$$\langle u_f | e^{-iHt/\hbar} | u_i \rangle \approx e^{iS[u_{cl}]/\hbar} \int_{x(0)=x(t)=0} \mathcal{D}x \exp \left[\frac{i}{2\hbar} \int_0^t \int_0^t dt' dt'' x(t') \frac{\delta^2 S[u]}{\delta u(t') \delta u(t'')} \Big|_{u=u_{cl}} x(t'') \right], \quad (4.26)$$

où la variable x désigne l'écart à la trajectoire classique. A partir de l'équation (4.22), il est facile de calculer la dérivée seconde dans l'Eq. (4.26). Nous obtenons

$$\frac{1}{2} \int_0^t \int_0^t dt' dt'' x(t') \frac{\delta^2 S[u]}{\delta u(t') \delta u(t'')} \Big|_{u=u_{cl}} x(t'') = -\frac{1}{2} \int_0^t dt' x(t') [m\partial_t^2 + V''(u_{cl}(t))] x(t'), \quad (4.27)$$

où nous avons introduit la dérivée seconde ordinaire $V''(u_{cl}(t)) = \partial_u^2 V(u)|_{u=u_{cl}}$. L'intégration sur x est une intégrale Gaussienne qui est reliée à la racine carrée du déterminant de l'opérateur $m\partial_t^2 + V''(u_{cl}(t))$. Cet opérateur agit dans l'espace des fonctions $x(t)$ avec des conditions de bord $x(0) = x(t) = 0$. Pour comprendre la signification de ce résultat formel, il suffit comme d'habitude de revenir au discret, auquel cas le résultat s'écrit en fonction de la racine du déterminant d'une matrice. Nous verrons des exemples un peu plus loin et en travaux dirigés. Toute l'analyse précédente suppose que l'opérateur soit défini positif c.a.d. que l'opérateur ait toutes ses valeurs propres strictement positives.

En poussant notre analyse des fluctuations autour de la trajectoire classique, on peut écrire l'élément de matrice $\langle u_f | e^{-iHt/\hbar} | u_i \rangle$ sous la forme approchée compacte suivante

$$\langle u_f | e^{-iHt/\hbar} | u_i \rangle \approx \left[\det \left(\frac{i}{2\pi\hbar} \frac{\delta^2 S[u_{cl}]}{\delta u_i \delta u_f} \right) \right]^{-1/2} e^{i\frac{S[u_{cl}]}{\hbar}}. \quad (4.28)$$

C'est la base du développement semi-classique. On peut légitimement s'interroger sur le bien-fondé de cette approximation. Quel rôle jouent les termes au delà du deuxième ordre? Il

est difficile de répondre à cette question de manière générale. Il faut regarder au cas par cas. Néanmoins, on peut faire remarquer que cette formulation en temps réel de l'intégrale de chemin se prête mal à un développement limité contrôlé de l'action autour de la trajectoire classique. Nous allons voir dans le paragraphe suivant une formulation en temps imaginaire de l'intégrale de chemin qui présente, entre autres, l'intérêt de faciliter un développement contrôlé de l'action (voir par exemple la ref. [8]).

4.2 Calcul de la fonction de partition : formulation en temps imaginaire

Supposons que le système soit en contact avec un thermostat. La fonction de partition quantique du système est alors décrit par

$$Z = \text{Tr}[e^{-\beta H}], \quad (4.29)$$

où Tr signifie la trace, c.a.d. la somme sur tous les états d'une base complète. Nous supposons que le système a atteint un équilibre thermique ce qui implique que l'hamiltonien soit indépendant du temps. En utilisant u comme base complète, la fonction de partition s'écrit

$$Z = \int du \langle u | e^{-\beta H} | u \rangle. \quad (4.30)$$

On peut formellement diviser l'inverse de la température β en N segments de taille $\epsilon = \beta/N$. Z devient alors

$$Z = \int du \int du_{N-1} \cdots \int du_2 \langle u | e^{-\epsilon H} | u_{N-1} \rangle \cdots \langle u_2 | e^{-\epsilon H} | u \rangle. \quad (4.31)$$

On peut immédiatement reconnaître que (4.31) et (4.7) sont identiques exception faite des deux points suivants :

- (i) $u_f = u_i = u$ et on intègre sur u ;
- (ii) Au lieu de $e^{-\frac{i}{\hbar} H \frac{t}{N}}$ on a $e^{-H \frac{\beta}{N}}$.

D'un point de vue purement formel, on a ainsi remplacé it dans l'exponentielle par un temps complexe τ qui est compris entre 0 et $\beta\hbar$. On parle alors de temps imaginaire qui n'a d'existence que sur le plan formel.

D'un point de vue technique, on peut suivre les mêmes étapes qui ont mené à l'Eq. (4.22) pour écrire la fonction de partition sous la forme

$$Z = \int du \int_{u(0)=u}^{u(\beta\hbar)=u} \mathcal{D}u(\tau) e^{-\frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau [\frac{m}{2} (\frac{du(\tau)}{d\tau})^2 + V(u(\tau))]} = \int du \int_{u(0)=u}^{u(\beta\hbar)=u} \mathcal{D}u(\tau) e^{-\frac{1}{\hbar} S_\beta[u]} \quad (4.32)$$

La fonction de partition (4.32) s'écrit ainsi comme la somme sur toutes les trajectoires fermées par rapport à un temps fictif imaginaire τ comme représenté de manière schématique sur la figure 4.1. Remarquez que l'argument dans l'exponentielle est bien la continuation analytique de l'action en passant vers un temps imaginaire que l'on peut écrire de manière précise sous la forme suivante

$$\frac{i}{\hbar} \int_0^{t_f} dt L[u, \frac{du}{dt}] \rightarrow \frac{1}{\hbar} \int_0^{\beta\hbar} d\tau L[u, i \frac{du}{d\tau}]. \quad (4.33)$$

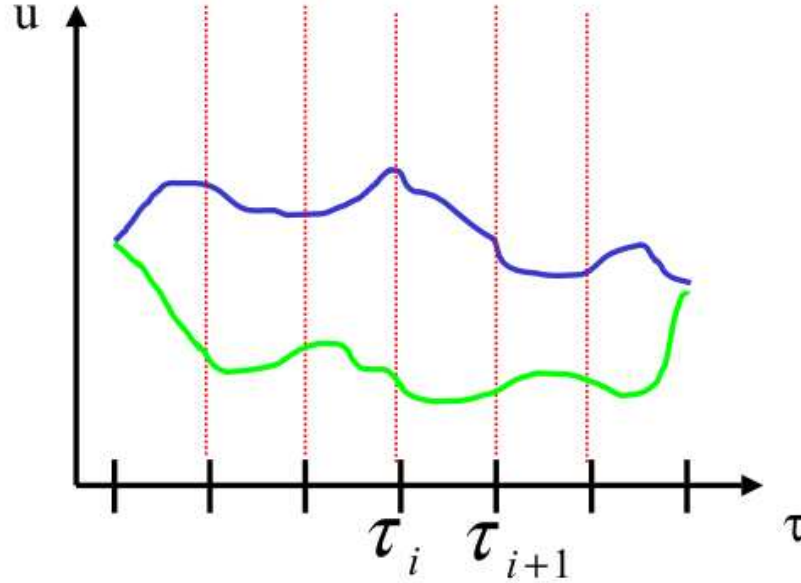


FIG. 4.1 – . L'opérateur d'évolution peut être défini comme une intégrale fonctionnelle sur toutes les trajectoires commençant à u_i au temps τ_i et finissant à u_f au temps τ_f .

Il est important de remarquer que contrairement à l'action en temps réel (4.21), l'action en temps imaginaire S_β

$$S_\beta = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \left[\frac{m}{2} \left(\frac{du(\tau)}{d\tau} \right)^2 + V(u(\tau)) \right], \quad (4.34)$$

est une forme positive qui se prête donc plus facilement aux développements. En effet, l'intégrale (4.32) ne pose pas de problème de convergence. C'est là un avantage considérable du temps imaginaire qui permet d'ailleurs une formulation plus rigoureuse des développements semi-classiques.

Comme pour l'intégrale de chemin en temps réel, il y a une représentation "Hamiltonienne" où l'on intègre par sur p

$$Z = \int \mathcal{D}u(\tau) \mathcal{D}p(\tau) e^{\frac{1}{\hbar} [i \int_0^{\beta\hbar} d\tau p \left(\frac{du(\tau)}{d\tau} \right) - \int_0^{\beta\hbar} d\tau H[p(\tau), u(\tau)]]}. \quad (4.35)$$

A partir de maintenant, afin de ne pas alourdir les notations, on suppose que $\hbar = 1$. Les \hbar manquants peuvent être facilement restitués par une analyse dimensionnelle.

4.3 Fonctions de corrélations et fréquences de Matsubara

Nous avons vu que l'on pouvait calculer la fonction de partition d'un système quantique à l'aide d'intégrales fonctionnelles. L'expression (4.32) permet également de formuler le calcul des fonctions de corrélations comme nous l'avons fait dans l'équation (2.6)

$$\langle O(\tau_1) O(\tau_2) \cdots O(\tau_p) \rangle = \frac{\int_{u(0)=u(\beta)} \mathcal{D}u(\tau) e^{-S_\beta} O(\tau_1) O(\tau_2) \cdots O(\tau_p)}{\int_{u(0)=u(\beta)} \mathcal{D}u(\tau) e^{-S_\beta}}, \quad (4.36)$$

où les $O(\tau_i)$ sont des fonctions des $u(\tau_i)$. Notez que comme pour les systèmes classiques les fonctions de corrélations (4.36) peuvent être définies directement comme des dérivées de la

fonction de partition comme dans (2.9). On peut donc remarquer un grand nombre de similarités entre la fonction de partition d'un système quantique calculée à l'aide de l'intégrale fonctionnelle et celles de systèmes classiques. Il existe effectivement des connexions très profondes que nous allons explorer en détail dans la paragraphe 5.2

Une question importante est bien évidemment la signification physique d'une telle fonction de corrélation (4.36). Pour comprendre son sens, revenons à notre système quantique. Si l'on commence avec un certain état $|\psi(t=0)\rangle$, on peut avoir un opérateur O_1 agissant sur cet état au temps t_1 .

$$O_1|\psi(t_1)\rangle = O_1U(t_1, 0)|\psi(t=0)\rangle. \quad (4.37)$$

On peut ensuite laisser évoluer ce nouvel état jusqu'au temps t_2 et ensuite appliquer un opérateur O_2 . Le résultat est un nouvel état

$$O_2U(t_2, t_1)O_1U(t_1, 0)|\psi(t=0)\rangle, \quad (4.38)$$

et ainsi de suite si l'on a p opérateurs agissant au temps t_1, t_2, \dots, t_p . Si on se limite à $p = 2$, l'Eq. 4.38) représente l'état obtenu en partant de $|\psi(t=0)\rangle$ et dont l'évolution temporelle a été modifiée par l'application des opérateurs O_1 et O_2 aux temps t_1 et t_2 . On peut par exemple comparer l'état ainsi obtenu avec l'évolution de l'état $|\psi(t=0)\rangle$ jusqu'au temps t_2 en l'absence d'application d'opérateur. Le résultat est

$$\begin{aligned} &\langle \psi(t=0) | U^\dagger(t_2, 0) O_2 U(t_2, t_1) O_1 U(t_1, 0) | \psi(t=0) \rangle \\ &\langle \psi(t=0) | U(0, t_2) O_2 U(t_2, t_1) O_1 U(t_1, 0) | \psi(t=0) \rangle \end{aligned} \quad (4.39)$$

Une représentation alternative pour (4.39) consiste à utiliser la représentation de Heisenberg, où les états ne dépendent pas temps tandis que les opérateurs évoluent avec le temps selon

$$\widehat{O}_1(t) = e^{iHt} O_1 e^{-iHt}, \quad (4.40)$$

pour un Hamiltonien ne dépendant pas du temps. Nous avons utilisé la notation $\widehat{O}_1(t)$ pour les opérateurs dans la représentation de Heisenberg. L'eq. (4.39) devient pour $t_2 > t_1$

$$\langle \psi(t=0) | \widehat{O}_2(t_2) \widehat{O}_1(t_1) | \psi(t=0) \rangle. \quad (4.41)$$

Considérons la continuation analytique en temps imaginaire des opérateurs en représentation de Heisenberg

$$\widetilde{O}_1(\tau) = e^{\tau H} O_1 e^{-\tau H}. \quad (4.42)$$

Contrairement au temps réel $[\widetilde{O}(\tau)]^\dagger \neq \widetilde{O}^\dagger(\tau)$. Cherchons à calculer

$$\frac{\text{Tr}[e^{-\beta H} \widetilde{O}_2(\tau_2) \widetilde{O}_1(\tau_1)]}{\text{Tr}[e^{-\beta H}]}, \quad (4.43)$$

mais cette expression est de peu d'intérêt puisque les opérateurs ne commutent pas en général. On peut alors essayer un opérateur d'ordonnancement temporel T_τ mais qui agit cette fois sur des temps imaginaires. Supposons que $\tau \in [0, \beta]$ et définissons T_τ de manière similaire à (4.10),

$$T_\tau(\widetilde{O}(\tau_1) \widetilde{O}(\tau_2)) = \theta(\tau_1 - \tau_2) \widetilde{O}(\tau_1) \widetilde{O}(\tau_2) + \theta(\tau_2 - \tau_1) \widetilde{O}(\tau_2) \widetilde{O}(\tau_1). \quad (4.44)$$

Calculons

$$\frac{\text{Tr}[e^{-\beta H} T_\tau(\widetilde{O}_2(\tau_2) \widetilde{O}_1(\tau_1))]}{\text{Tr}[e^{-\beta H}]}. \quad (4.45)$$

Le dénominateur est simplement la fonction de partition Z . Du fait de l'opérateur T_τ , on peut réarranger les opérateurs dans l'Eq. (4.45) comme

$$\text{Tr}[e^{-(\beta-\tau_2)H} O_2 e^{-(\tau_2-\tau_1)H} O_1 e^{-\tau_1 H}] \quad \tau_2 > \tau_1 \quad (4.46)$$

$$\text{Tr}[e^{-(\beta-\tau_1)H} O_1 e^{-(\tau_1-\tau_2)H} O_2 e^{-\tau_2 H}] \quad \tau_1 > \tau_2. \quad (4.47)$$

En utilisant $|u\rangle$ comme base complète, on peut récrire (4.46) comme (en supposant par exemple $\tau_2 > \tau_1$)

$$\int du \int du_2 \int du_1 \langle u | e^{-(\beta-\tau_2)H} | u_2 \rangle \langle u_2 | O_2 e^{-(\tau_2-\tau_1)H} | u_1 \rangle \langle u_1 | O_1 e^{-\tau_1 H} | u \rangle. \quad (4.48)$$

Si les opérateurs O sont fonctions de u , alors

$$O|u\rangle = O(u)|u\rangle. \quad (4.49)$$

On peut ainsi écrire (4.48) comme

$$\int du \int du_2 \int du_1 O_2(u_2) O_1(u_1) \langle u | e^{-(\beta-\tau_2)H} | u_2 \rangle \langle u_2 | e^{-(\tau_2-\tau_1)H} | u_1 \rangle \langle u_1 | e^{-\tau_1 H} | u \rangle. \quad (4.50)$$

Maintenant, chaque élément de matrice de (4.50) peut être écrit comme une intégrale fonctionnelle comme précédemment :

$$\langle u_2 | e^{-(\tau_2-\tau_1)H} | u_1 \rangle = \int_{u(\tau_1)=u_1}^{u(\tau_2)=u_2} \mathcal{D}u[\tau] e^{-\int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau L(\tau)}. \quad (4.51)$$

Cela donne pour (4.50)

$$\begin{aligned} & \int du \int du_1 \int du_2 O_2(u_2) O_1(u_1) \int_{u(\tau_2)=u_2}^{u(\beta)=u} \mathcal{D}u[\tau] \int_{u(\tau_1)=u_1}^{u(\tau_2)=u_2} \mathcal{D}u'[\tau] \int_{u(0)=u}^{u(\tau_1)=u_1} \mathcal{D}u''[\tau] \\ & e^{-\int_{\tau_2}^{\beta} d\tau L(u(\tau))} e^{-\int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau L(u'(\tau))} e^{-\int_0^{\tau_1} d\tau L(u''(\tau))} \\ & = \int_{u(0)=u(\beta)} \mathcal{D}u[\tau] O_2(u(\tau_2)) O_1(u(\tau_1)) e^{-\int_0^{\beta} d\tau L(u(\tau))} \end{aligned} \quad (4.52)$$

qui est évidemment similaire à (4.36).

Les fonctions de corrélation obtenues par l'intégrale fonctionnelle ont donc une interprétation assez naturelle en terme d'opérateurs. Ce sont les moyennes sur les opérateurs agissant aux temps τ_1, τ_2 etc. Par contre, l'ordre dans lequel les opérateurs doivent être pris est déterminé par l'ordre en temps. Le fait que la correspondance entre intégrales fonctionnelles et opérateurs implique de spécifier un ordre temporel peut être vu comme le prix à payer pour travailler avec des nombres au lieu d'opérateurs. L'intégrale fonctionnelle apparaît ainsi comme un moyen très pratique pour calculer les fonctions de corrélation en temps imaginaire. Noter que des considérations analogues s'appliquent aussi aux fonctions de corrélation en temps réel à condition que l'hamiltonien ne dépende pas du temps! Le cas d'hamiltonien dépendant du temps est plus délicat et est traité par exemple dans [14].

La fait que les fonctions de corrélation calculées par l'intégrale fonctionnelle aient une correspondance opératorielle est en soit satisfaisant. Néanmoins, il faut bien garder à l'esprit qu'une fonction de corrélation en temps imaginaire n'a pas de sens physique!!!

En effet le temps imaginaire est avant tout une astuce de calcul sans interprétation directe en

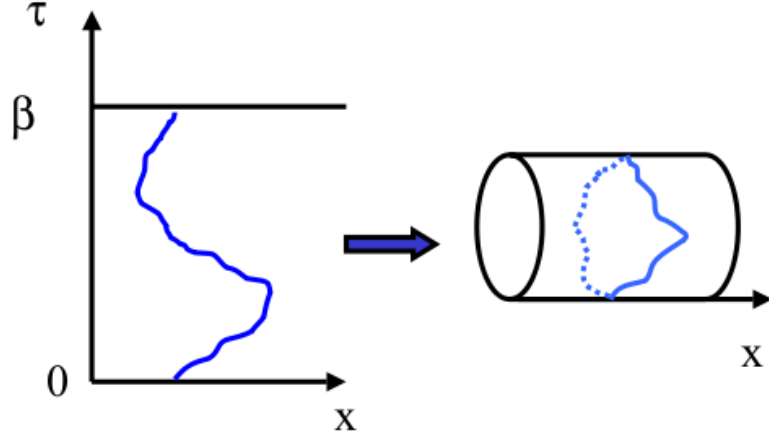


FIG. 4.2 – Dans l'intégrale fonctionnelle, on somme sur toutes les fonctions qui satisfont $u(0) = u(\beta)$, il est équivalent de considérer que le système est défini sur un tore de circonférence β .

temps réel. Heureusement, il est relativement facile de déduire les fonctions de corrélations en temps réel par une continuation analytique. Nous reviendrons là dessus dans le chapitre 7.

Avant de donner quelques exemples, analysons quelques propriétés de l'intégrale fonctionnelle à une particule. Dans l'intégrale fonctionnelle, on somme sur toutes les fonctions qui satisfont $u(0) = u(\beta)$. Le système est donc périodique dans la direction du temps imaginaire comme représenté sur la Fig. 4.2 Cela implique que toutes les fonctions de corrélation en temps imaginaire peuvent être vues comme des fonctions périodiques sur l'intervalle $[0, \beta]$. Dans ce cas, la fonctions de corrélation ont un développement en série de Fourier. Ou de manière équivalente, la transformée de Fourier des fonctions de corrélation est obtenue en sommant sur un ensemble *discret* de fréquences de Fourier $\omega_n = 2\pi n/\beta$:

$$G(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n\tau} G(\tau) \quad (4.53)$$

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n\tau} G(i\omega_n). \quad (4.54)$$

Les fréquences ω_n sont appelées les fréquences de Matsubara. La notation $G(i\omega_n)$ est là pour nous rappeler que nous travaillons avec des fréquences associées au temps imaginaire.

Même si les fonctions de corrélation en temps imaginaire n'ont pas de sens physique en général, une exception notable est le cas de la fréquence $\omega_n = 0$. En effet, si l'on ajoute à un Hamiltonien une perturbation qui ne dépend pas du temps, le Lagrangien s'écrit

$$L_{\text{pert}} = - \int_0^\beta d\tau \int dx h(x) O(x, \tau) = - \int dx h(x) O(x, \omega_n = 0), \quad (4.55)$$

où O est un opérateur fonction de u . On peut donc développer une théorie de la réponse linéaire comme dans le paragraphe 2.2 pour trouver que

$$\langle O(x) \rangle = \int dx' \chi(x, x') h(x'). \quad (4.56)$$

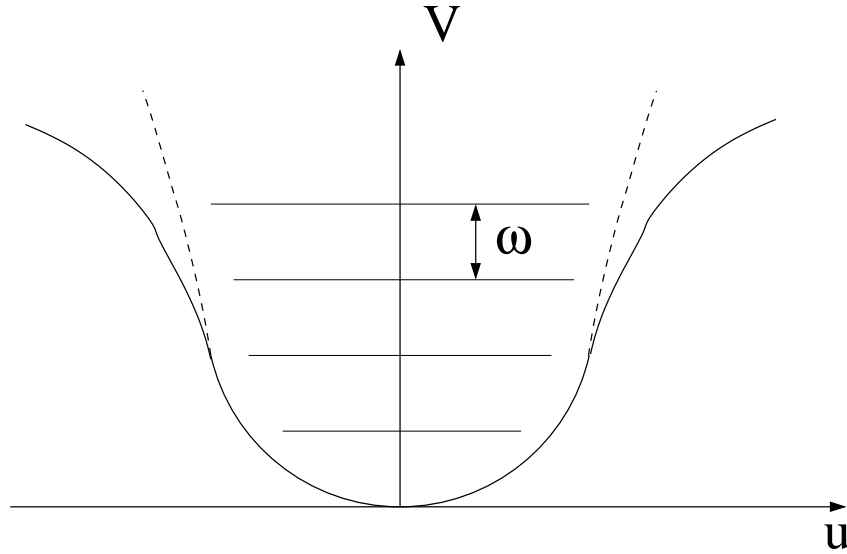


FIG. 4.3 –

Du fait de l'invariance par rapport au temps de l'hamiltonien, seule la fréquence $\omega_n = 0$ peut être non nulle dans (4.56). Comme l'hamiltonien est indépendant du temps

$$\begin{aligned} \langle O(x) \rangle &= \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\tau \langle O(x, \tau) \rangle \\ &= \frac{1}{\beta} \langle O(x, \omega_n = 0) \rangle \end{aligned} \quad (4.57)$$

Ainsi la susceptibilité est donnée par

$$\beta\chi(x, x') = \langle O(x, \omega_n = 0)O(x', \omega_n = 0) \rangle - \langle O(x, \omega_n = 0) \rangle \langle O(x', \omega_n = 0) \rangle \quad (4.58)$$

Cette formule permet de calculer la plupart des propriétés thermodynamiques du système. Ceci illustre également la puissance de cette représentation en terme d'intégrales fonctionnelles.

4.4 Quelques exemples

Nous allons appliquer dans cette partie les considérations formelles vues précédemment à travers trois exemples tirés de [5]. Les deux premiers sont académiques, le troisième est beaucoup plus riche et s'applique à de nombreuses situations physiques.

4.4.1 Particule dans un puits de potentiel

Considérons une particule quantique dans un puits de potentiel V à une dimension comme représenté schématiquement sur la Fig. 4.3.

Nous supposons le potentiel symétrique, $V(u) = V(-u)$ avec $V(0) = 0$. La particule est décrite par l'hamiltonien $H = \frac{p^2}{2m} + V(u)$. Nous cherchons à calculer l'amplitude pour qu'une particule injectée à l'origine, $u = 0$, retourne à l'origine après un temps t . D'après nos considérations précédentes, cette amplitude n'est autre que $\langle u = 0 | U(t, 0) | u = 0 \rangle$ qui est définie par :

$$\langle u = 0 | U(t, 0) | u = 0 \rangle = \int_{u(t)=u(0)=0} \mathcal{D}u \exp \left[\frac{i}{\hbar} \int_0^t L(u, \dot{u}) dt' \right], \quad (4.59)$$

où $L = \frac{m}{2}\dot{u}^2 - V(u)$ représente le Lagrangien associé à H . En général, pour un potentiel V quelconque, l'intégrale ne peut pas être évaluée exactement. Par contre, nous pouvons utiliser l'approximation semi-classique vue dans ce chapitre. Dans un premier temps, il nous faut donc trouver les trajectoires classiques. Il suffit alors de minimiser l'action par rapport à $u(t)$ ce qui donne les équations de Euler-Lagrange :

$$m \frac{d^2 u}{dt^2} = -\frac{dV}{du} = -V'(u). \quad (4.60)$$

Nous devons donc résoudre les équations du mouvement avec les conditions de bord $u(0) = u(t) = 0$. Il existe une solution triviale $u_{cl}(t) = 0$. Supposons que cela soit la seule. D'après l'approche semi-classique vue au paragraphe 4.1.2, il nous faut étudier les fluctuations autour de cette solution classique. Définissons $r(t) = u(t) - u_{cl}$, alors cette amplitude n'est autre que $\langle u = 0 | U(t, 0) | u = 0 \rangle$ qui est définie par :

$$\langle u = 0 | U(t, 0) | u = 0 \rangle \approx \int_{r(t)=r(0)=0} \mathcal{D}r \exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' r(t') \frac{m}{2} (\partial_{t'}^2 + \omega^2) r(t') \right], \quad (4.61)$$

avec $m\omega^2 = V''(0)$. L'intégrale Gaussienne nous donne alors

$$\langle u = 0 | U(t, 0) | u = 0 \rangle \approx \left[\det \left(\frac{-m(\partial_t^2 + \omega^2)}{2\pi i \hbar} \right) \right]^{-1/2}. \quad (4.62)$$

Pour calculer ce déterminant, il nous faut trouver les valeurs propres de l'opérateur $-(\partial_t^2 + \omega^2)$. Ces valeurs propres sont solutions de l'Eq.

$$-(\partial_t^2 + \omega^2)r_n = \epsilon_n r_n, \quad (4.63)$$

et sont sujettes aux conditions de bord $r_n(t) = r_n(0) = 0$. Cette équation aux valeurs propres ressemble à celle d'une particule dans une boîte de largeur $L = t$. Les solutions sont du type $r_n(t') = \sin(\pi n t' / t)$ avec $\epsilon_n = (\pi n / t)^2 - \omega^2$. D'où

$$\langle u = 0 | U(t, 0) | u = 0 \rangle \approx \prod_{n=1}^{\infty} \left[\frac{m}{2\pi i \hbar} \left(\left(\frac{\pi n}{t} \right)^2 - \omega^2 \right) \right]^{-1/2} \quad (4.64)$$

Ce résultat semble bien compliqué puisque l'on a exprimé la quantité recherchée comme un produit infini (le prix à payer pour passer à la limite continue) et surtout ce produit semble divergent pour les valeurs de t commensurées avec π/ω . Une manière simple de résoudre ces deux problèmes est d'écrire

$$\langle u = 0 | U(t, 0) | u = 0 \rangle = \frac{\langle u = 0 | U(t, 0) | u = 0 \rangle}{\langle u = 0 | U_{lib}(t, 0) | u = 0 \rangle} \langle u = 0 | U_{lib}(t, 0) | u = 0 \rangle$$

où U_{lib} est l'opérateur d'évolution d'une particule libre, c.a.d. correspondant à $\omega = 0$. Nous avons déjà calculé $\langle u = 0 | U_{lib}(t, 0) | u = 0 \rangle = G_{lib}(0, 0; t)$ dans l'Eq. (4.25). En introduisant $G(0, 0; t) = \langle u = 0 | U(t, 0) | u = 0 \rangle$, on obtient alors

$$G(0, 0; t > 0) \approx \prod_{n=1}^{\infty} \left[1 - \left(\frac{\omega t}{\pi n} \right)^2 \right]^{-1/2} G_{lib}(0, 0; t > 0) \quad (4.65)$$

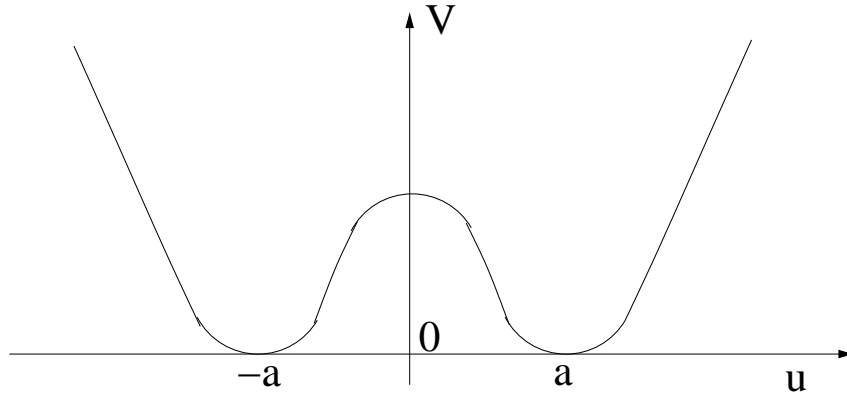


FIG. 4.4 – Potentiel en double puits.

En utilisant l'identité $\prod_{n=1}^{\infty} \left[1 - \left(\frac{x}{\pi n}\right)^2\right]^{-1} = \frac{x}{\sin x}$, on obtient finalement

$$G(0, 0; t > 0) \approx \sqrt{\frac{m\omega}{2\pi i \hbar \sin(\omega t)}}. \quad (4.66)$$

Dans le cas d'un potentiel harmonique, le résultat ci-dessus devient exact. Dans le cas d'un potentiel quelconque, l'approximation semi-classique consiste à remplacer $V(u)$ par un potentiel harmonique de même courbure. Le calcul présenté dans ce paragraphe illustre bien comment les fluctuations autour d'une solution complètement statique restaurent les fluctuations quantiques de point zéro inhérentes à la mécanique quantique.

4.4.2 Particule dans un double puits de potentiel

Nous considérons maintenant une particule dans un double puits de potentiel comme représenté sur la figure 4.4. On cherche à estimer l'amplitude de probabilité pour une particule de rester dans son puits de potentiel ou de transiter dans l'autre puits. Nous pouvons essayer de suivre la même stratégie que le simple puits. Le problème auquel nous sommes confrontés est qu'il n'est pas *a priori* si simple de savoir quelle trajectoire classique stationnaire peut être utilisée comme point de départ pour décrire l'effet tunnel quantique.

Une manière simple de s'en sortir consiste à passer en temps imaginaire $\tau = it$. On parle de rotation de Wick car on a multiplié le temps t par une phase $i = e^{i\pi/2}$ ce qui revient à faire une rotation de $\pi/2$ dans le plan complexe. L'amplitude tunnel en temps imaginaire est défini par

$$\langle a | e^{-\frac{\tau}{\hbar} H} | \pm a \rangle \equiv G_E(a, \pm a; \tau), \quad (4.67)$$

où les coordonnées $\pm a$ coïncident avec les deux minima du potentiel en double puits et l'indice E indique que l'on travaille en temps Euclidien ou temps imaginaire. Cette amplitude s'écrit :

$$G_E(a, \pm a; \tau) = \int_{u(0)=\pm a, u(\tau)=a} \mathcal{D}u \exp \left[-\frac{1}{\hbar} \int_0^\tau d\tau' \left(\frac{m}{2} \left(\frac{du}{d\tau} \right)^2 + V(u) \right) \right], \quad (4.68)$$

où $\dot{u} = du/d\tau$. Dans la limite où $\hbar \rightarrow 0$, on peut appliquer l'approximation du point col (c'est un avantage de la formulation en temps imaginaire, l'approximation de la phase stationnaire est remplacé par l'approximation du point col). La solution stationnaire obéit à

$$-m \frac{d^2 u_{cl}}{d\tau^2} + \frac{dV}{du_{cl}} = 0 \quad (4.69)$$

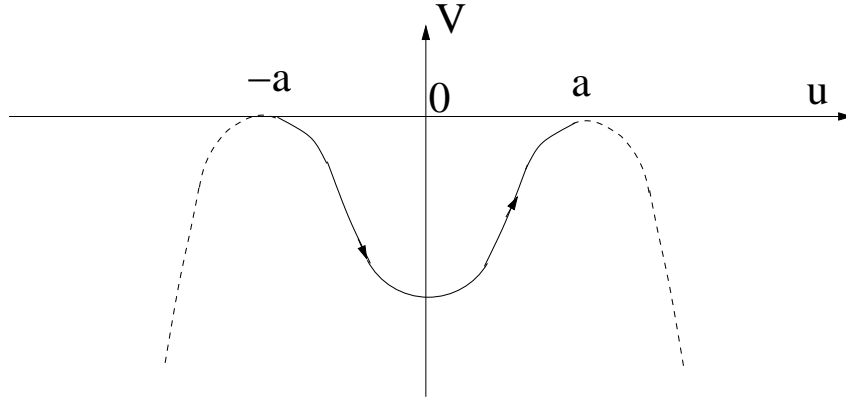


FIG. 4.5 – Représentation du potentiel équivalent à celui de la Fig. 4.4 après la rotation de Wick.

Si l'on compare les équations du mouvement en temps réel à celles obtenues en temps imaginaire, plus spécifiquement (4.60) et (4.69), on voit qu'une des conséquences de la rotation de Wick est que

$$V \longrightarrow -V! \quad (4.70)$$

Nous avons représenté sur la figure 4.5, le potentiel $-V$ ainsi obtenu. La barrière est maintenant une vallée. Le point crucial est que les extrema à $-a$ et a sont maintenant connectés par un chemin classique (représenté en trait plein sur la Fig. 4.5). Plus précisément, nous avons maintenant trois trajectoires classiques : La trajectoire classique où la particule reste en a , son équivalent en $-a$, et finalement la trajectoire classique connectant les deux extrema. Pour les deux premières trajectoires, nous n'avons pas besoin de passer en temps imaginaire et le calcul est complètement similaire au potentiel en simple puits considéré dans le paragraphe 4.4.1 puisque dans l'approximation quadratique liée à la limite semi-classique, les deux puits de potentiel s'ignorent totalement. Reste le cas intéressant de la trajectoire connectant $-a$ et a représenté en trait plein sur la figure 4.5. Cette trajectoire, solution des équations du mouvement en temps imaginaire (4.69), est appelée instanton. La trajectoire opposée qui va de $+a$ à $-a$ est appelée anti-instanton.

Comme toute terminologie en “-on”, cela suggère une interprétation en terme de particule. Comme nous le verrons, ces solutions sont quasiment partout constantes sauf sur un petit intervalle du temps, quasi instantané, où la particule transite de $-a$ à a , d'où le terme instanton. C'est l'analogue temporel du soliton, solution stationnaire d'une équation différentielle non linéaire dans les variables d'espace. Si l'on regarde le temps imaginaire comme une dimension d'espace particulière, les instantons sont des solutions très localisées dans cette variable et dans un langage de théorie quantique des champs peuvent être interprétées comme des particules. Pour ceux qui veulent en savoir plus sur les solitons et instantons, je recommande vivement la Ref. [13].

Pour commencer, calculons l'action associée à un instanton. Pour ce faire, multiplions les équations de mouvement (4.69) par \dot{u}_{cl} et intégrons par rapport au temps (les conditions de bord sont telles que pour $u_{cl} = \pm a$). Par ailleurs nous considérons la solution qui coûte le moins “cher” en action (en énergie). Il s'agit de la trajectoire qui vérifie $\partial_\tau u_{cl} = V = 0$ pour $u_{cl} = \pm a$.

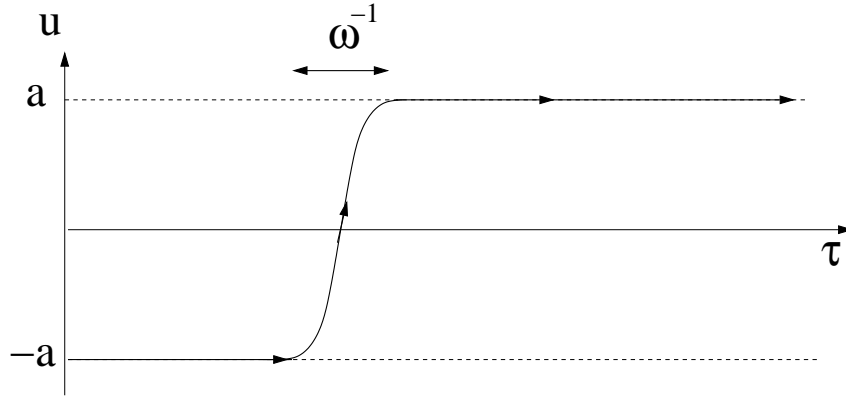


FIG. 4.6 – Représentation d’un instanton dont le temps caractéristique est $1/\omega$ où $V''(\pm a) = m\omega^2$.

On trouve alors la loi de conservation de l’énergie en temps imaginaire²

$$\frac{m}{2} \left(\frac{du_{cl}}{d\tau} \right)^2 = V(u_{cl}). \quad (4.71)$$

A partir de ce résultat, on en déduit l’action associée à un instanton [$u(0) = -a$ et $u(\tau) = a$]

$$\begin{aligned} S_{\text{inst}} &= \int_0^\tau d\tau' \left(\frac{m}{2} \left(\frac{du_{cl}}{d\tau} \right)^2 + V(u_{cl}) \right) = \int_0^\tau d\tau' m \left(\frac{du_{cl}}{d\tau} \right)^2 \\ &= \int_{-a}^a du \sqrt{2mV(u)}. \end{aligned} \quad (4.72)$$

Ainsi l’action associée à un instanton (ou à un anti-instanton) dépend seulement de V . On peut de la même manière explorer la dépendance temporelle de l’instanton. Introduisons la fréquence ω par $V''(\pm a) = m\omega^2$. Donc, au voisinage de a , $V(u_{cl}) \approx \frac{1}{2}m\omega^2(u_{cl} - a)^2$. En injectant cette relation dans (4.71), on peut obtenir $\frac{du_{cl}}{d\tau} \approx -\omega(u_{cl} - a)$, qui s’intègre en $u_{cl}(\tau) \approx a - ae^{-\tau\omega}$ au voisinage de a . Ainsi, le temps caractéristique est relié à l’inverse de ω c.a.d. à la courbure des minima du potentiel V initial. Ceci n’est rien d’autre que la fréquence des oscillateurs associés aux minima du potentiel V . L’inverse de cette fréquence est très petite par rapport au temps tunnel caractéristique. Nous avons typiquement la représentation temporelle schématisée représentée sur la figure 4.6.

Le fait que l’instanton soit confiné sur un intervalle de temps court a des conséquences importantes sur le calcul de l’amplitude tunnel $G_E(a, \pm a; \tau)$. En effet, on peut très bien imaginer des solutions dans laquelle la particule va de a à $-a$, repart et ainsi de suite. Ce genre de trajectoire peut être représentée comme une succession d’instanton et d’anti-instanton. Ces trajectoires à plusieurs instantons sont également solutions des équations de point col qui déterminent les trajectoires “classiques” en temps imaginaire. Si l’on suit notre approche semi-classique de l’intégrale de chemin, nous devons dans un premier temps prendre en compte toutes les trajectoires “classiques” donc sommer sur toutes configurations à plusieurs instantons. On nomme

²Il y a d’autres chemins classiques qui vérifient $\frac{m}{2} \left(\frac{du_{cl}}{d\tau} \right)^2 - V(u_{cl}) = E > 0$ mais leur poids $\propto e^{-Action}$ est moindre donc on les néglige.

ces configurations à plusieurs instantons un gaz d'instantons. Du fait que ces instantons ont un temps caractéristique très court, la probabilité que deux instantons se chevauchent est très faible. De plus, les événements où un instanton et un anti-instanton se chevauchent vont avoir un poids négligeable pour des temps tunnel $\tau \gg 2\omega^{-1}$ (à ces échelles de temps, c'est comme si la particule était restée sur son extremum). De ce fait on peut parler de gaz d'instanton dilué où les instantons sont indépendants les uns des autres.

Revenons au calcul de $G_E(a, \pm a; \tau)$. Puisqu'il faut prendre en compte toutes les trajectoires "classiques", on peut écrire

$$G_E(a, \pm a; \tau) \approx \sum_{n \text{ pair/impair}} K^n \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n A_n(\tau_1, \dots, \tau_n), \quad (4.73)$$

où A_n est l'amplitude associée à la trajectoire avec n instantons. Nous devons également prendre en compte que $G_E(a, a; \tau)$ contient nécessairement un nombre pair d'instantons et $G_E(a, -a; \tau)$ un nombre impair. $K \sim \omega$ est une constante dimensionnée, homogène à l'inverse d'un temps, qui vient compenser la mesure d'intégration. Plus spécifiquement, $A_n(\tau_1, \dots, \tau_n)$ est l'amplitude, évaluée dans le cadre de l'approximation semi-classique, associée à une configuration à n instantons aux temps $0 \leq \tau_n \leq \tau_{n-1} \leq \dots \leq \tau_1 \leq \tau$. Nous avons représenté sur la Fig. 4.7 une configuration à 5 instantons connectant a et $-a$.

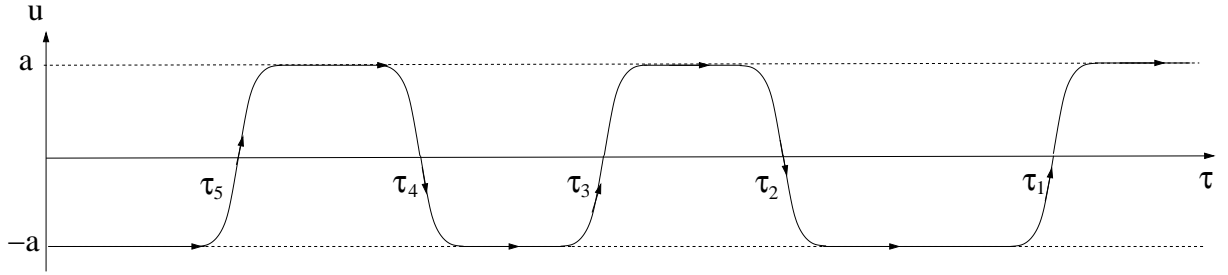


FIG. 4.7 – Représentation d'un gaz dilué à 5 instantons.

Nous allons pour l'instant nous concentrer sur le calcul de l'amplitude A_n . Nous avons vu dans le cadre du formalisme semi-classique que l'amplitude se factorise en deux parties, l'une "classique", et l'autre quantique résultant des fluctuations quantiques autour de la trajectoire "classique". Écrivons donc $A_n = A_{n,cl} \times A_{n,qu}$ où $A_{n,cl}$ correspond à l'action de la trajectoire contenant n instantons et $A_{n,qu}$ les fluctuations quantiques autour de cette trajectoire "classique". Dans l'énumération initiale des trajectoires classiques, la trajectoire classique où la particule reste au fond d'un puits de potentiel (ou de manière équivalente au sommet d'une bosse dans la potentiel renversé) ne contribue pas à l'action car $V(\pm a) = 0$. Les seules contributions non nulles à l'action "classique" sont bien celles dues aux instantons. Du fait que $\tau \gg \omega^{-1}$, nous avons vu que l'on peut considérer l'approximation du gaz d'instantons dilué où les instantons sont indépendants les uns des autres. Cette approximation facilite énormément le calcul de l'action puisque l'action d'un gaz de n instantons est simplement n fois l'action associée à un instanton, auquel cas

$$A_{n,cl}(\tau_1, \dots, \tau_n) = e^{-nS_{inst}/\hbar}. \quad (4.74)$$

Cette action est indépendante des τ_i puisque les instantons s'ignorent les uns des autres.

Il nous faut maintenant calculer les fluctuations quantiques autour d'une trajectoire classique comme celle représentée sur la Fig. 4.7. On doit *a priori* distinguer deux cas : soit la particule

repose sur le sommet d'une bosse du potentiel renversé (les traits horizontaux sur la figure 4.7) soit elle transite entre deux bosses (l'instanton)

Dans le premier cas de figure, c'est exactement le calcul que nous avons déjà fait (certes en temps réel) dans l'exemple étudié en 4.4.1. Nous avons vu que les fluctuations quantiques autour d'un puits du potentiel initial donne un résultat en $\sqrt{1/\sin(\omega t)}$ (voir l'Eq. (4.66)), les constantes restantes étant absorbées dans le facteur K^n . La contribution en temps imaginaire est obtenue simplement à l'aide de la continuation analytique $t \rightarrow -i\tau$. Donc l'action accumulée sur un intervalle de "temps" $[\tau_i, \tau_{i+1}]$ est donnée par :

$$\sqrt{\frac{1}{\sin(-i\omega(\tau_{i+1} - \tau_i))}} \sim e^{-\omega(\tau_{i+1} - \tau_i)/2}, \quad (4.75)$$

où nous avons utilisé l'approximation du gaz dilué c.a.d. $|\tau_{i+1} - \tau_i| \gg \omega^{-1}$ (et $\sin(ix) = i \sinh(x) \approx \frac{i}{2}e^x$ quand $x \gg 1$). Physiquement, cela signifie simplement que cela prend beaucoup moins de temps de passer par effet tunnel à travers une barrière que d'osciller dans un minimum d'un puits de potentiel, ce qui semble raisonnable. Dans le second cas de figure, il faut prendre en compte les fluctuations autour des instantons. Néanmoins, comme le temps typique de l'instanton est d'ordre $O(\omega^{-1}) \ll \Delta\tau$ où $\Delta\tau$ représente la longueur typique d'un segment dans la Fig. 4.7, on peut négliger ces fluctuations ou plus précisément elles ne contribuent pas à l'intégrale et peuvent être absorbées dans le préfacteur K .

Si l'on pose $\tau_0 = 0$ et $\tau_{n+1} = \tau$, en tenant compte des deux cas de figure ci-dessus, il nous reste donc

$$A_{n,qu}(\tau_1, \dots, \tau_n) = \prod_{i=0}^n e^{-\omega(\tau_{i+1} - \tau_i)/2} = e^{-\omega\tau/2}, \quad (4.76)$$

qui est également indépendant de la configuration particulière des τ_i . En combinant (4.74) et (4.76), on obtient :

$$\begin{aligned} G_E(a, \pm a; \tau) &\approx \sum_{n \text{ pair/impair}} K^n e^{-nS_{\text{inst}}/\hbar} e^{-\omega\tau/2} \overbrace{\int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \cdots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n}^{\tau^n/n!} \\ &= e^{-\omega\tau/2} \sum_{n \text{ pair/impair}} \frac{1}{n!} (\tau K e^{-S_{\text{inst}}/\hbar})^n. \end{aligned} \quad (4.77)$$

Nous obtenons ainsi le résultat final

$$G_E(a, a; \tau) \approx e^{-\omega\tau/2} \cosh(\tau K e^{-S_{\text{inst}}/\hbar}), \quad (4.78)$$

$$G_E(a, -a; \tau) \approx e^{-\omega\tau/2} \sinh(\tau K e^{-S_{\text{inst}}/\hbar}) \quad (4.79)$$

L'hypothèse clé qui nous a permis d'obtenir ce résultat est l'approximation du gaz dilué. Avant de discuter l'interprétation physique de (4.78), vérifions a fortiori la consistance de cette hypothèse. Pour cela calculons le nombre moyen d'instantons contribuant à la somme dans l'Eq. (4.77). Si l'on pose $X = \tau K e^{-S_{\text{inst}}/\hbar}$, le nombre moyen $\langle n \rangle$ d'instantons est simplement donné par

$$\langle n \rangle \equiv \frac{\sum_n n \frac{X^n}{n!}}{\sum_n \frac{X^n}{n!}} = X, \quad (4.80)$$

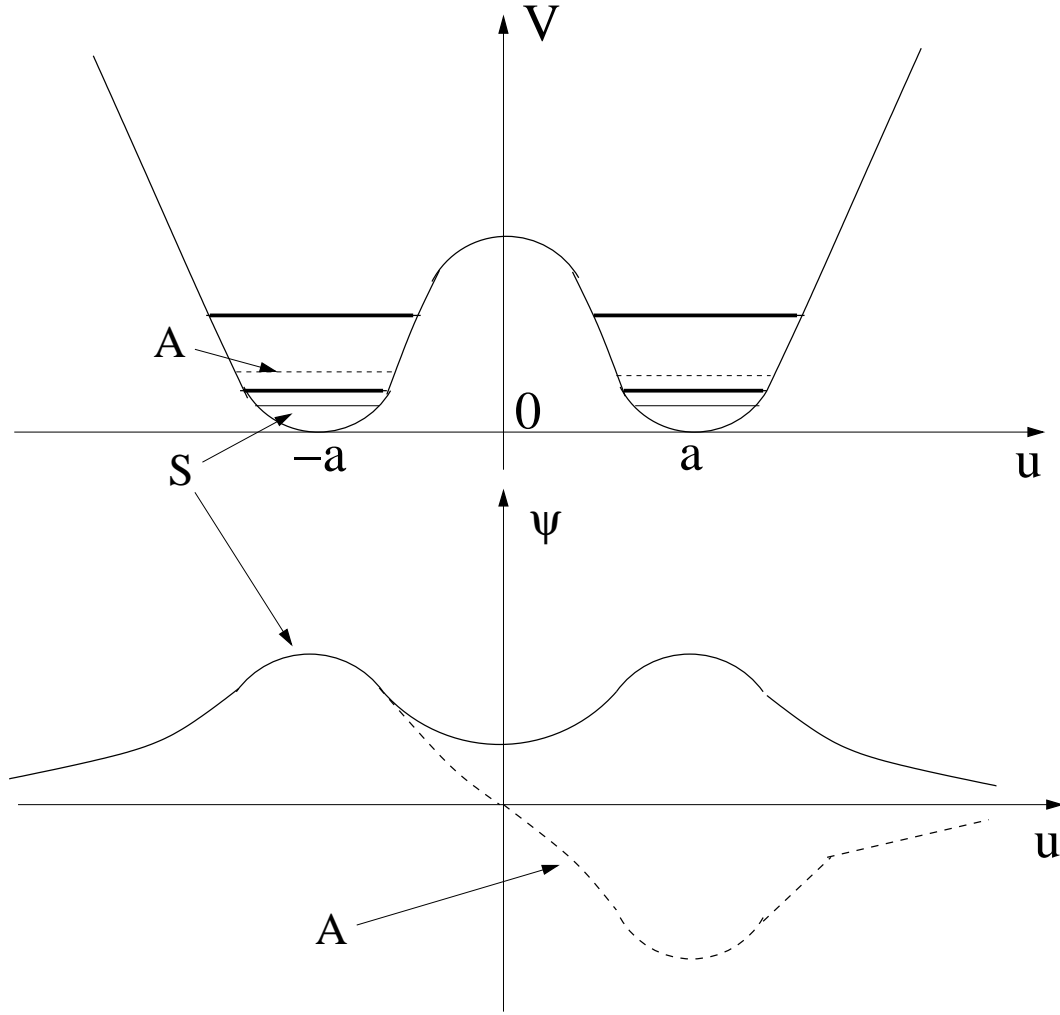


FIG. 4.8 – États quantiques dans le double puits. Les traits épais dans chaque puits représentent les deux premiers niveaux de l'oscillateur harmonique. Les traits fins (plein et en pointillé) indiquent les états propres symétriques (S) et antisymétriques (A). Nous avons également représenté schématiquement les fonctions propres associées.

où nous avons utilisé, que pour $\langle n \rangle \gg 1$, la distinction entre n impair et n pair est superflue. Nous pouvons donc en déduire l'intervalle de temps moyen entre deux instantons défini par

$$\tau / \langle n \rangle = K^{-1} e^{S_{\text{inst}}/\hbar} \sim \omega^{-1} e^{S_{\text{inst}}/\hbar}. \quad (4.81)$$

Le gaz est dilué si $\tau / \langle n \rangle \gg \omega^{-1}$, où ω^{-1} est le temps de vie d'un instanton. Cela implique que $S_{\text{imp}} \gg \hbar$, ce qui est bien l'esprit de la limite semi-classique. De manière équivalente, la densité d'instantons définie par $\langle n \rangle / \tau$ est exponentiellement petite en l'action d'un instanton et indépendante de τ . Ceci est tout fait cohérent avec notre approximation du gaz d'instanton dilué.

Cherchons maintenant à donner une interprétation physique aux résultats donnés par (4.78). Pour ce faire, analysons le spectre de basse énergie de notre problème sans effet tunnel possible. Nous avons alors deux puits indépendants qui dans notre approximation semi-classique ont chacun un spectre d'oscillateur harmonique de fréquence ω donnée par la courbure du puits. Le

niveau fondamental dans chaque puits est donc $\epsilon_0 = \hbar\omega/2$. Lorsque l'on autorise l'effet tunnel entre les puits, on s'attend à une levée de dégénérescence des niveaux de chaque puits. En particulier l'état fondamental se décompose maintenant en un état symétrique (liant) d'énergie ϵ_S et un état antisymétrique (anti-liant) d'énergie ϵ_A . On peut paramétrer cette levée de dégénérescence en introduisant

$$\epsilon_{A/S} = \frac{\hbar\omega}{2} \pm \frac{\Delta\epsilon}{2}, \quad (4.82)$$

où $\Delta\epsilon$ est la levée de dégénérescence liée à l'effet tunnel. Nous avons résumé schématiquement ce phénomène sur la Fig. 4.8.

Si l'on suppose que notre propagateur est essentiellement dominé par les états de plus basse énergie, (ce qui revient à une utilisation d'une décomposition de l'identité approximative $\infty \approx |S\rangle\langle S| + |A\rangle\langle A|$) on peut alors décomposer $G_E(a, \pm a; \tau) \equiv \langle a | \exp[-\frac{\tau}{\hbar}H] | \pm a \rangle$ sur ces états, ce qui donne

$$G(a, \pm a; \tau) \approx \langle a | (|S\rangle e^{-\epsilon_S\tau/\hbar} \langle S| + |A\rangle e^{-\epsilon_A\tau/\hbar} \langle A|) | \pm a \rangle. \quad (4.83)$$

En utilisant les symétries du problème, nous avons $|\langle a|S\rangle|^2 = | \langle -a|S\rangle|^2 \approx 1/2$ et $|\langle a|A\rangle\langle A|-a\rangle| = -|\langle a|A\rangle|^2 \approx -1/2$, ce qui implique

$$G(a, \pm a; \tau) \approx \frac{1}{2} (e^{-(\hbar\omega - \Delta\epsilon)\tau/2\hbar} \pm e^{-(\hbar\omega + \Delta\epsilon)\tau/2\hbar}) = e^{-\omega\tau/2} \begin{cases} \cosh(\Delta\epsilon\tau/\hbar) \\ \sinh(\Delta\epsilon\tau/\hbar) \end{cases} \quad (4.84)$$

En comparant cette expression avec (4.78), on en déduit donc

$$\Delta\epsilon \approx \hbar K e^{-S_{\text{inst}}/\hbar}. \quad (4.85)$$

Noter que K est homogène à l'inverse d'un temps, donc $\Delta\epsilon$ est bien homogène à une énergie. Nous venons donc de montrer que la levée de dégénérescence est reliée à l'action d'un instanton.

En utilisant $S_{\text{inst}} = \int_{-a}^a du \sqrt{2mV(u)}$, on retrouve un résultat analogue à ce que la méthode WKB fournirait (voir par exemple le livre de Messiah, "Quantum Mechanics"). Noter que le résultat est non perturbatif à cause du facteur $e^{-S_{\text{inst}}/\hbar}$. En effet le petit paramètre est ici $\hbar \rightarrow 0$, ou plus exactement $\hbar/S_{\text{inst}} \ll 1$, auquel cas $e^{-\frac{1}{\hbar/S_{\text{inst}}}}$ ne se développe pas en puissance de \hbar/S_{inst} .

On peut légitimement se demander quel est l'intérêt de toute cette machinerie si elle permet simplement de retrouver un résultat facilement obtenue par la méthode WKB. Tout d'abord, la méthode WKB apparaît plus comme une recette pas forcément très contrôlée alors que le développement en instantons l'est parfaitement (nous pouvons à tout moment en vérifier la consistance). Vu que le développement est systématique, il est *a priori* facile d'étudier les corrections d'ordre supérieur contrairement à la méthode WKB. Un dernier avantage crucial de l'approche par l'intégrale de chemin est qu'on peut facilement l'étendre à des objets non ponctuels c.a.d. à des champs quantiques. C'est donc une méthode très puissante qui a fait ses preuves.

Une dernière remarque technique. Nous n'avons pas calculé le préfacteur K . Pour ce faire, il aurait fallu analysé en détail les fluctuations quantiques autour des configurations instantoniques. Cela ne présente pas de difficulté de calcul si ce n'est l'apparition d'une divergence liée à une symétrie du problème mal prise en compte de prime abord. Je renvoie le lecteur à [5, 1, 8] pour plus de détails.

4.4.3 Effet tunnel dans un environnement dissipatif

Dans les deux exemple précédents, nous avons considéré une particule dans un puits ou un double puits. Dans les deux cas, nous aurions pu arriver au même résultat sans passer

par l'intégrale de chemin, en utilisant la méthode WKB par exemple. Nous allons considérer maintenant un exemple où l'intégrale de chemin est parfaitement adaptée. Il s'agit d'étudier la probabilité d'amplitude tunnel pour une particule couplée à un environnement. Ceci est un effet une situation beaucoup plus réaliste car, dans la plupart des phénomènes quantiques, il est difficile de négliger *a priori* l'environnement. Donnons quelques exemples où l'environnement peut jouer un rôle. Lorsqu'un atome dans un réseau cristallin veut sauter par effet tunnel d'un interstice à un autre, il peut exciter des phonons qui sont les excitations du réseau cristallin sous-jacent. Un autre exemple propre aux systèmes nanoscopiques concerne l'étude de l'équivalent d'un transistor. Il en existe plusieurs réalisations comme par exemple le transistor moléculaire lorsque l'on contacte une molécule organique à deux électrodes métalliques. Sous l'effet d'un champ électrique, un électron peut sauter par effet tunnel de l'électrode métallique à la molécule. Néanmoins, lors de cette action, il peut exciter des modes de l'environnement, des photons dans le cas présent. Quel est leur rôle sur le courant tunnel entre l'électrode et la molécule. Avec un peu d'imagination, on voit bien que ce genre de situation est assez générique à tout problème tunnel et donc son étude est importante en matière condensée.

Modèle de Caldeira-Leggett

Pour modéliser la situation ci-dessus, nous considérons une particule dans un potentiel $V(u)$. Nous supposons que cette particule est couplée à l'environnement et qu'elle se trouve initialement dans un état métastable (voir la Fig. 4.9 encore que cette dernière hypothèse n'est pas nécessaire au début du traitement). En suivant le modèle de Caldeira et Leggett (A. O. Caldeira et A. J. Leggett, Phys. Rev. Lett. **46**, 211 (1981)), nous allons décrire l'environnement par une collection de N oscillateurs harmoniques avec un jeu de fréquence $\{\omega_\alpha\}$,

$$H_{env}[u_\alpha] = \sum_{\alpha=1}^N \left[\frac{p_\alpha^2}{2m_\alpha} + \frac{1}{2} m_\alpha \omega_\alpha^2 u_\alpha^2 \right], \quad (4.86)$$

où u_α et p_α sont respectivement les opérateurs position et impulsion de l'oscillateur α . Nous allons également supposer que le couplage entre la particule et les oscillateurs est linéaire en u_α :

$$H_c = - \sum_{\alpha=1}^N f_\alpha(u) u_\alpha, \quad (4.87)$$

où les fonctions $f_\alpha(u)$ représentent des fonctions de la coordonnée u de la particule. Pour simplifier l'analyse, nous allons supposer que f_α est linéaire en u *i.e.* $f_\alpha = c_\alpha u$. Il s'agit donc d'un couplage entre les positions de deux oscillateurs. On peut récrire ce couplage en complétant le carré $H_c = - \sum_{\alpha=1}^N f_\alpha(u) u_\alpha = \frac{1}{2} \sum c_\alpha (u - u_\alpha)^2 - \frac{1}{2} \sum c_\alpha (u^2 + u_\alpha^2)$. Les deux derniers termes peuvent être absorbés dans une redéfinition du potentiel $V(u)$ et de la masse m_α . Le premier terme nous indique que la position d'équilibre moyenne de la particule dépend de l'état de l'environnement (ici les oscillateurs).

Supposons par exemple que la particule soit dans un état métastable en $u = a$ et cherchons à analyser l'amplitude de probabilité que la particule reste dans cet état en présence de l'environnement. Cette amplitude s'exprime dans le langage de l'intégrale de chemin par

$$\langle a | e^{-iHt/\hbar} | a \rangle = \int_{u(0)=u(t)=a} \mathcal{D}u e^{iS_{part}[u]} \int \prod \mathcal{D}u_\alpha e^{iS_{env}[u_\alpha] + iS_c[u, u_\alpha]}, \quad (4.88)$$

où $H = H_{part} + H_{env} + H_c$,

$$S_{part}[u] = \int_0^t dt' \left[\frac{m}{2} \dot{u}^2 - V(u) \right], \quad (4.89)$$

$$S_{env}[u_\alpha] = \int_0^t dt' \sum_\alpha \frac{m_\alpha}{2} [\dot{u}_\alpha^2 - \omega_\alpha^2 u_\alpha^2] \quad (4.90)$$

et également

$$S_c[u, u_\alpha] = - \int_0^t dt \sum_\alpha c_\alpha u u_\alpha - \int_0^t dt' \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2 u^2}{2m_\alpha \omega_\alpha^2} \quad (4.91)$$

représente l'action du terme de couplage. Nous avons rajouté à la main un terme en $\frac{(c_\alpha u)^2}{2m_\alpha \omega_\alpha^2}$ dans le terme de couplage afin que S_c soit purement dissipative c.a.d. qu'elle ne renormalise pas le potentiel $V(u)$. Si l'on n'introduit pas ce terme, alors le couplage à l'environnement induit simplement un décalage de l'extremum du potentiel de $V(u)$ comme nous l'avons vu ci-dessus, décalage que l'on pourrait absorber par une redéfinition du potentiel initial.

Pour étudier les effets de l'environnement, il est commode d'intégrer directement sur les degrés de liberté u_α afin d'avoir une action effective dans la seule variable u . Ceci est faisable car l'action est quadratique en u_α (c'est aussi l'intérêt de ce modèle). Pour ce faire, il faut passer dans l'espace de Fourier.

Il peut également être utile de passer en temps imaginaire auquel cas

$$\langle a | e^{-iHt/\hbar} | a \rangle \longrightarrow \int \mathcal{D}u e^{-S_{part}[u]} \int \prod \mathcal{D}u_\alpha e^{-S_{env}[u, u_\alpha] - S_c[u, u_\alpha]}. \quad (4.92)$$

L'intérêt de passer en temps imaginaire est que notre variable temporelle it s'interprète naturellement comme l'inverse d'une température. On utilisera donc l'identification formelle

$$\boxed{\beta = \frac{it}{\hbar} = T^{-1}.} \quad (4.93)$$

Cette identification jouera un rôle par la suite car elle nous permet de traiter sur le même plan la probabilité d'aller de a à a en un temps t donné à température nulle, ou bien d'étudier le taux d'échappement dans un état métastable à température finie T .

On peut supposer que les variables u_α ont des conditions de bord périodiques sur l'intervalle $[0, \beta]$. On peut donc les développer en série de Fourier en utilisant nos définitions 4.53 qui s'écrivent ici

$$u_\alpha(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{-i\omega_n \tau} u_\alpha(i\omega_n) \quad ; \quad u(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} u(\tau), \quad (4.94)$$

où les fréquences de Matsubara ω_n sont définies par $\omega_n = 2\pi n/\beta$ avec n entier. L'action $S_{env} + S_c$ devient alors :

$$S_{env} + S_c = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n, \alpha} \left\{ \frac{m_\alpha}{2} (\omega_n^2 + \omega_\alpha^2) u_\alpha(i\omega_n) u_\alpha(-i\omega_n) + c_\alpha u(i\omega_n) u_\alpha(-i\omega_n) + \frac{c_\alpha^2}{2m_\alpha \omega_\alpha^2} u(i\omega_n) u(-i\omega_n) \right\}. \quad (4.95)$$

Il est maintenant facile d'effectuer les intégrales Gaussiennes sur u_α en utilisant la formule 2.59 pour obtenir

$$\langle a | e^{-iHt/\hbar} | a \rangle = \int \mathcal{D}u e^{-S_{eff}[u]}, \quad (4.96)$$

avec

$$S_{eff}[u] = S_{part}[u] + \frac{1}{2\beta} \sum_{\omega_n, \alpha} \frac{c_\alpha^2 \omega_n^2}{m_\alpha \omega_\alpha^2 (\omega_\alpha^2 + \omega_n^2)} u(i\omega_n) u(-i\omega_n) \quad (4.97)$$

Nous voyons qu'en intégrant sur les degrés de liberté du bain, l'action de la particule quantique acquiert une nouvelle contribution qui semble compliquée au premier abord.

Lorsque l'on repasse en transformée de Fourier inverse, l'action effective de la particule (on parle ici d'action effective mais en fait il s'agit ici de l'action exacte) prend la forme caractéristique suivante :

$$S_{eff}[u] = S_{part}[u] - T \int_0^\beta d\tau d\tau' K(\tau - \tau') u(\tau) u(\tau'), \quad (4.98)$$

où nous avons introduit le noyau $K(\tau) = \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} J(\omega) D_\omega(\tau)$ avec

$$J(\omega) = \frac{\pi}{2} \sum_\alpha \frac{c_\alpha^2}{m_\alpha \omega_\alpha} \delta(\omega - \omega_\alpha) \quad (4.99)$$

$$D_\omega(\tau) = - \sum_{\omega_n} \frac{\omega_n^2}{\omega(\omega^2 + \omega_n^2)} e^{i\omega_n \tau}. \quad (4.100)$$

$J(\omega)$ représente la fonction spectrale de l'environnement (on y met toutes les dépendances en α). Au delà de l'écriture, nous pouvons remarquer que l'action de la particule reste quadratique mais néanmoins devient non locale en temps. Ceci n'a rien de surprenant. La particule interagit avec l'environnement au temps τ' , celui-ci contre réagit au temps τ d'où des effets de retardement. On parle de self-énergie. $D(\omega)$ est homogène à l'inverse d'une énergie et ressemble à la fonction de Green d'un boson d'énergie $\hbar\omega$. On peut récrire S_{eff} en utilisant une représentation de Fourier en introduisant

$$K(i\omega_n) = \int_0^\beta e^{-i\omega_n \tau} K(\tau) \quad ; \quad K(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_n e^{i\omega_n \tau} K(i\omega_n), \quad (4.101)$$

ce qui donne immédiatement

$$S_{eff}[u] = S_{part}[u] - \frac{1}{\beta^2} \sum_n K(i\omega_n) u(i\omega_n) u(-i\omega_n) \quad (4.102)$$

Les résultats donnés par les équations (4.98) et (4.102) sont généraux et repose sur un nombre très limité d'approximations. Ces deux actions décrivent donc l'effet d'un bain d'oscillateurs sur une particule quantique. Cette forme peut servir de point de départ pour étudier divers problèmes de transport dans le systèmes mésoscopiques. Plus spécifiquement, on peut directement identifier $K(i\omega_n)$ à partir de l'Eq. (4.97) ou bien faire le calcul de la transformée de Fourier de $K(\tau)$, les deux donnant le même résultat.

La forme particulière de la fonction spectrale $J(\omega)$ s'obtient soit à partir de la connaissance microscopique des paramètres d'interaction entre la particule et le bain (les constantes c_α) soit de manière phénoménologique à partir de la structure des équations du mouvement classiques. Dans la plupart des cas, on optera plutôt pour cette seconde stratégie. Par exemple, pour un système sujet à une dissipation de type ohmique (c'est à dire que les équations du mouvement classique pour u contiennent un terme dissipatif du type $-\eta\dot{u}$ avec η un coefficient de friction), on a dans ce cas $J(\omega) = \eta|\omega|$ pour toute fréquence ω inférieure à une fréquence de coupure caractéristique. De la même manière, un défaut dans un réseau cristallin tridimensionnel se couple aux phonons acoustiques du réseau avec une fréquence caractéristique en ω^3 ou ω^5 suivant que ω est plus grande ou plus petite que la fréquence de Debye.

Nous allons considérer ici le cas d'une dissipation de type ohmique avec $J(\omega) = \eta|\omega|$. Dans ce cas,

$$K(i\omega_n) = \frac{\eta\omega_n^2}{\pi} \int_0^\infty d\omega \frac{1}{\omega^2 + \omega_n^2} = \frac{\eta}{2} |\omega_n|. \quad (4.103)$$

K décrit bien la dispersion ohmique d'une particule. En passant en transformée de Fourier inverse, on obtient facilement (exercice)

$$K(\tau) = \frac{\eta\pi T}{\sin^2(\pi T\tau)} \underset{\tau \ll \beta}{\approx} \frac{\eta}{2\pi T\tau^2}. \quad (4.104)$$

Ceci nous donne une forme assez simple pour le noyau.

Il est commode d'utiliser l'identité $u(\tau)u(\tau') = \frac{1}{2}[u(\tau)^2 + u(\tau')^2] - \frac{1}{2}[u(\tau) - u(\tau')]^2$. Lorsque l'on injecte cette identité dans l'action, le premier terme renormalise (il s'agit d'une correction négative) simplement le potentiel $V(u)$ tandis que le deuxième terme est purement non local. Comme cette renormalisation est déjà présente au niveau des équations du mouvement classique, on peut l'absorber dans une redéfinition de $V(u)$. Il nous reste la correction non locale (en temps) à l'action de la particule qui est par ailleurs toujours positive. Pour un bain ohmique, l'action effective de la particule s'écrit :

$$S_{eff}[u] = S_{part}[u] + \frac{\eta}{4\pi} \int_0^\beta d\tau d\tau' \left\{ \frac{[u(\tau) - u(\tau')]}{(\tau - \tau')} \right\}^2. \quad (4.105)$$

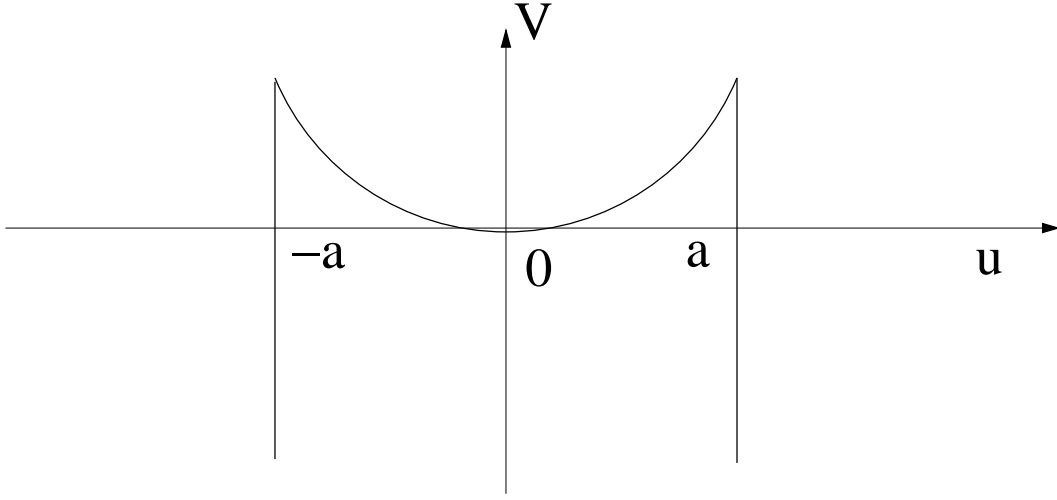
Cette action est relativement générale et fut dérivée pour la première par Caldeira et Leggett en 1981. Son champ d'application est assez vaste. Notons néanmoins que la dérivation présentée ci-dessus est à température nulle. Donnons une application non triviale du modèle de Caldeira-Leggett.

4.4.4 Application au problème tunnel d'une particule dans un état métastable

Maintenant que nous avons intégré l'action d'un bain dissipatif en une forme relativement simple, il nous reste à analyser son effet sur un cas simple d'effet tunnel. Considérons par exemple le cas d'une particule dans un état métastable comme représenté sur la Fig. 4.9.

Le puits de potentiel représenté sur la Fig.4.9 peut être paramétré par

$$V(u) = \begin{cases} \frac{1}{2}m\omega_c^2 u^2 & 0 < |u| < a, \\ -\infty & |u| > a. \end{cases} \quad (4.106)$$

FIG. 4.9 – Potentiel avec un minimum métastable en $u = 0$.

La particule localisée dans le puits de potentiel est donc dans un état métastable. On peut supposer la température T finie. En utilisant une représentation en temps imaginaire, la fonction de partition du système s'écrit alors

$$\mathcal{Z} = \int_{u(0)=u(\beta)} \mathcal{D}u e^{-S_{eff}/\hbar}, \quad (4.107)$$

où

$$S_{eff} = \int_0^\beta d\tau \left(\frac{m}{2} \dot{u}^2 + V(u) \right) + \frac{\eta}{4\pi} \int_0^\beta d\tau d\tau' \left\{ \frac{[u(\tau) - u(\tau')]}{(\tau - \tau')} \right\}^2. \quad (4.108)$$

Quand bien même nous avons utilisé le terme d'action effective, il s'agit bien de l'action exacte de la particule quantique couplée à un bain ohmique à la température T . On peut montrer³ que le taux tunnel Γ est relié à la partie imaginaire de l'énergie libre $F = -\frac{1}{\beta} \ln \mathcal{Z}$

$$\Gamma = -\frac{2}{\hbar} \text{Im}(F). \quad (4.109)$$

Noter que Γ est bien homogène à l'inverse d'un temps. Il nous faut donc calculer la fonction de partition ce qui semble a priori un problème très difficile à cause de la non localité en temps de l'action effective. Nous allons devoir faire des approximations. Supposons que la barrière de potentiel soit haute et que la température soit basse c.a.d. $T \ll m\omega_c^2 a^2/2$. L'intégrale de chemin est alors dominée par les solutions stationnaires de l'action effective. On peut distinguer dans ce cas trois solutions distinctes :

- La première solution correspond à $u = 0$. La particule quantique siège alors au sommet du potentiel inversé. La contribution de cette solution (et des fluctuations harmoniques autour de $u = 0$) a déjà été calculée dans le paragraphe 4.4.1.

³A température nulle, l'énergie libre se réduit à l'énergie de l'état fondamental. L'énergie s'écrit $E = E_R + iE_I$, auquel cas $e^{-iEt/\hbar} = e^{-iE_R t/\hbar} e^{E_I t/\hbar} = e^{-i\omega t} e^{-t/\tau}$ ce qui permet d'identifier $\omega = E_R/\hbar$ et $\Gamma \equiv 2/\tau = -2E_I/\hbar = -2\text{Im}(E)/\hbar$.

- Il existe également une solution singulière où la particule reste aux minima du potentiel inversé, c'est-à-dire perchée aux sommets singuliers du potentiel. Cette solution représente une contribution négligeable à la fonction de partition quantique et peut être négligée.
- Finalement, il existe une troisième solution dans laquelle une particule injectée à la position u descend le potentiel inversé et rebondit sur la paroi et retourne à sa position initiale en u en un temps β . Pendant cette trajectoire, la particule reste dans le potentiel harmonique. Puisque $u(0) = u(\beta)$, la trajectoire est symétrique autour de $\beta/2$ c.a.d que sur l'intervalle de temps $[\beta/2, \beta]$, la particule décrit la même trajectoire que sur $[0, \beta/2]$ mais en sens inverse. Nous admettons que c'est cette trajectoire avec rebond qui donne le temps tunnel caractéristique.

La trajectoire d'une particule dans le potentiel harmonique inversé est solution de l'équation du mouvement classique

$$-m\ddot{u} + m\omega_c^2 u + \frac{\eta}{\pi} \int_0^\beta d\tau' \frac{u(\tau) - u(\tau')}{(\tau - \tau')^2} = A\delta(\tau - \beta/2) \quad (4.110)$$

où le terme de droite donne une impulsion au temps $\tau = \beta/2$ qui change de manière discontinue la vitesse de la particule au temps $\tau = \beta/2$. Le coefficient A est choisi de manière à assurer la symétrie de la solution classique par rapport à $\tau = \beta/2$. Cette solution se calcule en développant en série de Fourier $u(\tau)$ (voir l'Eq.(4.94)) et en utilisant l'Eq. (4.103). Nous obtenons

$$u(i\omega_n) = Ae^{i\omega_n\beta/2} g(i\omega_n) \quad , \quad g(i\omega_n) = [m(\omega_n^2 + \omega_c^2) + \eta|\omega_n|]^{-1}. \quad (4.111)$$

En imposant la condition $u(\tau/2) = a$, on trouve

$$A = a/f \quad \text{avec} \quad f \equiv \frac{1}{\beta} \sum_n g(i\omega_n). \quad (4.112)$$

L'action associée à cette trajectoire classique avec rebond vaut

$$S_{\text{rebond}} = \frac{\beta}{2} \sum_n (m(\omega_n^2 + \omega_c^2) + \eta|\omega_n|) |u(i\omega_n)|^2 = \frac{a^2}{2f}. \quad (4.113)$$

A partir de cette expression, nous pouvons maintenant calculer le taux tunnel Γ dans différentes limites.

- Regardons déjà les limites $\eta \rightarrow 0$ et $\beta \rightarrow \infty$, c'est-à-dire l'absence de dissipation et la température nulle. Lorsque $\beta \rightarrow \infty$,

$$f \rightarrow \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} g(\omega) = \frac{1}{2m\omega_c}. \quad (4.114)$$

Dans ce cas, $S_{\text{rebond}} = m\omega_c a^2$ et $\Gamma \sim e^{-S_{\text{rebond}}} = e^{-m\omega_c a^2}$. Le terme dans l'exponentielle est contrôlé par le rapport entre la hauteur de la barrière, $m\omega_c^2 a^2$, divisé par la fréquence $\hbar\omega_c$. La trajectoire classique associée vaut d'ailleurs

$$u(\tau) = \frac{a}{f} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi} e^{i\omega(\tau-\beta/2)} g(\omega), \quad (4.115)$$

ce qui implique que la particule passe seulement un temps de l'ordre de ω_c^{-1} sous la barrière.

- Toujours dans la limite $\beta \rightarrow 0$, analysons maintenant l'effet de la dissipation. Tout d'abord f s'écrit

$$f = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{2\pi m} \frac{1}{\omega^2 + \omega_c^2 + \frac{\eta}{m}|\omega|}. \quad (4.116)$$

Cette intégrale se calcule facilement. En particulier, dans la limite de forte dissipation, $\eta \gg m\omega_c$ $f \approx (2/\pi\eta) \ln(\eta/m\omega_c)$. Le taux tunnel s'écrit alors comme

$$\Gamma \approx e^{-\frac{\pi\eta a^2}{4} \ln\left(\frac{\eta}{m\omega_c}\right)} \approx e^{-m\omega_c a^2 \times h(\eta/m\omega_c)}, \quad (4.117)$$

où $h(x) = \frac{\pi}{4}x \ln(x)$. Dans la limite de forte dissipation, $h(x) \rightarrow +\infty$, le taux tunnel est donc exponentiellement supprimé comparé au cas sans dissipation. Noter qu'il reste juste une faible dépendance logarithmique en ω_c . Comment interprétez ce résultat physiquement. L'effet tunnel est un phénomène purement quantique. Lorsque la particule transfère de l'énergie avec le bain, elle perd de la cohérence de phase, l'effet tunnel en est donc dramatiquement affecté. On peut voir le bain en sorte comme un appareil de mesure de la **position** de la particule. Dans la limite $\eta \rightarrow \infty$, la particule se retrouve complètement localisée dans l'état métastable, l'effet tunnel est totalement inhibé. Il s'agit là d'un effet qualitatif fondamental qui permet de mieux appréhender la transition quantique-classique. On parle de décohérence.

Néanmoins, nous n'avons pas perdu la mécanique quantique pour autant. En effet, les fluctuations de la position de la particule autour de la position d'équilibre instable, à savoir $\langle u^2 \rangle$, tendent vers 0 à forte dissipation $\eta/m\omega_c \rightarrow \infty$ mais les fluctuations de l'impulsion $\langle P^2 \rangle$ divergent à forte dissipation pour assurer le principe d'incertitude.

- Considérons maintenant l'influence de la température en l'absence de dissipation $\eta \rightarrow 0$. Dans ce cas, f est une somme discrète sur les fréquences de Matsubara. Pour calculer ces sommes, on utilise certaines astuces qui seront vues en travaux dirigés. On peut montrer que $f = \frac{1}{\beta} \sum_n g(i\omega_n) = \coth(\beta\omega_c/2)/2m\omega_c$. Dans ce cas,

$$\Gamma = e^{-m\omega_c a^2 \tanh(\beta\omega_c/2)}. \quad (4.118)$$

Dans la limite de basse température, on retrouve le résultat $\Gamma = e^{-m\omega_c a^2}$. A haute température, $\beta \rightarrow 0$, on trouve un comportement de type activation thermique comme on pouvait s'y attendre

$$\Gamma = e^{-m\omega_c^2 a^2 / 2T}. \quad (4.119)$$

On retrouve donc la loi d'Arrhénius. La probabilité est proportionnelle à $e^{-\Delta E/T}$ où ΔE est l'énergie de la barrière.

- Finalement, il nous reste à commenter le cas de β et η fini. A basse température, on peut faire un développement en série en utilisant la formule de Euler-Maclaurin $\sum_{m=0}^{\infty} f(m) = \int_0^{\infty} dx f(x) + f(0)/2 - f'(0)/12 + \dots$. Cela nous permet de relier la somme discrète à l'intégrale à température nulle. On trouve alors que $S_{\text{rebond}}(T) - S_{\text{rebond}}(0) \propto \eta T^2$. Donc

$$\Gamma(T) \approx e^{-\frac{\pi\eta a^2}{4} \ln\left(\frac{\eta}{m\omega_c}\right)} e^{-c\eta T^2}, \quad (4.120)$$

où $c = O(1)$. L'effet tunnel est encore atténué lorsque l'on augmente la température ce qui est légitime.

Ceci conclut notre analyse de l'effet tunnel dans un environnement dissipatif. Nous n'avons fait qu'introduire sur un exemple simple un phénomène fondamental qui touche beaucoup de champ de la physique quantique : le problème de la décohérence et de la transition quantique-classique. Cela fait actuellement l'objet de recherches importantes tant sur le plan expérimental que théorique.

Chapitre 5

Systèmes quantiques à plusieurs particules discernables

Jusqu'à maintenant, nous avons essentiellement étudié à l'aide de l'intégrale fonctionnelle le cas d'une particule dans un potentiel. Néanmoins, les phénomènes quantiques ne se ramènent pas toujours au cas d'une particule libre. Dans ce chapitre, nous allons étendre le formalisme de l'intégrale fonctionnelle aux systèmes à plusieurs particules. Au premier abord, cela semble facile. Il suffit d'introduire une base complète pour le problème à N particules $|u_1, u_2, u_3, \dots, u_N\rangle$, et de répéter toutes les étapes du chapitre précédent. Cela devrait donner les mêmes expressions mais généralisées à N particules. Néanmoins, il existe un problème de taille. Cette méthode fonctionnera lorsque les particules sont discernables mais est vouée à l'échec lorsque les particules sont indiscernables. En effet, dans ce cas, nous devons considérer des fonctions d'ondes soit totalement symétriques soit totalement antisymétriques (suivant que l'on ait à faire à des bosons ou bien à des fermions). Imposer cette restriction dans le cadre de la première quantification mène à des expressions intraitables analytiquement. Nous devons alors établir l'intégrale fonctionnelle dans le cadre de la seconde quantification. Nous verrons comment résoudre ce problème dans le chapitre suivant 6. Dans ce chapitre, allons Considérer le cas de particules quantiques discernables.

5.1 Systèmes quantiques de particules discernables : exemple des systèmes élastiques

Un exemple de systèmes pertinents pour cette analyse est de nouveau le cas des systèmes élastiques. Imaginons un cristal de particules quantiques (des bosons ou des fermions). Si le système peut être décrit par un Hamiltonien élastique, cela signifie que chaque particule possède une étiquette, ici sa position d'équilibre dans le cristal et est donc bien discernable. Tous les résultats du chapitre précédent se généralisent donc trivialement.

L'hamiltonien du système sur le réseau peut s'écrire

$$H = \sum_i \left[\frac{\Pi_i^2}{2M} + \frac{1}{2}k(u_{i+1} - u_i)^2 \right] \quad (5.1)$$

qui correspond à l'hamiltonien standard associé aux phonons. u a la dimension d'une distance, k est une énergie divisée par le carré d'une distance et Π_i est le moment conjugué à u_i . Passons maintenant à la limite continue en conservant u homogène à une distance. Ainsi $u_i \rightarrow u(r)$ et

$\Pi_i \rightarrow a^d \Pi(r)$ afin d'assurer que les variables continues $u(r)$ et $\Pi(r)$ soient conjuguées l'une de l'autre, c.a.d.

$$[u(r), \Pi(r')] = i\hbar \delta(r - r'). \quad (5.2)$$

Si l'on introduit la densité de particules $\rho_0 = 1/a^d$, l'hamiltonien dans le continu s'écrit (en utilisant $\sum_i = \int d^d r \rho_0$)

$$H = \int d^d r \left[\frac{\Pi(r)^2}{2M\rho_0} + \rho_0 \frac{1}{2} c (\nabla u(r))^2 \right], \quad (5.3)$$

où $c = ka^2$ a maintenant la dimension d'une énergie. $\Pi(r)$ est la densité de moments. Cela conduit à l'action en temps imaginaire suivante :

$$S = \int d\tau \int d^d r \rho_0 \left[\frac{1}{2} M (\partial_\tau u(r, \tau))^2 + \frac{1}{2} c (\partial_r u(\tau, r))^2 \right]. \quad (5.4)$$

L'action du système peut se récrire dans l'espace de Fourier

$$S = \frac{1}{2} \frac{1}{\Omega} \sum_q \frac{1}{\beta} \sum_n \rho_0 [M\omega_n^2 + cq^2] u(q, \omega_n) u^*(q, \omega_n) \quad (5.5)$$

A partir de cette expression, on peut par exemple calculer la compressibilité du cristal. A l'aide de (4.58), la compressibilité est donnée par

$$\chi = \frac{1}{\Omega\beta} \langle \rho(q, \omega_n = 0) \rho(-q, \omega_n = 0) \rangle. \quad (5.6)$$

En utilisant (2.97) cela mène finalement à

$$\begin{aligned} \chi &= \frac{\rho_0^2 q^2}{\Omega\beta} \langle u(q, \omega_n = 0) u^*(q, \omega_n = 0) \rangle \\ &= \frac{\rho_0 q^2}{M\omega_n^2 + cq^2} \Big|_{\omega_n=0} \\ &= \frac{\rho_0}{c}. \end{aligned} \quad (5.7)$$

5.2 Lien avec les problèmes classiques

Comme nous l'avons déjà remarquée, l'expression de l'action fonctionnelle d'un système quantique en temps imaginaire ressemble à celle d'un système classique pour lequel la variable τ jouerait le rôle d'une dimension physique supplémentaire. Cette identification formelle va parfois nous permettre d'établir des liens entre la physique d'un système quantique à d dimensions et celle d'un système classique à $d + 1$ dimensions.

Pour mettre en lumière cette correspondance formelle, revenons encore aux systèmes élastiques. En effet, comparons un système quantique en dimension d dont l'hamiltonien est donné par l'Eq.(5.3). Son action se met alors sous la forme (voir (5.4) dans laquelle on a restitué les \hbar)

$$S_\beta = \int_0^{\beta\hbar} d\tau \int d^d r \rho_0 \left[\frac{1}{2} M (\partial_\tau u(r, \tau))^2 + \frac{1}{2} c (\partial_r u(\tau, r))^2 \right], \quad (5.8)$$

et la fonction de partition s'écrit

$$Z = \int \mathcal{D}u[r, \tau] e^{-\frac{1}{\hbar} S_\beta}. \quad (5.9)$$

Système	Quantique	Classique
Dimension	d	$d+1$
β	Température	Taille du système dans la direction z
\hbar	Fluctuations quantiques	Température

TAB. 5.1 – Équivalence entre un système quantique en dimension d et un système classique en dimension $d + 1$.

Noter que l'on somme maintenant sur tous les configurations possibles de $u[r, \tau]$.

Nous pouvons aisément remarquer que (5.8-5.9) sont exactement identiques aux équations d'un système classique en dimension $d + 1$. Néanmoins, la dimension supplémentaire (que l'on appelle z pour le système classique) est de *taille finie* et vaut $\beta\hbar$.

L'hamiltonien du système classique équivalent vaut

$$H = \int d^d r \int_0^{\beta\hbar} d\tau \rho_0 \left[\frac{1}{2} M (\partial_z u(r, z))^2 + \frac{1}{2} c (\partial_r u(r, z))^2 \right]. \quad (5.10)$$

L'équivalent de la température pour le système classique dans l'Eq.(5.9) est jouée par \hbar . Cette correspondance formelle entre système classique et système quantique est résumée de manière synthétique dans le tableau 5.1

Cette équivalence remarquable a plusieurs conséquences importantes. Nous allons en voir quelques unes, la liste ci-dessous étant seulement limitée par l'imagination (et aussi par le temps nécessaire pour rédiger ces notes). D'autres exemples seront abordés en travaux dirigés.

- Avant d'examiner quelques conséquences de cette correspondance quantique-classique, il faut bien garder à l'esprit que cette correspondance a été établi sur des bases purement formelles. En effet, si l'on part d'un hamiltonien quantique, on peut en déduire une action classique équivalente. Néanmoins, rien n'implique que cet Hamiltonien classique a un quelconque sens physique voir un quelconque rapport avec la réalité. Son énergie peut par exemple être complexe. Un système quantique n'est pas en général une réécriture d'un système classique. Par contre une théorie quantique a bien une représentation en terme d'intégrales de chemin mais n'a pas nécessairement un équivalent classique avec une énergie réelle. Fort heureusement, il existe des systèmes (simples) où cette correspondance a un sens et donc s'avère très utile.

- Lorsque l'on veut analyser un problème classique ou quantique, il peut en effet être toujours utile d'analyser son équivalent quantique ou classique (enfin quand ce dernier a un sens!). Bien que l'action des deux problèmes est formellement identique, l'un des deux formalismes (quantique ou classique) peut être plus adapté pour le résoudre (ou pour découvrir qu'il a déjà été résolu!). Les problèmes classiques sont, en général, plus faciles à résoudre numériquement et on peut utiliser cette équivalence pour étudier numériquement les problèmes quantiques associés.

- Nous avons une bonne intuition des transitions de phase dans les systèmes classiques (voir le cours de M. Héritier). Si l'on étudie un système quantique, \hbar joue le rôle d'une température dans son équivalent classique. Si cet équivalent classique possède par exemple une transition de phase, cela implique que le système quantique peut également subir une transition de phase à *température nulle* lorsqu'un des paramètres du Hamiltonien varie. Il s'agit donc d'une transition de phase purement quantique. Détaillons ce point. Supposons que le système quantique possède une symétrie continue. Comme la taille de l'équivalent classique dans la direction z est donnée par β , cela signifie par exemple qu'un problème quantique en dimension $d = 2$ peut avoir une transition de phase seulement à $\beta = \infty$ ($T = 0$) car cela correspond dans ce cas à un problème

classique à trois dimensions. Par contre si $\beta \neq \infty$, l'équivalent classique est de taille finie dans la direction z . Cela implique qu'aux grandes longueurs d'onde l'équivalent classique est effectivement un problème bidimensionnel. Comme il ne peut y avoir de phase ordonnée brisant une symétrie continue en dimension $d = 2$, cela implique bien que la condition $\beta = \infty$ est nécessaire ici. On peut faire également le même raisonnement pour un système quantique avec une symétrie discrète en dimension $d = 1$. Une transition de phase quantique peut avoir lieu uniquement à $T = 0$. A $T \neq 0$, aucun ordre ne peut exister dans notre système quantique unidimensionnel. On peut également voir par ces équivalences qu'une transition de phase quantique sera également caractérisée par une divergence de la longueur de corrélation ξ et par un jeu d'exposants critiques. Il y a néanmoins une différence importante entre systèmes quantiques et systèmes classiques. Dans les systèmes classiques, l'espace est en général isotrope donc la longueur de corrélation diverge de la même manière dans toutes les directions d'espace. Pour le problème quantique, la direction *temps* joue un rôle spécial, donc la direction z de l'équivalent classique également. Il est, de ce fait, possible d'avoir une divergence de la longueur de corrélation différente dans la direction z que suivant les autres directions d'espace. Si l'on suppose par exemple que

$$\xi \sim t^{-\nu} \quad (5.11)$$

où $t = |1 - T/T_c|$ est la déviation par rapport à la température critique dans le problème classique et ν est l'exposant critique, on peut définir une divergence de la longueur de corrélation selon la direction z (ou τ) comme

$$\xi_\tau \sim t^{-\nu z} \quad (5.12)$$

où z est appelé l'exposant dynamique. C'est la loi de puissance qui permet de relier temps et espace. Par exemple, pour l'action (5.4), l'énergie varie comme

$$\omega_n^2 + k^2 \quad (5.13)$$

ou de manière équivalente $\omega = ck$ où c est homogène à une vitesse. dans cet exemple, espace et temps ont la même dimension d'échelle et $z = 1$. Si, par contre, au lieu d'avoir une énergie de telle sorte que $(\nabla u)^2$ soit remplacée par $(\nabla u)^4$, alors $\omega \sim ck^2$. Dans ce cas, $\tau \sim L^2$. Cela implique que si ξ diverge dans les dimensions d'espace comme $t^{-\nu}$, alors ξ diverge dans la dimension temps comme $t^{-2\nu}$ et donc $z = 2$. De manière similaire, pour l'intégrale fonctionnelle bosonique où $\omega \sim ck^2$ et $z = 2$. A l'exception de l'introduction de ce nouvel exposant, les transitions de phase quantique se comportent (se décrivent) de la même manière que leur équivalent classique. En particulier, les fonctions de corrélations obéissent à des lois d'échelle ce qui entraîne des relations entre les exposants critiques.

Pour finir, on peut remarquer que pour les transitions de phase quantiques, on est naturellement amené à résoudre le problème sur un tore comme représenté sur la figure 4.2, pour lequel certaines des directions sont infinies tandis que la direction temps est de taille β . Il serait donc très intéressant de connaître les fonctions de corrélations pour ce type de géométrie spéciale. Lorsque $\beta = \infty$ le système est infini dans toutes les directions et possède en général un point critique caractérisé par une divergence des fonctions de corrélation. Une question très pertinente pour comparer théorie et expérience (qui a toujours lieu à $T \neq 0$) est de savoir comment sont modifiées les fonctions de corrélations lorsque β devient fini. Pour les systèmes critiques classiques à deux dimensions, il est possible de répondre à cette question de manière générale en utilisant le fait qu'en dimension $d = 2$, les fonctions de corrélations du système infini au point critique possèdent l'invariance conforme, c.a.d. sont invariantes sous toutes les transformations conformes (ce sont les transformations qui préservent les angles). Cela implique que si l'on connaît les fonctions de corrélations au point critique dans le plan, on peut déduire la forme

de ces fonctions de corrélations sur le tore à l'aide d'une transformation conforme. L'invariance conforme a en fait de nombreuses autres conséquences et s'avère une méthode très puissante pour classer les systèmes critiques bidimensionnels. Cela sort du cadre de ce cours et je renvoie le lecteur au livre très pédagogique de J. Cardy [4] pour plus de détails.

Chapitre 6

Systèmes quantiques à plusieurs particules indiscernables

Nous avons développé au chapitre 4 l'intégrale de chemin à une particule ainsi que sa généralisation immédiate à N particules discernables dans le chapitre 5. Pour ce faire, nous avons décomposé $\langle u_f | U(t_f, t_i) | u_i \rangle$ en tranches ultra-fines en insérant des relations de fermeture et ensuite nous avons approximé $\langle u_{j+1} | e^{-\frac{i}{\hbar} H(t)\epsilon} | u_j \rangle$ au premier ordre en ϵ en séparant les parties cinétiques et potentielles. Le clé du calcul était clairement l'insertion multiple de relations de fermeture à *une particule*.

Néanmoins, les principaux problèmes en matière condensée sont des problèmes à N particules (fermions ou bosons). Dans ce cas, comment choisir les états propres intermédiaires à N particules ? Quels sont les équivalents des $|u_i\rangle\langle u_i|$ et des $|p_i\rangle\langle|$ pour un problèmes à N particules indiscernables ? Par ailleurs, le nombre de particules peut fluctuer entre t_i et t_f ce qui complique encore plus notre tâche.

Pour traiter les systèmes de particules quantiques indiscernables, la seconde quantification est bien plus appropriée. La seconde quantification étant traitée dans un autre cours, je la supposerai acquise quand bien des rappels seront vus en travaux dirigés.

6.1 États cohérents bosoniques

Nous considérons un espace de Fock bosonique et un Hamiltonien H du type

$$H = \sum_{i,j} h_{ij} a_i^\dagger a_j + \sum_{ijkl} V_{ijkl} a_i^\dagger a_j^\dagger a_k a_l. \quad (6.1)$$

Nous noterons $|0\rangle$ le vide (de particules). N'importe quel états $|\Phi\rangle$ peut se décomposer sous

$$|\Phi\rangle = \sum_{n_1, n_2, \dots} C_{n_1, n_2, \dots} |n_1, n_2, \dots\rangle, \quad (6.2)$$

où

$$|n_1, n_2, \dots\rangle \equiv \frac{(a_1^\dagger)^{n_1}}{\sqrt{n_1!}} \frac{(a_2^\dagger)^{n_2}}{\sqrt{n_2!}} \dots |0\rangle. \quad (6.3)$$

Nous avons défini dans les expressions ci-dessus :

- a_i^\dagger crée un boson dans l'état i tandis que a_i détruit un boson dans l'état i .

– $|n_1\rangle$ correspond à n_1 bosons dans l'état 1, etc.

– Les $C_{n_1, n_2, \dots}$ sont les coefficients de la décomposition de $|\Phi\rangle$.

Remarquons que $|\Phi\rangle$ apparaît en principe comme une superposition d'états à nombre de particules différents.

Les a_i^\dagger, a_j satisfont aux relations de commutation suivantes

$$[a_i, a_j] = 0 ; [a_i^\dagger, a_j^\dagger] = 0 ; [a_i, a_j^\dagger] = \delta_{ij}. \quad (6.4)$$

Les $\sqrt{n_i}$ sont des facteurs de normalisation :

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots | a_i^\dagger | n'_1, \dots, n'_i, \dots \rangle = \sqrt{n'_i + 1} \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2}, \dots, \delta_{n_i, n'_i+1}, \dots \quad (6.5)$$

$$\langle n_1, \dots, n_i, \dots | a_i | n'_1, \dots, n'_i, \dots \rangle = \sqrt{n'_i} \delta_{n_1, n'_1} \delta_{n_2, n'_2}, \dots, \delta_{n_i, n'_i-1}, \dots \quad (6.6)$$

Si le nombre minimum de particules dans l'état $|\Phi\rangle$ est n_0 , alors le minimum de particules dans l'état $a_i^\dagger|\Phi\rangle$ doit être $n_0 + 1$. Cela implique que les opérateurs de création a_i^\dagger ne peuvent avoir d'états propres (à droite). Par contre, ce n'est pas le cas des opérateurs de destruction. Les états propres de l'opérateur de destruction sont appelés les états cohérents. Introduisons les états

$$|\Phi\rangle \equiv \exp\left[\sum_i \Phi_i a_i^\dagger\right]|0\rangle \quad (6.7)$$

où les éléments de $\Phi = \{\Phi_i\}$ représentent un ensemble de nombres complexes. Les états $|\Phi\rangle$ sont les états propres des opérateurs de destruction. Ils vérifient donc :

$$a_i |\Phi\rangle = \Phi_i |\Phi\rangle \quad (6.8)$$

Les états $|\Phi\rangle$ sont donc les états propres (à droite) des opérateurs de destruction avec des valeurs propres Φ_i . Pour démontrer la propriété (6.8), montrons déjà que $a \exp(\Phi a^\dagger)|0\rangle = \Phi \exp(\Phi a^\dagger)|0\rangle$.

$$\begin{aligned} a \exp(\Phi a^\dagger)|0\rangle &= a \sum \frac{1}{n!} \Phi^n (a^\dagger)^n |0\rangle \\ &= \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} \Phi^n a (a^\dagger)^n |0\rangle \end{aligned} \quad (6.9)$$

A partir de la relation $[a, (a^\dagger)^n] = n(a^\dagger)^{n-1} + (a^\dagger)^n a$ qui se démontre facilement par récurrence, nous avons donc

$$\begin{aligned} a \exp(\Phi a^\dagger)|0\rangle &= \sum_{n \geq 1} \frac{1}{n!} n \Phi^n (a^\dagger)^{n-1} |0\rangle \\ &= \Phi \sum_{n=0} \frac{1}{n!} \Phi^n (a^\dagger)^n |0\rangle = \Phi e^{\Phi a^\dagger} |0\rangle, \end{aligned} \quad (6.10)$$

ce qui démontre la propriété. A partir de ce résultat, c'est un bon exercice de démontrer la relation (6.8). Si l'on prend l'hermitique conjugué de (6.8), nous obtenons

$$\langle \Phi | a_i^\dagger = \langle \Phi | \bar{\Phi}_i, \quad (6.11)$$

où $\bar{\Phi}_i$ est le complexe conjugué de Φ_i . Donc $\langle \Phi |$ est un état propre (à gauche) de a_i^\dagger . On peut montrer un certain nombre de propriétés sur les états cohérents :

– i)

$$a_i^\dagger |\Phi\rangle = \partial_{\Phi_i} |\Phi\rangle \quad (6.12)$$

– ii) Soient $|\Phi\rangle, |\Theta\rangle$ deux états cohérents, alors

$$\langle \Theta | \Phi \rangle = \exp\left(\sum_i \bar{\theta}_i \Phi_i\right) \quad (6.13)$$

– iii) Les états cohérents forment une base complète (sur-complète en fait car $\langle \Theta | \Phi \rangle \neq 0$) de l'espace de Fock :

$$\int \prod_i \frac{d\bar{\Phi}_i d\Phi_i}{\pi} e^{-\sum_i \bar{\Phi}_i \Phi_i} |\Phi\rangle \langle \Phi| = \mathbf{1}_{\mathcal{F}}, \quad (6.14)$$

où $d\bar{\Phi}_i d\Phi_i = d\text{Re}\Phi_i d\text{Im}\Phi_i$ et $\mathbf{1}_{\mathcal{F}}$ représente l'opérateur identité sur l'espace de Fock.

La preuve de l'Eq. (6.14) repose sur le lemme de Schur (si et seulement si un opérateur commute avec les opérateurs (plus exactement leurs représentations matricielles) formant une représentation irréductible du groupe, alors cet opérateur est soit nul, soit proportionnel à l'identité). La famille des $\{a_i\}, \{a_i^\dagger\}$ forment une représentation irréductible de l'espace de Fock. Il est aisé de vérifier que le membre de gauche commute de (6.14) commute avec les a_i, a_i^\dagger . La constante de proportionnalité est par exemple fixée en prenant le recouvrement avec le vide.

Notons que le facteur $e^{-\sum_i \bar{\Phi}_i \Phi_i}$ qui apparaît dans la résolution de l'identité (6.14) est là pour compenser le fait que la base est sur-complète c.a.d. que l'on compte trop d'états si l'on somme directement sur l'ensemble des états cohérents.

A l'aide de ces états cohérents et en particulier l'Eq. (6.14), nous sommes maintenant complètement armés pour construire l'intégrale fonctionnelle pour des systèmes bosoniques.

6.2 Intégrale fonctionnelle pour les bosons

Considérons la fonction de partition d'un système bosonique décrit par l'hamiltonien (6.1)

$$\mathcal{Z}_b = \text{Tr} \left(e^{-\beta(H-\mu N)} \right) = \sum_n \langle |e^{-\beta(H-\mu N)} | n \rangle. \quad (6.15)$$

Comme nous l'avons déjà vu pour les systèmes classiques, la fonction de partition donne accès aux fonctions de corrélations qui sont les quantités importantes mesurées par l'expérience. μ est le potentiel chimique, N est ici l'opérateur nombre et les $\{|n\rangle\}$ forment une base complète de l'espace de Fock. Pour préparer la représentation en terme d'intégrales de chemin, nous insérons une première résolution de l'identité

$$\mathcal{Z}_b = \int d(\bar{\Phi}, \Phi) e^{-\sum_i \bar{\Phi}_i \Phi_i} \sum_n \langle n | \Phi \rangle \langle \Phi | e^{-\beta(H-\mu N)} | n \rangle, \quad (6.16)$$

où nous avons introduit la notation plus compacte $d(\bar{\Phi}, \Phi) = \prod_i \frac{d\bar{\Phi}_i d\Phi_i}{\pi}$. Nous avons deux sommes sur l'espace de Fock, l'une sur $\{|n\rangle\}$, l'autre sur les $\{|\Phi\rangle\}$. Il est clair que l'une est redondante. L'idée est de débarrasser de la somme sur les $\{|n\rangle\}$ (qui vérifie $\sum_n |n\rangle \langle n| = \mathbf{1}_{\mathcal{F}}$) en passant le facteur $\langle n | \Phi \rangle$ à droite du facteur $\langle \Phi | e^{-\beta(H-\mu N)} | n \rangle$. On peut effectivement vérifier que

$\langle n|\Phi\rangle\langle\Phi|n\rangle = \langle\Phi|n\rangle\langle n|\Phi\rangle$, ce qui permet de se débarrasser de la somme sur les $\{|n\rangle\}$ en utilisant une résolution de l'identité. Il nous reste donc

$$\mathcal{Z}_b = \int d(\bar{\Phi}, \Phi) e^{-\sum_i \bar{\Phi}_i \Phi_i} \langle\Phi|e^{-\beta(H-\mu N)}|\Phi\rangle. \quad (6.17)$$

L'équation (6.17) exprime la fonction de partition sur la base des états cohérents. On peut maintenant suivre à la lettre la procédure vue dans le chapitre précédent. On divise β en P segments de longueur $\epsilon = \beta/P$. On suppose $\Phi(0) = \Phi(\beta)$, de même pour $\bar{\Phi}$. On insère P résolutions de l'identité ce qui permet d'exprimer

$$\begin{aligned} \mathcal{Z}_b = \int_{\substack{\Phi^0 = \Phi^P \\ \bar{\Phi}^0 = \bar{\Phi}^P}} d(\bar{\Phi}^n, \Phi^n) e^{-\bar{\Phi}^0 \Phi^0} & \langle\Phi^0|e^{-\epsilon(H-\mu N)}e^{-\bar{\Phi}^1 \Phi^1}|\Phi^1\rangle \langle\Phi^1|e^{-\epsilon(H-\mu N)}|\Phi^2\rangle \dots \\ & \times \langle\Phi^{P-1}|e^{-\epsilon(H-\mu N)}|\Phi^P\rangle, \end{aligned} \quad (6.18)$$

où nous avons utilisé la notation simplifiée $\bar{\Phi}^0 \Phi^0 = \sum_i \bar{\Phi}_i^0 \Phi_i^0$. On utilise ensuite le fait que

$$\langle\Phi^{n-1}|e^{-\epsilon(H-\mu N)}|\Phi^n\rangle = e^{-\epsilon(H(\bar{\Phi}^{n-1}, \Phi^n) - \mu N(\bar{\Phi}^{n-1}, \Phi^n))} e^{-\bar{\Phi}^{n-1} \Phi^n}, \quad (6.19)$$

où nous avons introduit la notation compacte

$$\frac{\langle\Phi|H(a^\dagger, a)|\Phi'\rangle}{\langle\Phi|\Phi'\rangle} = \sum_{ij} h_{ij} \bar{\Phi}_i \Phi'_j + \sum_{ijkl} V_{ijkl} \bar{\Phi}_i \bar{\Phi}_j \Phi_k \Phi_l \equiv H(\bar{\Phi}, \Phi'), \quad (6.20)$$

et une définition similaire pour $N()$. On aboutit ainsi à la forme suivante de la fonction de partition :

$$\mathcal{Z}_b = \int_{\substack{\Phi^0 = \Phi^P \\ \bar{\Phi}^0 = \bar{\Phi}^P}} d(\bar{\Phi}^n, \Phi^n) e^{-\epsilon \sum_{n=0}^P \left[\frac{(\bar{\Phi}^n - \bar{\Phi}^{n+1}) \cdot \Phi^n}{\epsilon} + H(\bar{\Phi}^{n+1}, \Phi^n) - \mu N(\bar{\Phi}^{n+1}, \Phi^n) \right]}. \quad (6.21)$$

Finalement, il nous reste plus qu'à faire tendre $P \rightarrow \infty$ de manière à transformer les sommes en intégrales. On obtient donc dans la limite continue la forme suivante pour la fonction de partition :

$$\mathcal{Z}_b = \mathcal{D}(\bar{\Phi}, \Phi) e^{-S_b(\bar{\Phi}, \Phi)} \quad (6.22)$$

avec

$$S_b(\bar{\Phi}, \Phi) = \int_0^\beta d\tau [\bar{\Phi} \partial_\tau \Phi + H(\bar{\Phi}, \Phi) - \mu N(\bar{\Phi}, \Phi)]. \quad (6.23)$$

Nous avons défini

$$\mathcal{D}(\bar{\Phi}, \Phi) = \lim_{P \rightarrow \infty} \prod_{n=1}^P d(\bar{\Phi}, \Phi), \quad (6.24)$$

et

$$\partial_\tau \Phi|_{\tau=n\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\Phi^{n+1} - \Phi^n}{\epsilon}. \quad (6.25)$$

Les champs bosoniques ont des conditions de bord périodiques $\bar{\Phi}(0) = \bar{\Phi}(\beta)$, $\Phi(0) = \Phi(\beta)$. Si l'on reprend l'expression explicite de l'hamiltonien bosonique (6.1) du début du chapitre l'action prend la forme suivante :

$$S_b(\bar{\Phi}, \Phi) = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i,j} \bar{\Phi}_i(\tau) [(\partial_\tau - \mu)\delta_{ij} + h_{ij}] \Phi_j(\tau) + \sum_{ijkl} V_{ijkl} \bar{\Phi}_i(\tau) \bar{\Phi}_j(\tau) \Phi_k(\tau) \Phi_l(\tau) \right]. \quad (6.26)$$

Tout d'abord, il est important de remarquer que notre action bosonique a bien la structure générale d'une action de la forme $S = \int d\tau (p\dot{q} - H)$ à condition d'identifier comme coordonnées généralisées (q, p) avec $(\Phi, \bar{\Phi})$. Ceci n'a rien de tout à fait étonnant. En effet, l'hamiltonien qui apparaît dans l'action est notre Hamiltonien initial (6.1) dans lequel on a remplacé les a_i par les $\Phi(\tau)$ et les a_i^\dagger par les $\bar{\Phi}(\tau)$. La variable conjuguée à a_i est à facteur i près a_i^\dagger puisque $[a_i, a_i^\dagger] = 1$. En se rappelant que $[q, p] = i\hbar$, on peut prendre formellement $p_i = ia_i^\dagger$. Avec cette identification formelle, on retrouve bien la forme d'une action généralisée que l'on aurait pu deviner dès le départ. L'intérêt des états cohérents est que nous avons pu construire rigoureusement l'intégrale fonctionnelle pour un système de particules bosoniques indiscernables. Comme nous l'avons déjà expliqué dans le chapitre précédent, notre action (6.23) peut être également interprétée comme une action classique à $d + 1$ dimensions.

On peut également écrire l'action bosonique dans l'espace de Fourier. Pour ce faire, du fait des conditions de bord périodiques pour les champs bosoniques, on peut les développer en série de Fourier comme nous l'avons déjà vu à l'Eq. (4.53) :

$$\Phi(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \Phi_n e^{-i\omega_n \tau} \quad ; \quad \Phi_n \equiv \Phi(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \Phi(\tau), \quad (6.27)$$

où nous avons introduit les fréquences de Matsubara bosoniques $\omega_n = 2\pi nT$. De la même manière, on obtient le développement en série de Fourier de $\bar{\Phi}$ en prenant le complexe conjugué de Φ . En substituant (4.53) et en utilisant $\int_0^\beta d\tau e^{-i\omega_n \tau} = \beta \delta_{\omega_n, 0}$, on obtient

$$S_b(\bar{\Phi}, \Phi) = \sum_{ij,n} \bar{\Phi}_{i,n} [(-i\omega_n - \mu)\delta_{ij} + h_{ij}] \Phi_{j,n} + \frac{1}{\beta} \sum_{ijkl,n_i} V_{ijkl} \bar{\Phi}_{i,n_1} \bar{\Phi}_{j,n_2} \Phi_{k,n_3} \Phi_{l,n_4} \delta_{n_1+n_2,n_3+n_4}. \quad (6.28)$$

L'équation (6.28) définit la représentation en fréquence de l'action bosonique qui est souvent plus pratique.

Quand bien même, nous sommes partis d'un Hamiltonien quantique compliqué de bosons, nous avons une représentation en terme d'une intégrale de chemin "standard" à partir de laquelle nous allons pouvoir appliquer toutes les techniques de calculs vues au chapitre 3 pour faire de la physique. Ce formalisme est particulièrement bien adapté pour traiter les systèmes de particules quantiques en interaction (c.a.d. au problème à N corps). Nous verrons juste quelques applications en travaux dirigés faute de temps mais ceci sera plus amplement développé au second semestre dans le cours de A. Georges.

6.3 États cohérents fermioniques

6.3.1 Introduction des variables de Grassmann

La principale différence entre bosons et fermions est que les premiers commutent tandis que les seconds anticommutent. Comme pour les bosons, nous cherchons les vecteurs propres de l'opérateur destruction, c'est à dire que nous cherchons un état $|\eta\rangle$ tel que

$$c_i|\eta\rangle = \eta_i|\eta\rangle, \quad (6.29)$$

où c_i détruit un fermion dans l'état i . Du fait que les opérateurs fermioniques anticommutent, c.a.d vérifient $\{a_i, a_j\} = 0$, cela implique nécessairement que les η_i vérifient

$$\eta_i\eta_j + \eta_j\eta_i = 0. \quad (6.30)$$

Par conséquent, contrairement au cas bosonique où les Φ étaient de simples nombres complexes, ce n'est pas le cas des η_i ! Que faire ? Nous aimerions travailler avec des états cohérents qui ont la même forme que les états cohérents bosoniques afin de retrouver une structure d'action standard. Le prix à payer pour ce faire est que les η_i doivent nécessairement obéir à une algèbre anticommutative que l'on appelle plus communément algèbre de Grassmann. Nous n'allons pas rentrer dans les détails de la structure mathématique de cette algèbre. La seule chose que nous avons besoin de savoir est que les η_i , les générateurs de cet algèbre (et leur généralisation aux produits de la forme $\{\eta_i\eta_j, \eta_i\eta_j\eta_k\}$) forment une algèbre ordinaire mais anticommutative. En pratique, la seule règle dont nous avons besoin est donnée par l'Eq.(6.30). Notons qu'une conséquence directe de (6.30) est que

$$\eta_i^2 = 0. \quad (6.31)$$

Pour générer cette algèbre, on associe à

$$\begin{aligned} c_i &\longrightarrow \eta_i \\ c_i^\dagger &\longrightarrow \bar{\eta}_i. \end{aligned} \quad (6.32)$$

Ainsi, à tout vecteur $|\eta\rangle$ dans l'espace de Fock, on pourra associer un élément correspondant dans l'algèbre de Grassmann.

Quelques remarques de précaution s'imposent tout de même. Tout d'abord, l'algèbre de Grassmann, notons la \mathcal{G} , ne contient pas que des éléments qui anticommutent mais aussi des éléments qui commutent. En effet les nombres de Grassmann qui s'écrivent comme un produit d'un nombre pair de nombres de Grassmann commutent avec le reste de l'algèbre. Quand bien même les nombres de Grassmann et les opérateurs fermioniques ont une structure anticommutative, il ne faut pas les confondre. Les variables de Grassmann η_i ne sont jamais que des nombres, certes anticommutants, tandis que les c_i sont des opérateurs agissant dans l'espace de Fock. Les η_i n'agissant sur rien du tout !

6.3.2 Quelques propriétés des variables de Grassmann

Dérivation

On peut définir une dérivée de manière ordinaire

$$\partial_\xi \xi = 1 \ ; \ \partial_\xi \xi \bar{\xi} = \bar{\xi} \ ; \ \partial_\xi \xi \bar{\xi} = -\bar{\xi}. \quad (6.33)$$

Si on considère une fonction f de p variables de Grassmann $\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_p \in \mathcal{G}$, alors

$$f(\xi_1, \xi_2, \dots, \xi_p) = \sum_{n=0}^{\infty} \sum_{i_1, \dots, i_n}^k \frac{1}{n!} \frac{\partial^n f}{\partial \xi_{i_1} \partial \xi_{i_2} \dots \partial \xi_{i_n}} \Big|_{\xi=0} \xi_{i_1} \dots \xi_{i_n}. \quad (6.34)$$

Noter que la série est finie ans la mesure où $\xi_{i_p}^2 = 0$.

Pour une fonction d'une seule variable, le développement est donc très simple

$$f(\xi) = f(0) + \xi \frac{\partial f}{\partial \xi} \Big|_{\xi=0}. \quad (6.35)$$

Intégration

On définit l'intégration par $\int d\xi = 0$ et $\int d\xi \xi = 1$. Par conséquent,

$$\int d\xi f(\xi) = \int d\xi (f(0) + \xi f'(0)) = f'(0) \quad (6.36)$$

Intégration et dérivation ont donc le même effet ! Nous pouvons également généraliser l'intégrale Gaussienne sur les variables de Grassmann.

$$\int d\bar{\eta} d\eta e^{-\bar{\eta}\eta} = 1 \quad (6.37)$$

$$\int d\bar{\eta} d\eta e^{-\bar{\eta}a\eta} = a \quad (6.38)$$

$$\int d(\bar{\psi}, \psi) e^{-\bar{\psi}^t A \eta} = \det A, \quad (6.39)$$

ou $\bar{\psi}, \psi$ sont des vecteurs à N composantes dans l'algèbre de Grassmann, $\bar{\psi}^t$ est le vecteur transposé de $\bar{\psi}$, $d(\bar{\psi}, \psi) = \prod_{i=1}^N d\bar{\psi}_i d\psi_i$ et A est une matrice arbitraire complexe. Lorsque A est diagonalisable, la preuve suit exactement les mêmes pas que la démonstration de l'intégrale Gaussienne standard. Pour une matrice A générale non diagonalisable, l'identité s'établit par un développement de l'exponentielle qui se termine à l'ordre N .

– Pour finir, donnons l'intégrale Gaussienne généralisée

$$\int d(\bar{\psi} d\psi) e^{-\bar{\psi}^t A \psi + \bar{\nu}^t \cdot \psi + \bar{\psi}^t \cdot \nu} = \det A e^{\bar{\nu}^t A^{-1} \nu}. \quad (6.40)$$

où $\bar{\psi}, \psi, \bar{\nu}, \nu$ sont des vecteurs à N composantes dans l'algèbre de Grassmann. Des exercices de manipulations des variables de Grassmann seront vus en travaux dirigés.

6.3.3 États cohérents

A partir de ces bases de la dérivation et de l'intégration, on peut construire les états cohérents fermioniques. Il nous faut tout de même définir comment les nombres de Grassmann interagissant avec les opérateurs fermioniques. Pour cela, il faut étendre l'algèbre. On demande que

$$\{\eta_i, c_j\} = 0. \quad (6.41)$$

Dans ce cas, l'état cohérent fermionique s'écrit simplement

$$|\eta\rangle = \exp\left(-\sum_i \eta_i c_i^\dagger\right) |0\rangle \quad (6.42)$$

où $|0\rangle$ désigne le vide. L'ordre est important à cause des règles d'anticommutation. De la même manière, nous avons

$$\langle\eta| = \langle 0| \exp\left(-\sum_i c_i \bar{\eta}_i\right) = \langle 0| \exp\left(\sum_i \bar{\eta}_i c_i\right) \quad (6.43)$$

Pour vérifier que $|\eta\rangle$ est bien un vecteur propre de l'opérateur de destruction, considérons le cas plus simple $c|\zeta\rangle$ avec $|\zeta\rangle = \exp(-\eta c^\dagger)|0\rangle$.

$$\begin{aligned} c|\zeta\rangle &= c(1 - \zeta c^\dagger)|0\rangle = (c + \zeta c c^\dagger)|0\rangle = \zeta|0\rangle \\ &= \zeta(1 - \zeta c^\dagger)|0\rangle = \eta \exp(-\zeta c^\dagger)|0\rangle = \zeta|\zeta\rangle. \end{aligned} \quad (6.44)$$

La généralisation à η est alors immédiate. Cela constitue un exercice de vérifier que

$$c_i|\eta\rangle = \eta_i|\eta\rangle \quad (6.45)$$

$$\langle\eta|c_i = \partial_{\bar{\eta}_i}\langle\eta|. \quad (6.46)$$

Nous avons également les propriétés suivantes pour l'action de c_i^\dagger :

$$c_i^\dagger|\eta\rangle = -\partial_{\eta_i}|\eta\rangle \quad (6.47)$$

$$\langle\eta|c_i^\dagger = \langle\eta|\bar{\eta}_i. \quad (6.48)$$

Le recouvrement de deux états cohérents fermioniques $|\eta\rangle, |\eta'\rangle$ s'écrit

$$\langle\eta'|\eta\rangle = \exp\left[\sum_i \bar{\eta}'_i \eta_i\right]. \quad (6.49)$$

Comme pour les bosons, les états cohérents fermioniques forment une base (sur complète) ce qui permet une résolution de l'identité :

$$\int d(\bar{\eta}, \eta) e^{-\sum_i \bar{\eta}_i \eta_i} |\eta\rangle\langle\eta| = \mathbf{1}_{\mathcal{F}}, \quad (6.50)$$

où nous avons utilisé la notation compacte $d(\bar{\eta}, \eta) = \prod_i d\bar{\eta}_i d\eta_i$ (noter la différence de π dans la normalisation de la mesure d'intégration entre états cohérents fermioniques et états cohérents bosoniques. Les états cohérents fermioniques ont donc, à quelques nuances près, les mêmes propriétés que les états cohérents bosoniques. Nous sommes donc maintenant armés pour généraliser l'intégrale fonctionnelle aux fermions.

6.4 Intégrale fonctionnelle pour les fermions

Considérons la fonction de partition d'un système fermioniques décrit par un Hamiltonien similaire à (6.1) dans lequel on remplace les opérateurs bosoniques a_i, a_i^\dagger par des opérateurs fermioniques c_i, c_i^\dagger . On peut alors suivre exactement les mêmes étapes que pour l'intégrale fonctionnelle bosonique à quelques petites subtilités près. La fonction de partition s'écrit :

$$\mathcal{Z}_f = \text{Tr} \left(e^{-\beta(H-\mu N)} \right) = \sum_n \langle | e^{-\beta(H-\mu N)} | n \rangle. \quad (6.51)$$

On insère une nouvelle résolution de l'identité avec les états cohérents fermioniques

$$\mathcal{Z}_f = \int d(\bar{\psi}, \psi) e^{-\sum_i \bar{\psi}_i \phi_i} \sum_n \langle n | \psi \rangle \langle \psi | e^{-\beta(H-\mu N)} | n \rangle, \quad (6.52)$$

Comme pour le cas bosonique, on cherche à éliminer la somme redondante sur $\{|n\rangle\}$ (qui vérifie $\sum_n |n\rangle\langle n| = \mathbf{1}_{\mathcal{F}}$) en passant le facteur $\langle n | \psi \rangle$ à droite du facteur $\langle \psi | e^{-\beta(H-\mu N)} | n \rangle$. Néanmoins, il faut faire attention aux règles d'anticommuation. C'est un bon exercice de se convaincre que

$$\langle n | \psi \rangle \langle \psi | n \rangle = \langle -\psi | n \rangle \langle n | \psi \rangle \quad (6.53)$$

où

$$\langle -\psi | = \langle 0 | \exp\left(+\sum_i a_i \bar{\psi}_i\right) = \langle 0 | \exp\left(-\sum_i \bar{\psi}_i a_i\right). \quad (6.54)$$

Il nous reste donc après élimination de la somme redondante sur $|n\rangle$

$$\mathcal{Z}_f = \int d(\bar{\psi}, \psi) e^{-\sum_i \bar{\psi}_i \psi_i} \langle -\psi | e^{-\beta(H-\mu N)} | \psi \rangle. \quad (6.55)$$

On peut maintenant reproduire exactement les mêmes étapes que pour le cas bosonique. On divise donc β en P segments de longueur $\epsilon = \beta/P$ mais les champs ψ ont des conditions de bord anti-périodiques c.a.d. $\psi(0) = -\psi(\beta)$ et de même pour $\bar{\psi}$. Le reste du calcul est formellement identique et ne sera donc pas détaillé.

On obtient donc dans la limite continue la forme suivante pour la fonction de partition fermionique

$$\mathcal{Z}_f = \mathcal{D}(\bar{\psi}, \psi) e^{-S_f(\bar{\psi}, \psi)} \quad (6.56)$$

avec

$$S_f(\bar{\psi}, \psi) = \int_0^\beta d\tau [\bar{\psi} \partial_\tau \psi + H(\bar{\psi}, \psi) - \mu N(\bar{\psi}, \psi)]. \quad (6.57)$$

Nous avons défini

$$\partial_\tau \psi |_{\tau=n\epsilon} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\epsilon}. \quad (6.58)$$

Noter que remplacer une différence par une dérivée est purement symbolique avec les variables de Grassmann. Cela ne fait pas de sens de dire que $\psi^{n+1} - \psi^n$ est petit. Par contre le symbole $\partial_\tau \bar{\psi}$ représente formellement l'expression bien définie $\lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{\psi^{n+1} - \psi^n}{\epsilon}$.

Contrairement aux champs bosoniques, les champs fermioniques ont des conditions de bord anti-périodiques $\bar{\psi}(0) = -\bar{\psi}(\beta), \psi(0) = -\psi(\beta)$. La structure de l'action fermionique est donc totalement similaire à celle de l'action bosonique, la seule différence étant que les ψ_i sont des nombres de Grassmann et non de simples nombres complexes.

On peut également écrire l'action fermionique dans l'espace de Fourier. En tenant compte des conditions de bord anti-périodiques pour les champs fermioniques, on peut les développer en série de Fourier

$$\psi(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{\omega_n} \psi_n e^{-i\omega_n \tau} \quad ; \quad \psi_n \equiv \psi(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_n \tau} \psi(\tau), \quad (6.59)$$

où nous avons introduit cette fois les fréquences de Matsubara fermioniques $\omega_n = (2n + 1)\pi T$. On obtient le même développement en série de Fourier de $\bar{\psi}$ en prenant le complexe conjugué de ψ . L'action fermionique pour l'hamiltonien fermionique est complètement analogue à l'Eq. (6.28) en remplaçant les champs bosoniques $(\bar{\Phi}_i, \Phi_i)$ par les champs fermioniques $(\bar{\psi}_i, \psi_i)$.

6.5 Applications

6.5.1 Bosons en interaction : application à la superfluidité

Cette partie n'a pas encore été rédigée.

6.5.2 Fermions en interaction : application au blocage de Coulomb

Cette partie n'a pas encore été rédigée.

6.6 Conclusion

Nous avons dans ce chapitre construit l'intégrale fonctionnelle pour les particules quantiques indiscernables (bosons) et (fermions). La construction peut paraître un peu longue et lourde mais le résultat final est très simple. Notre fonction de partition dans la limite continue a bien la forme

d'une intégrale de chemin et l'action prend la forme $S(\bar{\phi}, \phi) = \int_0^\beta d\tau [\bar{\phi} \partial_\tau \phi + H(\bar{\phi}, \phi) - \mu N(\bar{\phi}, \phi)]$

où ϕ_i sont des champs scalaires complexes pour les bosons ou des variables de Grassmann pour les fermions. On peut étendre cette construction à des particules portant des nombres quantiques internes comme le spin ou d'autres nombres quantiques. Le principal intérêt de cette construction est qu'elle permet d'aborder les systèmes quantiques en interaction à l'aide des méthodes usuelles liées à l'intégrale fonctionnelle. Nous l'avons appliqué aux problèmes de la superfluidité de l'Helium 4 et au blocage de Coulomb. D'autres applications peuvent évidemment être envisagées comme la supraconductivité, les liquides de Fermi, etc. IL s'agit là d'un cours à part entière qui sera développé au second semestre. Rajoutons enfin que cette approche fonctionnelle constitue un bon formalisme de départ pour inclure un potentiel désordonné ou pour étudier des systèmes hors équilibre bien qu'un peu de travail soit nécessaire.

Chapitre 7

Perturbation : théorie de la réponse linéaire

7.1 Méthode

Nous allons maintenant essayer d'analyser le même genre de questions pour le problème quantique que nous avons traitées pour le problème classique dans la partie 2.2. Nous ajoutons à l'hamiltonien quantique une perturbation a priori indépendante de l'espace du type

$$H_{\text{pert}} = \int dx h(x, t) O(x) \quad (7.1)$$

où $h(x, t)$ représente un champ extérieur quelconque (un champ magnétique, un champ électrique, une pression, etc.). Comme pour l'étude des systèmes classiques, nous choisissons O de sorte qu'en l'absence de la perturbation $\langle O(x) \rangle = 0$ (nous pouvons toujours soustraire à la perturbation sa valeur moyenne).

Comme l'équation de Schroedinger donne l'évolution temporelle du système, nous sommes maintenant en position de calculer la réponse à une perturbation dépendant du temps. Ce n'était pas possible en physique statistique dans la mesure où l'équilibre statistique ne définit pas l'évolution temporelle d'un système.

Comme pour les problèmes classiques, il n'est pas pensable de calculer en général l'entière réponse à la perturbation. Par contre, nous allons tâcher d'obtenir la réponse linéaire.

$$\langle O(x_0, t_0) \rangle \simeq \int dx dt \chi(x_0 - x, t_0 - t) h(x, t). \quad (7.2)$$

Noter qu'ici t correspond bien au véritable temps du système.

Pour calculer cette réponse, nous devons tout d'abord définir ce que la valeur moyenne signifie avec un Hamiltonien dépendant du temps. Pour ce faire, nous introduisons la matrice densité $\rho(t)$ et définissons la moyenne au temps t par

$$\langle A \rangle_t = \text{Tr}[\rho(t)A]. \quad (7.3)$$

Si l'hamiltonien ne dépend pas du temps, la matrice densité s'écrit simplement

$$\rho = \frac{1}{Z} e^{-\beta H}. \quad (7.4)$$

Pour déterminer son évolution temporelle, nous pouvons supposer que la matrice densité s'écrit dans une base propre

$$\rho = \sum_n c_n |n\rangle\langle n|, \quad (7.5)$$

si les états $|n\rangle$ sont les états propres et $c_n = e^{-\beta E_n} / \sum_n e^{-\beta E_n}$. Dans le cadre de la réponse linéaire, nous supposons que l'évolution temporelle est seulement donnée par l'évolution des fonctions d'ondes. Cela revient à dire que les coefficients c_n ne changent pas quand le système évolue avec le temps, de même que les populations des niveaux d'énergie. L'évolution temporelle est donc supposée adiabatique. En d'autres termes, le bain thermique est introduit à un temps donné antérieur à la perturbation (par exemple $t = -\infty$) et les niveaux d'énergie sont peuplés selon la distribution indépendante du temps $e^{-\beta E_n}$. Le bain thermique est ensuite enlevé et la perturbation est introduite progressivement, de telle sorte que les fonctions d'onde évoluent avec le temps. En utilisant l'équation de Schroedinger, et l'équation (7.5), il est facile de montrer que

$$\frac{\partial \rho(t)}{\partial t} = -i[H(t), \rho(t)]. \quad (7.6)$$

Pour obtenir la réponse linéaire, nous supposons que $\rho(t) = \rho_0 + f(t)$ où $f(t)$ est la partie proportionnelle à h . En ne conservant que les termes linéaires, (7.6) devient

$$i \frac{\partial f(t)}{\partial t} = [H_0, \rho_0] + [H_0, f(t)] + [H_{\text{pert}}, \rho_0]. \quad (7.7)$$

Comme $\rho_0 = \frac{1}{Z_0} e^{-\beta H_0}$, nous avons $[H_0, \rho_0] = 0$. On peut transformer (7.7) en

$$e^{-iH_0 t} \left[i \frac{\partial}{\partial t} (e^{iH_0 t} f(t) e^{-iH_0 t}) \right] e^{iH_0 t} = [H_{\text{pert}}(t), \rho_0] \quad (7.8)$$

Introduisons la représentation de Heisenberg des opérateurs :

$$\hat{A} = e^{iH_0 t} A e^{-iH_0 t}. \quad (7.9)$$

En utilisant cette représentation, l'Eq. (7.8) devient

$$i \frac{\partial}{\partial t} (e^{iH_0 t} f(t) e^{-iH_0 t}) = [\hat{H}_{\text{pert}}(t), \rho_0]. \quad (7.10)$$

Il faut bien garder en tête que comme H_{pert} dépend déjà du temps, la dépendance en temps de \hat{H} a deux origines. L'Eq.(7.10) s'intègre facilement en utilisant le fait que la perturbation est absente au temps $t = -\infty$ et donc que $f(-\infty) = 0$. Cela donne

$$f(t) = -i e^{-iH_0 t} \int_{-\infty}^t dt' [\hat{H}_{\text{pert}}(t'), \rho_0] e^{iH_0 t'}. \quad (7.11)$$

Noter qu'à cause de la dépendance explicite de H_{pert} ,

$$e^{-iH_0 t} \hat{H}_{\text{pert}}(t') e^{iH_0 t} \neq \hat{H}_{\text{pert}}(t' - t). \quad (7.12)$$

En utilisant (7.11), on peut maintenant calculer les valeurs moyennes

$$\langle A(t) \rangle = \text{Tr}[(\rho_0 + f(t))A]. \quad (7.13)$$

Choisissons pour simplifier un opérateur dont la valeur moyenne vaut zéro en l'absence de perturbation (sinon il suffit de soustraire à cet opérateur sa valeur moyenne). On a dans ce cas

$$\begin{aligned}\langle A(t) \rangle &= \text{Tr}[Af(t)] \\ &= -i\text{Tr}\left[\int_{-\infty}^t dt' e^{-iH_0 t'} [\hat{H}_{\text{pert}}(t'), \rho_0] e^{iH_0 t'} A\right].\end{aligned}\quad (7.14)$$

En utilisant l'invariance cyclique de la trace $\text{Tr}[ABC \cdots D] = \text{Tr}[BC \cdots DA]$, on obtient

$$\begin{aligned}\langle A(t) \rangle &= -i\text{Tr}\left[\int_{-\infty}^t dt' [\hat{H}_{\text{pert}}(t'), \rho_0] e^{iH_0 t'} A e^{-iH_0 t'}\right] \\ &\quad -i\text{Tr}\left[\int_{-\infty}^t dt' [\hat{H}_{\text{pert}}(t'), \rho_0] \hat{A}(t)\right].\end{aligned}\quad (7.15)$$

A l'aide de (7.1) on obtient

$$\langle A(t) \rangle = -i\text{Tr}\left[\int_{-\infty}^t dt' \int dx' [\hat{O}(t', x'), \rho_0] \hat{A}(t) h(x', t')\right].\quad (7.16)$$

Finalement, en utilisant la propriété

$$\text{Tr}[[A, B]C] = \text{Tr}[ABC - BAC] = \text{Tr}[B[C, A]],\quad (7.17)$$

on peut récrire (7.16) comme

$$\begin{aligned}\langle A(t) \rangle &= -i\text{Tr}[\rho_0 \int_{-\infty}^t dt' \int dx' [\hat{A}(t), \hat{O}(t', x')]] h(x', t') \\ &= -i \int_{-\infty}^t dt' \int dx' \langle [\hat{A}(t), \hat{O}(t', x')] \rangle_0 h(x', t'),\end{aligned}\quad (7.18)$$

où $\langle \rangle_0$ signifie la moyenne par rapport à l'hamiltonien non perturbé H_0 . Il est ainsi plus commode de définir une fonction de corrélation retardée

$$G_{A,O}^{\text{ret}}(x - x', t - t') = -i\theta(t - t') \langle [\hat{A}(t, x), \hat{O}(t', x')] \rangle_0\quad (7.19)$$

où nous avons supposé un opérateur A dépendant aussi de l'espace pour plus de généralités. Nous avons donc pour la susceptibilité (7.2)

$$\chi(x - x', t - t') = G_{A,O}^{\text{ret}}(x - x', t - t').\quad (7.20)$$

La fonction de Green retardée est ainsi celle qui est physiquement observable, *i.e* celle qui est correspond aux fonctions de corrélations mesurables. La fonction θ est due à la causalité et exprime le fait qu'une mesure au temps t peut seulement dépendre d'une perturbation à des temps antérieurs. Plutôt que de travailler avec les variables d'espace temps, il est préférable de passer en mode de Fourier. En effet, comme H ne dépend pas du temps, la transformée de Fourier de (7.2) sera diagonal :

$$\langle O(q, \omega) \rangle = \chi(q, \omega) h(q, \omega),\quad (7.21)$$

avec

$$\chi(q, \omega) = \int d^d r dt e^{-i(qr - \omega t)} \chi(r, t).\quad (7.22)$$

En utilisant (7.19), on obtient

$$\begin{aligned}\chi(q, \omega) &= \int d^d r \int dt G_{A,O}^{\text{ret}}(r, t) e^{i\omega t - iqr} \\ &= -i \int d^d r \int_0^{+\infty} dt e^{i\omega t - iqr} \langle [\hat{A}(t, r), \hat{O}(0, 0)] \rangle_0.\end{aligned}\quad (7.23)$$

7.2 Continuation analytique

Les fonctions de Green retardées sont donc celles qu'il nous faut calculer car elles décrivent la réponse physique du système à une perturbation extérieure. Malheureusement il n'y a pas *a priori* de méthodes systématiques pour les calculer directement. Comme nous l'avons vu dans le paragraphe 4.3, les fonctions de corrélation qui ont une expression simple dans le langage de l'intégrale fonctionnelle, (et donc qui peuvent être calculées au mois perturbativement) sont les fonctions de corrélations ordonnées en temps. Heureusement, ces deux types de fonctions de corrélations peuvent être reliées simplement. Pour s'en rendre compte, exprimons formellement les fonctions de corrélations en utilisant les états propres de H que nous noterons $|n\rangle$. Si on introduit les fonctions de corrélations ordonnées en temps (voir (4.45))

$$G(\tau) = -\langle T_\tau A(\tau) O(0) \rangle, \quad (7.24)$$

(notez que A et O peuvent dépendre de r quand bien même nous ne l'écrivons pas de manière explicite pour alléger les notations. Nous pouvons l'exprimer formellement (en prenant pas exemple $\tau > 0$)

$$\begin{aligned} G(r, \tau) &= -\frac{1}{Z} \sum_{n,m} \langle n | e^{-\beta H} A(\tau) | m \rangle \langle m | O(0) | n \rangle \\ &= -\frac{1}{Z} \sum_{n,m} \langle n | e^{-\beta H} e^{\tau H} A e^{-\tau H} | m \rangle \langle m | O | n \rangle \\ &= -\frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{\tau(E_n - E_m)} \langle n | A | m \rangle \langle m | O | n \rangle. \end{aligned} \quad (7.25)$$

La transformée de Fourier avec les fréquences de Matsubara donne

$$\begin{aligned} G(i\omega_p) &= \int_0^\beta d\tau G(\tau) \\ &= -\frac{1}{Z} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} \langle n | A | m \rangle \langle m | O | n \rangle \frac{e^{\beta(i\omega_p + E_n - E_m)} - 1}{i\omega_p + E_n - E_m} \\ &= \frac{1}{Z} \sum_{n,m} \langle n | A | m \rangle \langle m | O | n \rangle \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{i\omega_p + E_n - E_m}. \end{aligned} \quad (7.26)$$

Une représentation similaire peut être utilisée pour les fonctions de Green retardées

$$\begin{aligned} G^{\text{ret}}(t) &= -i\theta(t) \langle [\hat{A}(t), \hat{O}(0)] \rangle \\ &= -i\theta(t) \sum_n \langle n | e^{-\beta H} [\hat{A}(t), \hat{O}(0)] | n \rangle \\ &= -i\theta(t) \sum_{n,m} \langle n | e^{-\beta H} \hat{A}(t) | m \rangle \langle m | \hat{O}(0) | n \rangle - \langle n | e^{-\beta H} \hat{O}(0) | m \rangle \langle m | \hat{A}(t) | n \rangle \\ &= -i\theta(t) \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} e^{it(E_n - E_m)} \langle n | A | m \rangle \langle m | O | n \rangle - e^{-\beta E_n} e^{it(E_m - E_n)} \langle n | O | m \rangle \langle m | A | n \rangle \\ &= -i\theta(t) \sum_{n,m} \langle n | A | m \rangle \langle m | O | n \rangle e^{it(E_n - E_m)} [e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}]. \end{aligned} \quad (7.27)$$

La transformée de Fourier s'écrit

$$G^{\text{ret}}(\omega) = \int dt G^{\text{ret}}(t) e^{i\omega t} \quad (7.28)$$

A cause du facteur $\theta(t)$ dans $G^{\text{ret}}(t)$, les bornes de l'intégrale sont $t = 0$ et $t = \infty$. Au voisinage de $t \rightarrow \infty$, nous devons nous assurer que l'intégrale converge au grand temps. Pour ce faire, une manière consiste à ajouter à la transformée de Fourier un petit facteur de convergence

$$G^{\text{ret}}(\omega) = \int_0^{+\infty} dt G^{\text{ret}}(t) e^{i(\omega+i\delta)t}, \quad (7.29)$$

où $\delta = 0^+$. Remarquez que ce facteur de convergence a une signification physique. Comme nous l'avions vu lors du calcul de la dépendance temporelle de la matrice densité, nous avons à brancher adiabatiquement la perturbation à partir du temps $t = -\infty$. Ainsi $h(t)$ fut changé en $h(t)e^{-\delta|t|}$ pour s'assurer que la perturbation s'annule en $t = -\infty$. Ainsi la relation (7.2) devient

$$\begin{aligned} \langle O(x_0, t_0) \rangle &\simeq \int dx dt \chi(x_0 - x, t_0 - t) e^{\delta t} h(x, t) \\ &\simeq e^{\delta t_0} \int dx dt \chi(x_0 - x, t_0 - t) e^{-\delta(t_0-t)} h(x, t). \end{aligned} \quad (7.30)$$

On retrouve ainsi une réponse adiabatique dans laquelle la susceptibilité contient le facteur $e^{-\delta(t_0-t)}$ qui est exactement le facteur de convergence que nous avons utilisé. A partir de (7.29) et (7.27), nous obtenons

$$\begin{aligned} G^{\text{ret}}(\omega) &= -i \sum_{n,m} \langle n|A|m\rangle \langle m|O|n\rangle [e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}] \int_0^{+\infty} dt e^{i(\omega+i\delta)t} e^{it(E_m-E_n)} \\ &= \sum_{n,m} \langle n|A|m\rangle \langle m|O|n\rangle [e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}] \frac{1}{(\omega + i\delta + E_n - E_m)}. \end{aligned} \quad (7.31)$$

En comparant (7.31) et (7.26), on réalise facilement que les fonctions de Green de Matsubara et les fonctions Green retardées sont reliées par continuation analytique

$$\boxed{G^{\text{ret}}(\omega) = G^{\text{Matsubara}}(i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta)}. \quad (7.32)$$

C'est une formule remarquable car elle nous permet de calculer les observables physiques directement à partir de l'intégrale de chemin. Notez qu'il est assez naturel de passer du temps imaginaire $\tau = it$ au temps réel par une telle continuation analytique. Ce qui n'est a priori pas évident est qu'une fonction de corrélation ordonnée en temps imaginaire donne lieu à une fonction de corrélation avec un commutateur en temps réel. La forme $\omega + i\delta$ n'est pas arbitraire mais induite par la causalité de la fonction de Green retardée. En utilisant (7.31), il est facile de montrer, d'une part que les valeurs propres $E_{n,m}$ sont réelles, d'autre part que pour une variable complexe z , les fonctions de Green vérifient la relation

$$G(z) = \frac{-1}{\pi} \int d\omega \frac{1}{z - \omega} \text{Im} G^{\text{ret}}(\omega). \quad (7.33)$$

En particulier, si l'on prend $z = \omega + i\delta$, avec la relation

$$\frac{1}{x + i\delta} = \mathcal{P} \frac{1}{x} - i\pi\delta(x), \quad (7.34)$$

où \mathcal{P} est la partie principale, on obtient les relations de Kramers-Kroenig

$$\text{Re} G^{\text{ret}}(\omega) = \frac{-1}{\pi} \int d\omega' \mathcal{P} \frac{1}{\omega - \omega'} \text{Im} G^{\text{ret}}(\omega') \quad (7.35)$$

La causalité ainsi que les propriétés d'analyticité des fonctions de Green imposent donc de fortes contraintes sur la forme des fonctions de Green. La connaissance de la partie imaginaire ou de la partie réelle suffisent à déterminer complètement la fonction de Green. Ces relations s'avèrent très utiles car certaines expériences mesurent soit l'une soit l'autre mais rarement les deux.

On peut aussi remarquer à partir de (7.31) et (7.35) que lorsque $O = A^\dagger$ (ce qui est habituellement la fonction de corrélation qui nous intéresse), $\text{Im}G(\omega)$ est une fonction impaire de ω tandis que $\text{Re}G(\omega)$ est une fonction paire de ω .

7.3 Le théorème fluctuation dissipation

Afin de mieux comprendre la signification de la susceptibilité χ , examinons le changement en énergie du système. En l'absence de perturbation extérieure, l'énergie du système est conservée. Ce n'est plus le cas quand le système est sujet un potentiel extérieur dépendant du temps, auquel cas de l'énergie est injectée dans le système. L'énergie du système au temps t est donnée par

$$E(t) = \text{Tr}[\rho(t)H(t)] \quad (7.36)$$

et donc le changement en énergie s'écrit

$$\frac{dE(t)}{dt} = \text{Tr}[\rho(t)\frac{dH(t)}{dt}] + \text{Tr}[\frac{d\rho(t)}{dt}H(t)]. \quad (7.37)$$

En utilisant l'équation d'évolution (7.6) pour $\rho(t)$, on peut récrire le deuxième terme de (7.37) comme

$$-i\text{Tr}[[H(t), \rho(t)]H(t)] = -i\text{Tr}[\rho(t)[H(t), H(t)] = 0, \quad (7.38)$$

en utilisant l'invariance cyclique de la trace. Ainsi

$$\frac{dE(t)}{dt} = \text{Tr}[\rho(t)\frac{dH(t)}{dt}] = \langle \frac{dH(t)}{dt} \rangle. \quad (7.39)$$

Considérons par exemple une simple perturbation sinusoïdale de la forme

$$H_{\text{pert}} = Ohe^{i\omega t} + O^\dagger h^* e^{-i\omega t}. \quad (7.40)$$

Dans ce cas,

$$\frac{dE(t)}{dt} = i\omega[\langle O \rangle_t h e^{i\omega t} - \langle O^\dagger \rangle_t h^* e^{-i\omega t}]. \quad (7.41)$$

En utilisant la réponse linéaire, on a

$$\langle O(t) \rangle = \int dt' \chi_{OO}(t-t') h e^{i\omega t'} + \chi_{OO^\dagger}(t-t') h^* e^{-i\omega t'}. \quad (7.42)$$

Plutôt que de calculer la variation d'énergie du système à un temps donné, on peut s'intéresser à la moyenne sur une période dans la mesure où nous traitons une perturbation sinusoïdale (on suppose $\omega > 0$)

$$\overline{\frac{dE(t)}{dt}} = \frac{1}{T} \int_0^{T=2\pi/\omega} dt \frac{dE(t)}{dt}. \quad (7.43)$$

En utilisant (7.41) et (7.42), on obtient

$$\begin{aligned} \overline{\frac{dE(t)}{dt}} &= i\omega[\chi_{OO^\dagger}(\omega) - \chi_{O^\dagger O}(-\omega)]hh^* \\ &= \omega i[\chi_{OO^\dagger}(\omega) - \chi_{O^\dagger O}(-\omega)]hh^*. \end{aligned} \quad (7.44)$$

En utilisant la définition (7.23), on obtient

$$\begin{aligned}
\chi(\omega)^* &= +i \int_0^{+\infty} dt \langle [O(t), O^\dagger(0)] \rangle^* e^{-i\omega t} \\
&= -i \int_0^{+\infty} dt \langle [O^\dagger(t), O(0)] \rangle e^{-i\omega t} \\
&= \chi(-\omega),
\end{aligned} \tag{7.45}$$

comme il se doit pour un opérateur hermitien. Ainsi (7.44) devient

$$\begin{aligned}
\frac{d\overline{E(t)}}{dt} &= \omega i \hbar h^* [\chi_{OO^\dagger}(\omega) - \chi_{OO^\dagger}(\omega)^*] \\
&= -2\omega \hbar h^* \text{Im} \chi_{OO^\dagger}(\omega).
\end{aligned} \tag{7.46}$$

Ainsi la partie imaginaire de la susceptibilité contrôle la dissipation en énergie dans le système. A partir de (7.31), on peut récrire la partie imaginaire sous la forme

$$\begin{aligned}
\text{Im} \chi_{OO^\dagger}(\omega) &= -\pi \sum_{n,m} \langle n|O|m\rangle \langle m|O^\dagger|n\rangle [e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}] \delta(\omega + E_n - E_m) \\
&= -\pi \sum_{n,m} |\langle n|O|m\rangle|^2 e^{-\beta E_n} (1 - e^{-\beta \omega}) \delta(\omega + E_n - E_m).
\end{aligned} \tag{7.47}$$

Ainsi la partie imaginaire est toujours négative pour $\omega > 0$, ce qui signifie une dissipation d'énergie toujours positive comme il se doit. Ainsi (7.23) relie la fonction de réponse du système à une perturbation extérieure (et donc la dissipation en énergie induite par cette perturbation) à une fonction de corrélation à l'équilibre du système. Cette relation est connue comme le théorème fluctuation-dissipation. C'est l'analogie de la relation que nous avons vu au chap. 2 pour les systèmes classiques. Il s'agit d'une relation très puissante qui repose sur seulement sur deux hypothèses :

- (i) on se restreint à la réponse linéaire,
- (ii) on suppose que le système est à l'équilibre thermodynamique.

Comparé au cas des systèmes classiques, nous avons en plus les équations du mouvement (l'équation de Schroedinger) et pas seulement la condition d'équilibre thermodynamique, donc nous pouvons également traiter des perturbations dépendant du temps.

7.4 Formule de Kubo

Nous avons déjà vu l'exemple de la compressibilité, donnée par la fonction de corrélation densité-densité. Un autre exemple fameux est celui de la conductivité du système. Nous disposons de deux méthodes pour la calculer. La méthode la plus simple, loin d'être rigoureuse, consiste à ajouter à l'hamiltonien une perturbation similaire à celle que nous avons utilisée pour la compressibilité

$$H_{\text{pert}} = \int d^d r V(r, t) \delta \rho(r), \tag{7.48}$$

où $\delta \rho = \rho - \rho_0$ est la densité moins sa valeur moyenne en l'absence de perturbation V . En se restreignant à la réponse linéaire,

$$\langle \delta \rho(q, \omega) \rangle = \chi(q, \omega) V(q, \omega) \tag{7.49}$$

où $\chi(q, \omega)$ est la transformée de Fourier de la fonction de Green retardée

$$\langle \delta\rho(r, t); \delta\rho(0, 0) \rangle_{\text{ret}} = -i\theta(t) \langle [\delta\rho(r, t), \delta\rho(0, 0)] \rangle. \quad (7.50)$$

Nous calculons d'abord la fonction de corrélation en fréquence de Matsubara et ensuite effectuons la continuation analytique. Si l'hamiltonien est invariant par translation, il ne peut pas coupler des valeurs différentes de q et de ω . Dans ce cas il est facile d'en déduire que les seules composantes non nulles sont

$$\langle \delta\rho(q, i\omega_n) \delta\rho(-q, -i\omega_n) \rangle. \quad (7.51)$$

Nous effectuerons dans la partie 8.1 le calcul complet et direct de la compressibilité pour le cristal.

Dans un premier temps, analysons la conductivité. Elle relie le courant j et le champ électrique E à l'intérieur du système. Le champ électrique est simplement donné par $E = -\nabla V$. On peut obtenir le courant par l'équation de continuité

$$\frac{\partial \rho(r, t)}{\partial t} + \nabla_r \cdot j(r, t) = 0. \quad (7.52)$$

Cela implique en transformée de Fourier

$$i\omega\rho(q, \omega) = iq \cdot j(q, \omega) \quad (7.53)$$

Le problème avec cette dérivation est que j est un vecteur. Pour l'instant, supposons que j et q soient alignés. Dans ce cas on peut obtenir à partir de (7.49)

$$\begin{aligned} \langle j(q, \omega) \rangle &= \frac{\omega}{q} \chi(q, \omega) V(q, \omega) \\ &= \frac{\omega}{q} \chi(q, \omega) \frac{1}{-iq} E(q, \omega). \end{aligned} \quad (7.54)$$

Cela peut s'exprimer plus simplement à partir de la relation (7.53) comme

$$\langle j(q, \omega) \rangle = \frac{i}{\omega} \langle j(q, \omega); j(-q, -\omega) \rangle_{\text{ret}} E(q, \omega). \quad (7.55)$$

La conductivité est donc simplement donnée par la fonction de corrélation courant-courant.

La dérivation présentée ci-dessus est simple mais souffre de plusieurs imprécisions. Une dérivation plus rigoureuse (et plus complexe!) est donnée ci-dessous. Au lieu d'ajouter un potentiel V à l'hamiltonien, ajoutons un potentiel vecteur \mathcal{A} . Pour un potentiel vecteur dépendant du temps, on a

$$E(r, t) = -\frac{\partial \mathcal{A}(r, t)}{\partial t}. \quad (7.56)$$

Le potentiel vecteur est introduit dans l'hamiltonien par la substitution minimale $\Pi \rightarrow \Pi - qA$, où A est l'opérateur correspondant au potentiel vecteur. Le courant est alors donné par la dérivée fonctionnelle ($\alpha = x, y, z$)

$$j_\alpha(r, t) = -\frac{\partial H}{\partial \mathcal{A}_\alpha(r, t)}. \quad (7.57)$$

Par exemple, pour une seule particule d'énergie cinétique $\Pi^2/(2M)$, l'hamiltonien est présence du potentiel vecteur s'écrit

$$\frac{1}{2M} \sum_\alpha (\Pi_\alpha - q \int d^d r \mathcal{A}_\alpha(r, t) |r\rangle \langle r|)^2, \quad (7.58)$$

tandis que les composantes α ($\alpha = x, y, z$) du courant sont données par

$$j_\alpha(r, t) = \frac{q}{2M} [\Pi|r\rangle\langle r| + |r\rangle\langle r|\Pi] - \frac{q^2}{M} \mathcal{A}_\alpha(r, t) |r\rangle\langle r|, \quad (7.59)$$

ce qui correspond à l'extension en mécanique quantique de la relation $j = q\rho v$ avec $v = (P - qA)/m$. Ainsi le courant contient également le potentiel vecteur \mathcal{A} . Si on veut calculer la réponse linéaire en \mathcal{A} , on doit donc développer le courant et l'hamiltonien en \mathcal{A} . Définissons $j^0 = j(A = 0)$, c.a.d. le courant en l'absence du potentiel vecteur. Pour l'énergie cinétique donnée par (7.58), j^0 s'écrit

$$j_\alpha^0(r, t) = \frac{q}{2M} [\Pi|r\rangle\langle r| + |r\rangle\langle r|\Pi]. \quad (7.60)$$

Au premier ordre dans le potentiel vecteur, la valeur moyenne du courant est donnée par

$$\langle j_\alpha(r, t) \rangle = \sum_\beta \int dr' dt' \frac{\partial \langle j_\alpha(r, t) \rangle}{\partial \mathcal{A}_\beta(r', t')} \mathcal{A}_\beta(r', t'). \quad (7.61)$$

La dérivée contient deux termes, le premier lié à la dépendance explicite du courant avec le potentiel vecteur, l'autre lié au fait que dans la valeur moyenne l'hamiltonien contient le potentiel vecteur. Cette deuxième contribution peut se calculer par la réponse linéaire en écrivant

$$H = H[A = 0] - \int dr \sum_\alpha j_\alpha^0(r) \mathcal{A}_\alpha(r, t), \quad (7.62)$$

à l'ordre le plus bas en \mathcal{A} . Ainsi

$$\langle j_\alpha(r, t) \rangle = \sum_\beta \int dr' dt' \left[\left\langle \frac{\partial j_\alpha(r, t)}{\partial \mathcal{A}_\beta(r', t')} \right\rangle_{H[A=0]} - \langle j_\alpha^0(r, t); j_\beta^0(r', t') \rangle_{\text{ret}} \right] \mathcal{A}_\beta(r', t'), \quad (7.63)$$

ce qui peut être réécrit en

$$\langle j_\alpha(r, t) \rangle = \sum_\beta \int dr' dt' \left[- \left\langle \frac{\partial^2 H}{\partial \mathcal{A}_\alpha(r, t) \partial \mathcal{A}_\beta(r', t')} \right\rangle_{A=0} - \langle j_\alpha^0(r, t); j_\beta^0(r', t') \rangle_{\text{ret}} \right] \mathcal{A}_\beta(r', t'). \quad (7.64)$$

Comme H est une fonction de $\Pi - qA$, différencier seulement par rapport à A est équivalent à différencier par rapport à Π . On a donc

$$\left. \frac{\partial^2 H}{\partial \mathcal{A}_\alpha(r, t) \partial \mathcal{A}_\beta(r', t')} \right|_{A=0} = q^2 \frac{\partial^2 H}{\partial \Pi^2} \delta(r - r') \delta(t - t') \delta_{\alpha\beta}. \quad (7.65)$$

Dans l'espace de Fourier, cette relation s'écrit plus simplement

$$\mathcal{A}_\alpha(q, \omega) = \frac{1}{i\omega} E_\alpha(q, \omega). \quad (7.66)$$

En fait, comme la perturbation est appliquée adiabatique, toutes les fréquences ω doivent être remplacées par $\omega + i\delta$. Néanmoins, pour alléger les notations, nous allons conserver la notation ω . Ainsi la matrice de conductivité $\sigma_{\alpha\beta}(q, \omega)$ qui relie le courant au champ électrique,

$$j_\alpha(q, \omega) = \sum_\beta \sigma_{\alpha\beta}(q, \omega) E_\beta(q, \omega), \quad (7.67)$$

s'écrit

$$\sigma_{\alpha\beta}(q, \omega) = \frac{1}{i\omega} [-\chi_{j_\alpha, j_\beta}(q, \omega) - e^2 \delta_{\alpha\beta} \langle \frac{\partial^2 H}{\partial \Pi^2} \rangle], \quad (7.68)$$

où le premier terme est la transformée de Fourier de la fonction de corrélation retardée courant-courant

$$\chi_{j_\alpha, j_\beta}(r, t) = -i\theta(t) \langle [j_\alpha(r, t), j_\beta(0, 0)] \rangle. \quad (7.69)$$

Le second terme est purement imaginaire. Il s'appelle le terme diamagnétique. Pour un Hamiltonien quadratique simple, le terme diamagnétique s'écrit

$$-\frac{ne^2}{i\omega M}. \quad (7.70)$$

Si l'énergie cinétique vient d'un Hamiltonien de liaisons fortes, elle s'écrit $\epsilon(k) = -t \cos(k)$, on aurait alors

$$\frac{1}{i\omega} \langle T \rangle \quad (7.71)$$

c.a.d. la valeur moyenne de l'énergie cinétique.

L'équation (7.68) est connue comme la formule de Kubo. C'est un cas spécial très important d'application de la réponse linéaire dans la mesure où elle permet de calculer les propriétés de transport d'un système. A cause du facteur $i\omega$ au dénominateur, la dissipation est maintenant donnée par la partie réelle de σ . La partie réelle de la conductivité est donc totalement déterminée par la fonction de corrélation courant-courant. Pour obtenir la partie uniforme de la conductivité, on doit déjà prendre la limite $q \rightarrow 0$ en gardant ω finie, puis dans un second temps, prendre la limite $\omega \rightarrow 0$ pour obtenir la partie statique de la conductivité. L'ordre des limites a son importance. Noter qu'il s'agit d'une procédure différente que celle utilisée pour obtenir la réponse thermodynamique du système. Dans ce cas, on prend d'abord la limite $\omega \rightarrow 0$ pour avoir un perturbation statique. Cette perturbation peut avoir n'importe qu'elle dépendance en q . Cette différence dans l'ordre des limites est cruciale, dans la mesure où, et la conductivité et la compressibilité sont données par la même fonction de corrélation à des facteurs q et ω près.

Lorsque l'opérateur courant commute avec l'hamiltonien, la conductivité est facile à calculer. Physiquement, cela signifie que le courant est conservée et donc on peut naïvement que la conductivité soit infinie.. Comme le courant commute avec H , on a $J(r, t) = J(r, 0)$. Donc le commutateur

$$\int dr [j_\alpha(r, t), j_\beta(0, 0)] = \int dr [j_\alpha(r, 0), j_\beta(0, 0)] = 0, \quad (7.72)$$

et ainsi la conductivité est totalement donnée par le terme diamagnétique. Il est de la forme

$$\sigma_{\alpha\beta}(q, \omega) = -\delta_{\alpha\beta} \frac{\mathcal{D}}{i(\omega + i\delta)}, \quad (7.73)$$

où nous avons restauré le facteur de convergence $i\delta$. La conductivité est ainsi donnée par

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \delta_{\alpha\beta} \mathcal{D} [\pi\delta(\omega) - i\mathcal{P}(\frac{1}{\omega})] \quad (7.74)$$

σ est donc imaginaire pure pour toute fréquence et la conductivité statique est infinie. Noter que dans ce cas, on a évidemment

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \text{Re}\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \pi e^2 \langle \frac{\partial^2 H}{\partial \Pi^2} \rangle \quad (7.75)$$

Cette identité connue comme une règle de somme est en fait vraie de manière générale, même si le courant ne commute avec l'hamiltonien. Cela repose seulement sur le fait que l'hamiltonien est une fonction de seulement la densité (exceptée l'énergie cinétique). On peut le prouver en analysant la représentation spectrale de la conductivité.

Chapitre 8

Exemples d'application de la réponse linéaire dynamique

Appliquons le formalisme développé dans le chapitre précédent à des situations concrètes.

8.1 Compressibilité

Revenons à la compressibilité du cristal, que nous avons déjà calculé dans la partie 5. Nous commençons par l'hamiltonien donné par l'Eq. (5.3). La première étape consiste à écrire l'action en temps imaginaire. Nous l'avons déjà fait en (5.4) et (5.5).

Nous cherchons à calculer la compressibilité, qui est la réponse à l'addition d'une perturbation du type

$$\delta H = - \int d^d r \mu(r) \delta \rho(r). \quad (8.1)$$

A partir des conventions que nous avons adoptées pour la perturbation dans le cadre de la réponse linéaire (comparez (8.1) avec (7.1)), la compressibilité est donnée par la fonction de Green retardée densité-densité (au signe près).

Pour obtenir la fonction de Green retardée, nous devons déjà calculer la fonction de corrélation densité-densité en temps imaginaire. (notez que le signe moins est nécessaire pour obtenir la bonne continuation analytique comme expliqué dans la partie 7.2).

$$\begin{aligned} \chi_{\rho\rho}(r, \tau) &= -\langle T_\tau \delta \rho(r, \tau) \delta \rho(0, 0) \rangle \\ &= -\frac{1}{(\Omega\beta)^2} \sum_{q_1, \omega_{n_1}, q_2, \omega_{n_2}} e^{i(q_1 r - \omega_{n_1} \tau)} \langle \delta \rho(q_1, \omega_{n_1}) \delta \rho(q_2, \omega_{n_2}) \rangle. \end{aligned} \quad (8.2)$$

Ainsi la transformée de Fourier s'écrit simplement

$$\chi_{\rho\rho}(q, \omega_n) = -\frac{1}{(\Omega\beta)} \sum_{q_2, \omega_{n_2}} \langle \delta \rho(q, \omega_n) \delta \rho(q_2, \omega_{n_2}) \rangle. \quad (8.3)$$

Nous cherchons à calculer la composante uniforme (c.a.d. $q \rightarrow 0$) de la compressibilité. Dans ce cas, on peut l'approximation de longue portée de la densité

$$\delta \rho(r, t) = \rho(r, t) - \rho_0 = -\rho_0 \nabla u(r, t), \quad (8.4)$$

et ainsi

$$\delta \rho(q, \omega) = -\rho_0 (iq) u(q, \omega). \quad (8.5)$$

En utilisant (2.73) et (5.5), on obtient

$$\langle u(q, \omega_n) u^*(q_2, \omega_{n2}) \rangle = \frac{\beta \Omega}{\rho_0 (M \omega_n^2 + c q^2)} \delta_{q, q_2} \delta_{\omega_{n2}, \omega_n}. \quad (8.6)$$

Et ainsi

$$\chi_{\rho\rho}(q, \omega_n) = -\frac{\rho_0 q^2}{M \omega_n^2 + c q^2}. \quad (8.7)$$

Pour obtenir la fonction de Green retardée, on effectue la continuation analytique. La susceptibilité s'écrit donc

$$\chi(q, \omega) = -\chi_{\rho\rho}^{\text{ret}}(q, \omega) = -\chi_{\rho\rho}(q, i\omega_n)|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta}. \quad (8.8)$$

Cela donne

$$\chi(q, \omega) = \frac{\rho_0 q^2}{-M(\omega + i\delta)^2 + c q^2}. \quad (8.9)$$

Pour obtenir la compressibilité, nous devons prendre d'abord la limite $\omega \rightarrow 0$ et nous retrouvons ainsi

$$\kappa = \frac{\rho_0}{c}, \quad (8.10)$$

qui correspond à la compressibilité statique et qui est identique à la valeur (5.7) que nous avons obtenu directement en passant par les fréquences de Matsubara.

Néanmoins la formule (8.9) contient beaucoup plus d'information. En particulier, elle contient la réponse du système à un potentiel dépendant de l'espace et du temps. Supposons que nous excitons le système avec un potentiel sinusoïdal. Nous voyons immédiatement que la réponse du système diverge si

$$\omega^2 = \frac{c}{M} q^2. \quad (8.11)$$

Cela signifie que ce mode existe même si le potentiel externe est infiniment petit. Il s'agit des modes collectifs du système. Dans ce cas précis, on reconnaît les phonons acoustiques. Comme la partie imaginaire est infinitésimale, ces modes peuvent se propager sans atténuation.

Analysons ce qu'il se passerait si l'on ajoutait des interactions longue portée dans le système. L'hamiltonien acquiert une partie additionnelle

$$\begin{aligned} H_L &= \frac{1}{2} \int dr dr' V(r - r') \delta\rho(r) \delta\rho(r') \\ &= \frac{1}{2\Omega} \sum_q \rho_0^2 V(q) q^2 u(q) u^*(q). \end{aligned} \quad (8.12)$$

En fait la partie élastique de courte portée correspond à $V(r) = \delta(r)$, c.a.d à un $V(q)$ constant. Si l'on a un potentiel Coulombien $V(r) \sim 1/r$, la transformée de Fourier se comporte comme

$$\begin{aligned} V(q) &\sim \frac{1}{q^2} & d = 3 \\ V(q) &\sim \frac{1}{|q|} & d = 2 \\ V(q) &\sim \log(1/|q|) & d = 1. \end{aligned} \quad (8.13)$$

Les états propres deviennent dans ce cas

$$M\omega^2 = q^2 [c + \rho_0 V(q)]. \quad (8.14)$$

Dans la limite q et ω petit, ces modes ont le comportement suivant :

$$\begin{aligned}\omega(q)^2 &\sim C + q^2 & d = 3 \\ \omega(q)^2 &\sim |q| & d = 2 \\ \omega(q)^2 &\sim q^2 \log(1/|q|) & d = 1.\end{aligned}\tag{8.15}$$

On reconnaît ici les modes plasmoniques.

8.2 Conductivité des cristaux quantiques ; effet Hall

Analysons maintenant les propriétés de transport. Comme nous l'avons vu, la conductivité est donnée par la fonction de corrélation courant-courant. Afin de déterminer le courant dans le cristal, nous pouvons encore utiliser l'équation de continuité (7.52). Comme nous sommes intéressés par le courant pour des valeurs petites de q , on peut utiliser (8.4) pour obtenir

$$-\rho_0 \frac{\partial \sum_{\beta} \nabla_{\beta} u_{\beta}(r, t)}{\partial t} + \sum_{\beta} \nabla_{\beta} j_{\beta}(r, t) = 0.\tag{8.16}$$

Une solution évidente de cette équation est simplement

$$j_{\beta}(r, t) = \rho_0 \partial_t u_{\beta}(r, t),\tag{8.17}$$

et donc le courant de charge s'écrit

$$j_{\beta}(r, t) = e \rho_0 \partial_t u_{\beta}(r, t),\tag{8.18}$$

où e est la charge des porteurs. Une manière physique de comprendre cette relation est d'analyser les harmoniques haute fréquence de la densité. La densité peut être vue comme une onde

$$\rho(x, t) = \rho_0 \cos(K(x - u(x, t))),\tag{8.19}$$

ainsi les maxima de l'onde sont à $x = u(x, t)$ et ainsi l'onde se déplace avec une vitesse $\partial_t u(r, t)$. Il s'agit évidemment d'une dérivation très qualitative mais l'équation de continuité prouve que la réponse est correcte.

Pour calculer la conductivité, nous devons analyser la partie imaginaire de la fonction de corrélation

$$\chi_{\alpha\beta}(r, t) = -\langle T_{\tau} \partial_{\tau} u_{\alpha}(r, \tau) \partial_{\tau} u_{\beta}(0, 0) \rangle.\tag{8.20}$$

Normalement, nous devons faire le calcul directement. Néanmoins, dans le cas du cristal, il y a une petite simplification qu'il vaut la peine de mentionner. Si on regarde la transformée de

Fourier et intègre par partie

$$\begin{aligned}
 \chi(q, i\omega_n) &= - \int_0^\beta d\tau e^{+i\omega_n(\tau-\tau')} \langle T_\tau \partial_\tau u_\alpha(q, \tau) \partial_{\tau'} u_\beta(-q, \tau') \rangle \\
 &= - \int_0^\beta d\tau e^{+i\omega_n(\tau-\tau')} \theta(\tau - \tau') \langle \partial_\tau u_\alpha(q, \tau) \partial_{\tau'} u_\beta(-q, \tau') \rangle + \theta(\tau' - \tau) \langle \partial_{\tau'} u_\beta(-q, \tau') \partial_\tau u_\alpha(q, \tau) \rangle \\
 &= - \int_0^\beta d\tau e^{+i\omega_n(\tau-\tau')} i\omega_n [\theta(\tau - \tau') \langle u_\alpha(q, \tau) \partial_{\tau'} u_\beta(-q, \tau') \rangle + \theta(\tau' - \tau) \langle \partial_{\tau'} u_\beta(-q, \tau') u_\alpha(q, \tau) \rangle] \\
 &\quad + \langle [u_\alpha(q, \tau), \partial_\tau u_\beta(-q, \tau)] \rangle \\
 &= - \int_0^\beta d\tau e^{+i\omega_n(\tau-\tau')} \omega_n^2 [\theta(\tau - \tau') \langle u_\alpha(q, \tau) \partial_{\tau'} u_\beta(-q, \tau') \rangle + \theta(\tau' - \tau) \langle \partial_{\tau'} u_\beta(-q, \tau') u_\alpha(q, \tau) \rangle] \\
 &\quad + \langle [u_\alpha(q, \tau), \partial_\tau u_\beta(-q, \tau)] \rangle + \langle [u_\alpha(q, \tau), u_\beta(-q, \tau)] \rangle \\
 &= - \int_0^\beta d\tau e^{+i\omega_n(\tau-\tau')} \omega_n^2 \langle T_\tau u_\alpha(q, \tau) u_\beta(-q, \tau') \rangle + \langle [u_\alpha(q, \tau), \partial_\tau u_\beta(-q, \tau)] \rangle. \tag{8.21}
 \end{aligned}$$

Dans l'Eq.(8.21), le premier terme est simplement la fonction de corrélation des variables u . Les termes en ω_n^2 devant l'expression vient de la dérivée temporelle dans l'expression du courant. En utilisant le fait que

$$\frac{\partial_\tau u(\tau)}{\partial_\tau} = [H, u(\tau)], \tag{8.22}$$

le second terme peut se récrire comme

$$\langle [u_\alpha(q, \tau), [H, u_\beta(-q, \tau)]] \rangle \tag{8.23}$$

En utilisant l'hamiltonien cristallin (5.5), on voit que (8.23) est exactement identique au terme diamagnétique. Le fait que la dérivée temporelle agisse sur sur le produit T_τ compense exactement le terme diamagnétique. Il reste pour la conductivité totale

$$\sigma_{\alpha\beta}(q, \omega) = e^2 \rho_0^2 \frac{1}{\Omega\beta} \frac{i}{\omega} [\omega_n^2 \langle u_\alpha(q, i\omega_n) u_\beta^*(q, i\omega_n) \rangle]_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta}, \tag{8.24}$$

où nous avons réintroduit le petit facteur de convergence dans la fréquence. Noter que cette forme est identique à (7.54) que l'on obtiendrait avec l'équation de continuité. En utilisant l'expression de la fonction de corrélation en u ,

$$\langle u_\alpha(q, i\omega_n) u_\beta^*(i\omega_n) \rangle = \frac{\delta_{\alpha\beta} \Omega \beta}{\rho_0 (M\omega_n^2 + cq^2)} \tag{8.25}$$

on obtient pour la conductivité $\sigma(\omega) = \sigma(q = 0, \omega)$,

$$\sigma_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{\delta_{\alpha\beta} e^2 \rho_0 i}{(\omega + i\delta)} = \delta_{\alpha\beta} \mathcal{D}[\pi\delta(\omega) + i\mathcal{P}(\frac{1}{\omega})]. \tag{8.26}$$

Par conséquent, on retrouve une conductivité parfaite. Physiquement, cela signifie que le cristal peut glisser lorsqu'il est soumis à un potentiel externe.

La dérivation précédente utilisait la forme opératorielle du courant. Montrons que l'on peut retrouver les mêmes résultats à partir de l'intégrale fonctionnelle. Nous allons le montrer à une dimension pour éviter d'écrire l'index d'axe α . Bien sûr, la méthode et les résultats sont généraux. Nous allons utiliser une reparamétrisation de l'hamiltonien élastique en terme de la

“phase” $\phi(x) = \pi u(x)/a$ et de sa variable conjuguée $\Pi(x)$ qui vérifie $[\phi(x), \Pi(x')] = i\hbar\delta(x - x')$. Nous récrivons l’hamiltonien

$$H = \frac{\hbar}{2\pi} \int dx \left[\frac{1}{\hbar^2} v K (\pi \Pi(x))^2 + \frac{v}{K} (\partial_x \phi(x))^2 \right]. \quad (8.27)$$

où v a la dimension d’une vitesse et K est sans dimension. Cette paramétrisation est assez utilisée en terme de problème fermionique. La densité du système s’écrit donc

$$\rho(x) = \rho_0 - \frac{1}{\pi} \partial_x \phi(x) + \rho_0 \sum_p e^{ip[\frac{2\pi}{a}x - 2\phi(x)]} \quad (8.28)$$

où p est un entier relatif. En utilisant l’expression du courant $j(r, t) = \frac{e}{\pi} \partial_t \phi(r, t)$, et l’équation de Heisenberg pour un opérateur O

$$\partial_t O(t) = \frac{i}{\hbar} [H, O(t)], \quad (8.29)$$

il est facile de voir que l’opérateur courant s’écrit

$$j(r, t) = \frac{e}{\hbar} (vK) \Pi(r, t). \quad (8.30)$$

Ainsi, la fonction de corrélation courant-courant en temps imaginaire s’exprime de la manière suivante :

$$\chi(\tau - \tau') = -\left(\frac{evK}{\hbar}\right)^2 \langle \Pi(x, \tau) \Pi(x', \tau') \rangle_S. \quad (8.31)$$

Cette fonction de corrélation peut être calculée à l’aide de l’intégrale fonctionnelle

$$\langle \Pi(x, \tau) \Pi(x', \tau') \rangle_S = \frac{\int \mathcal{D}\Pi \int \mathcal{D}\phi e^{-S/\hbar} \Pi(x, \tau) \Pi(x', \tau')}{\int \mathcal{D}\Pi \int \mathcal{D}\phi e^{-S/\hbar}}. \quad (8.32)$$

Comme l’hamiltonien est quadratique en Π , il est facile d’effectuer l’intégration sur Pi :

$$\langle \Pi(x, \tau) \Pi(x', \tau') \rangle_S = -\frac{\hbar^2}{(\pi v K)^2} \langle \partial_\tau \phi(x, \tau) \partial_{\tau'} \phi(x', \tau') \rangle_S + \mathcal{D} \quad (8.33)$$

Le second terme annule exactement le terme diamagnétique, tandis que le premier terme correspond est exactement celui que nous avons déjà calculé dans l’Eq. (8.24). Comme nous l’avons déjà souligné plusieurs fois, l’intégrale de chemin permet d’éviter de manipuler des opérateurs d’ordonnancement temporel et autres complications liées à la manipulation d’opérateurs.

Maintenant que nous avons calculé le tenseur complet de la conductivité, on peut étudier l’effet d’autres perturbations externes. Avant de regarder l’effet d’impuretés, analysons l’effet d’un champ magnétique externe. Supposons que nous avons un cristal bidimensionnel dans le plan $(x - y)$ et que l’on ajoute un champ magnétique dans la direction z . Dans ce cas, si l’on prend par exemple $A = (-By/2, Bx/2, 0)$, on peut écrire $B = \nabla \wedge A$. L’hamiltonien élastique en présence d’un champ extérieur s’écrit (en tenant compte que le champ de déplacement possède deux composantes)

$$\frac{1}{2} \left[\int d^2r \sum_\alpha \frac{1}{\rho_0 M} (\Pi_\alpha - a A_\alpha)^2 + \rho_0 \sum_{\alpha\beta} c (\nabla_\alpha u_\beta(r))^2 \right] \quad (8.34)$$

où nous avons supposé une élasticité isotrope. Donnons des précisions sur l'opérateur A . Pour ce faire, revenons à l'expression du courant à une particule. Dans ce cas,

$$H_{\text{kin}} = \frac{1}{2M} (\Pi - \int dr \mathcal{A}(r) |r\rangle\langle r|)^2, \quad (8.35)$$

ce qui donne le courant (7.59). Pour plusieurs particules, on a

$$H_{\text{kin}} = \sum_i \frac{1}{2M} (\Pi_i - \int dr \dot{A}(r) |r\rangle\langle r|)^2, \quad (8.36)$$

et le courant devient

$$j_\alpha(r, t) = \frac{q}{2M} \sum_i [\Pi_i |r\rangle\langle r| + |r\rangle\langle r| \Pi_i] - \sum_i \frac{q^2}{M} \mathcal{A}_\alpha(r, t) |r\rangle\langle r|. \quad (8.37)$$

Comme nous sommes intéressés à la partie de grande longueur d'onde du courant, il faut comprendre le courant au point r comme une moyenne sur un volume grand par rapport à a^2 centrée autour du point r . Nous avons la propriété

$$\int_{r_0} dr |r\rangle\langle r| \sim 1, \quad (8.38)$$

pour les particules autour du site r_0 . Ainsi (8.37) devient

$$\begin{aligned} j_\alpha(r, t) &= \frac{q}{M} [\Pi_{r_i=r} \rho_0] - \frac{q^2}{M} \mathcal{A}_\alpha(r, t) \rho_0 \\ &= \frac{q}{M} [\Pi(r)] - \frac{q^2}{M} \mathcal{A}_\alpha(r, t) \rho_0, \end{aligned} \quad (8.39)$$

ce qui est le résultat que nous avons dérivé à partir de l'équation de continuité et de l'expression de l'opérateur densité dans la limite continue. En présence d'un champ magnétique, nous pouvons procéder de manière similaire. L'opérateur projetant la particule i au point r est (il est facile de vérifier qu'ils ont les mêmes éléments de matrice

$$|r\rangle\langle r| = \delta(r - R_i^0 - u_i) \quad (8.40)$$

et donc pour toutes les particules

$$|r\rangle\langle r| = \sum_i \delta(r - R_i^0 - u_i). \quad (8.41)$$

L'hamiltonien devient

$$\begin{aligned} H_{\text{kin}} &= \sum_i \frac{1}{2M} (\Pi_i - \int dr \dot{A}(r) \sum_i \delta(r - R_i^0 - u_i))^2 \\ &= \sum_i \frac{1}{2M} (\Pi_i - \dot{A}(R_i^0 + u_i))^2 \\ &= \int d^d r \frac{1}{2M \rho_0} (\Pi(r) - \rho_0 \dot{A}(r + u_i))^2. \end{aligned} \quad (8.42)$$

On peut l'écrire dans une forme plus pratique en notant que $\mathcal{A}_\alpha = -\epsilon_{\alpha\beta} r_\beta B/2$ où $\epsilon_{\alpha\beta}$ est le tenseur complètement antisymétrique $\epsilon_{xy} = -\epsilon_{yx} = 1$ et $\epsilon_{xx} = \epsilon_{yy} = 0$. Donc le potentiel vecteur dans (8.42) s'écrit

$$A_\alpha = -\frac{B}{2} \epsilon_{\alpha\beta} (r_\beta + u_\beta(r, t)). \quad (8.43)$$

On peut passer de l'hamiltonien à l'action en intégrant sur Π en utilisant (4.35). L'action sera donnée par

$$\sum_{\alpha} \int d^2r \int_0^{\beta} d\tau i\Pi \partial_{\tau} u_{\alpha}(r, \tau) - H(\Pi, u). \quad (8.44)$$

L'intégration sur Π peut se faire facilement en effectuant le déplacement $\Pi \rightarrow \Pi - qA$, ce qui mène à l'action

$$\sum_{\alpha\beta} \int d^2r \int_0^{\beta} d\tau [i \frac{-eB}{2} \epsilon_{\alpha\beta} \rho_0(r_{\beta} + u_{\beta}(r, t))] (\partial_{\tau} u_{\alpha}(r, \tau)) + \sum_{\alpha} \rho_0 \frac{1}{2} [M(\partial_{\tau} u_{\alpha}(r, \tau))^2 + c(\nabla_{\beta} u_{\alpha}(r, \tau))^2]. \quad (8.45)$$

On peut facilement voir que le terme contenant $\int_0^{\beta} d\tau r \partial_{\tau}$ est une dérivée totale par rapport au temps et donc s'annule à cause de la périodicité. L'action est donc donnée par

$$\sum_{\alpha\beta} \int d^2r \int_0^{\beta} d\tau [i \frac{-eB\rho_0}{2} \epsilon_{\alpha\beta} u_{\beta}(r, t)] (\partial_{\tau} u_{\alpha}(r, \tau)) + \sum_{\alpha} \rho_0 \frac{1}{2} [M(\partial_{\tau} u_{\alpha}(r, \tau))^2 + c(\nabla_{\beta} u_{\alpha}(r, \tau))^2]. \quad (8.46)$$

La seconde partie dans (8.46) est l'action élastique standard. Le premier terme est facile à identifier également. Si nous considérons la force de Lorentz donnée par $qv \wedge B$ où v est la vitesse. Ici, $v = \partial_{\tau} u$. L'énergie associée au travail de la force de Lorentz est simplement fu et on retrouve l'expression (8.46). On peut facilement récrire l'action dans l'espace de Fourier. Il est plus pratique d'utiliser une représentation matricielle

$$\frac{1}{2\beta\Omega} \sum_{q, \omega_n} (u_x^*(q, i\omega_n), u_y^*(q, i\omega_n)) \begin{pmatrix} \rho_0 [M\omega_n^2 + cq^2] & +\omega_n Be\rho_0 \\ -\omega_n Be\rho_0 & \rho_0 [M\omega_n^2 + cq^2] \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_x(q, i\omega_n) \\ u_y(q, i\omega_n) \end{pmatrix}. \quad (8.47)$$

Il est important de remarquer que même si l'on a utilisé une notation matricielle pour exhiber les coordonnées x, y , ce ne sont rien de plus que des indices de plus et x, y ne jouent aucun rôle spécial comparé à r ou τ .

Nous devons diagonaliser les actions. Nous savons le faire pour r et τ en utilisant la transformée de Fourier. Dans la mesure où les corrélations en q, ω_n sont diagonales, nous avons seulement à inverser la matrice 2×2 restante pour obtenir les fonctions de corrélation $\langle u_{\alpha}(q, \omega) u_{\beta}^*(q, \omega) \rangle$. Si l'on note

$$G^{-1}(q, \omega_n) = \rho_0 \begin{pmatrix} M\omega_n^2 + cq^2 & +\omega_n Be \\ -\omega_n Be & M\omega_n^2 + cq^2 \end{pmatrix}, \quad (8.48)$$

alors la conductivité est simplement donnée par

$$\sigma_{\alpha\beta} = -e^2 \rho_0^2 i(\omega + i\delta) G_{\alpha\beta}(q, i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta). \quad (8.49)$$

Essayons d'analyser les effets sur la conductivité. La composante longitudinale de la conductivité est donnée par

$$\begin{aligned} \sigma_{xx}(\omega, q=0) &= \sigma_{yy}(\omega, q=0) = \frac{-ie^2 \rho_0 (\omega + i\delta) M \omega_n^2}{M^2 \omega_n^4 + B^2 e^2 \omega_n^2} \Big|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta} \\ &= \frac{-ie^2 \rho_0 (\omega + i\delta) M}{M^2 \omega_n^2 + B^2 e^2} \Big|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta} \\ &= \frac{-ie^2 \rho_0 \omega M}{-M^2 (\omega + i\delta)^2 + B^2 e^2}. \end{aligned} \quad (8.50)$$

Ainsi la conductivité statique est non nulle à fréquence nulle. La conductivité est par contre infinie à la fréquence

$$\omega_c = eB/M, \quad (8.51)$$

qui correspond à la fréquence cyclotron. Physiquement, cela traduit le fait que les électrons en présence d'un champ magnétique décrivent des orbites circulaires.

On peut également regarder la résistance de hall. Elle est définie dans une géométrie où aucun courant ne peut circuler dans la direction y . On a un courant circulant dans la direction x . La résistance de Hall est définie par $R_H = V_y/I_x$. En utilisant la relation entre le courant et le champ

$$\begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \rho_{xx} & \rho_{xy} \\ \rho_{yx} & \rho_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix}, \quad (8.52)$$

et entre le champ et le courant

$$\begin{pmatrix} J_x \\ J_y \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \sigma_{xx} & \sigma_{xy} \\ \sigma_{yx} & \sigma_{yy} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_x \\ E_y \end{pmatrix}, \quad (8.53)$$

on montre que le tenseur de résistivité et conductivité sont inverses l'un de l'autre. La résistance de Hall peut être déduite de l'Eq. (8.52) en imposant que $J_y = 0$, et en utilisant $E_y = -V_y/L_y$. Dans ce cas, on a $E_y/J_x = \rho_{yx}$. On peut calculer σ et en déduire ρ mais on peut aller plus vite. Comme le tenseur de conductivité est donné par la matrice G (à un facteur ω près) le tenseur de résistivité est simplement

$$\rho_{\alpha\beta} = \frac{i}{e^2 \rho_0^2 (\omega + i\delta)} [G^{-1}]_{\alpha\beta}. \quad (8.54)$$

On peut ainsi directement lire la résistance de Hall de l'action

$$\rho_{yx} = \frac{-i\omega_n eB}{(\omega + i\delta)e^2 \rho_0} \Big|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta} = \frac{-B}{e\rho_0}. \quad (8.55)$$

La résistance de hall est ainsi égale à sa valeur classique, sans être affectée par les interactions entre les particules dans le cristal et les fluctuations quantiques. Noter que ce résultat, de manière remarquable, restera valide pour le cristal même si on ajoute un potentiel de diffusion pourvu que le cristal reste isotrope, c.a.d. qu'il agisse uniquement sur les éléments diagonaux de l'action.

8.3 Les systèmes commensurés

Analysons pour finir des systèmes plus compliqués. Un cas intéressant survient lorsque le cristal est placé dans un potentiel extérieur. On doit alors rajouter à l'hamiltonien élastique le terme suivant

$$H = \int d^d r V(r) \rho(r), \quad (8.56)$$

où $V(r)$ est le potentiel. Une fois encore, on utilise la décomposition de la densité. Si $V(r)$ a seulement des modes de Fourier avec une longueur d'onde grande devant le pas du réseau, alors (8.56) devient

$$H = -\rho_0 \int d^d r V(r) \nabla u(r). \quad (8.57)$$

Il est alors facile de voir que le potentiel $V(r)$ peut être absorbé simplement en effectuant le changement de variable

$$u(r) \rightarrow u(r) - \frac{1}{M} \int^r d^d r' V(r'). \quad (8.58)$$

Une telle redéfinition de u va bien sûr affecter les fonctions de corrélation mais comme le courant est donné par $\partial_\tau u$, le courant, ainsi que toutes les propriétés de transport restent inchangées.

Il nous faut donc prendre en compte les harmoniques d'ordre plus élevées dans le développement du potentiel. Si on suppose que le potentiel est périodique avec une période de vecteur d'onde K_0 proche de celle du cristal, nous obtenons à partir de (8.56)

$$H = -\rho_0 \int d^d r V_0 \cos(K_0 u(r)). \quad (8.59)$$

Nous retrouvons donc le fait qu'un potentiel extérieur périodique amène à un hamiltonien de type sine-Gordon.

Cet Hamiltonien n'est pas exactement soluble mais on peut essayer d'établir ses propriétés de transport en utilisant l'approche variationnelle introduite dans la partie 3.2.

Concentrons nous pour plus de simplicité sur le cas d'une système quantique à une dimension à $T = 0$ et utilisons de nouveau les notations du paragraphe 3.2. Dans ce cas, à cause de la direction temporelle, cela revient à traiter un système classique à deux dimensions. Comme nous l'avons déjà analysé dans le paragraphe 3.2, il y a deux phases possibles selon la valeur de K . Si $K > K_c = 2$, le potentiel périodique est non pertinent et les fluctuations quantiques dominent la physique. La solution variationnelle est $G = G^0$. La conductivité est donc celle d'un cristal parfait avec un pic de Drude à $\omega = 0$. Par contre, si $K < K_c$, une masse apparaît dans le propagateur. La conductivité devient alors dans l'approximation variationnelle

$$\sigma(\omega) = \frac{e^2 v K}{\pi} \frac{i}{\omega + i\delta} \frac{\omega_n^2}{\omega_n^2 + m} \Big|_{i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta}. \quad (8.60)$$

Quand la masse m est nulle, on retrouve le résultat standard. Pour une masse finie, la conductivité possède un pic delta à la fréquence \sqrt{m} et est donc nulle à $\omega = 0$. Cela se traduit le fait que le cristal est "accroché" par le potentiel périodique et donc ne peut plus glisser librement lorsqu'on applique un petite force extérieure. Le fait que la conductivité soit non nulle seulement à une seule fréquence est un artefact de la méthode variationnelle qui a remplacé le problème original où tous les modes sont couplés- par un simple problème harmonique.

Bibliographie

- [1] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Quantum Mechanics*, Clarendon Press, Oxford, (1989).
- [2] J. Zinn-Justin, *Transitions de phase et groupe de renormalisation*, EDP Sciences/CNRS Editions, Les Ulis, (2005).
- [3] M. Le Bellac, *Des phénomènes critiques aux champs de jauge*, (EDP Sciences/CNRS Editions Les ULis, 2002).
- [4] J. Cardy, *Scaling and Renormalization in Statistical Physics*, Cambridge University Press, (1996).
- [5] A. Atland et B. Simons, *Condensed Matter Field Theory*, Cambridge University Press, Cambridge, (2006).
- [6] J.W. Negele et H. Orland, *Quantum Many-Particle Systems, Frontiers in Physics*, Addison-Wesley, Reading, MA, (1988).
- [7] R. P. Feynmann et A. R. Hibbs, *Path Integral and Quantum Mechanics*, Mc Graw Hill, New York, (1965).
- [8] J. Zinn-Justin, *Intégrale de chemin en mécanique quantique : Introduction*, EDP Sciences/CNRS Editions, Les Ulis, (2003).
- [9] L. S. Schulman, *Techniques and Applications of Path Integration*, Dover ed., Minealo, NY, 2005.
- [10] G. F. Giuliani and G. Vignale, *Quantum Theory of the Electron Liquid*, Cambridge University Press (2005).
- [11] G. D. Mahan, *Many-Particles Physics*, Kluwer Academic/Plenum Publishers, New York, (2000).
- [12] N. D. Mermin, and H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966).
- [13] R. Rajaraman, *Solitons and Instantons*, North Holland Publishing Company, (1982).
- [14] P. M. Chaikin et T. C. Lubensky, *Principles of Condensed Matter Physics*, Cambridge University Press (1995).