

Physique statistique des systèmes (faiblement) hors équilibre : formalisme de la réponse linéaire. Dissipation quantique. Transport électronique.

Christophe Texier



Document mis à jour à l'adresse : http://www.lptms.u-psud.fr/christophe_texier/

Table des matières

1	Introduction	4
	Conseils bibliographiques	7
2	Fonctions de corrélation et fonctions de réponse	9
2.1	Analyse de Fourier des processus aléatoires et théorème de Wiener-Khintchine :	9
2.2	Fonctions de corrélation et fonctions de réponse	11
2.2.1	Une interprétation de la relation de bilan détaillé	16
2.3	Dissipation	18
2.4	Causalité et relations de dispersion	19
3	Réponse linéaire	21
3.1	Parenthèse : la réponse linéaire statique (isotherme)	21
3.2	Calcul de la fonction de réponse dynamique $\chi_{BA}(t)$	22
3.3	Relaxation	25
3.4	Forme généralisée du théorème fluctuation-dissipation	25
3.5	La limite classique	26
3.6	Fonctions de corrélation et fonction de réponse de l'oscillateur harmonique	26
4	Structure spatiale des fonctions de corrélation	29
4.1	Diffusion élastique d'une onde par des diffuseurs immobiles	29
4.1.1	Introduction : différents régimes de diffusion	29
4.1.2	Le facteur de structure statique	31
4.1.3	Fonction de corrélation de paires - ordre de la matière	32
4.2	Sonder la dynamique de la matière : facteur de structure dynamique	38
4.2.1	Compressibilité et facteur de structure dynamique	38
4.2.2	Expérience de diffusion et facteur de structure dynamique	40
4.2.3	De la fonction de réponse $\tilde{\chi}(\vec{q}, \omega)$ au spectre des excitations	42
4.2.4	Règles de somme	45

5	Dissipation quantique	47
5.1	Introduction	47
5.2	Préliminaire : la ligne de transmission	47
5.3	Bruit quantique : version quantique du théorème de Nyquist	49
5.3.1	Dissipation	49
5.3.2	Fluctuations	50
5.3.3	Théorème fluctuation-dissipation	50
5.4	Couplage à un environnement	52
5.4.1	Définition du modèle	52
5.4.2	Méthode n°1 : Formalisme de Matsubara	55
5.4.3	Méthode n°2 : Équation de Langevin quantique (équation de Langevin-Mori)	60
6	Transport électronique dans les métaux	66
6.1	Conductivité des électrons	67
6.1.1	Conductivité d'un gaz d'électrons libres pour $\vec{q} = 0$	67
6.1.2	Le modèle semiclassique de Drude-Sommerfeld	68
6.1.3	Une règle de somme pour la conductivité	68
6.2	Compressibilité du gaz de fermions libres	69
6.3	Constante diélectrique, écrantage et oscillations plasma	72
6.3.1	Approximation 2 : Raisonnement autocohérent (RPA)	73
6.3.2	Théorème fluctuation-dissipation dans le métal	75
6.3.3	Les oscillations plasma et la non commutativité des limites $q \rightarrow 0$ & $\omega \rightarrow 0$	76
6.4	Conductivité et fonction de Green – Formule de Kubo-Greenwood	79
6.4.1	Conductivité d'un anneau mésoscopique	80
6.5	Conductivité d'un métal faiblement désordonné	84
6.5.1	Méthode des perturbations et choix d'un modèle de désordre	86
6.5.2	La conductivité à l'approximation de Drude	90
6.5.3	Corrélations entre fonctions de Green	91
6.5.4	Diffuson (contribution non cohérente)	93
6.5.5	La localisation faible : une correction quantique (cohérente)	94
7	Au delà de la réponse linéaire	99
A	Problème : Mouvement brownien quantique	100
B	Problème : Ondes de spin dans un ferromagnétique - magnons	102
C	Problème : Compressibilité des fermions chargés - plasmons	105
D	Problème : Obstacle en mouvement dans un superfluide	107
E	Problème : Effet Hall	109
F	Problème : Formule de Kubo dans un anneau	111
G	Problème : Ferromagnétisme itinérant & continuum de Stoner	113
H	Problème : Peierls instability in one-dimensional metals	116
H.1	Subject of the exam	116
H.2	Electron gas on a lattice of atoms	119
H.2.1	Metallic phase	119
H.2.2	Insulating phase	119
H.2.3	Comparison of the two phases	120
H.3	Lattice of atoms	121
H.4	Peierls transition	121
H.4.1	Electron-phonon interaction	121
H.4.2	Insulating phase at $T = 0$ – Charge density wave	122
H.4.3	Peierls transition	122

H.5	A continuous description of the electronic gas	123
H.5.1	Linear response theory – compressibility of the electronic gas	123
H.5.2	Static compressibility	124
H.5.3	Energy of the electron gas and cost of the distortion	125
H.5.4	Experiments	126
H.6	Final remarks	126
I	Problème : Métaux quasi-ferromagnétiques – Paramagnons	128
J	Problème : Oscillations de Weiss de la magnétorésistivité d’un 2DEG	131
J.1	Subject of the exam	131
J.2	Solutions of the problem	134
K	Problème : Zero sound in Helium-3	140
K.1	Subject of the exam	140
K.2	Solutions of the problem	143
	Bibliographie	146
	Livres	149
	Index	152

Prérequis.– quelques notions de probabilité : distribution, moments, cumulants, fonction génératrice, théorème de la limite centrale, (loi des extrêmes?),... Processus stochastique, processus markovien, probabilité d’équilibre, probabilité conditionnelle,... (sur le plan technique : réviser l’analyse complexe et le théorème des résidus!)

Remarque sur les notations.– J’omettrai très souvent la flèche sur les vecteurs : $\vec{q} \rightarrow q$. Lorsque cela clarifie la discussion je repérerai les opérateurs par un chapeau : \hat{A} . Enfin notons que \hbar est parfois pris égal à 1.

Remerciements.– Ce document a été conçu pour servir de support au cours dispensé dans le parcours de physique quantique à l’École Normale Supérieure. Sa rédaction date de l’année universitaire 2007-2008 puis le texte a connu (et continue de connaître) une évolution lente. J’ai bénéficié des conseils et de l’expertise de nombreuses personnes que je tiens ici à remercier : Hélène Bouchiat, Serguei Brazovsky, Véronique Brouet, Alain Comtet, Richard Deblock, Meydi Ferrier, Jean-Noël Fuchs, Sophie Guéron, Thierry Jolicœur, Gilles Montambaux, Nicolas Pavloff (notamment pour l’idée du problème sur le superfluide), Bertrand Reulet, Emmanuel Trizac, Denis Ullmo. J’adresse mes remerciements à Jean Dalibard dont le sujet d’examen de l’année 1994-1995 a été à l’origine de mon intérêt pour le modèle quantique analysé dans la section 5.4.3 (il est utile de poser des sujets d’examen intéressants!). Enfin un grand merci aux étudiants qui ont contribué à améliorer le document par leurs nombreuses remarques et questions ô combien stimulantes.

1 Introduction

Le développement de la physique statistique décrivant les situations à l'équilibre repose sur des grands principes de portée universelle : le postulat fondamental de la physique statistique, etc. Ceux-ci permettent de développer un cadre bien clair (ensembles de la physique statistique : microcanonique, canonique, etc), l'étude concrète d'un problème ne requérant plus, *en principe*, que d'enclencher une mécanique éprouvée, i.e. calculer la fonction génératrice appropriée : entropie, énergie libre (fonction de partition), etc.

L'étude de la situation hors équilibre est nettement moins bien balisée, ce qui reflète la plus grande richesse des aspects dynamiques et un relatif manque d'universalité. Une grande variété d'approches est en général proposée (approche de Langevin, équation maîtresse, équation de Fokker-Planck, etc) dont les relations entre elles ne sont pas *a priori* évidentes et qui ne sont pas fondées sur quelques grands principes.¹ Bien que ces approches soient plus fréquemment formulées dans un cadre classique, elles ont également trouvé des justifications dans le cadre quantique (équation de Langevin quantique discutée au § 5.4.3 page 60, équation maîtresse quantique –équation pilote–, mouvement brownien quantique (annexe A), etc ; on pourra consulter les ouvrages de C. W. Gardiner [79, 80]). Ces approches proposent des outils permettant l'analyse des propriétés statistiques des quantités physiques vues comme des *processus aléatoires*, i.e. de leur structure temporelle. L'approche de ce cours est plus modeste à double titre : d'une part nous allons nous intéresser uniquement à la *moyenne* des quantités physiques hors de l'équilibre $\langle X(t) \rangle_{\text{hors eq.}}$, d'autre part nous n'en considérerons que la partie *linéaire* dans la « force » responsable de la mise hors de l'équilibre. Moyennant ces restrictions nous développerons ces idées dans un cadre complètement quantique.

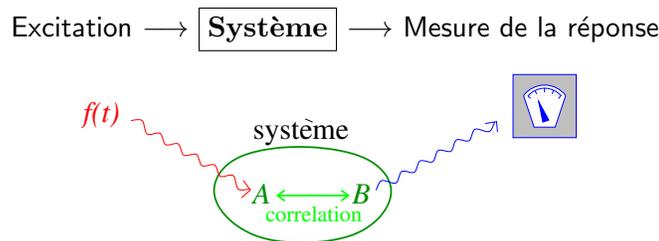


FIGURE 1 : Représentation schématique de la situation décrite par la relation (12) : La force excitatrice $f(t)$ se couple à l'observable A . Les dynamiques des observables du système sont couplées (corrélations représentées par la double flèche). L'appareil de mesure suit l'évolution de l'observable B .

Motivation pratique : Bien souvent l'information que nous avons provient d'une situation où l'on sonde le système en appliquant une faible perturbation extérieure. On analyse alors la réponse du système en mesurant diverses quantités (figure 1). C'est de cette réponse qu'on peut espérer remonter aux propriétés microscopiques (comme le spectre des excitations).

On peut donner un exemple de cette situation : une structure métallique dont on étudie les propriétés de transport électronique : on injecte un courant et on mesure une tension. La réponse est caractérisée par une impédance.²

Le problème : étude de la dynamique d'un système mis hors équilibre.

¹ Parmi les idées transversales : le théorème fluctuation-dissipation. Notons également les progrès récents quant à sa généralisation à des situations fortement hors équilibre (théorème de Gallavoti-Cohen, égalité de Jarzynski,...). Quelques références générales : [34, 38]

²Cet exemple n'est pas hors du cadre quantique : depuis plusieurs décennies il est possible de réaliser des structures de dimensions micrométriques et d'étudier les phénomènes de conduction électrique dans un régime quantique.

La situation : commençons par une lapalissade : la théorie de la réponse linéaire s'intéresse au régime linéaire, *i.e.* aux *petites perturbations*, ce qui nous amène à un traitement perturbatif (classique ou quantique) des équations d'évolution.

Je développerai surtout une description quantique.

Mise hors équilibre : Nous allons discuter deux façons de mettre le système hors équilibre :

- réponse à une force extérieure se couplant à l'une des observables. Un type d'excitation important est le cas d'une excitation harmonique. On mesure alors la *réponse fréquentielle*.
- Relaxation : on relâche une contrainte (on éteint une force) à $t = 0$ et on étudie l'évolution pour $t > 0$. Nous verrons comment réponse et relaxation sont reliées.

Les fonctions de corrélation : Un résultat central est que **la réponse du système à une excitation extérieure (situation faiblement hors équilibre) est reliée à des fonctions de corrélation d'équilibre**. Étant induites par la dynamique, les évolutions temporelles des observables A et B sont en général corrélées (ce que représente la flèche " \leftrightarrow " de la figure) ; la réponse de l'observable B mesurée est donc contrôlée par ces corrélations. Nous pouvons ainsi renverser la problématique et voir dans l'étude expérimentale de la situation faiblement hors équilibre une manière d'étudier les corrélations à l'équilibre.

Les fonctions de corrélation joueront donc un rôle central. Pour chaque couple d'opérateurs (A, B) nous allons introduire et discuter plusieurs (cinq !) fonctions de corrélation (deux dans le cas classique). Fort heureusement elles sont toutes liées par deux contraintes : la causalité et le théorème fluctuation-dissipation.

Fluctuation-dissipation : Une relation très importante est fournie par le *théorème fluctuation-dissipation*, qui relie les fluctuations d'équilibre à la dissipation (l'irréversibilité). Ce théorème est suffisamment important pour que nous en donnions d'ores et déjà un avant goût à travers deux illustrations dans le cadre de la physique classique (une formulation plus générale du théorème sera démontrée plus tard) :

1. *Le mouvement brownien* (Einstein 1905) : $m\dot{v} = -\gamma v + F(t)$ où $\langle F(t)F(t') \rangle = 2D\gamma^2\delta(t-t')$ (ce choix assure $\langle x(t)^2 \rangle \simeq 2Dt$ aux grands temps). En utilisant le théorème d'équipartition, $\frac{1}{2}m\langle v^2 \rangle = \frac{1}{2}k_B T$, et l'expression du corrélateur $\langle v(\tau+t)v(t) \rangle = \frac{D\gamma}{m} e^{-\frac{\gamma}{m}|\tau|}$, on montre que $D\gamma = k_B T$ (relation entre coefficients cinétiques macroscopiques et fluctuations thermiques). La relation est parfois écrite à l'aide de la mobilité $\mu = 1/\gamma$: $D = \mu k_B T$.



FIGURE 2 : *Albert Einstein (1879-1955)*.

2. *Le théorème de Nyquist* (1928) est l'analogue électrique.³ Considérons un circuit constitué d'une résistance et une inductance. Les fluctuations thermiques induisent des fluctuations de tension modélisées par un générateur fictif aux bornes duquel la tension $U(t)$ fluctue : on suppose $\langle U \rangle = 0$ et $\langle U(t)U(t') \rangle = \mathcal{S}_U\delta(t-t')$ (par définition \mathcal{S}_U est le spectre de bruit de tension ; ici on a supposé que le bruit est blanc). On a $L\dot{I} = -RI + U(t)$. La relation

³ La théorie a été proposée par Harry Nyquist [43] et l'expérience réalisée par John B. Johnson [30].

$2D\gamma^2/\gamma = 2k_B T$ vue dans le paragraphe précédent devient $\mathcal{S}_U = 2k_B TR$: elle relie les fluctuations de tension à la résistance (dissipation).⁴

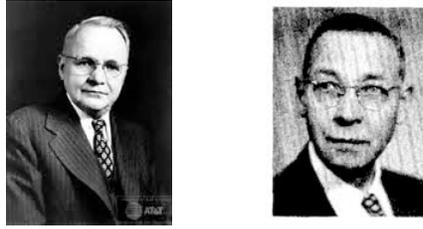


FIGURE 3 : *Harry Nyquist (1889-1976) et John B. Johnson (1887-1970).*

La structure du cours :

- Le chapitre 2 introduit les différentes fonctions de corrélation. Nous discuterons les conséquences de la causalité des fonctions de réponse et le lien entre fonction de réponse et dissipation.
- Dans le chapitre 3 est démontré un résultat central du cours, qui montre quelle fonction de corrélation intervient dans la fonction de réponse. Nous obtiendrons une formulation générale du théorème fluctuation-dissipation.
- Le chapitre 4 discute la structure spatiale de certaines fonctions de corrélation et suggère *comment extraire les informations microscopiques* de celles-ci. La discussion s'appuie sur le cas de la compressibilité (corrélation densité-densité).
- Une première application est étudiée dans le chapitre 5 : la mécanique quantique étant basée sur une formulation hamiltonienne, la description des phénomènes dissipatifs n'est pas évidente. Nous discutons quelques idées générales à travers différents modèles. En particulier nous étudierons le problème d'un oscillateur harmonique couplé à un "bain d'oscillateurs" (un ensemble d'oscillateurs caractérisé par une densité spectrale continue). Cette étude nous servira d'alibi pour introduire la méthode de Matsubara des fonctions de Green à température finie, qui joue un rôle très important en matière condensée, notamment. Une seconde méthode plus directe sera également présentée (la construction d'une équation de Langevin quantique).

⁴ **Bruit de Johnson-Nyquist et bruit de Shottky.**– Il est bon de garder en tête que l'étude du bruit de courant à travers une résistance conduit à considérer deux cas limites. (1) Le bruit de Johnson-Nyquist est le bruit de courant dû aux fluctuations thermiques à l'équilibre : $\langle I \rangle = 0$ et $\mathcal{S}_I = \frac{2k_B T}{R}$. (2) Dans la situation *hors équilibre*, lorsque $\langle I \rangle \neq 0$, le bruit de grenaille (Shottky) traduit la nature discrète des porteurs de charge : par exemple le bruit d'une jonction tunnel dans le régime $R \gg h/e^2$ est $\mathcal{S}_I = e|\langle I \rangle|$ à $T = 0$ K. La transition entre les deux régimes se produit pour $eR\langle I \rangle \sim k_B T$ et est étudiée en TD. Puisque le cours s'intéresse au régime *faiblement* hors équilibre, nous discuterons systématiquement le régime de Johnson-Nyquist.

Intérêt expérimental en physique mésoscopique : Dans la situation d'équilibre, les fluctuations sont contraintes par le théorème fluctuation-dissipation. Leur étude n'apporte pas d'information supplémentaire par rapport à une expérience de transport. La mesure du bruit de Johnson-Nyquist permet toutefois de calibrer une expérience de bruit. En revanche le bruit de grenaille apporte de nouvelles informations par rapport aux expériences de transport, et fournit un moyen puissant de sonder les propriétés des conducteurs mésoscopiques. L'étude du bruit de grenaille dans ce contexte a stimulé une grande activité ces quinze dernières années. On pourra se reporter à l'article [15].

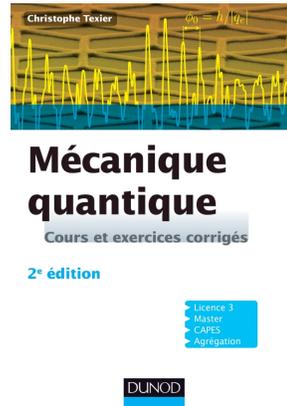
- Une seconde application des idées des chapitres 2 et 3 est présentée au chapitre 6 qui donne une présentation succincte des propriétés de transport électronique dans les métaux. La question des interactions et de l'écrantage est discutée dans un premier temps, puis nous nous tournons vers le rôle du désordre dans le transport électronique.

Conseils bibliographiques

A. Réviser la mécanique quantique

- Un grand classique : C. Cohen-Tannoudji, B. Diu & F. Laloë [72].
- Deux excellents livres récents : J.-L. Basdevant & J. Dalibard [67] et M. Le Bellac [91].
- Encore plus récent (2011 pour la 1ère édition), assez condensé et avec une légère coloration

« matière condensée/physique mésoscopique », [108]



B. Réviser la physique statistique à l'équilibre

- Le plus synthétique : l'excellent photocopié de cours d'A. Georges & M. Mézard [81].
- Un livre au classicisme très français plutôt synthétique et plaisant : R. Castaing [69].
- Très (trop ?) complet et pédagogique : B. Diu, C. Guthmann, D. Lederer & B. Roulet [74]. Ne pas se laisser effrayer par le volume (~1000 pages) : le cœur de l'ouvrage (la partie « cours ») ne fait que 235 pages, le reste étant une série de « compléments » et illustrations.
- Un ouvrage très agréable, avec une longue discussion sur les transitions de phases et les phénomènes critiques : R. K. Pathria & P. D. Beale [102].
- Deux ouvrages intéressants sont ceux de K. Huang [84] et plus original, celui de S.-K. Ma [97].
- Pour rester du côté asiatique on peut mentionner le classique livre de R. Kubo *et alter* [109]
- Dans les classiques on peut citer le très complet livre de F. Reif [107] et le « Landau & Lifchitz » [90] (discussion détaillée des symétries).
- Très profond et complet, mais également plus difficile : R. Balian [65, 66] (en vf : édité chez Ellipses en 1990).

C. Physique du solide

- Un livre assez descriptif et agréable : C. Kittel [87].
- Un ouvrage plus avancé très agréable et synthétique : J. Ziman [111].
- Un classique assez détaillé : N. Ashcroft & N. Mermin [64].

D. Physique statistique hors de l'équilibre

Pour les chapitres 2 et 3

- Les chapitres 2 et 3 sont inspirés du cours du collège de France de C. Cohen-Tannoudji [70].
- Une référence canonique sur la réponse linéaire est le livre de R. Kubo, M. Toda & N. Hashitsume [89].
- Un livre récent qui couvre assez bien le sujet est le livre de Le Bellac, Mortessagne & Batrouni [92]. On peut également mentionner le livre de Noëlle Pottier [105] (and [106] for the english version).
- Le second tome de R. Balian aborde les aspects hors équilibre [66].

Pour le chapitre 4

- Ce chapitre est inspiré de l'ouvrage de Pines & Nozières [104].

Pour le chapitre 5

- Les cours du collège de France de C. Cohen-Tannoudji des années 88–89 et 89–90 [71].
- L'ouvrage de Gardiner & Zoller [80]. Le livre de Weiss [110] (plus difficile).

Pour le chapitre 6

- Citons quelques ouvrages sur le problème à N corps qui abordent les problèmes de transport. Deux classiques (assez avancés) : Pines & Nozières [104] et Mahan [98]. Un autre livre récent, également très avancé (sur les électrons corrélés) : Giuliani & Vignale [82]. On peut mentionner les livres très pédagogiques et récents (plus faciles d'abord que ceux mentionnés précédemment) : Bruus & Flensberg [68] et l'excellent livre d'Altland & Simons [63] utilisant l'intégrale de chemin.
- Sur la diffusion en milieu désordonné : Akkermans & Montambaux [61].

2 Fonctions de corrélation et fonctions de réponse

La physique statistique permet de caractériser les fluctuations thermiques émergeant de la complexité de la dynamique microscopique. Le langage probabiliste vient se substituer à l'analyse de la dynamique à l'échelle élémentaire et les grandeurs physiques acquièrent le statut de « variables aléatoires ». L'étude des aspects dynamiques, à l'équilibre ou hors de l'équilibre, ajoute donc une dimension supplémentaire (le temps) $X \rightarrow X(t)$, requérant de faire appel à la notion plus sophistiquée de « processus stochastique ».⁵ En particulier la caractérisation complète des propriétés statistiques d'un processus $X(t)$ requiert des outils mathématiques plus complexes : la mesure de probabilité $\mathcal{P}[X(t)]$ est une fonctionnelle, etc. À un niveau simple, une première information est fournie par l'étude de la fonction de corrélation à deux temps $\langle X(t)X(t') \rangle$, ce qui explique le rôle central que jouera ce concept dans ces notes.⁶

Remarque : en mécanique quantique, une grandeur sera représentée par un opérateur $X(t)$ à l'instant t qui ne commute pas en général avec l'opérateur $X(t')$ si $t \neq t'$. On aura ainsi plusieurs manières de construire des fonctions de corrélations, selon l'ordonnement des opérateurs, $X(t)X(t')$, $X(t')X(t)$, $\{X(t), X(t')\}$, $[X(t), X(t')]$, etc. Cette remarque n'affecte cependant pas la discussion du § ci-dessous.

2.1 Analyse de Fourier des processus aléatoires et théorème de Wiener-Khinchine :

Convention pour la transformation de Fourier temporelle : La transformation de Fourier est définie selon la convention

$$\tilde{C}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt C(t) e^{i\omega t} \quad \text{et} \quad C(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{C}(\omega) e^{-i\omega t}. \quad (1)$$

Soit $x(t)$ un processus aléatoire **stationnaire**, sur $t \in [0, T]$, caractérisé par sa fonction de corrélation $C_{xx}(\tau) \stackrel{\text{def}}{=} \langle x(t)x(t+\tau) \rangle$, supposée rapidement décroissante. Étant stationnaire, on préférera introduire sa transformée de Fourier discrète⁷

$$\tilde{x}_n = \int_0^T \frac{dt}{T} x(t) e^{+i\omega_n t} \quad \text{et} \quad x(t) = \sum_n \tilde{x}_n e^{-i\omega_n t} \quad \text{où} \quad \omega_n = \frac{2n\pi}{T} \quad \text{avec} \quad n \in \mathbb{Z}. \quad (2)$$

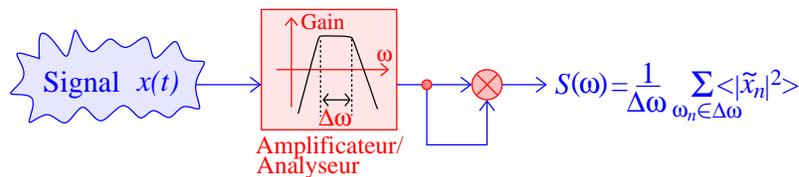


FIGURE 4 : Schéma d'un dispositif de mesure de bruit : le signal est amplifié, dupliqué et multiplié. Le résultat est moyenné (en général pendant un temps long).

⁵ La théorie des probabilités désigne par « processus stochastiques » les « fonctions aléatoires ».

⁶ Dans le cas très particulier où le processus est *gaussien*, ou plutôt la mesure est gaussienne $\mathcal{P}[X(t)] \propto \exp\left\{-\frac{1}{2} \int dt dt' X(t) A(t, t') X(t')\right\}$, la fonction à deux points caractérise toute l'information statistique.

⁷ Pour la transformée de Fourier spatiale on adoptera plutôt la convention $f_q = \int_V dr f(r) e^{-iqr}$, où q est quantifié pour un volume fini, et $f(r) = \frac{1}{V} \sum_q f_q e^{+iqr} \rightarrow \int \frac{dq}{(2\pi)^d} f_q e^{+iqr}$.

Spectre de bruit.— Soit $\Delta\omega$ la largeur de bande de l'appareil de mesure ($\Delta\omega \gg 1/T$). On définit le *spectre de bruit* comme la moyenne du module carré des composantes de Fourier appartenant à $[\omega, \omega + \Delta\omega]$:

$$\mathcal{S}(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\Delta\omega} \sum_{\omega_n \in [\omega, \omega + \Delta\omega]} \langle |\tilde{x}_n|^2 \rangle \quad (3)$$

Le spectre de bruit est ce qui est mesuré dans une expérience de bruit : échantillon \rightarrow ampli/filtre \rightarrow appareil de mesure.

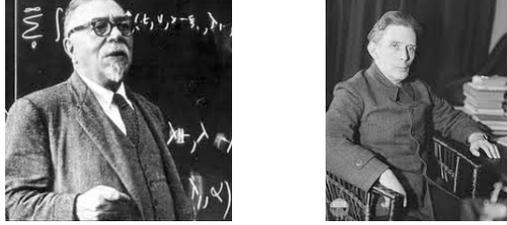


FIGURE 5 : *Norbert Wiener (1894-1964) & Aleksandr Yakovlevich Khinchin (1894-1959).*

Théorème de Wiener-Khintchine.— En utilisant les hypothèses énoncées ci-dessus, on peut vérifier que : ⁸

$$\langle \tilde{x}_n \tilde{x}_m^* \rangle = \frac{1}{T} \delta_{n,m} \tilde{C}_{xx}(\omega_n) \quad (4)$$

où $\tilde{C}_{xx}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau C_{xx}(\tau) e^{i\omega\tau}$. Seules les fréquences opposées ω_n et ω_{-n} sont corrélées⁹. On a donc : $\sum_{\omega_n \in [\omega, \omega + \Delta\omega]} \langle |\tilde{x}_n|^2 \rangle = \frac{\mathcal{N}_{\Delta\omega}}{T} \tilde{C}_{xx}(\omega)$ où $\mathcal{N}_{\Delta\omega} = \Delta\omega T / 2\pi$ est le nombre de fréquences ω_n dans l'intervalle. Finalement nous obtenons

$$\boxed{\mathcal{S}(\omega) = \frac{\tilde{C}_{xx}(\omega)}{2\pi}} \quad (5)$$

i.e. une relation entre le bruit (fluctuations à fréquence ω) et les corrélations (précisément la TF). Des corrélations de courte portée temporelle sont donc responsable d'un large spectre de bruit. À la limite de corrélations de portée nulle, on parle de “*bruit blanc*”.

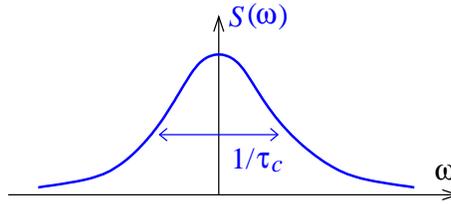


FIGURE 6 : **Théorème de Wiener-Khintchine** : *la largeur du spectre de bruit est égale à l'inverse du temps de corrélation du processus.*

⁸ On écrit $\langle \tilde{x}_n \tilde{x}_m^* \rangle = \int_0^T \frac{dt}{T} \int_0^T \frac{dt'}{T} e^{i\omega_n t - i\omega_m t'} C_{xx}(t-t') = \frac{1}{T} \int_0^T \frac{dt'}{T} e^{i(\omega_n - i\omega_m)t'} \int_{-t'}^{T-t'} d(t-t') e^{i\omega_n(t-t')} C_{xx}(t-t')$. L'hypothèse de corrélations de courte portée justifie l'approximation $\int_{-t'}^{T-t'} d(t-t') \dots \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') \dots$.

⁹ On peut également considérer des processus sur \mathbb{R} en faisant $T \rightarrow \infty$. La TF est alors définie comme $\tilde{x}(\omega) = \int dt x(t) e^{i\omega t}$ et on montre que $\langle \tilde{x}(\omega) \tilde{x}(\omega') \rangle = 2\pi \delta(\omega + \omega') \tilde{C}_{xx}(\omega)$. La correspondance est assurée par les substitutions $\tilde{x}(\omega) \leftrightarrow T \tilde{x}_n$ et $2\pi \delta(\omega - \omega') \leftrightarrow T \delta_{n,n'}$.

✎ **Exercice 2.1** : Une application simple du théorème de Wiener-Khintchine est le calcul de la fonction de corrélation de la vitesse pour le processus décrit par l'équation phénoménologique de Langevin

$$\frac{dv(t)}{dt} = - \int dt' \gamma(t-t') v(t') + F(t) \quad (6)$$

où $F(t)$ est la force de Langevin (un processus stationnaire corrélé à courte portée). La friction est décrite par une fonction causale $\gamma(t)$, de largeur τ_m finie¹⁰. Montrer que

$$C_{vv}(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \underbrace{\frac{\tilde{C}_{FF}(\omega)}{2\pi}}_{S_{\text{Force}}(\omega)} \frac{e^{-i\omega\tau}}{|\tilde{\gamma}(\omega) - i\omega|^2} \quad (7)$$

Retrouver le résultat pour le mouvement brownien [$C_{FF}(\tau) = 2D\gamma^2\delta(\tau)$ et $\gamma(t) = \gamma\delta(t)$].



FIGURE 7 : Paul Langevin (1872-1946).

✎ **Exercice 2.2** : On considère maintenant le cas d'une force de Langevin corrélée sur un temps τ_c (temps microscopique) : $C_{FF}(t) = 2D\gamma^2 \frac{1}{2\tau_c} e^{-|t|/\tau_c}$. On s'attend à ce que la fonction $\gamma(t)$ soit alors de largeur τ_m finie; supposons que $\gamma(t) = \gamma\theta(t) \frac{1}{\tau_m} e^{-t/\tau_m}$. Les trois temps du problème satisfont : $\tau_c \lesssim \tau_m \ll 1/\gamma$. En analysant les résidus de $|\tilde{\gamma}(\omega) - i\omega|^{-2}$ justifier l'approximation $\tau_m \rightarrow 0$ tout en gardant τ_c fini, ce qui simplifie le calcul de l'intégrale. Montrer alors que $C_{vv}(\tau) = \frac{D\gamma}{1-(\gamma\tau_c)^2} [e^{-\gamma|\tau|} - \gamma\tau_c e^{-|\tau|/\tau_c}]$. Analyser le comportement du résultat aux petits temps.

2.2 Fonctions de corrélation et fonctions de réponse

Notations.— Nous considérons un système (d'une ou plusieurs particules, en interaction ou non) dont la dynamique est décrite par le hamiltonien H_0 . Nous notons $\{E_n, |\varphi_n\rangle\}$ le spectre de cet hamiltonien. Soient A et B deux observables particulières (ex : position, impulsion, densité de particules, courant,...).

Matrice densité.— (introduit par von Neumann & Landau en 1927) quelques rappels : (cf. Réfs. [65, 74]) :

- $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ décrit un état pur (système dans l'état $|\psi\rangle$ avec probabilité 1).
- Soit $\{|\psi_a\rangle\}$ une base orthonormée; $\rho = \sum_a P_a |\psi_a\rangle\langle\psi_a|$ décrit un mélange statistique (où les P_a sont les probabilités d'occupation des états quantiques $|\psi_a\rangle$). Le calcul de la

¹⁰ On peut justifier le choix de cet effet de mémoire de la manière suivante : si la force de Langevin est corrélée sur un temps τ_c , l'irréversibilité (la dissipation et la friction) ne se manifestent que pour des temps $t \gg \tau_c$. Il est donc plus naturel de postuler que l'équation est de la forme $\dot{v} = -\gamma\bar{v} + F(t)$ où \bar{v} est une *moyenne temporelle* de v (à distinguer de la moyenne d'ensemble $\langle \dots \rangle$) sur un temps typique τ_m avec $\tau_c \lesssim \tau_m \ll \tau_{\text{relax}}$ avec $\tau_{\text{relax}} = 1/\gamma$. Nous verrons au chapitre 5 que les modèles quantiques de dissipation conduisent naturellement à une fonction $\gamma(t)$ de largeur finie.

moyenne, statistique et quantique, d'une observable A s'effectue efficacement à l'aide de la matrice densité : $\langle A \rangle = \underbrace{\sum_a P_a}_{\text{statistique}} \underbrace{\langle \psi_a | A | \psi_a \rangle}_{\text{quantique}} = \text{Tr} \{ \rho A \}$.

- Lorsque le système est à l'équilibre thermodynamique et en contact avec un thermostat on a $\rho_0 = \frac{1}{Z_\beta} e^{-\beta H_0}$ avec $Z_\beta \stackrel{\text{def}}{=} \text{Tr} \{ e^{-\beta H_0} \}$. Dans le cas grand canonique $\rho_0 \propto e^{-\beta(H_0 - \mu N)}$ où N est l'opérateur nombre de particules.
- La matrice densité¹¹ obéit à l'équation d'évolution (équation de von Neumann, version quantique de l'équation de Liouville) :

$$\frac{d}{dt} \rho(t) = \frac{i}{\hbar} [\rho(t), H(t)]. \quad (8)$$

Moyennes des observables.— La dernière relation nous permet donc d'exprimer des moyennes d'observables dans des problèmes dépendant du temps. Il est utile de comparer les deux points de vue de Schrödinger et de Heisenberg. Introduisons l'opérateur d'évolution $U(t)$ obéissant à $i\partial_t U(t) = H(t)U(t)$ pour la condition initiale $U(0) = 1$ (notamment $U(t) = \exp[-(i/\hbar)Ht]$ si H est indépendant du temps).

- Dans le point de vue de Schrödinger, l'évolution temporelle est entièrement supportée par la fonction d'onde, i.e. par la matrice densité $\rho(t)$.
- Dans le point de vue d'Heisenberg, ce sont les observables qui portent la dépendance temporelle : $A_H(t) \stackrel{\text{def}}{=} U^\dagger(t) A U(t)$. L'équation d'évolution est

$$\frac{d}{dt} A_H(t) = \frac{i}{\hbar} [H_H(t), A_H(t)] \quad (9)$$

où $H_H(t) = U^\dagger(t) H(t) U(t)$ (notons que $H_H(t) = H$ pour un problème indépendant du temps). Les moyennes sont calculées dans un état de référence, i.e. avec une matrice ρ_0 .

La moyenne de l'observable est donc écrite dans les deux points de vue

$$\langle A(t) \rangle = \text{Tr} \{ \rho(t) A \} = \text{Tr} \{ \rho_0 A_H(t) \} \quad (10)$$

ce qui permet de mieux comprendre la remarque de la note de bas de page 11.

Fonction de réponse : définitions.— Soit $f(t)$ une "force" extérieure conjuguée à une grandeur physique A : i.e. l'énergie contient la contribution

$$\boxed{\hat{H}_{\text{pert}}(t) = -f(t) \hat{A}} \quad (11)$$

L'Hamiltonien complet est $H(t) = H_0 + H_{\text{pert}}(t)$.

La fonction de réponse $\chi_{BA}(t)$ caractérisant la réponse linéaire à cette perturbation est définie comme :

$$\boxed{\langle \hat{B}(t) \rangle_f \stackrel{\text{def}}{=} \langle \hat{B} \rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi_{BA}(t-t') f(t') + O(f^2)} \quad (12)$$

¹¹ Il n'est pas inutile d'insister sur le point suivant : bien qu'on parle de matrice ou d'"opérateur" densité, celui-ci **ne doit pas être confondu avec une observable**. $\rho(t)$ ne fait qu'encoder l'information sur l'état quantique. C'est la raison pour laquelle l'équation de Liouville fait apparaître un signe opposé à l'équation du mouvement de Heisenberg (9).

où $\langle \dots \rangle$ et $\langle \dots \rangle_f$ désignent respectivement la moyenne en l'absence et en présence de la perturbation :

$$\langle B \rangle \stackrel{\text{def}}{=} \text{Tr}\{\rho_0 B\} \quad (13)$$

$$\langle B(t) \rangle_f \stackrel{\text{def}}{=} \text{Tr}\{\rho(t) B\} \quad (14)$$

Quelques remarques :

- Puisque nous recherchons la réponse à l'ordre $O(f^1)$, la fonction de réponse est d'ordre $O(f^0)$, i.e. $\chi_{BA}(t)$ est une **propriété d'équilibre** (i.e. de l'hamiltonien H_0).
- Notons que la fonction $\chi_{BA}(t)$ est *causale*, $\boxed{\chi_{BA}(t < 0) = 0}$ (nous en analyserons plus bas les conséquences).

Réponse impulsionnelle versus fréquentielle.— Si $f(t) \propto \delta(t)$, la réponse linéaire de $\langle B(t) \rangle_f$ est directement proportionnelle à $\chi_{BA}(t)$, d'où le nom de *fonction de réponse impulsionnelle*.

Sa transformée de Fourier est appelée la *fonction de réponse fréquentielle*

$$\tilde{\chi}_{BA}(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \int dt \chi_{BA}(t) e^{i\omega t} \quad (15)$$

La réponse linéaire à une excitation harmonique $f(t) = f_\omega \cos \omega t = \text{Re}[f_\omega e^{-i\omega t}]$ est donc

$$\langle B(t) \rangle_f = \langle \hat{B} \rangle + \text{Re} [\tilde{\chi}_{BA}(\omega) f_\omega e^{-i\omega t}] + O(f^2) \quad (16)$$

Puisque la fonction de réponse est complexe, notons que la réponse est en général déphasée par rapport à l'excitation.

Un des principaux objectifs du cours sera de calculer la fonction de réponse $\chi_{BA}(t)$.

Remarque : Il peut être nécessaire de rajouter une partie imaginaire à la fréquence $\omega \rightarrow \omega + i0^+$ pour assurer la convergence de l'intégrale (15). Le terme supplémentaire e^{-0^+t} dans l'intégrale s'interprète comme un allumage adiabatique de la perturbation aux temps $t \rightarrow -\infty$.

Exemples :

- Un atome soumis à un champ électromagnétique. Dans l'approximation dipolaire électrique, le potentiel vecteur (la “force”) $f(t) \rightarrow \vec{A}(\vec{r} = 0, t)$ est couplé à l'impulsion $A \rightarrow \frac{q}{m} \vec{p}$: $H_{\text{pert}}(t) = -\frac{q}{m} \vec{p} \cdot \vec{A}(\vec{r} = 0, t)$. Si on s'intéresse à la polarisation de l'atome, $B \rightarrow \vec{d} = q\vec{r}$, on aura à étudier la fonction de réponse $\chi_{zp_z}(t)$.
- Un système de spins soumis à un champ magnétique $f(t) \rightarrow \vec{B}(t)$ (la “force” extérieure). L'observable qui lui est couplée est le moment magnétique $A \rightarrow \vec{\mathcal{M}} = \gamma \vec{S}$. Étudier la réponse des spins ($B \equiv A$) se fait en considérant la *susceptibilité magnétique* : $\langle S_i(t) \rangle_{\vec{B}} = \int dt' \chi_{ij}(t - t') \mathcal{B}_j(t')$.
- Soit $n(r)$ la densité de particules. Pour une perturbation $H_{\text{pert}}(t) = \int dr n(r) V(r, t)$, où $V(r, t)$ est un potentiel extérieur, la réponse de la densité est donnée par la *compressibilité* : $\langle n(r, t) \rangle_V = \int dt' dr' \chi(r, t; r', t') V(r', t')$.
- Considérons un système soumis à un champ électromagnétique $H_{\text{pert}}(t) = - \int dr j_i(r) A_i(r, t)$ la réponse de la densité de courant est donnée par le tenseur de conductivité : $\langle j_i(r, t) \rangle_{\vec{A}} = \int dt' dr' \sigma_{ij}(r, t; r', t') \mathcal{E}_j(r', t')$.

✎ **Exercice 2.3 :** On considère un oscillateur harmonique classique $\ddot{x} + \omega_0^2 x = \frac{1}{m} f(t)$. Vérifier que pour ce système linéaire la fonction de réponse, définie par $x^{(f)}(t) = x^{(0)}(t) + \int dt' \chi_{xx}(t-t') f(t')$, est la fonction de Green de l'équation du mouvement¹², solution de $\ddot{\chi}_{xx} + \omega_0^2 \chi_{xx} = \frac{1}{m} \delta(t)$ (commenter l'absence de terme $O(f^2)$ dans $x^{(f)}(t)$). Déduire $\tilde{\chi}_{xx}(\omega)$. Représenter la position des pôles dans le plan complexe de la variable ω . Montrer que les pôles, notés ω_{\pm} , doivent être légèrement décalés dans le demi-plan complexe inférieur, $\omega_{\pm} \rightarrow \omega_{\pm} - i0^+$, afin que $\chi_{xx}(t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{\chi}_{xx}(\omega) e^{-i\omega t}$ soit une fonction causale.

✎ **Exercice 2.4 :** On considère un oscillateur harmonique classique amorti décrit par l'équation $\ddot{x} + \frac{2}{\tau} \dot{x} + \omega_0^2 x = \frac{1}{m} f(t)$. Déduire la fonction de réponse fréquentielle $\tilde{\chi}_{xx}(\omega)$. Analyser ses pôles ; on distinguera les régimes fortement ($1/\tau > \omega_0$) et faiblement ($1/\tau < \omega_0$) amortis. Dans ce second cas, montrer que $\tilde{\chi}_{xx}(\omega)$ possède la même structure que dans le cas non amorti à condition de remplacer 0^+ par $1/\tau$.

Relaxation : Une expérience de relaxation consiste à éteindre une force à l'instant $t = 0$ et à étudier l'évolution du système. Cela correspond donc à un choix particulier pour la force : $f(t) = f_0 \theta(-t)$ et à étudier $\langle B(t) \rangle_f$ pour $t > 0$.

Fonction de corrélation non symétrique : Soit $C_{BA}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \langle B(t)A \rangle$ la fonction de corrélation non symétrisée. Sa transformée de Fourier se décompose comme :

$$\tilde{C}_{BA}(\omega) = 2\pi \sum_{n,m} P_n B_{nm} A_{mn} \delta(\omega + \omega_{nm}) \quad (17)$$

où $\hbar\omega_{nm} = E_n - E_m$, $P_n = e^{-\beta E_n} / Z_{\beta}$ et $A_{nm} \stackrel{\text{def}}{=} \langle \varphi_n | A | \varphi_m \rangle$. Cette expression de la fonction de corrélation nous montre que la structure en fréquence permet de sonder les énergies des excitations du système. $\tilde{C}_{BA}(\omega)$ diverge lorsque la fréquence coïncide avec l'énergie d'une transition $\hbar\omega = E_m - E_n$, les éléments de matrice $B_{nm} A_{mn}$ imposant des règles de sélection.

Rq. : dans un problème à N corps, les fonctions de corrélation étudiées font intervenir des opérateurs à un corps (densité, densité de courant,...). La présence des éléments de matrice A_{mn} impose une forte sélectivité sur les états $|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_m\rangle$, qui sont en particulier associés à des nombres de particules égaux (si A et B sont des opérateurs champs, les nombres de particules associés aux deux états différent de ± 1).

Relation de bilan détaillé : De la représentation spectrale, en utilisant $P_n/P_m = e^{-\beta\hbar\omega_{nm}}$, on déduit facilement

$$\boxed{\tilde{C}_{BA}(-\omega) = \tilde{C}_{AB}(\omega) e^{-\beta\hbar\omega}} \quad (18)$$

Nous discuterons en détail cette relation au § 2.2.1 dans un cadre particulier. Nous verrons que l'asymétrie entre fréquences positives et négatives traduit une asymétrie des probabilités d'absorption/émission d'énergie par le système. Nous pouvons analyser deux limites : (i) la limite "classique" $\hbar\omega \ll k_B T$ pour laquelle la fonction est symétrique¹³ $\tilde{C}_{BA}(-\omega) \simeq \tilde{C}_{AB}(\omega)$; (ii) la limite "quantique" $\hbar\omega \gg k_B T$ où l'asymétrie se manifeste, le cas extrême étant : $\tilde{C}_{BA}^{(T=0)}(\omega < 0) = 0$. Ce dernier résultat se déduit de la représentation spectrale (17).

✎ **Exercice 2.5 :** Calculer $\tilde{C}_{xx}(\omega)$ pour un oscillateur harmonique quantique unidimensionnel et vérifier la relation de bilan détaillé.

¹² Pour un système classique décrit par une équation du mouvement $\ddot{x} = F(x) + f(t)$ la réponse est non linéaire. À l'ordre $O(f)$ la réponse est décrite par la fonction de réponse impulsionnelle qui s'identifie avec la fonction de Green causale de l'équation $\ddot{\chi}(t) - F'(x_0(t)) \chi(t) = \delta(t)$ où $x_0(t)$ est la solution de l'équation à $f = 0$, fixée par $x(0)$ et $\dot{x}(0)$. Ormis dans le cas de l'oscillateur harmonique, $\chi(t)$ dépend de $x_0(0)$ et $\dot{x}_0(0)$.

¹³ Stricto sensu il y a symétrie dans le cas de la fonction d'autocorrélation $\tilde{C}_{AA}(-\omega) \simeq \tilde{C}_{AA}(\omega)$.

Fonction de corrélation symétrique : $S_{BA}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \langle \{B(t), A\} \rangle$, reliée aux fonctions non symétrisées par $S_{BA}(t) = \frac{1}{2}[C_{BA}(t) + C_{AB}(-t)]$. Représentation spectrale :

$$\tilde{S}_{BA}(\omega) = \pi \sum_{n,m} (P_n + P_m) B_{nm} A_{mn} \delta(\omega + \omega_{nm}) \quad (19)$$

Fonction spectrale : Après avoir introduit la moyenne de l'anticommutateur, nous introduisons la moyenne du commutateur $\xi_{BA}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\hbar} \langle [B(t), A] \rangle$, dont la représentation spectrale est

$$\tilde{\xi}_{BA}(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{n,m} (P_n - P_m) B_{nm} A_{mn} \delta(\omega + \omega_{nm}) \quad (20)$$

L'introduction du \hbar au dénominateur assure qu'à la limite classique ($\hbar \rightarrow 0$) la fonction spectrale $\xi_{BA}(t)$ tende vers une limite non nulle. En général $\tilde{\xi}_{BA}(\omega)$ est complexe, sauf dans le cas où l'on s'intéresse à l'autocorrélation $\tilde{\xi}_{AA}(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{n,m} (P_n - P_m) |A_{nm}|^2 \delta(\omega + \omega_{nm}) \in \mathbb{R}$.

Fonction de corrélation canonique de Kubo : Pour obtenir la limite classique de la fonction spectrale, il est utile de procéder à quelques manipulations. On note $A(t) = e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar}$ et $\dot{A}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d}{dt} A(t)$. Nous pouvons écrire $A(-i\hbar\beta) - A = -i\hbar \int_0^\beta d\lambda \dot{A}(-i\hbar\lambda)$, i.e. $[A, \rho_0] = -i\hbar \rho_0 \int_0^\beta d\lambda \dot{A}(-i\hbar\lambda)$, où $\rho_0 \propto e^{-\beta H_0}$ est la matrice densité canonique. Des manipulations élémentaires sur la trace conduisent à :

$$\frac{i}{\hbar} \langle [B(t), A] \rangle = \int_0^\beta d\lambda \langle \dot{A}(-i\hbar\lambda) B(t) \rangle \quad \Rightarrow \quad \xi_{BA}(t) = -\frac{i\beta}{2} K_{B\dot{A}}(t) \quad (21)$$

Le membre de droite est appelé *fonction de corrélation canonique de Kubo* (la photographie du grand homme se trouve p. 22) :

$$K_{BA}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\lambda \langle A(-i\hbar\lambda) B(t) \rangle \quad (22)$$

Nous montrerons plus tard que cette fonction de corrélation décrit la relaxation. Nous pouvons également donner la représentation spectrale de cette fonction

$$\tilde{K}_{BA}(\omega) = -2\pi \sum_{n,m} \frac{P_n - P_m}{\beta \hbar \omega_{nm}} B_{nm} A_{mn} \delta(\omega + \omega_{nm}). \quad (23)$$

En remplaçant $1/\omega_{nm}$ par $-1/\omega$ (grâce au Dirac), cette représentation montre clairement le lien avec la fonction spectrale :

$$\tilde{K}_{BA}(\omega) = \frac{2}{\beta \omega} \tilde{\xi}_{BA}(\omega). \quad (24)$$

Puisqu'il est clair que $\lim_{\hbar \rightarrow 0} K_{BA}(t) = \langle AB(t) \rangle = C_{BA}^{\text{class}}(t)$, la relation (21) permet d'obtenir la limite classique de la fonction spectrale :

$$\xi_{BA}^{\text{class}}(t) = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \xi_{BA}(t) = \frac{i\beta}{2} \frac{d}{dt} \langle B(t) A \rangle \quad (25)$$

(on a utilisé $\langle B(t) \dot{A} \rangle = \langle B \dot{A}(-t) \rangle = -\frac{d}{dt} \langle B A(-t) \rangle = -\frac{d}{dt} \langle B(t) A \rangle$), i.e. de manière plus suggestive :

$$\frac{1}{\hbar} \langle [B(t), A] \rangle \xrightarrow{\hbar \rightarrow 0} i\beta \langle \frac{d}{dt} B(t) A \rangle. \quad (26)$$

Limite $\beta \rightarrow \infty$: Nous discuterons la plupart du temps le cas des systèmes en contact avec un thermostat ; dans ce cas la moyenne $\langle \dots \rangle$ est une moyenne canonique. Le formalisme peut également être appliqué à un atome pour lequel la moyenne sera plus naturellement $\langle \dots \rangle = \langle \psi_0 | \dots | \psi_0 \rangle$ où $|\psi_0\rangle$ est l'état fondamental (ce qui correspond à la limite de température nulle $\beta \rightarrow \infty$).

↳ **Exercice 2.6** : Montrer que pour un atome d'hydrogène la fonction spectrale prend la forme : $\xi_{zz}(t) = -\frac{i}{\hbar} \sum_{n=2}^{\infty} \sin \omega_{n1} t |\langle np|z|1s\rangle|^2$ où $\omega_{n1} \stackrel{\text{def}}{=} (E_n - E_1)/\hbar$.

2.2.1 Une interprétation de la relation de bilan détaillé

Considérons un système à deux niveaux (un atome) couplé à un système macroscopique (supposé à l'équilibre thermodynamique) :

$$H = -\frac{\omega_0}{2} \sigma_z + H_{\text{int}} + H_{\text{syst. macro.}} = H_0 + H_{\text{int}} \quad (27)$$

la matrice de Pauli agit dans la base $\{|g\rangle, |e\rangle\}$. Nous notons $\{|\Phi_n\rangle\}$ une base d'états pour le système macroscopique. L'interaction entre les deux systèmes est choisie de façon à induire des transitions entre les états $|g\rangle$ et $|e\rangle$:

$$H_{\text{int}} = -\sigma_x X \quad (28)$$

où X est une observable du système macroscopique.

La référence [46] (on pourra également se reporter au cours de Benoît Douçot, dont est inspirée cette discussion) montre que les taux d'absorption et d'émission d'un système à deux niveaux¹⁴ sont reliés à la fonction de corrélation de l'observable X . Cette remarque fournit un moyen expérimental d'étudier le spectre de bruit non symétrisé de la variable X (par exemple le courant). Nous reprenons ici cette analyse.

Nous étudions les taux d'absorption $\Gamma_{g \rightarrow e}$ et d'émission $\Gamma_{e \rightarrow g}$ du système microscopique. Celui-ci est supposé initialement dans l'état $|\psi(0)\rangle = |\alpha\rangle \otimes |\Phi_n\rangle$, avec $\alpha = g, e$. Nous calculons la probabilité de transition par la méthode des perturbations. À l'ordre le plus bas dans l'interaction on a donc¹⁵ :

$$|\psi(t)\rangle \simeq e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \left(1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \sigma_x(\tau) X(\tau) \right) |\alpha\rangle \otimes |\Phi_n\rangle \quad (29)$$

Il est facile de vérifier que $\sigma_x(t) = \frac{1}{2}(\sigma_+ e^{-i\omega_0 t} + \sigma_- e^{i\omega_0 t})$ où $\sigma_{\pm} \stackrel{\text{def}}{=} \sigma_x \pm i\sigma_y$. L'absorption ($|g\rangle \rightarrow |e\rangle$) fait intervenir l'élément de matrice $\langle e|\sigma_x(t)|g\rangle = e^{i\omega_0 t}$ et l'émission l'élément conjugué. Nous en déduisons la probabilité d'absorption lorsque le système macroscopique est initialement dans l'état $|\Phi_n\rangle$:

$$\mathcal{P}_{\text{abs}}^{(\Phi_n)}(t) = \sum_m |(\langle e| \otimes \langle \Phi_m |) |\psi(t)\rangle|^2 \simeq \frac{1}{\hbar^2} \sum_m \left| \int_0^t d\tau e^{i\omega_0 \tau} \langle \Phi_m | e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} X(\tau) | \Phi_n \rangle \right|^2 \quad (30)$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau d\tau' e^{-i\omega_0(\tau-\tau')} \langle \Phi_n | X(\tau) X(\tau') | \Phi_n \rangle \quad (31)$$

Le système macroscopique étant à l'équilibre thermodynamique, la probabilité d'absorption est donnée par $\mathcal{P}_{\text{abs}}(t) = \sum_n P_n \mathcal{P}_{\text{abs}}^{(\Phi_n)}(t)$ où P_n sont les poids statistiques des occupations des états $|\Phi_n\rangle$. En introduisant la moyenne statistique et quantique $\langle \dots \rangle = \text{Tr} \{ \rho_0 \dots \} = \sum_n P_n \langle \Phi_n | \dots | \Phi_n \rangle$ nous écrivons la probabilité

$$\mathcal{P}_{\text{abs}}(t) \simeq \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau d\tau' e^{-i\omega_0(\tau-\tau')} \langle X(\tau) X(\tau') \rangle \quad (32)$$

¹⁴ le système à deux niveaux de la référence [46] est une boîte à paires de Cooper.

¹⁵ **Opérateur d'évolution.**— L'opérateur d'évolution temporelle, $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$, est solution de l'équation de Schrödinger $i\frac{d}{dt}U(t) = HU(t)$ pour $U(0) = 1$. Lorsque l'hamiltonien a la structure $H = H_0 + H_{\text{int}}$ il est commode d'extraire l'évolution libre : $U(t) = e^{-iH_0 t} \mathcal{U}(t)$. Le nouvel opérateur obéit à l'équation $i\frac{d}{dt}\mathcal{U}(t) = H_I(t)\mathcal{U}(t)$ où $H_I(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{iH_0 t} H_{\text{int}} e^{-iH_0 t}$. La solution s'écrit $U(t) = T \exp -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau H_I(\tau)$, où T désigne le produit chronologique, défini par $T[f(t)g(t')] = \theta(t-t')f(t)g(t') + \theta(t'-t)g(t')f(t)$.

en fonction de la fonction de corrélation *non symétrisée* $C_{XX}(t) \equiv \langle X(t)X(0) \rangle$. En supposant la fonction de corrélation étroite par rapport à l'échelle t , la double intégrale est dominée par le voisinage de la ligne $\tau \sim \tau'$ et l'on peut écrire $\int_0^t d\tau d\tau' \dots \simeq t \int_{-\infty}^{+\infty} d(\tau - \tau') \dots$. Finalement $\mathcal{P}_{\text{abs}}(t) \simeq \frac{t}{\hbar^2} \tilde{C}_{XX}(-\omega_0)$. On introduit le taux d'absorption : $\Gamma_{\text{abs}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{d}{dt} \mathcal{P}_{\text{abs}}(t)$, qui s'exprime finalement comme :

$$\Gamma_{\text{abs}} = \frac{1}{\hbar^2} \tilde{C}_{XX}(-\omega_0). \quad (33)$$

Le calcul du taux d'émission est similaire. L'unique différence avec le calcul précédent est la substitution de l'élément de matrice $\langle e | \sigma_x(t) | g \rangle = e^{i\omega_0 t}$ par $\langle g | \sigma_x(t) | e \rangle = e^{-i\omega_0 t}$, ce qui conduit simplement à changer le signe de la fréquence. Finalement on a

$$\Gamma_{\text{em}} = \frac{1}{\hbar^2} \tilde{C}_{XX}(\omega_0) \quad (34)$$

La condition de bilan détaillé devient donc dans ce contexte :

$$\tilde{C}_{XX}(-\omega_0) = \tilde{C}_{XX}(\omega_0) e^{-\beta \hbar \omega_0} \quad \Leftrightarrow \quad \Gamma_{\text{abs}} = \Gamma_{\text{em}} e^{-\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}}. \quad (35)$$

On se convainc facilement que cette relation entre taux de transition assure l'équilibre canonique : nous écrivons l'équation pilote pour les occupations des deux états $\frac{d}{dt} P_e = -\Gamma_{\text{em}} P_e + \Gamma_{\text{abs}} P_g$ et $\frac{d}{dt} P_g = -\Gamma_{\text{abs}} P_g + \Gamma_{\text{em}} P_e$. Dans le régime stationnaire nous retrouvons bien la distribution canonique de la mécanique statistique $P_e/P_g = \Gamma_{\text{abs}}/\Gamma_{\text{em}} = e^{-\beta \hbar \omega_0}$ (figure 8) ; plus en détail $P_g = \frac{\Gamma_{\text{em}}}{\Gamma_{\text{abs}} + \Gamma_{\text{em}}}$ et $P_e = \frac{\Gamma_{\text{abs}}}{\Gamma_{\text{abs}} + \Gamma_{\text{em}}}$ QED.

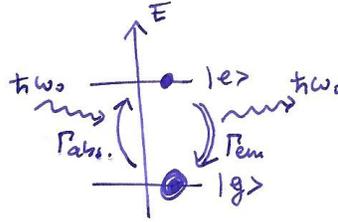


FIGURE 8 : Les échanges d'énergie entre le système microscopique et le système macroscopique (via leur interaction mutuelle) assurent la thermalisation du système microscopique.

Conclusions : nous tirons plusieurs enseignements de cette petite étude :

- Nous venons donc d'étudier un modèle microscopique dans lequel nous avons démontré que l'interaction entre le système microscopique (sur lequel aucune hypothèse n'a été faite) et le système macroscopique (supposé à l'équilibre thermodynamique) assure que les occupations des états quantiques du système *microscopique* coïncident avec la distribution canonique. L'idée que **la thermalisation est assurée par les interactions** est certes une idée qui traverse le cours de physique statistique d'équilibre, cependant elle est rarement démontrée explicitement (surtout au niveau quantique).
- Le bilan détaillé traduit donc le déséquilibre des occupations des états quantiques à l'équilibre thermodynamique.

- Finalement nous concluons que $\tilde{C}_{XX}(\omega < 0)$ est donc associé au processus d'absorption et $\tilde{C}_{XX}(\omega > 0)$ au processus d'émission, *du point de vue du système microscopique*. Ici ce dernier nous a servi de sonde de la fonction de corrélation du système macroscopique. Si l'on oublie le système à deux niveaux et que l'on prend le point de vue du système macroscopique, nous écrirons donc

$$\tilde{C}_{XX}(\omega > 0) \quad : \text{ processus d'absorption} \quad (36)$$

$$\tilde{C}_{XX}(\omega < 0) \quad : \text{ processus d'émission} . \quad (37)$$

2.3 Dissipation

Dissipation.— En écrivant la perturbation sous la forme $H_{\text{pert}}(t) = -f(t)A(t)$, nous voyons que $A(t)$ joue le rôle de « coordonnée » à laquelle se couple la « force » $f(t)$ (cf. § 3.6 pour un cas explicite). La puissance dissipée est donnée par le produit de la « force » par la « vitesse », i.e.

$$\mathcal{P}_{\text{diss}}(t) = f(t) \left\langle \frac{dA(t)}{dt} \right\rangle_f . \quad (38)$$

Pour une excitation harmonique $f(t) = f_\omega \cos \omega t = \text{Re}[f_\omega e^{-i\omega t}]$ la réponse linéaire de A est

$$\langle A(t) \rangle_f \simeq \text{Re} [\tilde{\chi}_{AA}(\omega) f_\omega e^{-i\omega t}] = f_\omega (\tilde{\chi}'_{AA}(\omega) \cos \omega t + \tilde{\chi}''_{AA}(\omega) \sin \omega t) \quad (39)$$

où $\tilde{\chi}_{AA} = \tilde{\chi}'_{AA} + i\tilde{\chi}''_{AA}$.

La puissance dissipée instantanée est donc donnée par : $\mathcal{P}_{\text{diss}}(t) = f_\omega^2 \omega \cos \omega t (-\tilde{\chi}'_{AA} \sin \omega t + \tilde{\chi}''_{AA} \cos \omega t)$. Moyennée sur le temps nous obtenons : $\bar{\mathcal{P}}_{\text{diss}} = \frac{1}{2} \omega f_\omega^2 \tilde{\chi}''_{AA}(\omega)$. **C'est donc la partie imaginaire $\text{Im } \tilde{\chi}_{AA}(\omega)$ qui caractérise la dissipation.**

Exercice 2.7 : La fonction de réponse de l'oscillateur harmonique amorti a été obtenue dans l'exercice 2.4 : $\tilde{\chi}_{xx}(\omega) = \frac{1}{m} \frac{1}{\tilde{\omega}_0^2 - (\omega + \frac{i}{\tau})^2}$ où $\tilde{\omega}_0 = \omega_0^2 - \frac{1}{\tau^2}$. Tracer ses parties réelle et imaginaire. Tracer $\bar{\mathcal{P}}_{\text{diss}} \propto \omega \text{Im } \tilde{\chi}_{xx}(\omega)$.

Admittance : Le calcul de la puissance dissipée $\mathcal{P}_{\text{diss}}(t) = f(t)\langle \dot{A}(t) \rangle$ fait intervenir naturellement la réponse de \dot{A} . La fonction de réponse correspondante est appelée l'*admittance complexe* : $Y(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\chi}_{\dot{A}A}(\omega) = -i\omega \tilde{\chi}_{AA}(\omega)$, reliée à l'impédance par $Y(\omega) = 1/Z(\omega)$.

$$\bar{\mathcal{P}}_{\text{diss}} = \frac{1}{2} \omega f_\omega^2 \text{Im } \tilde{\chi}_{AA}(\omega) = \frac{1}{2} f_\omega^2 \text{Re } Y(\omega) \quad (40)$$

Exemples :

- *La conductance est une admittance.*— Si $A \rightarrow Q$ est la charge électrique, la force conjuguée est alors le potentiel électrique : $\delta E = V\delta Q$. L'admittance caractérise la réponse du courant : $I(\omega) = \dot{Q}(\omega) = Y(\omega)V(\omega)$ (il s'agit de la conductance, notée G). La puissance dissipée est proportionnelle à $\text{Re } Y(\omega) = \text{Re } Z(\omega)/|Z(\omega)|^2$.
- *La conductivité.*— La conductance G d'un fil de longueur L et de section S est reliée à la conductivité par $G = S\sigma/L$. Dans le modèle de Drude on obtient : $\sigma(\omega) = \frac{ne^2\tau}{m} \frac{1}{1-i\omega\tau}$ où τ est le temps de collision des électrons (cf. chapitre 6). C'est bien la partie réelle de la conductivité qui caractérise la dissipation. Nous verrons au chapitre 6 que la partie imaginaire de la conductivité est proportionnelle à la partie réelle de la fonction diélectrique (donc au phénomène de réfraction).

2.4 Causalité et relations de dispersion

La causalité fournit une relation non triviale entre les parties réactive ($\text{Re } \tilde{\chi}_{AA}(\omega)$) et dissipative ($\text{Im } \tilde{\chi}_{AA}(\omega)$) de la fonction de réponse. Dans une expérience, il suffit donc de mesurer l'une pour obtenir l'autre. Par exemple en optique, les parties réelle et imaginaire de l'indice de réfraction complexe $\nu(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega)$ caractérisent respectivement la réfraction et l'absorption du milieu.

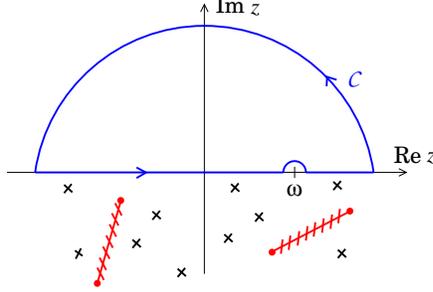


FIGURE 9 : Contour d'intégration pour obtenir l'éq. (42). Les croix représentent les pôles de la fonction $\tilde{\chi}(z)$, et les lignes rayées rouges les coupures.

La fonction de réponse est causale :

$$\boxed{\chi(t) = 0 \quad \text{pour } t < 0} \quad (41)$$

Nous supposons que sa transformée de Fourier est de carré sommable [101] : $\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega |\tilde{\chi}(\omega)|^2 < \infty$. Puisque $\chi(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{\chi}(\omega) e^{-i\omega t}$, tous les pôles et coupures de $\tilde{\chi}(\omega)$ doivent se trouver dans le plan complexe inférieur.¹⁶ Exprimons l'intégrale $\oint_C dz \frac{\tilde{\chi}(z)}{z-\omega}$ sur le contour représenté sur la figure 9, dans la limite où les rayons des demi-cercles extérieur et intérieur tendent respectivement vers l' ∞ et 0. Nous obtenons :

$$\tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\tilde{\chi}(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (42)$$

ce qui montre qu'on passe de la partie imaginaire à la partie réelle par une transformation de Hilbert :

$$\text{Re } \tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\text{Im } \tilde{\chi}(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (43)$$

$$\text{Im } \tilde{\chi}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\text{Re } \tilde{\chi}(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (44)$$

Ces relations de dispersion sont appelées **relations de Kramers-Kronig** (ou formules de Plemelj) :

Rqs. :

¹⁶ Démonstration : montrons que $\tilde{\chi}(z) = \int_0^\infty dt \chi(t) e^{+izt}$ est analytique dans le plan complexe supérieur. Pour cela nous souhaitons vérifier que $\partial \tilde{\chi}(z) / \partial z^* = 0$. La permutation entre dérivation et intégrale n'est permise que si l'intégrand et sa dérivée partielle sont bornés par une fonction sommable indépendante de z (théorème de convergence dominée). Or $|\chi(t)e^{+izt}| = |\chi(t)|e^{-t\text{Im}(z)} \leq |\chi(t)|$ pour $\text{Im}(z) \geq 0$. La permutation de $\partial / \partial z^*$ et $\int dt$ n'est donc autorisée que si $\text{Im}(z) \geq 0$; dans ce cas $\partial \tilde{\chi}(z) / \partial z^* = \int_0^\infty dt \chi(t) \partial e^{+izt} / \partial z^* = 0$ puisque la fonction exponentielle est analytique. QED.



FIGURE 10 : *Hendrik Anthony Kramers (1894-1952) & Ralph de Laer Kronig (1904-1995).*

- *Soustractions.* – Il peut arriver que la fonction $\tilde{\chi}(\omega)$ ne soit pas de carré sommable. Dans ce cas, étant donné $\text{Im } \tilde{\chi}(\omega)$, la causalité ne suffit pas à déterminer $\text{Re } \tilde{\chi}(\omega)$. Il est toutefois possible de trouver des relations de dispersion analogues aux formules de Plemelj en procédant à des soustractions [101]. Par exemple, si l'on considère une fonction $\tilde{\chi}(\omega)$ qui reste bornée à l'infini $|\tilde{\chi}(\infty)| < \infty$, une seule soustraction est suffisante. Cela consiste à appliquer la logique précédente à la fonction $\frac{\tilde{\chi}(\omega) - \tilde{\chi}(\omega_0)}{\omega - \omega_0}$ (qui est de carré sommable). On obtient :

$$\tilde{\chi}(\omega) = \tilde{\chi}(\omega_0) + \frac{\omega - \omega_0}{i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\tilde{\chi}(\omega') - \tilde{\chi}(\omega_0)}{\omega' - \omega_0} \frac{1}{\omega' - \omega} \quad (45)$$

où ω_0 est choisi arbitrairement (par exemple $\omega_0 = \infty$ simplifie la relation).

- En optique la causalité doit être formulée comme : “l’effet de la perturbation se propage moins vite que c ”, i.e. la fonction de réponse causale n’est non nulle qu’à l’intérieur du cône de lumière.
- Le cas de l’indice d’un milieu $\nu(\omega) = n(\omega) + i\kappa(\omega)$ entre dans le cadre des deux remarques précédentes. Puisque les milieux deviennent transparents aux hautes fréquences, l’indice devient $\nu(\omega \rightarrow \infty) = 1$. Introduisons la notation $\kappa(\omega) = c\beta(\omega)/2\omega$. La relation de Kramers-Kronig $n(\omega) - 1 = \frac{c}{\pi} \int_0^{+\infty} d\omega' \frac{\beta(\omega')}{\omega'^2 - \omega^2}$ (R. de L. Kronig, 1926 & H. A. Kramers, 1927) entre indice de réfraction et coefficient d’extinction est la première relation de dispersion connue [101]. Par extension les relations de Plemelj sont dénommées relations de Kramers-Kronig par les physiciens.

☞ **Exercice 2.8** : On donne $\text{Im } \tilde{\chi}(\omega) = \frac{-1}{1+\omega^2}$, montrer que $\tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{\omega+i}$ à l’aide des relations de Kramers-Kronig.

De même, sachant que $\text{Im } \tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{1/\tau^2 + (\omega - \omega_0)^2}$, trouver $\tilde{\chi}(\omega)$.

☺ Les idées importantes :

- $x(t)$ un processus stationnaire corrélé à courte portée. Le spectre de bruit est la TF de la fonction d’autocorrélation (Wiener-Khintchine) : $\langle \tilde{x}_\omega \tilde{x}_{\omega'} \rangle \propto \delta_{\omega, -\omega'}$ et $\langle |\tilde{x}_\omega|^2 \rangle \sim \tilde{C}_{xx}(\omega)$.
- $\text{Im } \tilde{\chi}_{AA}(\omega)$ (ou $\text{Re } Y(\omega)$ avec $Y(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\chi}_{AA}(\omega)$) caractérise la dissipation.
- Les pôles de la fonction de réponse $\tilde{\chi}(\omega)$ sont dans le demi-plan complexe inférieur, conséquence de la causalité.
- Le 0^+ au dénominateur $\frac{1}{\omega - \omega_0 + i0^+}$ ne doit pas être négligé : en éloignant la singularité de l’axe réel il assure la causalité. Il peut s’interpréter physiquement comme un taux de relaxation infinitésimal $1/\tau \leftrightarrow 0^+$.

3 Réponse linéaire

Dans le chapitre précédent nous avons étudié plusieurs fonctions de corrélation. D'autre part nous avons défini la fonction de réponse, discuté les conséquences de la causalité et identifié la partie dissipative. Toutefois nous n'avons pas encore établi le lien entre fonction de réponse et fonction de corrélation. Nous allons maintenant identifier laquelle des différentes fonctions de corrélation caractérise la réponse.

3.1 Parenthèse : la réponse linéaire statique (isotherme)

Ce paragraphe est légèrement hors sujet puisqu'il discute de physique statistique **d'équilibre** et montre comment sont modifiées les propriétés des états d'équilibre lorsqu'on varie un paramètre. Cela constituera toutefois une bonne introduction pour comprendre la méthode perturbative et se raccrocher à des résultats connus. Par exemple la relation bien connue¹⁷ $C_V = \frac{1}{k_B T^2} \text{Var}(E)$ montre que la réponse de l'énergie à une élévation de température, encodée dans la chaleur spécifique, est reliée aux fluctuations d'énergie. Un autre exemple sera discuté plus bas : dans une situation grand canonique où le nombre de particules fluctue, les fluctuations relatives de celui-ci sont proportionnelles à la compressibilité $\frac{\text{Var}(N)}{\langle N \rangle} = nk_B T \kappa_T$, où n est la densité, cf. (101,105).

Considérons une modification **statique** de l'hamiltonien $H = H_0 - fA$. Calculons $\langle B \rangle_f = \text{Tr} \{ e^{-\beta H} B \} / Z$ où $Z = \text{Tr} \{ e^{-\beta H} \}$. Pour cela on utilise la relation suivante.

Formule de Duhamel.– Soit $H = H_0 + V$, on a¹⁸

$$\boxed{e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} - \int_0^\beta d\lambda e^{-(\beta-\lambda)H_0} V e^{-\lambda H}} \quad (46)$$

Cette formule permet un développement perturbatif de ρ (ou plus généralement du propagateur $\langle x | e^{-\beta H} | x' \rangle$) en puissances de V .

La fonction de partition est donnée par $Z = Z_0 [1 + \beta f \langle A \rangle + O(f^2)]$, ce qui correspond à un développement de l'énergie libre $F = F_0 - f \langle A \rangle + O(f^2)$. De même :

$$\text{Tr} \{ e^{-\beta H} B \} = Z_0 \left[\langle B \rangle + f \int_0^\beta d\lambda \langle A(-i\hbar\lambda) B \rangle + O(f^2) \right] \quad (47)$$

où $A(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{iH_0 t/\hbar} A e^{-iH_0 t/\hbar}$ désigne l'opérateur en représentation d'interaction. Finalement : $\langle B \rangle_f = \langle B \rangle + \chi_{BA}^{\text{statique}} f + O(f^2)$ où la fonction de réponse statique est donnée par

$$\chi_{BA}^{\text{statique}} = \int_0^\beta d\lambda [\langle A(-i\hbar\lambda) B \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle] \quad (48)$$

Lorsque $\langle A \rangle \langle B \rangle = 0$ on a

$$\chi_{BA}^{\text{statique}} = \beta K_{BA}(t=0) \quad (49)$$

(en général $\chi_{BA}^{\text{statique}} = \beta K_{B-\langle B \rangle, A-\langle A \rangle}(t=0)$).

¹⁷ $C_V \stackrel{\text{def}}{=} \left(\frac{\partial E}{\partial T} \right)_{V,N}$. L'énergie moyenne est calculée dans l'ensemble canonique (dont les variables naturelles sont T, V, N) : on rappelle que $\ln Z$ est la fonction génératrice des cumulants de l'énergie, $\langle E \rangle = (-\partial_\beta) \ln Z$, $\text{Var}(E) = \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = (-\partial_\beta)^2 \ln Z = k_B T^2 \frac{\partial}{\partial T} \langle E \rangle$. QED. D'autre part en utilisant $F = \langle E \rangle - TS$ et $S = -\frac{\partial F}{\partial T}$ on obtient $C_V = T \frac{\partial S}{\partial T} = -\frac{\partial^2 F}{\partial T^2}$.

¹⁸ Dém. : $G(\beta) = e^{-\beta H}$ obéit à l'équation $\partial_\beta G(\beta) = -HG(\beta)$ qu'on écrit $\partial_\beta G(\beta) + H_0 G(\beta) = -VG(\beta) \equiv F(\beta)$ dont l'intégration conduit à $G(\beta) = e^{-\beta H_0} + \int_0^\beta d\lambda e^{-(\beta-\lambda)H_0} F(\lambda)$, i.e. l'équation (46).

La fonction de réponse $\chi_{BA}^{\text{statique}}$ est également appelée *fonction de réponse isotherme* [89] puisqu'elle décrit une situation où le système est maintenu à une température T par le thermostat ¹⁹. Elle décrira également des situations où la force varie lentement dans le temps, sur des échelles de temps plus grandes que tous les autres temps du problème (temps de relaxation, de thermalisation,...) La situation inverse doit être décrite par une fonction de réponse dynamique $\chi_{BA}(t)$.



Ryogo Kubo, 久保亮五 (1920-1995).

FIGURE 11 :

3.2 Calcul de la fonction de réponse dynamique $\chi_{BA}(t)$

Nous allons maintenant déterminer l'évolution de la moyenne de l'observable $\langle B(t) \rangle_f = \text{Tr}\{\rho(t)B\}$ où la matrice densité encode l'information statistique et la dynamique, i.e. obéit à l'équation de von Neumann (ou Liouville)

$$\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{i}{\hbar} [\rho(t), H(t)] \quad \text{avec } H(t) = H_0 + H_{\text{pert}}(t) \quad (50)$$

pour $H_{\text{pert}}(t) = -f(t)A$. Nous allons mener cette analyse en développant une théorie de perturbation dans la force extérieure.

Représentation d'interaction.— Lorsqu'on développe une théorie de perturbation pour un problème dépendant du temps, il est naturel de commencer par « extraire » l'évolution libre en introduisant

$$\tilde{\rho}(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{iH_0 t/\hbar} \rho(t) e^{-iH_0 t/\hbar} \quad (51)$$

Ce faisant on reporte une partie de l'interaction sur les opérateurs (l'évolution libre) alors que les fonctions d'onde, ou plutôt la matrice densité, caractérise l'effet de la perturbation sur l'évolution. Ce point de vue intermédiaire entre les points de vue de Schrödinger (toute l'évolution est dans $\rho(t)$) et de Heisenberg (toute l'évolution est dans les observables) est appelée la *représentation d'interaction* :

$$\langle B(t) \rangle_f = \overbrace{\text{Tr}\{\rho(t) B\}}^{\text{représ. de Schröd.}} = \overbrace{\text{Tr}\{\tilde{\rho}(t) B(t)\}}^{\text{représ. d'inter.}} \quad \text{avec } B(t) = e^{iH_0 t/\hbar} B e^{-iH_0 t/\hbar}. \quad (52)$$

Nous obtenons facilement l'équation différentielle satisfaite par la matrice densité transformée :

$$\frac{d}{dt}\tilde{\rho}(t) = \frac{i}{\hbar} [\tilde{\rho}(t), H_I(t)] \quad (53)$$

où

$$H_I(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{iH_0 t/\hbar} H_{\text{pert}}(t) e^{-iH_0 t/\hbar} = -f(t)A(t) \quad (54)$$

désigne la perturbation en représentation dite “*d'interaction*”.

¹⁹ On peut également construire une fonction de réponse adiabatique décrivant la réponse du système isolé [89].

Analyse perturbative.— L'équation (53) est maintenant parfaitement adaptée à la recherche de la solution sous la forme d'un développement en puissances de la perturbation $\rho(t) = \rho^{(0)}(t) + \rho^{(1)}(t) + \rho^{(2)}(t) + \dots$ où $\rho^{(n)}(t) = O(f^n)$. Nous déduisons immédiatement la récurrence

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}^{(n)}(t) = \frac{i}{\hbar} [\tilde{\rho}^{(n-1)}(t), H_I(t)] \quad (55)$$

que nous résolvons en supposant que le système est initialement à l'équilibre thermodynamique : $\rho(-\infty) = \rho_0$ (c'est le cas si $f(-\infty) = 0$). Les conditions aux limites sont donc : $\rho^{(n)}(-\infty) = \rho_0 \delta_{n,0}$, ce qui conduit à

$$\tilde{\rho}^{(n)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' f(t') [\tilde{\rho}^{(n-1)}(t'), A(t')] . \quad (56)$$

Finalement, si l'on se limite au premier ordre, nous obtenons

$$\tilde{\rho}(t) = \rho_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' f(t') [\rho_0, A(t')] + O(f^2) , \quad (57)$$

qui permet de calculer $\langle B(t) \rangle_f = \text{Tr} \{ \tilde{\rho}(t) B(t) \}$. En remarquant que $\text{Tr} \{ [A, B] C \} = \text{Tr} \{ A [B, C] \}$, on aboutit au résultat central du cours :

$$\boxed{\begin{array}{c} \text{causalité} \\ \underbrace{\chi_{BA}(t)}_{\text{réponse}} = \frac{i}{\hbar} \overbrace{\theta(t)}^{\text{causalité}} \underbrace{\langle [B(t), A] \rangle}_{\text{corrélation à l'équil.}} \end{array}} = 2i\theta(t) \xi_{BA}(t) = \theta(t) \beta K_{B\dot{A}}(t) \quad (58)$$

Nous venons donc d'identifier laquelle des fonctions de corrélation est reliée à la fonction de réponse. Insistons : cette fonction de réponse *dynamique*, coïncidant avec une fonction de corrélation *d'équilibre*, caractérise la façon dont le système réagit lorsqu'il est soumis à une perturbation extérieure, *i.e.* lorsqu'il est mis dans une situation (*faiblement*) hors équilibre.

Remarque : S'il est possible, le calcul de l'opérateur en représentation d'interaction permettra de déduire rapidement la fonction de corrélation.

✎ **Exercice 3.1 :** Réponse non linéaire.— On s'intéresse à la première nonlinéarité de la réponse. En poursuivant le développement comme

$$\langle B(t) \rangle_f \stackrel{\text{def}}{=} \langle B \rangle + \int dt' \chi_{BA}(t, t') f(t') + \int dt' dt'' \chi_{BAA}(t, t', t'') f(t') f(t'') + O(f^3) , \quad (59)$$

montrer que la non linéarité d'ordre deux est donnée par

$$\chi_{BAA}(t, t', t'') = \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \theta(t-t') \theta(t'-t'') \langle [[B(t), A(t')], A(t'')] \rangle . \quad (60)$$

Formule de Kubo : La relation $\chi_{BA}(t) = \theta(t) \beta K_{B\dot{A}}(t)$ porte le nom de "formule de Kubo" [89].²⁰

Représentation de Lehman : La représentation spectrale de la fonction de réponse fréquentielle est donnée par :

$$\tilde{\chi}_{BA}(\omega) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n,m} (P_n - P_m) B_{nm} A_{mn} \frac{1}{\omega + \omega_{nm} + i0^+} \quad (61)$$

²⁰ On parle également de formule de Kubo pour désigner plus spécifiquement l'expression de la conductivité exprimée comme une fonction de corrélation courant-courant (chapitre 6).

La fonction de réponse fréquentielle peut également être exprimée à l'aide de la fonction spectrale :

$$\tilde{\chi}_{BA}(\omega) = - \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\tilde{\xi}_{BA}(\omega')}{\omega - \omega' + i0^+} = \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\tilde{\xi}_{BA}(\omega')}{\omega' - \omega} + i\tilde{\xi}_{BA}(\omega) \quad (62)$$

Dans le cas particulier $B = A$, nous pouvons identifier les deux termes comme $\text{Re} [\tilde{\chi}_{AA}(\omega)]$ et $\text{Im} [\tilde{\chi}_{AA}(\omega)]$, i.e. l'équation précédente n'est qu'une expression de la relation de Kramers-Kronig entre partie réelle et partie imaginaire de la TF d'une fonction causale.

Prolongement analytique. – Notons que la représentation spectrale $\hat{\chi}_{BA}(z) \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{\hbar} \sum_{n,m} (P_n - P_m) \frac{B_{nm} A_{mn}}{z + \omega_{nm}}$ nous permet de prolonger analytiquement la fonction dans tout le plan complexe (alors que l'éq. (15) laissait penser que la TF est définie pour $\text{Im } \omega > 0$). Avec cette définition $\tilde{\chi}_{BA}(\omega) = \hat{\chi}_{BA}(\omega + i0^+)$ et la fonction spectrale est donnée par la discontinuité de part et d'autre de l'axe réel : $\xi_{BA}(\omega) = \frac{1}{2i} [\hat{\chi}_{BA}(\omega + i0^+) - \hat{\chi}_{BA}(\omega - i0^+)]$.

Relation entre $\chi_{BA}^{\text{statique}}$ et $\chi_{BA}(t)$. – On a

$$\tilde{\chi}_{BA}(\omega = 0) = \int_0^\infty dt \beta K_{BA}(t) = \beta [K_{BA}(t=0) - K_{BA}(t=\infty)] \quad (63)$$

Lorsque $K_{BA}(\infty) = 0$ on vérifie bien que $\chi_{BA}^{\text{statique}} = \tilde{\chi}_{BA}(\omega = 0)$.

Exercice 3.2 : Fonction de réponse d'un système de particules identiques (**Important**). – Soient A et B deux observables, sommes d'opérateurs à un corps : $A = \sum_i a^{(i)}$ et $B = \sum_i b^{(i)}$. On note $\{|\varphi_\alpha\rangle\}$ une base d'états propres de l'hamiltonien pour une particule et $f_\alpha \equiv f(\epsilon_\alpha) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\alpha - \mu)} \mp 1}$ la fonction de Bose-Einstein/Fermi-Dirac (ϵ_α est la valeur propre de l'énergie associée à $|\varphi_\alpha\rangle$).

Montrer que

$$\langle [B, A] \rangle = \text{Tr}\{\rho_0 [A, B]\} = \text{tr}\{f(h)[b, a]\} \quad (64)$$

où $\langle \dots \rangle = \text{Tr}\{\rho_0 \dots\}$ est la moyenne grand-canonique ; $\text{Tr}\{\dots\}$ désigne la trace dans l'espace de Fock et $\text{tr}\{\dots\}$ la trace dans l'espace de Hilbert d'une particule. En déduire que

$$\tilde{\chi}_{BA}(\omega) = - \sum_{\alpha, \beta} (f_\alpha - f_\beta) \frac{b_{\alpha\beta} a_{\beta\alpha}}{\hbar\omega + \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta + i0^+} \quad (65)$$

où $a_{\alpha\beta} \stackrel{\text{def}}{=} \langle \varphi_\alpha | a | \varphi_\beta \rangle$ est l'élément de matrice à un corps.

Indications : La première étape consiste à écrire les opérateurs en seconde quantification $A = \sum_{\alpha, \beta} a_{\alpha\beta} c_\alpha^\dagger c_\beta$.

On pourra utiliser les relations utiles pour les moyennes statistiques de produits d'opérateurs création-annihilation :

$$\langle c_\alpha^\dagger c_\beta \rangle = \delta_{\alpha\beta} f_\alpha \quad (66)$$

$$\langle c_\alpha^\dagger c_\beta c_\mu^\dagger c_\nu \rangle = \delta_{\alpha\beta} \delta_{\mu\nu} f_\alpha f_\mu + \delta_{\alpha\nu} \delta_{\beta\mu} f_\alpha (1 \pm f_\mu) \quad (67)$$

(+ pour des bosons et – pour des fermions).

On pourra plus directement utiliser

$$[AB, CD] = A[B, C]_{\mp} D \pm [A, C]_{\mp} BD + CA[B, D]_{\mp} \pm C[A, D]_{\mp} B \quad (68)$$

où $[\cdot, \cdot]_{-} \equiv [\cdot, \cdot]$ désigne le commutateur et $[\cdot, \cdot]_{+} \equiv \{\cdot, \cdot\}$ l'anti-commutateur.

En pratique, cette représentation est beaucoup plus utile que la représentation de Lehman (61). Dans la situation typique d'un système à N corps (macroscopique), la manipulation des états propres de l'hamiltonien à N corps est plus compliquée que celle des états individuels. Une illustration concrète sera donnée au début du chapitre suivant (exercice 4.5 page 39).

3.3 Relaxation

L'expérience de relaxation correspond à un choix particulier de force excitatrice : $f(t) = f_0 \theta(-t)$. En utilisant (58) et en supposant que²¹ $K_{BA}(\infty) = 0$ on obtient :

$$\langle B(t) \rangle_f \simeq \langle B \rangle + f_0 \beta K_{BA}(t) \quad \text{pour } t > 0 \quad (69)$$

D'après le § sur la réponse statique, pour $t < 0$ on a $\langle B(t) \rangle_f \simeq \langle B \rangle + f_0 \chi_{BA}^{\text{statique}}$. L'expression (49) assure bien la continuité à $t = 0$.

Comme nous l'avons vu en introduisant la fonction de corrélation canonique de Kubo et en jouant avec les représentations spectrales des diverses fonctions de corrélation la relaxation est reliée à la fonction spectrale par l'éq. (21). L'égalité de la fonction de réponse avec le membre de droite de l'éq. (58), s'interprète physiquement comme une relation entre réponse et relaxation :

$$\underbrace{\chi_{BA}(t)}_{\text{réponse}} = -\theta(t) \beta \frac{d}{dt} \underbrace{K_{BA}(t)}_{\text{relaxation}} . \quad (70)$$

3.4 Forme généralisée du théorème fluctuation-dissipation

Le système est soumis à la force perturbatrice $f(t)$ qui apporte un travail de l'extérieur. Ce surplus d'énergie injecté dans le système est évacué dans le thermostat qui maintient la température constante.

Rappelons un résultat important du chapitre précédent : pour une perturbation harmonique $f_\omega \cos \omega t$, la puissance dissipée $\bar{\mathcal{P}}_{\text{diss}} = \frac{1}{2} f_\omega^2 \text{Re} [Y(\omega)]$ est proportionnelle à la partie imaginaire de la fonction de réponse $\text{Im} \tilde{\chi}_{AA}(\omega)$. Un des résultats centraux, Eq. (58), nous permet d'identifier cette partie dissipative de la réponse à la fonction spectrale :

$$\boxed{\bar{\mathcal{P}}_{\text{diss}} = \frac{1}{2} \omega f_\omega^2 \text{Im} \tilde{\chi}_{AA}(\omega) = \frac{1}{2} \omega f_\omega^2 \tilde{\xi}_{AA}(\omega) = \frac{1}{2} f_\omega^2 \text{Re} Y(\omega)} \quad (71)$$

où $Y(\omega) = \tilde{\chi}_{\dot{A}A}(\omega) = -i\omega \tilde{\chi}_{AA}(\omega)$ désigne l'admittance. Montrons maintenant que la fonction spectrale peut être reliée aux autres fonctions de corrélation. Pour cela nous partons de la représentation spectrale (20) et utilisons que $P_m = P_n e^{\beta(E_n - E_m)}$. Le Dirac $\delta(\omega + \omega_{nm})$ nous permet d'extraire le facteur exponentiel de la somme, $(1 - e^{\beta\hbar\omega_{nm}}) \rightarrow (1 - e^{-\beta\hbar\omega})$, et nous obtenons

$$\boxed{\tilde{C}_{BA}(\omega) = \frac{2\hbar}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \tilde{\xi}_{BA}(\omega)} \quad (72)$$

Nous pouvons comprendre le sens physique de cette relation en considérant le cas de l'auto-corrélation ($B = A$ ou $B = A^\dagger$ dans le cas d'un opérateur non hermitique) :

$$\underbrace{\tilde{C}_{AA}(\omega)}_{\text{fluctuation}} = \frac{2\hbar}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \underbrace{\tilde{\xi}_{AA}(\omega)}_{\text{dissipation}} = \frac{2\hbar}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \text{Im} [\tilde{\chi}_{AA}(\omega)] . \quad (73)$$

La relation (72) est donc la forme généralisée du théorème de fluctuation-dissipation.

✎ **Exercice 3.3** : À partir des représentations spectrales (19,20,23), vérifier que le théorème fluctuation-dissipation pour les autres fonctions de corrélation prend la forme :

$$\tilde{S}_{BA}(\omega) = \hbar \coth \frac{\beta\hbar\omega}{2} \tilde{\xi}_{BA}(\omega) \quad (74)$$

$$\tilde{K}_{BA}(\omega) = \frac{2}{\beta\omega} \tilde{\xi}_{BA}(\omega) \quad (75)$$

²¹ L'intégration donne $\langle B(t) \rangle_f \simeq \langle B \rangle + f_0 \beta [K_{BA}(t) - K_{BA}(\infty)]$.

Cette démonstration de la version généralisée du théorème fluctuation-dissipation, reposant sur les représentations spectrales et étant particulièrement peu physique, nous reviendrons sur ces relations au §.5.3 qui proposera une approche plus physique.

Toutes les fonctions de corrélation s'expriment à l'aide de $\tilde{\xi}_{BA}(\omega)$.— Nous avons introduit plusieurs fonctions de corrélation et fonctions de réponse, toutefois celles-ci sont toutes reliées par deux contraintes : $\tilde{\chi}_{BA}(\omega)$ est liée à la fonction spectrale par un des résultats centraux du cours, éq. (58), i.e. via la causalité, éq. (62). Le théorème fluctuation-dissipation, éqs. (74,75), connecte $\tilde{C}_{BA}(\omega)$, $\tilde{S}_{BA}(\omega)$ et $\tilde{K}_{BA}(\omega)$ à la fonction spectrale.

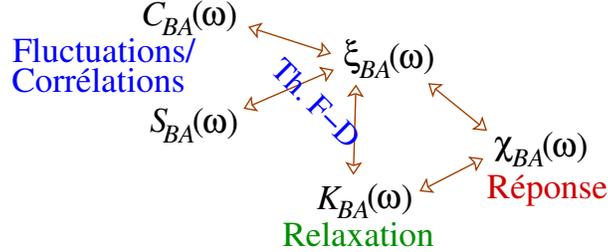


FIGURE 12 : Relation entre les différentes fonctions de corrélation/réponse.

3.5 La limite classique

À la limite classique ($\hbar \rightarrow 0$) la situation se simplifie considérablement puisque les fonctions de corrélation coïncident : $S_{BA}^{\text{class}}(t) = K_{BA}^{\text{class}}(t) = C_{BA}^{\text{class}}(t) = \langle B(t) A \rangle$. En utilisant la relation (70) entre la fonction de corrélation canonique de Kubo et la fonction de réponse on obtient :

$$\chi_{BA}^{\text{class}}(t) = -\beta\theta(t) \frac{d}{dt} C_{BA}^{\text{class}}(t) \quad (76)$$

ce qui était également donné par l'éq. (25). C'est donc une forme « temporelle » du théorème fluctuation-dissipation ; dans l'espace de Fourier on retrouve la relation déjà rencontrée $\tilde{C}_{BA}^{\text{class}}(\omega) = \frac{2k_B T}{\omega} \tilde{\zeta}_{BA}^{\text{class}}(\omega)$.

3.6 Fonctions de corrélation et fonction de réponse de l'oscillateur harmonique

À titre d'illustration nous considérons un oscillateur harmonique décrit par $H_0 = \frac{1}{2m}p^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2 x^2$ et supposé thermalisé. Une force extérieure se couple à l'oscillateur : $H_{\text{pert}}(t) = -f(t)x$. Nous calculons les diverses fonctions de corrélation. L'importance de ce cas tient à ce que l'analyse de l'oscillateur harmonique est un problème transversal en physique. Les calculs sont très simples puisque les opérateurs en représentation d'interaction peuvent facilement être calculés ²² : $a(t) = a(0) e^{-i\omega_0 t}$, d'où

$$x(t) = \sqrt{\frac{\hbar}{2m\omega_0}} \left(a e^{-i\omega_0 t} + a^\dagger e^{i\omega_0 t} \right) \quad (77)$$

- La fonction de corrélation non symétrisée est donnée par :

$$C_{xx}(t) = \frac{\hbar}{m\omega_0} \left(\bar{n} \cos \omega_0 t + \frac{1}{2} e^{-i\omega_0 t} \right) \quad (78)$$

²² Pour cela résolvons : $\frac{d}{dt} a(t) = \frac{i}{\hbar} [H_0, a(t)] = -i\omega_0 a(t)$.

où $\bar{n} = \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega_0} - 1}$. Notons que le second terme indépendant de la température correspond à la contribution du fondamental. À la limite classique ($\hbar \rightarrow 0$) $C_{xx}^{\text{class}}(t) = \frac{1}{\beta m \omega_0^2} \cos \omega_0 t$, dont la valeur à $t = 0$ redonne le théorème d'équipartition : $\frac{1}{2} m \omega_0^2 C_{xx}^{\text{class}}(0) = \frac{1}{2} k_B T$.

On vérifie facilement que la TF

$$\tilde{C}_{xx}(\omega) = \frac{\pi \hbar}{m \omega_0} \left[\underbrace{(\bar{n} + 1) \delta(\omega - \omega_0)}_{\text{absorption}} + \underbrace{\bar{n} \delta(\omega + \omega_0)}_{\text{émission}} \right] \quad (79)$$

satisfait le bilan détaillé (18). Remarquons que les poids des termes associés à l'absorption et à l'émission diffèrent par la contribution du fondamental, ce que nous attribuons facilement au fait que celui-ci ne peut pas émettre d'énergie.

• La fonction de corrélation canonique de Kubo se calcule aisément :

$$K_{xx}(t) = \frac{\cos \omega_0 t}{\beta m \omega_0^2} \quad (80)$$

Sa transformée de Fourier est : $\tilde{K}_{xx}(\omega) = \frac{\pi}{\beta m \omega_0^2} [\delta(\omega - \omega_0) + \delta(\omega + \omega_0)]$.

• On en déduit la fonction de réponse statique : $\chi_{xx}^{\text{statique}} = 1/m\omega_0^2$, qui correspond au déplacement du minimum du potentiel en présence de la force : $\frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2 - fx = \frac{1}{2} m \omega_0^2 (x - \frac{1}{m\omega_0^2} f)^2 + O(f^2)$.

• La fonction spectrale et la fonction de réponse se déduisent de $K_{x\dot{x}}(t) = -\frac{d}{dt} K_{xx}(t)$ ou se calculent directement en utilisant l'éq. (77) :

$$\xi_{xx}(t) = \frac{\sin \omega_0 t}{2im\omega_0} \quad \text{et} \quad \boxed{\chi_{xx}(t) = \theta(t) \frac{\sin \omega_0 t}{m\omega_0}} \quad (81)$$

Notons que $\tilde{\chi}_{xx}(\omega = 0) = \chi_{xx}^{\text{statique}}$ bien que $K_{xx}(\infty) \neq 0$.

Les transformées de Fourier sont données par :

$$\tilde{\xi}_{xx}(\omega) = \frac{\pi}{2m\omega_0} \left[\underbrace{\delta(\omega - \omega_0)}_{\text{absorption}} - \underbrace{\delta(\omega + \omega_0)}_{\text{émission}} \right] \quad \text{et} \quad \boxed{\tilde{\chi}_{xx}(\omega) = \frac{1}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - (\omega + i0^+)^2}} \quad (82)$$

La différence de signe des deux termes de la fonction spectrale est liée à leur interprétation physique; notons toutefois que $\bar{\mathcal{P}}_{\text{diss}} \propto \omega \tilde{\xi}_{xx}(\omega) > 0$. Les parties réelle et imaginaire de la fonction de réponse sont tracées sur la figure 35 (page 65) pour un taux de relaxation fini ($0^+ \rightarrow \gamma$).

FDT : On vérifie facilement la relation entre la fonction spectrale et $\tilde{K}_{xx}(\omega)$, éq. (75). En remarquant que $1 + \coth(\beta\hbar\omega_0/2) = 2(\bar{n} + 1)$ et $1 - \coth(\beta\hbar\omega_0/2) = -2\bar{n}$ on vérifie la formulation du théorème fluctuation-dissipation démontrée dans l'exercice 3.3 (page 25).

On remarque que $K_{xx}(t)$ et $\chi_{xx}(t)$ ne dépendent pas de \hbar . Elles coïncident précisément avec le résultat classique : $K_{xx}(t) = K_{xx}^{\text{class}}(t) = C_{xx}^{\text{class}}(t)$ et $\chi_{xx}(t) = -\theta(t) \beta \frac{d}{dt} C_{xx}^{\text{class}}(t)$. Pour comprendre cette remarque, nous pouvons revenir aux équations pour les opérateurs en *représentation de Heisenberg* : $\dot{x}_H(t) = \frac{1}{m} p_H(t)$ et $\dot{p}_H(t) = -m\omega_0^2 x_H(t) + f(t)$. La linéarité des équations assure que $\langle x_H(t) \rangle$ et $\langle p_H(t) \rangle$ obéissent aux équations du mouvement classiques dont la solution est :

$$\langle x_H(t) \rangle = \langle x(t) \rangle + \int dt' \chi_{xx}^{\text{class}}(t - t') f(t') \quad (83)$$

Le résultat montre en outre que la réponse est *purement linéaire* : $O(f^2) = 0$ (ce qui est propre à l'oscillateur harmonique).

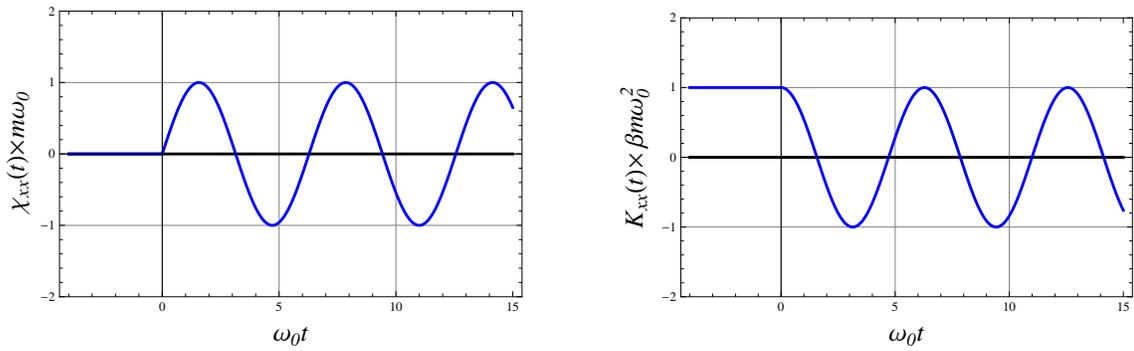


FIGURE 13 : À gauche : Fonction de réponse de l'oscillateur harmonique non amorti : à $t = 0$ l'oscillateur est forcé par une impulsion $f(t) \propto \delta(t)$; la réponse est $\langle x(t) \rangle_f - \langle x \rangle_{\text{eq.}} \propto \chi_{xx}(t)$. À droite : Relaxation. – L'oscillateur est écarté de son équilibre, puis il est relâché à $t = 0$. On a $\langle x(t) \rangle_f - \langle x \rangle_{\text{eq.}} \propto K_{xx}(t)$

Exercice 3.4 : Atome, forces d'oscillateur et règle de somme de Thomas-Reich-Kuhn. – Considérons un atome soumis à une onde électromagnétique : $H_{\text{pert}}(t) = -\vec{\mathcal{E}}(\vec{r} = 0, t) \cdot \vec{r}$ (approximation dipolaire électrique). Si $\vec{\mathcal{E}}(0, t) = \mathcal{E}(t)\vec{u}_z$ la polarisation de l'atome est caractérisée par la fonction de réponse $\chi_{zz}(t)$ où la moyenne est calculée dans l'état fondamental $\langle \dots \rangle = \langle \phi_0 | \dots | \phi_0 \rangle$. Nous avons montré plus haut que $\chi_{zz}(t) = \frac{2}{\hbar} \theta(t) \sum_n \sin \omega_{n0} t |\langle \phi_0 | z | \phi_n \rangle|^2$ où $\omega_{n0} = (E_n - E_0)/\hbar$. On introduit les forces d'oscillateurs $f_{n0} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2m\omega_{n0}}{\hbar} |\langle \phi_n | z | \phi_0 \rangle|^2$:

$$\chi_{zz}(t) = \theta(t) \sum_n f_{n0} \frac{\sin \omega_{n0} t}{m\omega_{n0}} \quad (84)$$

Que valent les f_{n0} pour l'oscillateur harmonique ? Démontrez²³ la règle de somme de Thomas-Reich-Kuhn $\sum_n f_{n0} = 1$. En déduire le comportement de $\chi_{zz}(t)$ aux temps courts ($\omega_{n0} t \ll 1$). Retrouver ce résultat plus directement à partir de la définition de $\chi_{zz}(t)$.

☺ Les idées importantes :

- Répétons un résultat central : lorsque le système est mis faiblement hors équilibre, $H_{\text{pert}}(t) = -A f(t)$, la réponse de B , définie par $\langle B(t) \rangle_f = \langle B \rangle + \int dt' \chi_{BA}(t-t') f(t') + O(f^2)$, est caractérisée par une **fonction de corrélation d'équilibre** :

$$\chi_{BA}(t) = \frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [B(t), A] \rangle.$$

- Le théorème fluctuation-dissipation (FDT).
- Toutes les fonctions de corrélation sont reliées entre elle (causalité et FDT).
- Calculer efficacement $\langle [A(t), B] \rangle$ dans un problème à N corps : exercice 3.2 p. 24.

📖 Pour en savoir plus

- Sur la différence entre fonction de réponse statique (isotherme) $\chi_{BA}^{\text{statique}}$ et fonction de réponse dynamique à fréquence nulle $\tilde{\chi}_{BA}(\omega = 0)$, on pourra consulter le § 8.3 de l'ouvrage [93].

²³ Indication : écrire $\sum_n f_{n0} = -\frac{i}{\hbar} \langle \phi_0 | [p_z, z] | \phi_0 \rangle$.

4 Structure spatiale des fonctions de corrélation

Dans les chapitres qui précèdent nous avons introduit les fonctions de corrélation entre observables du système sans préciser la nature d'icelui. Ces idées et résultats peuvent être appliqués à des systèmes microscopiques (pour étudier la réponse d'un atome à une onde électromagnétique par exemple ; dans ce cas la moyenne est plus naturellement purement quantique, dans l'état fondamental comme dans l'exercice 3.4). Cependant les concepts statistiques seront plus pertinents pour l'étude de systèmes complexes à grand nombre de particules ($\sim \mathcal{N}_A \sim 10^{23}$). Les observables d'intérêt pourraient alors porter des dépendances spatiales

$$\begin{aligned} A &\longrightarrow A(\vec{r}) \\ B &\longrightarrow B(\vec{r}) . \end{aligned}$$

C'est en effet le cas si l'on s'intéresse à la densité de particules $\hat{n}(\vec{r})$ (§ 4.2.3, 6.2 et 6.3), à une densité de courant $\hat{j}(\vec{r})$ (§ 6.3), une densité de spins (problèmes des annexes B et G), etc.

Le présent chapitre vise à donner une idée du type d'informations qu'il est possible d'extraire d'une fonction de réponse d'un système macroscopique homogène (invariant par translation à l'échelle macroscopique). Afin de rendre la discussion plus précise, nous allons nous concentrer sur un exemple, le plus simple non trivial : le cas de la compressibilité, i.e. de la fonction de réponse densité-densité (il s'agit du cas le plus simple puisque nous considérons l'autocorrélation d'un champ scalaire).

4.1 Diffusion élastique d'une onde par des diffuseurs immobiles

4.1.1 Introduction : différents régimes de diffusion

Commençons par prendre un peu de recul et discutons les différents régimes de collision possibles, ce qui nous permettra de situer les questions discutées dans ce chapitre dans un cadre plus large. Considérons une cible constituée d'un ensemble de diffuseurs à des positions $\{\vec{r}_i\}$ (le système dont nous sondons les propriétés). Une particule (un photon, électron, un neutron,...) est envoyée depuis l'infini dans un état libre (onde plane) $|\vec{k}\rangle$ et détectée très loin de la cible dans l'état $|\vec{k}'\rangle$. Nous notons $v(\vec{R} - \vec{r}_i)$ le potentiel créé par un centre diffuseur et « vu » par la particule diffusée de position \vec{R} . Si le diffuseur est fixe, l'énergie de la particule diffusée est conservée au cours de la collision qui est dite *élastique* :

$$\Omega_{\vec{k}'} = \Omega_{\vec{k}} \quad \Rightarrow \quad \|\vec{k}'\| = \|\vec{k}\| . \quad (85)$$

L'analyse du problème de collision conduit à introduire l'amplitude de diffusion $\mathcal{A}_i(\vec{k} \rightarrow \vec{k}')$ caractérisant la diffusion de la particule par le diffuseur en \vec{r}_i . Le calcul perturbatif donne (approximation de Born d'ordre 1) [72, 67, 108] :

$$\mathcal{A}_i(\vec{k} \rightarrow \vec{k}') \propto \langle \vec{k}' | v(\vec{R} - \vec{r}_i) | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\text{Vol}} \tilde{v}(\vec{k}' - \vec{k}) e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot \vec{r}_i} . \quad (86)$$

Diffusion simple.— En présence d'une cible unique, la probabilité d'être diffusée dans la direction \vec{k}' est donnée par $|\mathcal{A}_i(\vec{k} \rightarrow \vec{k}')|^2$. Une estimation naïve de l'intensité totale dans la direction \vec{k}' consiste à considérer la *somme des intensités* associées à chaque diffuseur :

$$I_{\text{simple}}(\vec{k}') \propto \sum_{\text{diffuseur } i} |\mathcal{A}_i(\vec{k} \rightarrow \vec{k}')|^2 . \quad (87)$$

Nous sommes ainsi dans un régime de diffusion simple. Si tous les diffuseurs sont équivalents, nous obtenons ainsi une information sur le potentiel d'interaction de chaque centre diffuseur.

Par exemple, la célèbre expérience de Rutherford (diffusion de particules α par une feuille d'or) est dans ce régime. L'intensité est proportionnelle à la section efficace de Rutherford décrivant la diffusion coulombienne : $I_{\text{simple}}(\vec{k}') \propto \mathcal{N}_{\text{diff}} |\mathcal{A}(\vec{k}', \vec{k})|^2 \propto \|\vec{k}' - \vec{k}\|^{-4} \propto 1/[E_c^2 \sin^4(\theta/2)]$ où θ est l'angle de collision (entre \vec{k}' et \vec{k}).

Diffusion de Bragg.— Il est clair que le régime de diffusion simple néglige les termes *d'interférences* entre les différentes amplitudes. Un autre régime correspond à l'addition cohérente de ces dernières :

$$I_{\text{Bragg}}(\vec{k}') \propto \left| \sum_{\text{diffuseur } i} \mathcal{A}_i(\vec{k} \rightarrow \vec{k}') \right|^2 = \sum_i |\mathcal{A}_i|^2 + \sum_{i, j (\neq)} \mathcal{A}_i \mathcal{A}_j^*. \quad (88)$$

Dans les phénomènes ondulatoires, l'addition des amplitudes est la « bonne » règle ; une question intéressante serait de savoir dans quelle situation il est légitime de négliger les termes d'interférence (diffusion simple) et dans quelle situation cela ne l'est pas. Le régime de Bragg correspond par exemple à l'observation de la figure d'interférences lors de la diffraction de lumière par un réseau optique. L'observation des interférences révèle la distribution spatiale des centres diffuseurs. Nous appelons ce régime le « régime de Bragg » par référence à la cristallographie (la diffraction est maximale dans des directions particulières correspondant aux plans réticulaires d'un cristal).

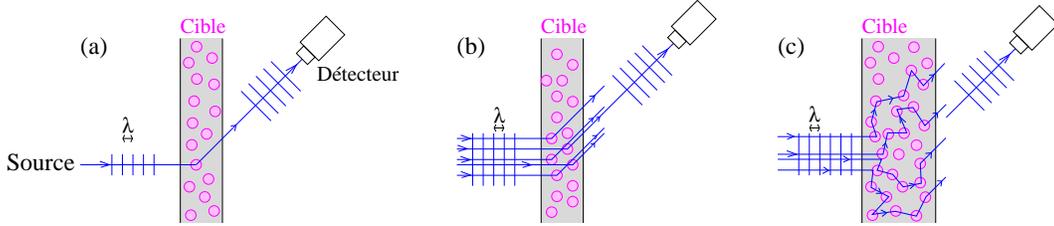


FIGURE 14 : Onde (lumière, électrons, neutrons, particules α ...) envoyée sur une cible. Les ronds représentent les centres diffuseurs de la cible (les atomes par exemple). Seule est représentée une direction de l'onde diffusée, celle sélectionnée par le détecteur (l'onde est bien entendu diffusée dans toutes les directions en général). (a) : Diffusion simple. (b) : Diffraction de Bragg. (c) : Diffusion multiple.

Diffusion multiple – régime incohérent.— Si la cible est épaisse, et/ou si la probabilité d'interagir avec chaque diffuseur est très importante, l'onde interagit avec un grand nombre de diffuseurs avant de sortir du milieu. Dans le cas, nous devons considérer chaque chemin de diffusion $\mathcal{C} = (\vec{r}_{i_1}, \vec{r}_{i_2}, \dots, \vec{r}_{i_N})$, auquel nous associons une amplitude de diffusion. Nous pouvons considérer un régime de diffusion multiple *incohérent*, pour lequel l'intensité totale est donnée par

$$I_{\text{Mult.}}^{(\text{incoh.})}(\vec{k}') \propto \sum_{\text{chemin } \mathcal{C}} |\mathcal{A}_{\mathcal{C}}(\vec{k} \rightarrow \vec{k}')|^2, \quad (89)$$

où la somme porte sur tous les chemins de diffusion. Si la séquence de collisions est très longue, l'onde diffusée perd la mémoire de la direction incidente et l'intensité dépend très peu de la direction : $I_{\text{Mult.}}^{(\text{incoh.})}(\vec{k}') \approx I_0$. L'échelle caractéristique sur laquelle l'onde perd la mémoire de la direction incidente est appelée la longueur de libre parcours moyen de transport ℓ_{tr} (transport mean free path). Ce régime de diffusion est celui de la lumière dans un nuage ou dans un verre de lait [85, 61].

Diffusion multiple – régime cohérent.– Enfin il existe un régime de diffusion multiple cohérent dans lequel on observe les termes d’interférences entre amplitudes ajoutées de façon cohérente :

$$I_{\text{Mult.}}^{(\text{coh.})}(\vec{k}') \propto \left| \sum_{\text{chemin } \mathcal{C}} \mathcal{A}_c(\vec{k} \rightarrow \vec{k}') \right|^2 \Rightarrow I_{\text{Mult.}}^{(\text{coh.})}(\vec{k}') = \underbrace{I_{\text{Mult.}}^{(\text{incoh.})}(\vec{k}')}_{\approx I_0 \forall \vec{k}'} + \Delta I_{\text{Interf.}}(\vec{k}'). \quad (90)$$

La dépendance angulaire est principalement due au terme d’interférence, puisqu’on a vu que la contribution incohérente possède une très faible dépendance angulaire. Ce régime, plus difficile à observer, peut donner lieu à des phénomènes très intéressants de localisation de l’onde par un milieu désordonné (localisation d’Anderson, *cf.* section 6.5). Par exemple en optique il est responsable d’une contribution à l’intensité diffusée $I_{\text{Mult.}}^{(\text{coh.})} \approx I_0 + I_{\text{CBS}}(\theta)$ présentant une structure angulaire²⁴ d’ouverture très petite $\delta\theta \sim 1/k\ell_{\text{tr}}$ autour de la rétrodiffusion ($\vec{k}' = -\vec{k}$, i.e. $\theta = \pi$) et *doublant*²⁵ l’intensité exactement à la rétrodiffusion : cette structure est appelée *l’albedo cohérent* (ou coherent backscattering) [61]. Elle est de même nature (mais pas strictement équivalente) que la correction de localisation faible dans un métal (section 6.5.5) et trouve son origine dans les interférences entre chemins de collision multiple renversés.

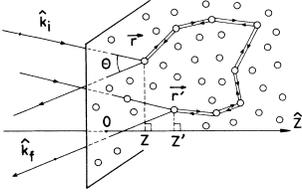


FIG. 1. Geometry used for the calculation of the coherent albedo, showing two interfering light paths.

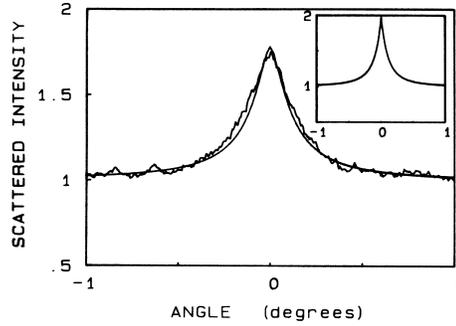


FIG. 2. Comparison between experimental and theoretical line shapes for the coherent backscattering. The experimental recording is taken from Ref. 8 [Fig. 3(a)]. The inset represents the bare theoretical curve taken from Eq. (5) with $\lambda = 0.515 \mu\text{m}$ and $l^* = 19 \mu\text{m}$. The full line is the theoretical prediction obtained by the convolution of this previous curve and the instrumental profile.

FIGURE 15 : *Pic d’albedo (contribution cohérente) : comparaison entre la théorie et l’expérience (figures tirées de [4]). Les données expérimentales ont été obtenues en étudiant la diffusion de lumière d’un laser à argon par des billes de polystyrène ($\varnothing = 0.46 \mu\text{m}$) en suspension dans l’eau (longueur d’onde dans l’eau $\lambda = 0.515/n_{\text{eau}} = 0.387 \mu\text{m}$, où $n_{\text{eau}} = 1.33$) [58]. Soulignons que le pic a une ouverture angulaire extrêmement étroite (*cf.* échelle).*

4.1.2 Le facteur de structure statique

Dans la suite de ce chapitre, **nous nous placerons exclusivement dans le régime de diffusion de Bragg**. Rappelons que l’objet du présent paragraphe est l’étude de la diffusion *élastique* de la particule diffusée

$$\Omega_{\vec{k}'} = \Omega_{\vec{k}} \Rightarrow \|\vec{k}'\| = \|\vec{k}\|. \quad (91)$$

Les diffuseurs sont supposés immobiles ou caractérisés par une dynamique très lente comparativement à la particule diffusée. En utilisant (86), nous relierons directement l’intensité détectée dans la direction \vec{k}' ,

$$I_{\text{elast}}(\vec{k}') \propto \left\langle \left| \sum_i \mathcal{A}_i(\vec{k} \rightarrow \vec{k}') \right|^2 \right\rangle \propto |\tilde{v}(\vec{k}' - \vec{k})|^2 \left\langle \sum_{i,j} e^{-i(\vec{k}' - \vec{k}) \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \right\rangle, \quad (92)$$

²⁴Attention à ne pas confondre l’angle de diffusion θ entre \vec{k}' et \vec{k} , avec l’angle d’incidence sur la cible, qui ne joue aucun rôle dans la discussion.

²⁵ Le doublement de l’intensité requiert que le champ diffusé soit scalaire et que la diffusion soit parfaitement élastique (diffusion sur le potentiel aléatoire statique).

au facteur de structure

$$S(\vec{q}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\text{Vol}} \langle \hat{n}_{\vec{q}} \hat{n}_{-\vec{q}} \rangle = \frac{1}{\text{Vol}} \left\langle \sum_{i,j} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \right\rangle, \quad (93)$$

où nous avons inclus une moyenne thermique sur les positions des diffuseurs pour tenir compte du fait que la mesure s'effectue sur un temps long comparé au temps caractérisant la dynamique des diffuseurs (et/ou qu'il y a un moyennage spatial dans l'échantillon macroscopique).

En résumé

$$\boxed{I_{\text{elast}}(\vec{k}') \propto |\tilde{v}(\vec{q})|^2 S(\vec{q})} \quad \text{avec} \quad \vec{q} = \vec{k}' - \vec{k}. \quad (94)$$

Nous allons maintenant faire quelques remarques sur le facteur de structure statique avant de nous intéresser aux aspects liés à la dynamique.

4.1.3 Fonction de corrélation de paires - ordre de la matière

Afin de mieux comprendre la nature de l'information contenue dans le facteur de structure, il est utile d'établir la correspondance précise avec des fonctions caractérisant l'ordre spatial, dont on perçoit le sens plus intuitivement. Considérons tout d'abord les corrélations de densité dans l'espace réel :

$$n^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') \stackrel{\text{def}}{=} \langle n(\vec{r}) n(\vec{r}') \rangle = \left\langle \sum_{i,j} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \delta(\vec{r}' - \vec{r}_j) \right\rangle. \quad (95)$$

En supposant l'homogénéité (l'invariance par translation), nous obtenons que la fonction est directement reliée au facteur de structure statique par le théorème de Wiener-Khintchine (4),

$$\int d\vec{r} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \int d\vec{r}' e^{i\vec{q}' \cdot \vec{r}'} \langle n(\vec{r}) n(\vec{r}') \rangle = \overset{\text{inv. par transl.}}{\langle n_{\vec{q}} n_{-\vec{q}'} \rangle} = \overbrace{\delta_{\vec{q}, \vec{q}'}} \text{Vol} S(\vec{q}), \quad (96)$$

i.e.

$$n^{(2)}(\vec{r}, \vec{r}') = \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{\vec{q}} S(\vec{q}) e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r} - \vec{r}')}. \quad (97)$$

L'examen de l'expression (95) ne met pas en valeur la propriété d'invariance par translation ; nous faisons le détour par l'espace de Fourier en écrivant

$$S(\vec{q}) = n + n^2 \tilde{g}(\vec{q}) \quad \text{où} \quad n^2 \tilde{g}(\vec{q}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\text{Vol}} \left\langle \sum_{i \neq j} e^{-i\vec{q} \cdot (\vec{r}_i - \vec{r}_j)} \right\rangle. \quad (98)$$

Nous avons introduit la fonction de corrélation de paires

$$g(\vec{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{nN} \left\langle \sum_{i \neq j} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i + \vec{r}_j) \right\rangle \quad (99)$$

caractérisant la distribution de la distance entre paires de particules ($g(\vec{r})$ n'est pas une densité de probabilité puisqu'elle n'est pas normalisée), en terme de laquelle nous écrivons la fonction de corrélation à deux points : ²⁶

$$\boxed{\langle n(\vec{r}) n(\vec{r}') \rangle = n \delta(\vec{r} - \vec{r}') + n^2 g(\vec{r} - \vec{r}')} \quad (100)$$

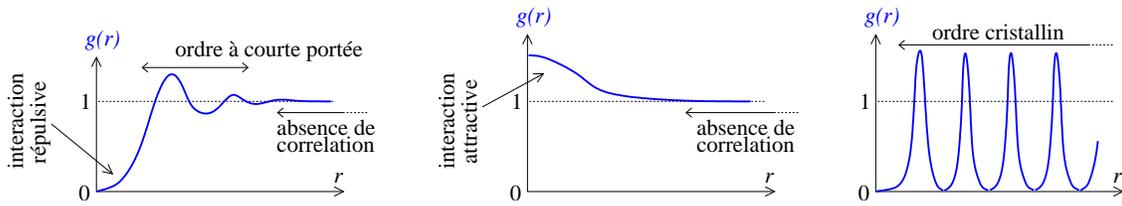


FIGURE 16 : Allure schématique de la fonction de corrélation de paires.

Le facteur de normalisation de la fonction de corrélation de paires a été choisi pour que celle-ci vaille $g(\vec{r}) = 1$, i.e. $\langle n(\vec{r})n(\vec{r}') \rangle = n^2$, en l'absence de corrélation.²⁷

Tout comme la fonction de corrélation de paires, la fonction spectrale statique nous renseigne donc sur *l'ordre de la matière*. Par exemple pour un fluide, en l'absence d'ordre à longue portée, nous attendons une structure plate de $g(r)$ avec une structure à courte distance caractérisant les interactions entre constituants du fluide et un éventuel ordre à courte portée (figure 16). Un exemple précis illustrant ces remarques est étudié dans l'exercice 4.3. Pour un cristal régulier nous attendons des pics dans le facteur de structure pour des vecteurs d'onde satisfaisant la condition de *diffraction de Bragg* (figures 16 pour $g(\vec{r})$ et 17 pour $S(\vec{q})$).

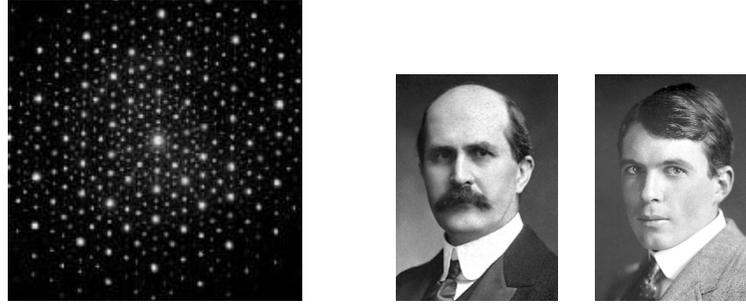


FIGURE 17 : Pics de Bragg obtenus par diffraction sur un quasicristal (symétrie d'ordre 5). Sir William Henry Bragg (1862-1949) et son fils Sir William Lawrence Bragg (1890-1971).

Une règle de somme sur la fonction de corrélation de paires.— Nous discutons une relation assez intéressante faisant intervenir la fonction de corrélation de paires. Plaçons-nous dans l'ensemble grand canonique (en pratique cela revient à isoler un petit volume du système par la pensée). Nous avons la règle de somme $\int d\vec{r} \sum_{i \neq j} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i + \vec{r}_j) = N(N-1)$, d'où, si le nombre de particules fluctue, $\int d\vec{r} g(\vec{r}) = \frac{\langle N(N-1) \rangle}{n \langle N \rangle}$. L'intégrale de la fonction de corrélation de paires est donc liée aux fluctuations du nombre de particules :

$$1 + n \int d\vec{r} [g(\vec{r}) - 1] = \frac{\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2}{\langle N \rangle}. \quad (101)$$

C'est encore un exemple de relation entre une fonction de *corrélation* et des *fluctuations*. Rappelons nous que la grand fonction de partition \mathcal{Z} est liée à la fonction génératrice des cumulants

²⁶ Autrement dit le détour par l'espace de Fourier nous a permis de montrer, qu'en supposant qu'il y a invariance par translation, $\langle \sum_{i,j} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \delta(\vec{r}' - \vec{r}_j) \rangle = \langle \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \delta(\vec{r} - \vec{r}') \rangle + \frac{1}{\text{Vol}} \langle \sum_{i \neq j} \delta(\vec{r} - \vec{r}' - \vec{r}_i + \vec{r}_j) \rangle$.

²⁷ Positions non corrélées : $P(\vec{r}_1, \dots, \vec{r}_N) = 1/\text{Vol}^N$, donc $\langle \sum_{i \neq j} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i + \vec{r}_j) \rangle = \int \prod_i \frac{d\vec{r}_i}{\text{Vol}} \sum_{i \neq j} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i + \vec{r}_j) = N(N-1) \int \frac{d\vec{r}_1 d\vec{r}_2}{\text{Vol}^2} \delta(\vec{r} - \vec{r}_1 + \vec{r}_2) = N(N-1)/\text{Vol} = nN$. QED.

du nombre de particules : $\langle N \rangle = \left(\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu}\right) \ln \mathcal{Z}$ et $\text{Var}(N) = \left(\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial \mu}\right)^2 \ln \mathcal{Z}$ d'où

$$\frac{\text{Var}(N)}{\langle N \rangle} = k_B T \frac{1}{\langle N \rangle} \frac{\partial \langle N \rangle}{\partial \mu}. \quad (102)$$

Dans les notations de la thermodynamique

$$k_B T \frac{1}{N} \left(\frac{\partial N}{\partial \mu}\right)_{T,V} = k_B T \frac{1}{n} \overbrace{\left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_T}^{\left(\frac{\partial n}{\partial p}\right)_T \left(\frac{\partial p}{\partial \mu}\right)_T} = k_B T \left(\frac{\partial n}{\partial p}\right)_T \quad (103)$$

où nous avons utilisé la relation de Gibbs-Duhem.²⁸ Finalement nous reconnaissons la *compressibilité isotherme* du fluide

$$\kappa_T \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{n} \left(\frac{\partial n}{\partial p}\right)_T = \frac{1}{n^2} \left(\frac{\partial n}{\partial \mu}\right)_T. \quad (104)$$

Nous obtenons la règle de somme, due à Ornstein & Zernike :

$$\boxed{1 + n \int d\vec{r} [g(\vec{r}) - 1] = n k_B T \kappa_T} \quad (105)$$

La relation est intéressante car elle connecte explicitement des propriétés macroscopiques (densité, température, compressibilité) à des propriétés microscopiques.

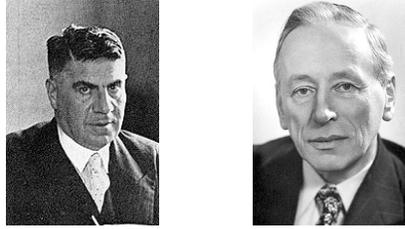


FIGURE 18 : *Leonard S. Ornstein (1880-1941) & Frits Zernike (1888-1966).*

Faisons quelques remarques afin d'en apprécier la portée.

Gaz parfait. – Tout d'abord, dans le cas d'un gaz parfait classique (particules sans corrélations, i.e. $g(\vec{r}) = 1$), nous vérifions cette règle de somme : $\kappa_T^{(\text{G.P.})} = 1/p = 1/nk_B T$ et donc $\int d\vec{r} [g(\vec{r}) - 1] = 0$. La relation d'Ornstein-Zernike permet de quantifier l'écart à la compressibilité du gaz parfait :

$$1 + n \int d\vec{r} [g(\vec{r}) - 1] = \kappa_T / \kappa_T^{(\text{G.P.})}. \quad (106)$$

Gaz réels. – Le développement du viriel est un développement du potentiel thermodynamique, i.e. de la pression (équation d'état), en puissances de la densité : $p = nk_B T [1 + n B_2(T) + \dots]$. On peut alors vérifier que l'intégrale de $g(\vec{r})$ est directement proportionnelle au second coefficient du viriel $\int d\vec{r} [g(\vec{r}) - 1] \simeq -2B_2(T)$. À partir du cas du gaz parfait, lorsqu'on branche une interaction attractive, $p \searrow$, $B_2 < 0$ et donc $g(r) > 1$ en moyenne. Inversement si on branche une interaction répulsive $p \nearrow$, $B_2 > 0$ et donc $g(r) < 1$ en moyenne (figure 16).

²⁸ **Relation de Gibbs-Duhem.** – Relation entre les trois paramètres intensifs d'un fluide simple : $d\mu = -\frac{s}{N} dT + \frac{v}{N} dp$. Pour démontrer la relation on part de la différentielle du grand potentiel $dJ = -SdT - pdV - Nd\mu$, puis on remarque que la transformation de Legendre donne $J + pV = 0$.

Point critique.— Un cas intéressant est celui où la compressibilité diverge (au point critique où se produit une transition de phase du second ordre : phénomène d’opalescence critique). La relation établit un lien entre divergence de la compressibilité et la divergence de la portée des corrélations (décroissance lente de $g(\vec{r})$).

✎ **Exercice 4.1 : Facteur de structure d’un cristal dans le modèle d’Einstein.**— Nous considérons un modèle très simplifié de cristal unidimensionnel : des atomes ayant pour position $\hat{x}_n = na + \hat{\xi}_n$ où les $\hat{\xi}_n$ sont des variables d’oscillateurs harmoniques **indépendants** (i.e. l’énergie est simplement $H = \sum_{n=1}^N [\frac{1}{2m}\hat{p}_n^2 + \frac{1}{2}m\omega_0^2(\hat{x}_n - na)^2]$). L’opérateur densité est donc $\hat{n}_q = \sum_n e^{-iq(na + \hat{\xi}_n)}$. Montrer que le facteur de structure est donné par

$$S(q) = \frac{1}{a} + \frac{2\pi}{a^2} \sum_n \delta\left(q - \frac{2n\pi}{a}\right) \times e^{-\frac{q^2\hbar}{2m\omega_0} \coth \frac{\hbar\omega_0}{2T}} \quad (107)$$

(nous avons fixé $k_B = 1$).

Indication : On rappelle la formule de Poisson $\sum_n e^{iQn} = 2\pi \sum_n \delta(Q - 2n\pi)$.

Justifier qu’une condition nécessaire de validité du modèle est $1/a \ll \sqrt{m\omega_0^2/T}$. Quelle conséquence cette condition a sur l’allure de $S(q)$?

Nous voyons sur cet exemple ultra simplifié de cristal que le facteur de structure présente des pics de Bragg²⁹ pour des vecteurs d’onde $q = 2n\pi/a$ signalant la présence d’un réseau de pas a . Cette structure de peigne de Dirac est pondérée par une structure plus molle (la gaussienne) ayant pour origine la dynamique des atomes (les vibrations).

✎ **Exercice 4.2 :** Montrer que la fonction de corrélation de paires associée au facteur de structure (107) est donnée par

$$g(x) = a \sum_n \sqrt{\frac{m\omega_0^2}{4\pi T}} e^{-\frac{m\omega_0^2}{4T}(x-na)^2}. \quad (108)$$

Indication : en utilisant la formule de Poisson, montrer que la transformée de Fourier d’un peigne de Dirac est un autre peigne de Dirac.

Représenter $g(x)$ pour $a \gg \sqrt{T/m\omega_0^2}$. Discuter également la limite inverse et vérifier que cette fonction caractérise l’existence d’un ordre à longue portée.

✎ **Exercice 4.3 : Facteur de structure d’une chaîne de ressorts.**— Nous considérons dans cet exercice un modèle plus réaliste de “cristal” unidimensionnel, décrit par le lagrangien $L = \frac{m}{2} \sum_n [\dot{x}_n^2 - \omega_0^2(x_n - x_{n-1} - a)^2]$. On introduira les variables $\xi_n = x_n - na$ mesurant les écarts aux positions d’équilibre données par la mécanique classique.

a) *Variables normales.*— Soit $\chi_Q \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \xi_n e^{-iQn}$, où $N (\rightarrow \infty)$ est la longueur de la chaîne. Montrer que $L = \frac{m}{2} \sum_Q [|\dot{\chi}_Q|^2 - \omega_Q^2 |\chi_Q|^2]$ où $\omega_Q = 2\omega_0 |\sin(Q/2)|$ (en volume fini la somme porte sur les $Q = 2n\pi/N$ avec $n = 1, \dots, N$). Dédurre l’Hamiltonien de la chaîne. Donner la valeur de $\langle \chi_Q \chi_{Q'} \rangle$ (moyenne quantique et statistique).

b) *Facteur de structure.*— Montrer que

$$S(q) = \frac{1}{a} \sum_n e^{-iqna} e^{-\frac{1}{2}q^2 \langle (\xi_n - \xi_0)^2 \rangle} \quad (109)$$

où

$$\langle (\xi_n - \xi_0)^2 \rangle = \frac{2\hbar}{m\omega_0} \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{dQ}{2\pi} \coth\left(\frac{\hbar\omega_0}{T} |\sin(Q/2)|\right) \frac{\sin^2(Qn/2)}{|\sin(Q/2)|} \quad (110)$$

²⁹ L’idée se généralise facilement en dimension supérieure. Dans ce cas les pics de Bragg sont placés aux nœuds du réseau réciproque, i.e. pour tous les vecteurs \vec{Q} t.q. $\vec{Q} \cdot \vec{R} = 2n\pi$, $n \in \mathbb{Z}$, où \vec{R} sont les nœuds du réseau de Bravais.

(on a posé $k_B = 1$).

c) *Limite classique.* – Montrer que dans la limite classique ($\hbar \rightarrow 0$)³⁰ $\langle (\xi_n - \xi_{n'})^2 \rangle = \frac{2T}{m\omega_0^2} |n - n'|$. À quoi correspond ce résultat ?³¹ Dans la limite continue, quel processus aléatoire $\xi_n \rightarrow \xi(x = na)$ possède cette propriété ? Montrer que³²

$$S_{\text{class}}(q) = \frac{1}{a} \left[\frac{2\pi}{a} \delta(q) + \frac{\sinh\left(\frac{q^2 T}{m\omega_0^2}\right)}{\cosh\left(\frac{q^2 T}{m\omega_0^2}\right) - \cos(qa)} \right] \quad (111)$$

Vérifier que dans la limite de haute température on obtient un pic lorentzien autour des petits vecteurs d'onde $S_{\text{class}}(q) \simeq \frac{2\pi}{a^2} \delta(q) + \frac{2\pi}{a^2} \frac{1}{\pi} \frac{m\omega_0^2 a/T}{q^2 + (m\omega_0^2 a/T)^2}$ pour $|q| \ll \sqrt{m\omega_0^2/T}$ et $S_{\text{class}}(q) \simeq 1$ pour $|q| \gg \sqrt{m\omega_0^2/T}$. Analyser la structure à basse température.

Nous voyons que la structure du résultat est tout à fait différente de celle obtenue pour le modèle d'Einstein.

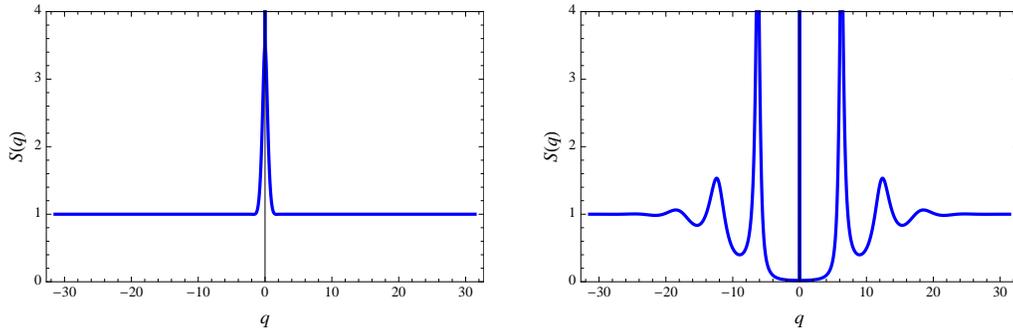


FIGURE 19 : *Facteur de structure de la chaîne de ressorts classique, éq. (111), à haute température ($T = 1.75$ avec $m\omega_0^2 = a = 1$) et basse température ($T = 0.01$). Au centre de la figure on a représenté le pic $2\pi\delta(q)$.*

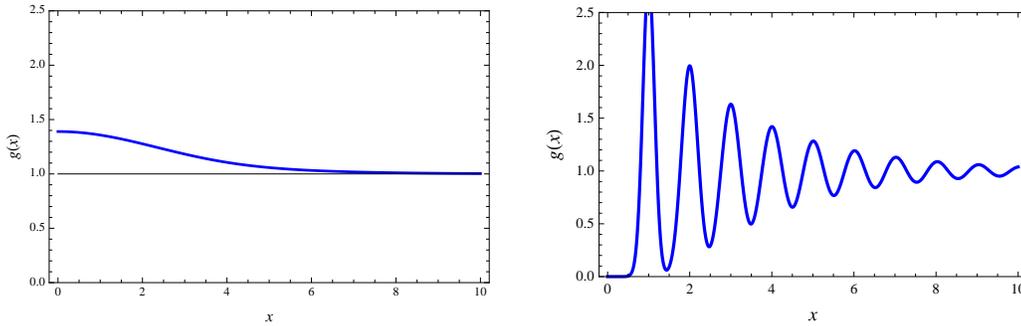


FIGURE 20 : *Fonction de corrélation de paires correspondant au facteur de structure de l'éq. (111) (figure 19), à haute température ($T = 1.75$ avec $m\omega_0^2 = a = 1$) et basse température ($T = 0.01$). Les oscillations de période $a = 1$ indiquent l'apparition d'un ordre à courte portée.*

³⁰ On donne l'intégrale $\int_0^{2\pi} \frac{dq}{2\pi} \frac{1 - \cos(qn)}{1 - \cos(q)} = |n|$ pour $n \in \mathbb{Z}$. Cette intégrale peut se retrouver par régularisation en utilisant $\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{\sinh a}{\cosh a - \cos \theta} e^{in\theta} = e^{-|n|a}$

³¹ Une interprétation intéressante de $\langle (\xi_n - \xi_0)^2 \rangle = \frac{2T}{m\omega_0^2} |n|$: on peut considérer que la chaîne entre l'atome 0 et l'atome n est un grand ressort avec une constante de raideur effective $k_{\text{eff}} = m\omega_0^2/|n|$. Les fluctuations de position sont données par le théorème d'équipartition $\frac{1}{2}k_{\text{eff}} \langle (\xi_n - \xi_0)^2 \rangle = 2 \times \frac{1}{2}T$ (deux termes quadratiques). QED.

³²Indication : analyser $S(q)$, éq. (109), pour $q = 0$ et $q \neq 0$ pour un volume N fini. Puis faire $N \rightarrow \infty$.

À haute température, $T \gg m\omega_0^2 a^2$, le facteur de structure est concentré autour de $q \simeq 0$. La largeur du pic indique que la fonction de corrélation de paires présente une structure de largeur $\Delta x \sim T/m\omega_0^2 a$ puis tend vers $g(x \rightarrow \infty) \rightarrow 1$. La fonction est ici $g(x) > 1$ (figure 20) du fait de l'interaction attractive.

À basse température, $T \ll m\omega_0^2 a^2$, $S(q)$ présente une structure oscillante sur une période $2\pi/a$, amortie sur une échelle $|q| \lesssim \sqrt{m\omega_0^2/T}$, indiquant un *ordre à courte portée* : la fonction de corrélation de paires présente quelques oscillations de période a puis tend vers $g(x \rightarrow \infty) \rightarrow 1$, indiquant la disparition de l'ordre (figure 20, à droite). Nous pouvons facilement estimer l'échelle de longueur sur laquelle l'ordre existe en utilisant l'expression des fluctuations entre positions des atomes $\langle (x_n - x_m)^2 \rangle_c = \langle (\xi_n - \xi_m)^2 \rangle = \frac{2T}{m\omega_0^2} |n - m|$; le cristal ne peut exister que sur une échelle telle que $\langle (\xi_n - \xi_m)^2 \rangle \ll a^2$ i.e. faisant intervenir un nombre d'atomes $|n| \ll m\omega_0^2 a^2/T$ (le cristal n'existe pas car ce nombre reste microscopique).

Alors que dans le modèle d'Einstein, le réseau est introduit artificiellement (à la main) dans le potentiel, nous observons que, dans la chaîne de ressorts, les *fluctuations thermiques détruisent l'ordre à longue portée, i.e. le cristal*. Cette observation découle du **théorème de Mermin-Wagner** (toute brisure spontanée d'une symétrie continue³³ causée par des interactions à courte portée en dimension $d \leq 2$ est détruite par les fluctuations quantiques et/ou thermiques).

Régime classique vs quantique. – Nous venons de voir que les fluctuations thermiques détruisent l'ordre cristallin au delà d'une échelle

$$L_{\text{cristal}}(T) \sim a \frac{m\omega_0^2 a^2}{T} \quad \text{pour} \quad T \ll m\omega_0^2 a^2. \quad (112)$$

Pendant la divergence de cette longueur est limitée par l'effet des fluctuations quantiques, qui deviennent dominantes aux plus basses températures. Dans ce cas les fluctuations ne croissent que logarithmiquement avec la distance $\langle (\xi_n - \xi_0)^2 \rangle \simeq \frac{2\hbar}{m\omega_0\pi} \ln |n|$ et l'ordre cristallin disparaît au delà de la longueur

$$L_{\text{cristal}}(0) \sim a \exp \frac{\pi m\omega_0 a^2}{2\hbar} \quad \text{à} \quad T = 0 \quad (113)$$

(ce régime est étudié dans l'exercice 7.8 du chapitre 7 de mon livre [108]). Nous voyons que la température de crossover entre les régimes de haute température (classique) et le régime quantique est $T_c \sim m\omega_0^2 a^2 \exp -\frac{\pi m\omega_0 a^2}{2\hbar}$.

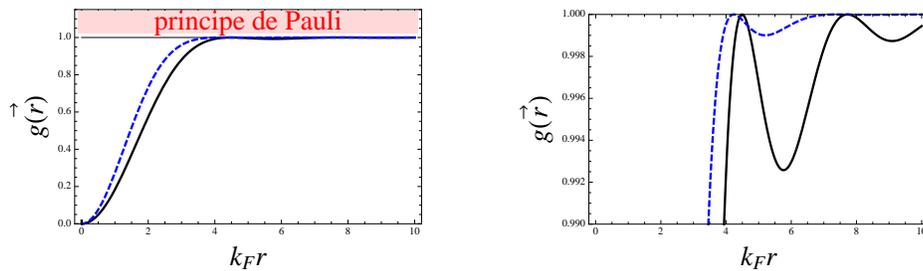


FIGURE 21 : Fonction de corrélation de paires des fermions libres : $T = 0$ (courbe continue) et $T = \epsilon_F$ (courbe en tirets). Le principe de Pauli induit des anti-corrélations spatiales (en l'absence d'interaction), « les fermions s'évitent ».

³³ Dans l'exercice, la symétrie continue est l'invariance par translation (brisée dans le modèle d'Einstein par le choix du potentiel mais pas dans le modèle de la chaîne de ressorts).

Exercice 4.4 : Fonction de corrélation de paires d'un gaz de fermions libres.— On considère un gaz de fermions libres à l'équilibre thermodynamique. On rappelle que la transformée de Fourier de l'opérateur densité s'écrit $\hat{n}_{\vec{q}} = \sum_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}}$ en termes des opérateurs création et annihilation.

a) Montrer que le facteur de structure statique est

$$S(\vec{q}) = \text{Vol} \delta_{\vec{q},0} n^2 + \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} (1 - f_{\vec{k}+\vec{q}}), \quad (114)$$

où n est la densité moyenne et $f_{\vec{k}} \equiv f(\epsilon_{\vec{k}})$ est la fonction de Fermi.

Indication : on pourra utiliser (67).

b) En utilisant (96) et (100), montrer que la fonction de corrélation de paires des fermions est

$$g(\vec{r}) = 1 - \left| \frac{\phi(\vec{r})}{\phi(\vec{0})} \right|^2 \quad \text{où} \quad \phi(\vec{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}}. \quad (115)$$

c) On remarque que $n = \phi(\vec{0})$ ($= k_F^3 / (6\pi^2)$ à $T = 0$, en oubliant la dégénérescence de spin). On donne l'intégrale $\int_0^\infty dk \frac{k \sin kr}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} + 1} = -\frac{\partial}{\partial r} \left[\frac{T/v_F}{\sinh(rT/v_F)} \sin(k_F r) \right]$ où $\mu = k_F^2 / (2m)$ et $v_F = k_F / m$. En déduire le comportement de $g(\vec{r})$.

Dans l'exercice $g(\vec{r}) \leq 1$, ce qui signale des anticorrélations de la densité $\langle n(\vec{r}) n(\vec{r}') \rangle - \langle n(\vec{r}) \rangle \langle n(\vec{r}') \rangle \leq 0$, manifestation du principe de Pauli (« les fermions s'évitent »).

4.2 Sonder la dynamique de la matière : facteur de structure dynamique

Dans la section précédente, nous avons supposé que les centres diffuseurs en $\{\vec{r}_i\}$ étaient immobiles. Nous avons montré comment le signal de diffraction d'une onde sur une telle cible permet de remonter à l'information sur la structure spatiale des diffuseurs. Lorsque les centres diffuseurs ont eux-mêmes une dynamique, $\{\vec{r}_i\} \rightarrow \{\vec{r}_i(t)\}$, la particule incidente peut échanger de l'énergie (cinétique) avec les diffuseurs ; pour simplifier nous ne discuterons pas la possible excitation des degrés de liberté internes (s'il y en a). Il est alors possible d'obtenir des informations sur la dynamique des diffuseurs, à condition de développer des techniques spectroscopiques plus sophistiquées, comme nous allons le voir.

4.2.1 Compressibilité et facteur de structure dynamique

Pour commencer cette section, nous clarifions le lien entre la compressibilité, une fonction de réponse du type de celles discutées dans le chapitre précédent, et le facteur de structure dynamique, qui va jouer un rôle important dans ce chapitre.

Compressibilité : réponse densité-densité.— Lorsqu'un potentiel $U_{\text{ext}}(\vec{r}, t)$ perturbe le système, il se couple à la densité $\hat{n}(\vec{r}) = \sum_j \delta(\vec{r} - \hat{r}_j)$ où \hat{r}_j est l'opérateur de position de la particule j : $\hat{H}_{\text{pert}}(t) = + \int d\vec{r} \hat{n}(\vec{r}) U_{\text{ext}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \hat{n}_{-\vec{q}} \tilde{U}_{\vec{q}}^{\text{ext}}(t)$, où V est le volume et $\hat{n}_{\vec{q}} = \int d\vec{r} e^{-i\vec{q} \cdot \vec{r}} \hat{n}(\vec{r})$ désigne la composante de Fourier de la densité. La fonction de réponse densité-densité caractérise la réponse de la densité $\langle n(\vec{r}, t) \rangle_{U_{\text{ext}}} = \langle n(\vec{r}) \rangle + \int dt' d\vec{r}' \chi(\vec{r}, t; \vec{r}', t') U_{\text{ext}}(\vec{r}', t') + \dots$. Si le système est homogène, $\chi(\vec{r}, t; \vec{r}', 0) = \chi(\vec{r} - \vec{r}', t; 0, 0)$ et l'on peut passer dans l'espace de Fourier $\langle n_{\vec{q}}(t) \rangle_{U_{\text{ext}}} = \langle n_{\vec{q}} \rangle + \int dt' \chi_{\vec{q}}(t - t') U_{\vec{q}}^{\text{ext}}(t') + \dots$. D'après (58) on a donc $\chi_{\vec{q}}(t) = -\frac{i}{\hbar} \theta(t) \langle [\hat{n}_{\vec{q}}(t), \hat{n}_{-\vec{q}}] \rangle$ (le signe $-$ est déplacé par rapport aux conventions choisies plus

haut pour définir la perturbation). Il est utile d'exprimer la compressibilité

$$\tilde{\chi}(\vec{q}, \omega) = \int dt e^{i(\omega-0^+)t} \chi_{\vec{q}}(t) = -\frac{i}{\hbar V} \int_0^\infty dt e^{i(\omega-0^+)t} \langle [\hat{n}_{\vec{q}}(t), \hat{n}_{-\vec{q}}] \rangle \quad (116)$$

dans la représentation de Lehman, éq. (61) :

$$\tilde{\chi}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\hbar V} \sum_{n,m} (P_n - P_m) \frac{|(\hat{n}_{\vec{q}})_{nm}|^2}{\omega + \omega_{nm} + i0^+} \quad (117)$$

où $(n_{\vec{q}})_{nm} = \langle \varphi_n | \hat{n}_{\vec{q}} | \varphi_m \rangle$.

Nous discutons dans l'exercice qui suit le cas de la compressibilité d'un gaz de fermions, exprimée à l'aide des propriétés des états individuels. L'exercice est une application de l'exercice 3.2 (p. 24).

Exercice 4.5 : Fonction de réponse densité-densité de fermions libres.— On considère un gaz de fermions libres à température fixée. Les états propres à une particule sont des ondes planes $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$. L'opérateur densité³⁴ pour une particule est $\hat{n}(\vec{r}) = \delta(\vec{r} - \hat{\vec{r}})$, i.e. $\hat{n}_{\vec{q}} = e^{-i\vec{q}\cdot\hat{\vec{r}}}$. Calculer ses éléments de matrice $\langle \varphi_{\vec{k}} | \hat{n}_{\vec{q}} | \varphi_{\vec{k}'} \rangle$. Montrer que la fonction de réponse densité-densité du système est donnée par :

$$\tilde{\chi}_0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+\vec{q}}}{\hbar\omega + \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + i0^+} \quad (118)$$

où $f_{\vec{k}}$ sont les facteurs d'occupation (Fermi-Dirac) des états individuels (ondes planes). Donner la valeur de $\tilde{\chi}_0(\vec{q}, 0)$ pour $q \ll k_F$ et interpréter le résultat.

Dans cette expression de la fonction de réponse, nous observons que le dénominateur s'annule pour $\omega = \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}$. Ces pôles correspondent à des excitations élémentaires faciles à interpréter : il s'agit des excitations particule-trou³⁵. Nous reviendrons sur cette fonction de réponse que nous calculerons et étudierons en détail plus tard (§ 6.2).

Facteur de structure dynamique : corrélation densité-densité.— Les discussions qui suivront feront intervenir soit la fonction de réponse $\tilde{\chi}(\vec{q}, \omega)$, soit la fonction de corrélation qui lui est associée, le *facteur de structure dynamique* :

$$\tilde{S}(\vec{q}, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\text{Vol}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle \hat{n}_{\vec{q}}(t) \hat{n}_{-\vec{q}} \rangle = \frac{2\pi}{\text{Vol}} \sum_{n,m} P_n |(\hat{n}_{\vec{q}})_{nm}|^2 \delta(\omega + \omega_{nm}), \quad (119)$$

ou pour reprendre la notation du chapitre précédent : $\tilde{S}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\text{Vol}} \tilde{C}_{n_{\vec{q}} n_{-\vec{q}}}^{\dagger}(\omega)$. Il est instructif de souligner la forme prise par la relation de bilan détaillé dans ce cas : l'échange des opérateurs $A \leftrightarrow B$ dans (18) correspond à changer le signe de l'impulsion :

$$\tilde{S}(-\vec{q}, -\omega) = \tilde{S}(\vec{q}, \omega) e^{-\beta\hbar\omega}. \quad (120)$$

³⁴ Dans les livres il est assez courant de trouver l'opérateur densité des fermions exprimé en terme des opérateurs d'annihilation et de création : $\hat{n}(\vec{r}) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}, \vec{q}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k}}$ i.e.

$$\hat{n}_{\vec{q}} = \sum_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}-\vec{q}}^{\dagger} \hat{c}_{\vec{k}}.$$

Deux états $|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_m\rangle$ du problème à N fermions couplés par la densité, i.e. tels que $(n_{\vec{q}})_{nm} \neq 0$, diffèrent donc par une paire particule-trou d'énergie $\omega_{mn} = E_m - E_n = \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}$.

³⁵ Un électron d'énergie $\epsilon_{\vec{k}}$ est envoyé dans l'état d'énergie $\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}$. À $T = 0$ on doit avoir $\epsilon_{\vec{k}} < \epsilon_F$ et $\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} > \epsilon_F$. Cette excitation correspond donc à créer un trou sous la surface de Fermi et une particule au dessus.

La relation avec la compressibilité $\tilde{\chi}(\vec{q}, \omega)$ est établie via l'introduction de la fonction spectrale $\tilde{\xi}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{V2\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle [\hat{n}_{\vec{q}}(t), \hat{n}_{-\vec{q}}] \rangle$, cette dernière étant reliée à la fonction de réponse par³⁶ $\text{Im} \tilde{\chi}(\vec{q}, \omega) = -\tilde{\xi}(\vec{q}, \omega)$. La représentation spectrale permet immédiatement de trouver la relation avec le facteur de structure

$$\tilde{\xi}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2\hbar} [\tilde{S}(\vec{q}, \omega) - \tilde{S}(-\vec{q}, -\omega)] . \quad (121)$$

Combinée avec la relation de bilan détaillé, cette dernière équation n'est rien d'autre que l'expression du théorème fluctuation-dissipation, éq. (72) : $\tilde{\xi}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{2\hbar} (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \tilde{S}(\vec{q}, \omega)$.

Notons qu'à température nulle le facteur de structure s'annule pour les fréquences négatives en vertu de la relation de bilan détaillé $\tilde{S}(\vec{q}, \omega < 0) = 0$ (absence de processus d'émission à $T = 0$). Dans ce cas on a simplement

$$\tilde{\xi}^{(T=0)}(\vec{q}, \omega > 0) = \frac{1}{2\hbar} \tilde{S}(\vec{q}, \omega) \quad \text{et} \quad \tilde{\xi}^{(T=0)}(\vec{q}, \omega < 0) = -\frac{1}{2\hbar} \tilde{S}(-\vec{q}, -\omega) .$$

✎ **Exercice 4.6** : Exprimer $\tilde{S}(\vec{q}, \omega)$ en fonction de $\tilde{\chi}(\vec{q}, \omega)$. L'intérêt de cette relation est de fournir très directement l'expression du facteur de structure en termes des propriétés à un corps (en rendant possible l'usage de (64)). En particulier, montrer que le facteur de structure du gaz de particules libres est donné par

$$\tilde{S}_0(\vec{q}, \omega) = \frac{2\pi\hbar}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} (f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+\vec{q}}) \delta(\hbar\omega + \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}}) . \quad (122)$$

4.2.2 Expérience de diffusion et facteur de structure dynamique

Un grand nombre de techniques expérimentales de spectroscopie permettent de sonder divers aspects des fonctions de réponse. On en trouvera une rapide revue dans l'excellent ouvrage d'Altland & Simons [63], chapitre 7. Citons par exemple les techniques de diffraction X, de diffraction d'électrons (microscopie électronique) ou de diffraction de neutrons (pour sonder la position des noyaux, le magnétisme), de spectroscopie tunnel, de spectroscopie par photoémission résolue en angle (ARPES) pour sonder la structure en \vec{q} et ω , etc.

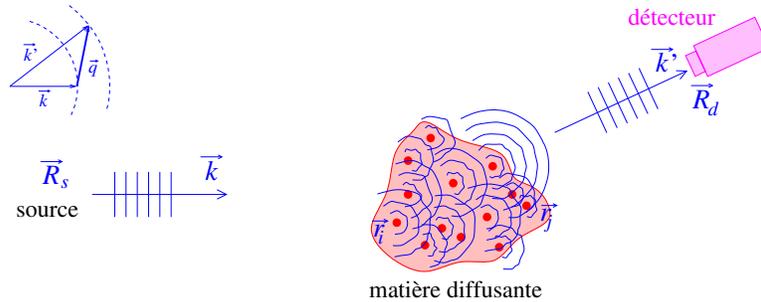


FIGURE 22 : Diffraction d'une onde sur des diffuseurs en \vec{r}_j .

Commençons par montrer précisément comment nous pouvons extraire le facteur de structure dynamique $\tilde{S}(\vec{q}, \omega)$ dans une expérience de diffraction. Considérons une matière dense constituée de particules ayant pour positions $\{\vec{r}_j\}$, sur laquelle est envoyée une onde (photons, électrons, neutrons,...), décrite par une relation de dispersion $\Omega_{\vec{k}}$ (par exemple $\Omega_{\vec{k}} = \|\vec{k}\|c$ pour des photons, $\Omega_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 \vec{k}^2}{2M}$ pour des neutrons,...) : situation représentée sur la figure 22. Le vecteur d'onde incident

³⁶ Le signe vient de la définition de χ .

est k et le détecteur sélectionne des particules de vecteur d'onde \vec{k}' (la position du détecteur sélectionne la direction du vecteur; le détecteur possède un filtre en énergie permettant de sélectionner également le module de \vec{k}'). Nous supposons que la section efficace de diffusion sur une particule est assez faible pour que nous puissions négliger les processus de diffusion multiple ³⁷ (l'onde incidente n'est diffusée vers le détecteur que par une seule particule). Nous pouvons écrire le potentiel « vu » par l'onde incidente $\hat{V} = \sum_i v(\hat{R} - \hat{r}_i)$, où \hat{R} est la position de la particule incidente et $v(\hat{R})$ désigne le potentiel vu par celle-ci pour un diffuseur à l'origine (nous avons admis que les diffuseurs ne possèdent pas de degrés de liberté interne; seuls sont en jeu les degrés de liberté de translation de la particule incidente et des particules diffusantes). Afin de séparer les observables associées au système ($\{\vec{r}_j\}$) et à la particule diffusée (R), nous introduisons l'opérateur densité de particules : $\hat{V} = \int d\vec{r} v(\hat{R} - r) \hat{n}(\vec{r})$.

Si le système étudié est initialement dans un état $|\varphi_n\rangle$, le système global (matière diffusante+onde incidente) transite de l'état $|\Phi_i\rangle = |\vec{k}\rangle \otimes |\varphi_n\rangle$ vers un état $|\Phi_f\rangle = |\vec{k}'\rangle \otimes |\varphi_m\rangle$. La section efficace correspondante est donnée par la règle d'or de Fermi :

$$\frac{d\sigma^{(\varphi_n)}}{d\Omega} \propto \sum_{f \text{ t.q. } \vec{k}' \text{ fixé}} |\langle \Phi_f | \hat{V} | \Phi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (123)$$

La conservation de l'énergie (imposée par le δ) prend la forme $\Omega_{\vec{k}'} + E_m = \Omega_{\vec{k}} + E_n$. Nous introduisons

$$\omega \stackrel{\text{def}}{=} \Omega_{\vec{k}'} - \Omega_{\vec{k}} \quad (124)$$

$$\vec{q} \stackrel{\text{def}}{=} \vec{k}' - \vec{k} \quad (125)$$

pour désigner les transferts d'énergie et d'impulsion, entre l'onde incidente et la matière diffusante. L'onde peut recevoir ou déposer de l'énergie dans la matière diffusante : elle est diffusée de manière *inélastique* par la matière. L'élément de matrice est

$$\langle \Phi_f | \hat{V} | \Phi_i \rangle = \int d\vec{r} \langle \vec{k}' | v(\hat{R} - \vec{r}) | \vec{k} \rangle \langle \varphi_m | \hat{n}(\vec{r}) | \varphi_n \rangle = \frac{1}{\text{Vol}} \tilde{v}(\vec{q}) \langle \varphi_m | \hat{n}_{\vec{q}} | \varphi_n \rangle \quad (126)$$

où $\tilde{v}(\vec{q}) = \int d\vec{r} v(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}$. Si P_n est la probabilité d'occupation de l'état $|\varphi_n\rangle$, l'intensité mesurée par le détecteur placé dans la direction \vec{k}' est une fonction des transferts d'impulsion et d'énergie

$$I_{\text{inelas}}(\vec{k}') \propto \sum_n P_n \frac{d\sigma^{(\varphi_n)}}{d\Omega} \propto |\tilde{v}(\vec{q})|^2 \sum_{n,m} P_n |\langle \varphi_m | \hat{n}_{\vec{q}} | \varphi_n \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{nm}); \quad (127)$$

elle est donc proportionnelle au facteur de structure

$$I_{\text{inelas}}(\vec{k}') \propto \overbrace{|\tilde{v}(\vec{q})|^2}^{\text{facteur de forme}} \underbrace{\tilde{S}(-\vec{q}, -\omega)}_{\text{facteur de structure}} \quad (128)$$

On prendra garde à ce que q et ω ne sont pas indépendants dans (128), mais contraints par (124) et (125). La mesure du facteur de structure requiert donc de résoudre aussi bien la direction de l'onde, $\vec{k}'/|\vec{k}'|$, que l'énergie de la particule diffusée, i.e. $|\vec{k}'|$: **le détecteur** de la figure 22 **possède donc un filtre en énergie** (c'est un spectromètre). Le *facteur de forme* $|\tilde{v}(\vec{q})|^2$ caractérise la diffusion sur un unique diffuseur (dans l'approximation de Born la section efficace

³⁷Les phénomènes liés à la diffusion multiple d'une onde sur des diffuseurs statiques distribués aléatoirement seront discutés au chapitre 6.

lui est en effet proportionnelle) et le *facteur de structure* $\tilde{S}(-\vec{q}, -\omega)$ contient l'information sur la distribution des diffuseurs et leur dynamique. Le signe ne doit pas nous surprendre, il nous rappelle que $\tilde{S}(\vec{q}, \omega < 0)$ est associé à un processus d'émission pour le système d'intérêt, comme nous l'avons noté dans le chapitre 2, page 16.

Relation entre facteurs de structure statique et dynamique.— La relation entre facteurs de structure statique et dynamique peut être facilement déduite des définitions de ces deux quantités, (93) et (119) :

$$S(\vec{q}) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{S}(\vec{q}, \omega). \quad (129)$$

Il faudra prendre garde au fait que $I_{\text{elast}}(\vec{k}')$ n'est pas la limite statique ($\omega \rightarrow 0$) de $I_{\text{inelas}}(\vec{k}')$. Si l'on revient sur la description des deux protocoles expérimentaux décrits dans les § 4.1.1 et 4.2.2, nous pouvons en effet comprendre la relation (129). Dans le premier cas (diffuseurs fixes/facteur de structure statique), nous avons supposé conservée l'énergie de la particule diffusée. Le détecteur détecte l'onde diffusée, quelle que soit l'énergie des particules, autrement dit ne contient pas de filtre en énergie. En revanche, dans la seconde situation (diffuseurs mobiles/facteur de structure dynamique), nous avons insisté sur l'intérêt qu'il y a à sélectionner les particules diffusées selon leur énergie, i.e. déterminer l'énergie échangée avec la cible. La différence entre les deux situations correspond bien à sélectionner ou non l'énergie de la particule diffusée, d'où l'intégrale dans (129).

4.2.3 De la fonction de réponse $\tilde{\chi}(\vec{q}, \omega)$ au spectre des excitations

Afin de toucher du doigt la richesse liée aux aspects dynamiques, et de comprendre comment la fonction de réponse permet de remonter à certaines propriétés microscopiques du système, nous appuyons la discussion sur l'exemple précis, et important, de la *compressibilité du liquide de Fermi chargé*. Cet objet a été exprimé pour des fermions libres sans interaction, éq. (118) (la fonction de réponse sera calculée explicitement dans le chapitre 6, section 6.2). Commençons par décrire les différents types d'excitations du système et comment ils se manifestent dans le facteur de structure $\tilde{S}(\vec{q}, \omega)$. Je reprends ici essentiellement la discussion très complète de l'ouvrage de Pines & Nozières [104], § 2.4 (on pourra également se reporter aux ouvrages [68, 82]).

Les quasiparticules.— Rappelons tout d'abord que l'état fondamental du gaz de fermions libres sans interaction est une mer de Fermi : les fermions occupent les ondes planes $|\phi_{\vec{k}}\rangle$ de vecteurs d'onde $\|\vec{k}\| < k_F$. Les états excités correspondent à occuper des états au dessus de la mer de Fermi ou vider des états en dessous de ϵ_F . Lorsque l'interaction est “branchée adiabatiquement”, la théorie des liquides de Fermi postule que les excitations élémentaires sont encore des fermions³⁸ ayant les mêmes caractéristiques que les fermions nus (même spin, même charge), mais “habillées” par l'interaction ; cet habillage est notamment responsable d'une renormalisation de la masse³⁹.

³⁸ Lorsqu'une quasiparticule est introduite dans un état d'énergie $\epsilon_{\vec{k}} > \epsilon_F$, le principe d'exclusion de Pauli limite fortement le nombre des états vers lesquels la quasiparticule peut transiter. Les processus de diffusion entre électrons s'en trouvent également limités : précisément, la règle d'or de Fermi permet de montrer, qu'en $d \geq 2$, le temps de vie de la quasiparticule d'énergie ϵ est $1/\tau_{ee}(\epsilon) \propto (\epsilon - \epsilon_F)^2$ (ce comportement se comprend simplement par un argument d'espace des phase disponible pour l'état final). Ces excitations se comportent asymptotiquement comme des particules, pour $\epsilon \rightarrow \epsilon_F$, d'où le nom de “quasiparticule”.

³⁹ Cet “habillage” est dû à l'existence d'un nuage de polarisation écrantant la charge de l'électron. En se mouvant, l'électron doit donc entraîner avec lui son nuage de polarisation, ce qui engendre une masse effective supérieure à la masse nue. Cette masse effective peut être mise en évidence par des mesures de chaleur spécifique ou de susceptibilité magnétique. Par exemple, la masse effective des quasi-particules est $m^*/m_e \simeq 1.1$ dans l'argent et $m^*/m_e \simeq 12$ dans le Niobium [64] (m_e est la masse de l'électron nu).

Les excitations particule-trou.– Puisque la compressibilité fait intervenir l'opérateur densité $\hat{n}_{\vec{q}} = \sum_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}}$ qui conserve le nombre de particules, la représentation de Lehman (117) ne peut faire apparaître que des transitions entre états $|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_m\rangle$ caractérisés par un même N . Pour cette raison les excitations les plus simples révélées par cette fonction sont des excitations de *paires particule-trou*, ce que nous avons déjà identifié dans le cas des fermions libres, sur l'éq. (118).

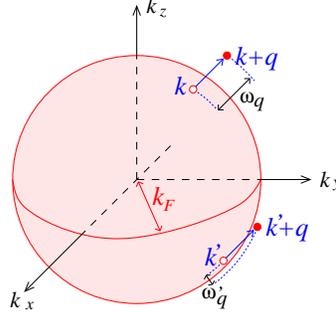


FIGURE 23 : Soit $\omega_{\vec{q}}$ l'énergie d'une excitation particule-trou de moment \vec{q} (la sphère représente la mer de Fermi à $T = 0$). La figure illustre qu'à une valeur de q donnée est associé un continuum de valeurs de l'énergie, parmi lesquelles $\omega_{\vec{q}} = \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}$ et $\omega'_{\vec{q}} = \epsilon_{\vec{k}'+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}'}$, du schéma.

Exercice 4.7 : Le continuum particule-trou.– On considère des fermions libres sans interaction dont la relation de dispersion est $\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$. Montrer que, lorsqu'une excitation particule-trou d'énergie $\omega_{\vec{q}} = \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}$ est créée à partir de la mer de Fermi, son énergie est contrainte par $\max(0, -v_F q + \frac{q^2}{2m}) \leq \omega_{\vec{q}} \leq v_F q + \frac{q^2}{2m}$, où $v_F = k_F/m$ est la vitesse de Fermi (figures 23 & 24).

L'exercice montre que pour une énergie ω_q donnée, il existe un *continuum* d'excitations (q, ω_q) particule-trou, responsable d'une structure assez molle de la compressibilité. Ces excitations existent dans un domaine du plan (q, ω) représenté sur la figure 24.

En l'absence d'interaction, l'histoire s'arrête là. Les interactions sont responsables d'autres types d'excitations. Tout d'abord, les *quasiparticules* n'étant pas de vrais états propres, l'opérateur $\hat{n}_{\vec{q}}$ couple le fondamental $|0\rangle$ non seulement aux états excités $|\varphi_n\rangle$ à une paire quasiparticule-quasitrou, mais aussi à plusieurs paires. L'énergie d'une telle excitation est alors de la forme $\Omega = \omega_{\vec{q}_1} + \dots + \omega_{\vec{q}_n}$ (avec $\omega_{\vec{q}} = \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}$). Contrairement au cas précédent, l'énergie est peu contrainte en terme des vecteurs \vec{q}_i , ce qui indique que la contribution de plusieurs paires à la fonction spectrale est une structure très molle (figure 24).

Les modes collectifs.– Les excitations particule-trou sont localisées dans le sens qu'elles mettent en jeu un nombre microscopique de fermions (un fermion et son nuage d'écrantage). Il existe également un autre type d'excitation : des ondes de compression médiées par l'interaction et mettant en jeu un mouvement *collectif* du gaz de fermions. Dans le cas d'un gaz de fermions chargés, on parle de *modes plasmons*. Nous les étudierons au chapitre 6. En particulier nous montrerons que ces *résonances* se manifestent pour des hautes fréquences⁴⁰ $\Omega_{\vec{q}} \simeq \omega_p + a \vec{q}^2$. Puisqu'il s'agit des modes propres du système, nous nous attendons à un comportement de la fonction de réponse analogue à celle de l'oscillateur harmonique⁴¹, éq. (82) : $\tilde{\chi}(\vec{q}, \omega) \propto \frac{1}{\Omega_{\vec{q}}^2 - (\omega + i0^+)^2}$. On

⁴⁰ Dans un gaz de fermions neutre on parle de "zero sound", associé à une relation de dispersion linéaire $\Omega_{\vec{q}} \simeq c \|\vec{q}\|$. *c.f.* §3.3 de la Ref. [104].

⁴¹ Rappelons qu'identifier les modes propres d'un système correspond à écrire son hamiltonien sous forme quadratique $H = \sum_{\vec{q}} \Omega_{\vec{q}} a_{\vec{q}}^\dagger a_{\vec{q}} + (\text{interactions résiduelles})$.

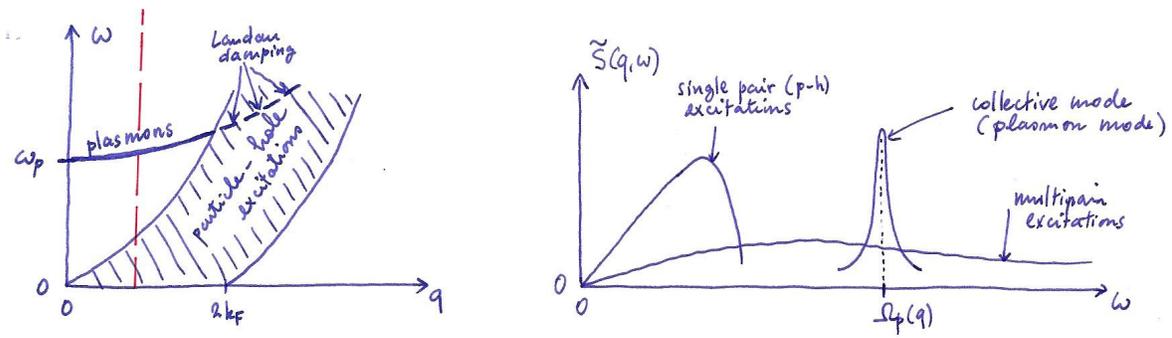


FIGURE 24 : À gauche : Domaine du plan $(|\vec{q}|, \omega)$ où est concentré le facteur de structure. La zone hachurée représente le continuum particule-trou (exercice 4.7). La ligne la relation de dispersion des plasmons (mode collectif). À droite : Le long de la ligne rouge de la figure gauche, nous représentons l'allure des différentes contributions au facteur de structure en fonction de ω . Lorsque la branche des plasmons pénètre dans la région des excitations p-h (ligne en pointillés), le couplage au continuum est responsable d'un amortissement ; on parle de "Landau damping".

s'attend donc à observer une *divergence* de la fonction de réponse, sur le spectre des modes propres, $\omega = \Omega_{\vec{q}}$. En pratique ces résonances sont amorties et la fonction de réponse présente la structure

$$\tilde{\chi}(\vec{q}, \omega) \sim \frac{1}{\omega - \Omega_{\vec{q}} + i/\tau_{\vec{q}}} \quad (130)$$

Nous illustrons cette discussion sur la figure 24 qui représente l'allure du facteur de structure (*i.e.* de la fonction spectrale) et associe les différentes structures aux différentes excitations discutées.

Sur la figure 25, une autre illustration est donnée de cette idée générale de la divergence de la fonction de réponse sur le spectre des excitations.

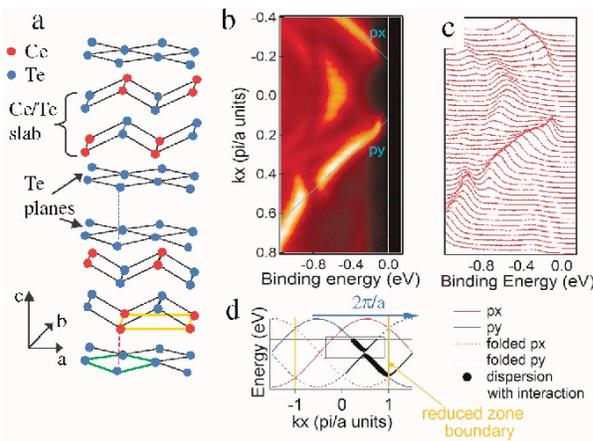


FIG. 2 (color). (a) Sketch of the CeTe_3 structure, indicating the unit cells corresponding to the orange and green BZ represented in Fig. 1. (b) Color-scale image and (c) Energy-distribution curve stacks of the band structure for $k_y = 0.45\pi/a$. In (b), the light blue lines are guide for the eyes. (d) Sketch of the dispersion for p_x and p_y (solid lines) and the folded bands (dotted lines), illustrating the situation for data in (b) (black rectangle). The thick black lines represent the dispersion after letting the main and folded bands interact. The thickness is proportional to the ARPES spectral weight.

FIGURE 25 : La fonction spectrale (partie imaginaire de la fonction de réponse) peut être étudiée par photoémission résolue angulairement (ARPES). La figure montre la fonction spectrale pour CeTe_3 , un système fortement anisotrope (2d) : des plans de Te faiblement couplés. Figure tirée de l'article V. Brouet et al, "Fermi surface reconstruction in the CDW state of CeTe_3 observed by photoemission", Phys. Rev. Lett. **93**, 126405 (2004).

4.2.4 Règles de somme

Les règles de somme du type de la règle de somme de Thomas-Reich-Kuhn discutée précédemment (exercice 3.4 page 28) sont d'autres types de contraintes sur les fonctions de corrélation : elles sont l'expression de lois de conservation, en terme des fonctions de corrélation. L'objet du paragraphe est de mentionner une version plus élaborée de la règle de Thomas-Reich-Kuhn, la règle de somme- f , qui est une conséquence de la conservation du nombre de particules. La discussion qui suit est tirée de l'ouvrage de Pines et Nozières [104].

Considérons un système de N particules de masse m_e , éventuellement en interaction. Le problème est supposé invariant par renversement du sens du temps (sans champ magnétique). L'état fondamental du système corrélé est noté $|0\rangle$ et les états excités $|n\rangle$. Nous notons $n_{\vec{q}}$ la composante de Fourier de l'opérateur densité. Nous introduisons les "forces d'oscillateurs" $f_{n0} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2m_e}{\vec{q}^2} \omega_{n0} |(n_{\vec{q}})_{0n}|^2$, analogues à celles de l'exercice 3.4.

Nous utilisons trois ingrédients :

- l'invariance par renversement du sens du temps⁴² permet d'écrire $\sum_n f_{n0} = \frac{m_e}{\vec{q}^2} \langle 0 | [[n_{\vec{q}}, H], n_{\vec{q}}^\dagger] | 0 \rangle$.
- La conservation du nombre de particules, $\dot{n}_{\vec{q}} = -i\vec{q} \cdot \vec{J}_{\vec{q}}$, prend la forme $[n_{\vec{q}}, H] = \vec{q} \cdot \vec{J}_{\vec{q}}$ où $\vec{J}_{\vec{q}}$ est la composante de Fourier de l'opérateur courant.
- La relation⁴³ $[\vec{J}_{\vec{q}}, n_{\vec{q}}^\dagger] = \frac{N}{m_e} \vec{q}$ où N est le nombre de particules.

Règle de somme f .– Les trois relations précédentes conduisent à la règle de somme :

$$\sum_n f_{n0} = N \quad (131)$$

Règle de somme pour le facteur de structure à $T = 0$ K.– La règle de somme (131) conduit à un nouveau type de contrainte sur les fonctions de corrélation. Pour le voir, nous introduisons le facteur de structure : $S(\vec{q}, t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\text{Vol}} \frac{1}{2\pi} \langle 0 | n_{\vec{q}}(t) n_{-\vec{q}} | 0 \rangle$. Une transformée de Fourier sur le temps conduit à :

$$\tilde{S}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{\text{Vol}} \sum_n |(n_{\vec{q}})_{0n}|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}) \quad (132)$$

Si $n(\vec{r})$ correspond à la densité d'atomes dans un liquide ou un cristal, le facteur de structure $\tilde{S}(\vec{q}, \omega)$ peut être mesuré directement par diffraction de neutrons. Notons que $\tilde{S}(\vec{q}, \omega < 0) = 0$, conséquence de la relation de bilan détaillé à $T = 0$ K. La règle de somme (131) se réécrit

$$\int_0^\infty d\omega \omega \tilde{S}(\vec{q}, \omega) = \frac{\vec{q}^2}{2m_e} \frac{N}{\text{Vol}} \quad (133)$$

La relation se généralise au cas des températures $T > 0$ en étendant l'intégrale à \mathbb{R} [104].

Notons qu'il est possible de trouver d'autres règles de somme pour la fonction spectrale (par exemple la règle de somme de la compressibilité due à Ornstein et Zernike). L'intégrale peut également être reliée au facteur de structure $1 + n \int d\vec{r} [g(\vec{r}) - 1] = \lim_{q \rightarrow 0} [S(\vec{q}) - 2\pi n^2 \delta(\vec{q})]$, qu'on peut encore écrire $\int \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{S}_{\text{reg}}(0, \omega) = nk_B T \kappa_T$ où $\tilde{S}_{\text{reg}}(\vec{q}, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{S}(\vec{q}, \omega) - (2\pi n)^2 \delta(\vec{q}) \delta(\omega)$.

On en trouvera une liste au §4.2 de la réf. [104]. L'intérêt des règles de somme n'est pas seulement formel (pour la discussion des lois de conservation) mais également pratique puisqu'elles permettent d'extraire de nombreuses informations d'un système complexe. D'autre part la prise en compte des règles de somme dans un schéma d'approximation permet d'éviter que les-dites approximations ne violent certaines lois de conservation.

⁴² qui nous dit que $\forall n, \exists m$ t.q. $E_n = E_m$ et $\vec{P}|n\rangle = -\vec{P}|m\rangle$. On a alors $(n_{-\vec{q}})_{0n} = (n_{\vec{q}})_{0m}$.

⁴³ Pour prouver la relation on peut exprimer les deux opérateurs en seconde quantification : $n_{\vec{q}} = \sum_{\vec{k}} c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{q}}$ et $\vec{J}_{\vec{q}} = \frac{1}{m_e} \sum_{\vec{k}} (\vec{k} + \vec{q}/2) c_{\vec{k}}^\dagger c_{\vec{k}+\vec{q}}$. Il est facile de vérifier que $[\vec{J}_{\vec{q}}, n_{-\vec{q}}] = \frac{\vec{q}'}{m_e} n_{\vec{q}-\vec{q}'}$.

☺ Les idées importantes :

- Le facteur de structure statique donne des informations sur l'ordre de la matière.
- La divergence de la fonction de réponse indique les résonances (les modes collectifs) du système : $\tilde{\chi}(q, \omega) = \infty$ pour $\omega = \omega_q - i\gamma_q$ où $\omega = \omega_q$ est le spectre de ces excitations (la relation de dispersion), et γ_q l'inverse du temps de vie de ces excitations. Deux exemples ont été discutés :
 - 1) les plasmons (ondes de densité de charges), § 4.2.3 (p. 42), § 6.3 (p. 72) & problème de l'annexe C.
 - 2) les magnons (ondes d'aimantation), problème de l'annexe B.
- Lorsqu'il existe un continuum d'excitations (par exemple des excitations à 2 particules), la fonction de réponse ne diverge pas sur une ligne du plan (q, ω) , mais est une fonction « molle » ayant pour support le domaine du plan (q, ω) correspondant au continuum (je recommande la lecture du § 2.4 de l'ouvrage [104]).

👉 Pour en savoir plus

- La discussion de la structure spatiale des fonctions de corrélation est un sujet standard qu'on trouvera discuté dans de nombreuses références : chapitre 10 de [102], chapitre 13 de [97], [104], [105], etc.

5 Dissipation quantique

5.1 Introduction

Bien que nous ayons identifié une partie dissipative dans la fonction de réponse, nous n'avons pas encore étudié de modèle quantique rendant compte de phénomènes dissipatifs : dans le cas de l'oscillateur harmonique nous avons trouvé une fonction spectrale proportionnelle à un δ de Dirac (l'analyse qualitative de la compressibilité du gaz de fermions du chapitre précédent sera complétée par la discussion du paragraphe 6.3 du prochain chapitre). L'objectif de ce chapitre est d'étudier des modèles plus riches pour lesquels la dissipation a lieu à toute fréquence.

L'étude de la dissipation en mécanique quantique a suscité un nombre considérable de travaux en physique atomique [73, 35], pour l'étude du tunneling [16], et plus récemment en physique mésoscopique [27, 26, 46]. Citons également quelques références générales [17, 80, 47, 110, 59, 60]. L'objet de ce chapitre n'est pas de fournir une discussion exhaustive du problème, mais plutôt d'introduire quelques idées à travers l'étude de plusieurs modèles. Cela nous fournira l'occasion d'appliquer les concepts qui ont été développés précédemment.

Une première question est de savoir d'où peut provenir la dissipation en mécanique quantique, alors que l'étude de la dynamique du système est bien souvent basée sur une approche hamiltonienne. Nous y répondrons dans le paragraphe suivant. Dans la section 5.3 nous reprendrons la discussion d'un article célèbre de Callen & Welton (1951) qui retrouve, à partir de la règle d'or de Fermi, le théorème de fluctuation-dissipation. Cela fournit une vision plus intuitive de ce dernier, que nous avons démontré ci-dessus de façon assez technique en jouant avec les représentations spectrales des diverses fonctions de corrélation. La fin du chapitre sera tournée vers l'étude d'un modèle complètement quantique : celui d'un oscillateur couplé à un bain d'oscillateurs harmoniques. En mécanique classique, une description phénoménologique de la dissipation est l'approche de Langevin consistant à introduire dans la relation fondamentale de la dynamique un terme de friction et un bruit. Nous montrerons sur quelles bases une telle approche est justifiée dans le cas quantique.

5.2 Préliminaire : la ligne de transmission

L'objectif de la section est de montrer comment des phénomènes dissipatifs peuvent émerger d'une description hamiltonienne.

Considérons une ligne de transmission constituée d'éléments non dissipatifs (inductances et capacités). Nous étudions dans un premier temps les modes propres de la ligne infinie, puis nous étudions l'impédance de la ligne semi infinie [78].

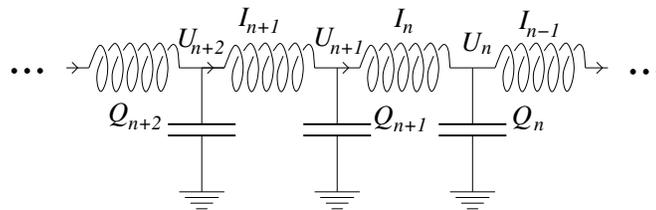


FIGURE 26 : Une ligne de transmission (un câble coaxial) possède une inductance et une capacité. Le ligne de transmission parfaite (sans élément résistif) peut être modélisée comme une série d'éléments (\mathcal{L} , \mathcal{C}) identiques.

Modes propagatifs.— Nous recherchons les modes propres : soit $I_n(t) = \tilde{I}_n e^{-i\omega t}$ le courant dans l'inductance n . Nous notons \tilde{U}_n le potentiel au nœud entre les inductances n et $n-1$: $\tilde{U}_{n+1} - \tilde{U}_n =$

$Z_L \tilde{I}_n$ et $\tilde{U}_n = Z_C(\tilde{I}_n - \tilde{I}_{n-1})$, où $Z_L = -i\omega\mathcal{L}$ et $Z_C = -1/i\omega\mathcal{C}$. Autrement dit :

$$\tilde{I}_{n+1} - \left(2 + \frac{Z_L}{Z_C}\right) \tilde{I}_n + \tilde{I}_{n-1} = 0 \quad (134)$$

Les modes propres de la ligne, $I_n(t) = e^{iqn - i\omega(q)t}$, satisfont la relation de dispersion

$$\omega(q) = \omega_0 |\sin(q/2)| \quad \text{pour } q \in]-\pi, \pi] \quad (135)$$

où $\omega_0 \stackrel{\text{def}}{=} 2/\sqrt{\mathcal{L}\mathcal{C}}$. Si a est la distance séparant deux inductances voisines, la vitesse de propagation du signal électrique (aux petites fréquences $\omega \ll \omega_0$) est $v = a/\sqrt{\mathcal{L}\mathcal{C}}$.

Modes évanescents.— Lorsque la fréquence excède $\omega_0 = 2/\sqrt{\mathcal{L}\mathcal{C}}$ la ligne ne transmet plus de signal sur de grandes distances. Les solutions de (134) sont de la forme $I_n(t) = (-1)^n e^{qn - i\omega(q)t}$ (le signe $(-1)^n$ est introduit pour assurer la continuité entre les modes propagatifs et les modes évanescents à $\omega = \omega_0$). La relation de dispersion prend la forme

$$\omega(q) = \omega_0 \cosh(q/2) \quad \text{pour } q \in \mathbb{R} \quad (136)$$

Dans une chaîne semi-infinie, un signal de fréquence légèrement supérieure au seuil, $\omega = \omega_0 + \delta\omega$, peut être injecté : l'onde pénètre sur une distance $n \sim \sqrt{\omega_0/8\delta\omega}$.

Impédance de la ligne : Comprendre l'origine de la dissipation en mécanique quantique.— Nous étudions maintenant l'impédance d'une ligne de transmission semi-infinie. Notons Z_n l'impédance de la ligne de n éléments, $Z_1 = Z_L + Z_C$. Elle obéit à la relation de récurrence :

$$Z_{n+1} = Z_L + Z_C \parallel Z_n \quad (137)$$

L'impédance de la ligne semi-infinie est solution de $Z_\infty = Z_L + \frac{1}{1/Z_C + 1/Z_\infty}$ (cf. [88] pour une discussion précise de l'existence d'une limite). Pour des fréquences appartenant au spectre des modes propagatifs nous obtenons :

$$Z(\omega) = R_{LC} \sqrt{1 - (\omega/\omega_0)^2} - i \frac{\mathcal{L}\omega}{2} \quad \text{pour } 0 \leq \omega \leq \omega_0 \quad (138)$$

où $Z(0) = R_{LC} \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\mathcal{L}/\mathcal{C}}$. Sur le spectre des modes évanescents nous obtenons :

$$Z(\omega) = -i \frac{\mathcal{L}\omega}{2} \sqrt{1 - (\omega_0/\omega)^2} - i \frac{\mathcal{L}\omega}{2} \quad \text{pour } \omega \geq \omega_0 \quad (139)$$

L'impédance $Z(\omega)$ possède une partie dissipative pour $\omega \leq \omega_0$, alors que le système n'est constitué que d'éléments non dissipatifs. En revanche la partie dissipative s'annule pour $\omega > \omega_0$. Ce résultat trouve son origine dans l'aptitude (ou non) de la ligne à envoyer l'énergie injectée à l'infini. Autrement dit à diluer l'énergie parmi le nombre infini de degrés de liberté (un continuum).

Conclusion : Une manière d'introduire de la dissipation dans un système est de le coupler à un grand système, à $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ degrés de liberté. Ces modes doivent être caractérisés par un spectre d'énergie continue, de façon à rendre possible les échanges d'énergie sur toutes les échelles. Dans la pratique un choix commode est de choisir le couplage à un "bain" d'oscillateurs harmoniques, ce que nous ferons dans la section 5.4.

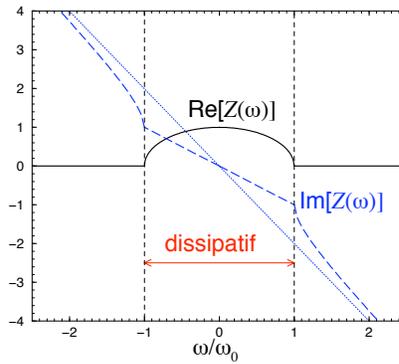


FIGURE 27 : Impédance de la ligne de transmission semi infinie.

5.3 Bruit quantique : version quantique du théorème de Nyquist

En 1951, Callen & Welton [17] ont généralisé le théorème de Nyquist⁴⁴ au cas quantique en utilisant la règle d'or de Fermi et ont retrouvé la relation (74) dans le cadre d'un modèle particulier. Pour cela ils ont étudié le modèle suivant : un système quantique décrit par l'hamiltonien H_0 , couplé à une perturbation oscillante

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{Q}V(t) \quad \text{avec } V(t) = V_\omega \cos \omega t \quad (140)$$

$\omega > 0$ par convention. Le “champ” classique $V(t)$ est couplé à l'observable Q du système. Le cours de mécanique quantique nous a appris que dans un tel modèle le système absorbe ou émet de l'énergie par quanta $\hbar\omega$. Le spectre de H_0 est supposé continu afin que le système puisse absorber/émettre à toute fréquence. On notera $|E\rangle$ les états propres de H_0 , avec $H_0|E\rangle = E|E\rangle$. On suppose que ces états sont normalisés⁴⁵ selon $\langle E|E'\rangle = \delta(E - E')$. Enfin, le système est supposé à l'équilibre thermodynamique, décrit par une fonction de distribution $f(E) \propto e^{-\beta E}$.

Afin d'établir le théorème de fluctuation-dissipation, Callen & Welton commencent par caractériser la dissipation en calculant la puissance absorbée par le système. Dans un second temps ils comparent ce résultat aux fluctuations $\langle \dot{Q}^2 \rangle$.

5.3.1 Dissipation

La dissipation a pour origine les processus d'absorption/émission, dont nous commençons par étudier les probabilités à l'aide de la règle d'or de Fermi. Le taux de probabilité pour quitter l'état $|E\rangle$ est donné par :

$$\Gamma_E = \frac{\pi}{2\hbar} V_\omega^2 \sum_{E'} |\langle E'|Q|E\rangle|^2 [\delta(E' - E - \hbar\omega) + \delta(E' - E + \hbar\omega)] = \Gamma_{E,\text{abs}} + \Gamma_{E,\text{em}} \quad (141)$$

⁴⁴ Comme on l'a vu dans l'introduction, le théorème de Nyquist est le théorème fluctuation-dissipation classique, appliqué à l'étude des fluctuations de tension aux bornes d'une résistance : $S_V = 2k_B TR$ où $S_V = \int dt \langle V(t)V(0) \rangle$.

⁴⁵ Ce choix de normalisation est lié à la forme prise par la relation de fermeture : $\int dE |E\rangle\langle E| = 1$. Autrement dit $\sum_E \rightarrow \int dE$. Il faut noter que Callen & Welton ont utilisé une autre convention (un autre choix de normalisation) : $\sum_E \rightarrow \int dE \rho(E)$ où $\rho(E)$ est la densité d'états.

Exercice 5.1 : On considère le problème libre 1d : $H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}$. Vérifier que la DoS par unité de longueur est $\rho(E) = \frac{1}{\hbar v(E)}$ où $v(E) = \frac{\hbar k(E)}{m} = \sqrt{2E/m}$ est la vitesse de groupe et \hbar la constante de Planck. Vérifier que les fonctions d'onde $\psi_{E,\pm}(x) = \frac{1}{\sqrt{\hbar v(E)}} e^{\pm ik(E)x}$ sont normalisées selon $\langle \psi_{E,\sigma} | \psi_{E',\sigma'} \rangle = \delta_{\sigma,\sigma'} \delta(E - E')$ et que la relation de fermeture prend la forme $\sum_{\sigma=\pm} \int dE |\psi_{E,\sigma}\rangle\langle \psi_{E,\sigma}| = 1$.

Cette expression nous permet d'identifier les taux d'absorption et d'émission. Pour le spectre continu $\sum_E \rightarrow \int dE$:

$$\Gamma_{E,\text{abs}} = \frac{\pi}{2\hbar} V_\omega^2 |\langle E + \hbar\omega | Q | E \rangle|^2 \quad \text{et} \quad \Gamma_{E,\text{em}} = \frac{\pi}{2\hbar} V_\omega^2 |\langle E - \hbar\omega | Q | E \rangle|^2 \quad (142)$$

Lorsque le système est dans l'état $|E\rangle$, la puissance absorbée est proportionnelle à $\hbar\omega(\Gamma_{E,\text{abs}} - \Gamma_{E,\text{em}})$. Le système occupant cet état avec probabilité $f(E)$, la puissance absorbée est finalement donnée par⁴⁶ :

$$\mathcal{P}_\omega = \hbar\omega \int dE f(E) (\Gamma_{E,\text{abs}} - \Gamma_{E,\text{em}}) \quad (143)$$

$$= \frac{1}{2}\pi\omega V_\omega^2 (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \int dE f(E) |\langle E + \hbar\omega | Q | E \rangle|^2 \quad (144)$$

où l'on a utilisé $f(E) \propto e^{-\beta E}$. Puisque la puissance absorbée est reliée à la partie réelle (dissipative) de l'admittance complexe, $\mathcal{P}_\omega = \frac{1}{2}V_\omega^2 \text{Re}[Y(\omega)]$, nous obtenons une expression de cette dernière en terme des propriétés spectrales de H_0 :

$$\text{Re}Y(\omega) = \pi\omega (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \int dE f(E) |\langle E + \hbar\omega | Q | E \rangle|^2. \quad (145)$$

5.3.2 Fluctuations

Nous nous intéressons maintenant aux fluctuations de l'observable "courant" $I \equiv \dot{Q} : \langle \dot{Q}^2 \rangle = \sum_E f(E) \langle E | \dot{Q}^2 | E \rangle = \sum_{E,E'} f(E) |\langle E' | \dot{Q} | E \rangle|^2$. En utilisant $\langle E + \hbar\omega | \dot{Q} | E \rangle = i\omega \langle E + \hbar\omega | Q | E \rangle$ nous obtenons l'expression

$$\langle \dot{Q}^2 \rangle = \hbar \int d\omega \omega^2 \int dE f(E) |\langle E + \hbar\omega | Q | E \rangle|^2 \quad (146)$$

Dans cette expression, l'intégrale sur ω porte sur des $\omega > 0$ et des $\omega < 0$. La fréquence ω de la perturbation ayant été définie positivement, nous procédons au changement de variable $\omega \rightarrow -\omega$ dans la partie $\int^0 d\omega$ de l'expression (146). Nous remarquons que les fluctuations totales sont données en intégrant la TF de la fonction d'autocorrélation (*i.e.* le spectre de bruit) sur toutes les fréquences $\langle \dot{Q}(t)^2 \rangle = S_{\dot{Q}\dot{Q}}(t=0) = \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \tilde{S}_{\dot{Q}\dot{Q}}(\omega)$, où $S_{\dot{Q}\dot{Q}}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2} \langle \{\dot{Q}(t), \dot{Q}(0)\} \rangle$ est la fonction de corrélation symétrisée⁴⁷. Nous exprimons plutôt les fluctuations de tension $V_\omega = \dot{Q}_\omega / Y(\omega)$, caractérisées par

$$\tilde{S}_{VV}(\omega) = \frac{\tilde{S}_{\dot{Q}\dot{Q}}(\omega)}{|Y(\omega)|^2} = \frac{\pi\hbar\omega^2}{|Y(\omega)|^2} (1 + e^{-\beta\hbar\omega}) \int dE f(E) |\langle E + \hbar\omega | Q | E \rangle|^2 \quad (147)$$

5.3.3 Théorème fluctuation-dissipation

Nous pouvons maintenant relier les fluctuations de tension à l'impédance $Z(\omega) = 1/Y(\omega)$:

$$\langle |V_\omega|^2 \rangle \equiv \tilde{S}_{VV}(\omega) = \text{Re}[Z(\omega)] \hbar\omega \coth \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \quad (148)$$

⁴⁶ On aura probablement remarqué qu'avec notre choix de normalisation, c'est plutôt $\Gamma_E dE$ qui a la dimension d'un taux. De même la contribution des états de $[E, E+dE]$ à la puissance absorbée par est $dE \hbar\omega (\Gamma_{E,\text{abs}} - \Gamma_{E,\text{em}})$.

⁴⁷ Le choix de faire intervenir la fonction de corrélation symétrisée vient de ce que la propriété $\tilde{S}_{\dot{Q}\dot{Q}}(-\omega) = \tilde{S}_{\dot{Q}\dot{Q}}(\omega)$ simplifie la discussion.

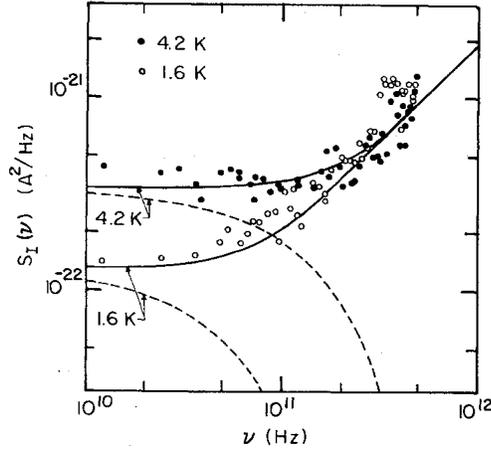


FIG. 3. Measured spectral density of current noise in shunt resistor vs the Josephson frequency $\nu = 2eV/h$ at 4.2 K (solid circles) and 1.6 K (open circles). Solid lines are predictions of Eq. (2), while dashed lines are $(4h\nu/R)|\exp(h\nu/k_B T) - 1|^{-1}$.

FIGURE 28 : Résultat expérimental de R. H. Koch et al (1981). L'équation (2) mentionnée dans la légende correspond au résultat de Callen & Welton (1951), i.e. notre eq. (149). La ligne pointillée à la conjecture de Nyquist (1928) négligeant la contribution du vide.

qui est la relation trouvée par Callen & Welton⁴⁸. Nous récrivons ce résultat de façon plus suggestive (pour $\omega > 0$) :

$$\tilde{S}_{VV}(\omega) = 2 \overbrace{\text{Re}[Z(\omega)]}^{\text{couplage au champ}} \underbrace{\left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right)}_{\text{énergie du mode } \omega} \quad (149)$$

L'impédance caractérise l'efficacité du transfert d'énergie du mode ω aux fluctuations de tension. Dans la limite classique $\hbar\omega \ll k_B T$ on retrouve bien le théorème de Nyquist : $\langle |V_\omega|^2 \rangle \equiv \tilde{S}_{VV}(\omega) = 2 \text{Re}[Z(\omega)]k_B T$. L'article de Nyquist [43] contient une conjecture sur la généralisation de son résultat au cas quantique : il suppose que l'énergie moyenne du mode ω , $k_B T$ dans la limite classique, est remplacée par $\hbar\omega \frac{1}{e^{\beta\hbar\omega} - 1}$. En d'autres termes Nyquist néglige la contribution de l'énergie du vide⁴⁹.

Qu'en est-il expérimentalement ? Résoudre le spectre de bruit en fréquence afin d'observer le régime quantique est assez irréaliste. En effet, pour une température⁵⁰ $T = 1$ K, la transition classique/quantique se produit déjà pour de très hautes fréquences (du point de vue de l'électronique) $\omega = k_B T/\hbar \sim 140$ GHz ! Koch *et al* ont proposé un dispositif astucieux permettant de relier le spectre aux hautes fréquences dans la résistance à un spectre de basse fréquence en court-circuitant la résistance par une jonction Josephson⁵¹ [31]. La mesure [32] a été effectuée

⁴⁸ Cette équation est directement donnée par (74) en choisissant les opérateurs $A = B \rightarrow \dot{Q} = I$. La fonction spectrale est reliée à l'admittance $Y \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\chi}_{IQ}$ selon : $\tilde{\xi}_{II} = \text{Im} \tilde{\chi}_{II} = \text{Im}[i\omega \tilde{\chi}_{IQ}] = \omega \text{Re}[Y]$.

⁴⁹ Nous avons sommé les contributions de l'émission et de l'absorption dans les fluctuations. Même dans son état fondamental, le mode ω peut absorber de l'énergie.

⁵⁰ Dans une expérience de transport, il ne suffit pas d'avoir un bon frigo pour sonder le régime de basse température, il faut également disposer d'une bonne détection (ampli,...) afin d'éviter de chauffer l'échantillon par effet Joule. Ceci nous donne $T \gtrsim 20$ mK et $I \gtrsim 1$ nA (septembre 2007).

⁵¹ Nous rappelons qu'une jonction Josephson est constituée par deux supraconducteurs séparés par une petite

et tranche sans ambiguïté entre la conjecture de Nyquist, $S_V(\omega) \sim \omega e^{-\beta\hbar\omega}$ dans le régime quantique, et le résultat de Callen & Welton $S_V(\omega) \sim \omega$, en faveur de ce dernier (figure 28).

Discussion : L'étude de Callen & Welton est intéressante mais certains aspects restent un peu mystérieux (au moins pour l'auteur de ces lignes). Tout d'abord nous avons commencé ce chapitre en introduisant l'idée que la dissipation pouvait être introduite en couplant le système à $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ degrés de liberté, comme par exemple les oscillateurs associés au câble coaxial. Dans la description de Callen & Welton, c'est plutôt le champ classique $V(t)$ qui a joué le rôle de réservoir d'énergie. Nous pouvons être surpris de voir intervenir l'énergie quantique du mode ω (i.e. la distribution de Bose-Einstein). Enfin, un motif d'insatisfaction est d'avoir imposé l'équilibre thermodynamique pour le système quantique $f(E) \propto e^{-\beta\omega}$, alors qu'en suivant les idées de la page 16 nous aurions préféré imposer l'équilibre thermodynamique au niveau du réservoir d'énergie.

5.4 Couplage à un environnement

5.4.1 Définition du modèle

Nous allons étudier un **modèle complètement quantique** de dissipation. Décrivons les différents ingrédients du modèle. Nous considérons un système décrit par des variables conjuguées (q, p) . Ce système est couplé à un environnement macroscopique. Par commodité cet environnement est modélisé comme un ensemble de $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ oscillateurs harmoniques de fréquences Ω_k distribuées selon une densité spectrale continue, ce qui autorise les échanges d'énergie à toute énergie. Notons (χ_k, π_k) les variables conjuguées associées au mode k . Enfin nous supposons le couplage entre le système et l'environnement linéaire :

$$H = H_{\text{sys}}(p, q) - \underbrace{q \sum_k \tilde{g}_k \chi_k}_{\text{couplage}} + \underbrace{\sum_k \frac{1}{2} (\pi_k^2 + \Omega_k^2 \chi_k^2)}_{\text{environnement}} . \quad (150)$$

Le paramètre \tilde{g}_k décrit le couplage du mode k au système (pour le traitement que nous ferons du modèle, il est important que le couplage soit linéaire, toutefois nous aurions aussi bien pu considérer une forme plus générale $(q \cos \theta + p \sin \theta) \sum_k \tilde{g}_k (\chi_k \cos \alpha_k + \pi_k \sin \alpha_k)$, où \tilde{g}_k , θ et α_k sont des paramètres du modèle). L'environnement étant macroscopique, nous le supposons à l'équilibre thermodynamique ; aucune telle hypothèse n'est faite concernant le système d'intérêt, qui atteindra un équilibre thermodynamique grâce aux échanges d'énergie avec l'environnement (cf. p. 16). Le cas libre $H_{\text{sys}} = \frac{1}{2m} p^2$ est étudié dans l'annexe A, page 100.

Dans la suite du chapitre nous allons nous concentrer sur le cas particulier où le système étudié est lui même un oscillateur harmonique : $H_{\text{sys}}(p, q) = \frac{1}{2}(p^2 + \omega_0^2 q^2)$. Ce choix permet de simplifier grandement l'analyse de la dynamique du problème, en particulier car nous pouvons combiner les équations du mouvement, deux équations différentielles couplées pour $q(t)$ et $p(t)$, pour former une unique équation différentielle du premier ordre pour $a(t) = \sqrt{\frac{m\omega_0}{2}} q(t) + i\sqrt{\frac{1}{2m\omega_0}} p(t)$. L'hamiltonien peut s'écrire en fonction des opérateurs de création/annihilation du système et de l'environnement :

$$H = \underbrace{\omega_0(a^\dagger a + 1/2)}_{H_{\text{sys}}} + a^\dagger \underbrace{\sum_k g_k b_k}_{H_{\text{int}}} + h.c. + \underbrace{\sum_k \Omega_k (b_k^\dagger b_k + 1/2)}_{H_{\text{Bath}}} \quad (151)$$

région isolante à travers laquelle peuvent tunneler des paires de Cooper. L'application d'une faible tension aux bornes de la jonction produit une différence de phase entre les supraconducteurs et génère un courant $I(t) = I_c \sin(2eVt/\hbar)$ où I_c est le courant critique. On transforme ainsi une tension continue ($\omega = 0$) en courant alternatif ($\omega = 2e|V|/\hbar$).

avec $[a, a^\dagger] = 1$ et $[b_k, b_{k'}^\dagger] = \delta_{k,k'}$. Les constantes de couplage complexes g_k sont des données du problème. Une hypothèse essentielle du modèle est de supposer que la densité spectrale des fréquences des oscillateurs Ω_k est une fonction régulière.

Illustration.— Les modèles (150) ou même (151) ont été étudiés dans de nombreux articles/ouvrages (par exemple [47, 26, 80]). Ils décrivent des situations assez diverses, parmi lesquelles :

1. **Le circuit RLC quantique.**— Une description purement hamiltonienne d'un circuit RLC est possible en représentant l'élément résistif (l'environnement) comme une ligne de transmission (cable coaxial) constituée d'inductances \mathcal{L} et de capacités \mathcal{C} (cf. § 5.2 et exercice 5.3). La ligne est caractérisée par des modes propres pour un continuum de fréquences sur $[0, \omega_c]$ où $\omega_c = 2/\sqrt{\mathcal{L}\mathcal{C}}$ et une résistance à basse fréquence $\mathcal{R} = \sqrt{\mathcal{L}/\mathcal{C}}$ (un article pédagogique est [59] ; le cas des circuits plus complexes dans [60]). Cette description hamiltonienne est appropriée pour décrire le circuit dans un régime quantique (circuit de dimension microscopique à basse température).

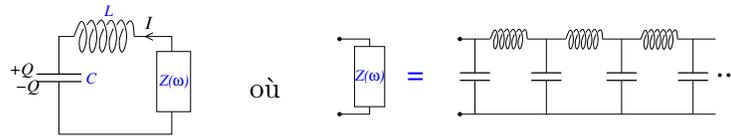


FIGURE 29 : Description hamiltonienne du circuit RLC.

2. **Le modèle spin-bosons.**— Une variante du modèle (151) est celle où l'on remplace la relation de commutation $[a, a^\dagger] = 1$ par une relation d'anticommutation $\{a, a^\dagger\} = 1$. On décrit alors l'interaction d'un système à deux niveaux avec un bain d'oscillateurs, modèle ayant de nombreuses réalisations : un atome à deux niveaux couplé au champ électromagnétique fluctuant et non résonant (l'évolution de l'opérateur densité de l'atome est appelée l'équation Pilote, cf. le chapitre IV de [73]), un système mésoscopique à deux niveaux (Qubit) en présence d'un élément résistif [46], un spin soumis aux fluctuations thermiques, etc.
3. **Le modèle de Caldeira-Leggett.**— La métastabilité a été étudiée dans un article célèbre par Caldeira et Leggett [16] : une variante du modèle (150) pour un potentiel $V(q)$ présentant un profil comme celui de la figure 30. Une question intéressante est celle de la compétition entre les fluctuations thermiques, qui sont responsables de la sortie de l'état métastable avec probabilité $P_{\text{thermal}} \sim \exp\{-\frac{1}{k_B T} \Delta V\}$, et des fluctuations quantiques (effet tunnel) conduisant à $P_{\text{tunnel}} \sim \exp\{-\frac{2}{\hbar} \int_a^b dq V(q)\}$.

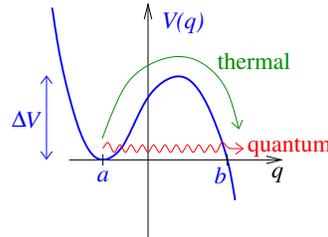


FIGURE 30 : Métastabilité.

4. Une autre situation où la compétition entre fluctuations thermiques et fluctuations quantiques se pose est celle du **mouvement brownien quantique** : si l'on considère une particule libre couplée à un bain d'oscillateurs harmoniques modélisant la force de Langevin, l'effet des fluctuations thermiques est d'induire une diffusion $x(t) \sim \sqrt{k_B T t}$ (la constante de diffusion est proportionnelle à la température d'après la relation d'Einstein). Si les fluctuations quantiques sont dominantes, on obtient une diffusion anormalement lente $x(t) \sim \sqrt{\hbar \ln t}$ (cf. annexe A) [26, 80].

✎ **Exercice 5.2 Quantification du circuit LC** : On considère un circuit formé par une bobine d'inductance L en un condensateur de capacité C . L'énergie de la bobine (terme cinétique) est $E_L = LI^2/2$ et celle de la capacité (terme potentiel) est $E_C = Q^2/2C$.

a) Donner l'expression du Lagrangien $L(Q, \dot{Q})$.

b) Le moment conjugué $\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}} = L\dot{Q} = \phi$ est le flux dans la bobine. Dédurre le Hamiltonien $H(\phi, Q)$. Comment quantifier le modèle ?

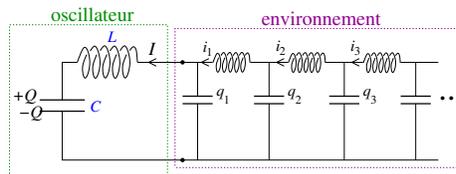


FIGURE 31 : Oscillateur électrique couplé à un environnement.

✎ **Exercice 5.3 Description hamiltonienne du circuit RLC** : On considère le circuit représenté sur la figure 31. L'oscillateur est constitué par le premier couple dans lequel est stockée l'énergie cinétique $E_c = \frac{1}{2}L I^2$ avec $I = \dot{Q}$ et l'énergie potentielle $E_p = \frac{1}{2C}Q^2$.

a) Exprimer l'énergie de l'environnement en fonction des charges q_n et des courants i_n (les éléments sont tous identiques caractérisés par la capacité \mathcal{C} et l'inductance \mathcal{L}).

b) On introduit $Q_n = \sum_{m=1}^n q_m$ mesurant la charge totale stockée dans les n premières capacités. Montrer que l'on peut séparer l'hamiltonien en trois contributions :

$$H_{\text{sys}} = \frac{1}{2}L_{\text{tot}} \dot{Q}^2 + \frac{1}{2C}Q^2 \quad (152)$$

$$H_{\text{Bath}} = \sum_{n=1}^{\infty} \left(\frac{1}{2}\mathcal{L} \dot{Q}_n^2 + \frac{1}{2\mathcal{C}}(Q_n - Q_{n-1})^2 \right) \quad (153)$$

$$H_{\text{int}} = \mathcal{L} \dot{Q} \sum_{n=1}^{\infty} \dot{Q}_n \quad (154)$$

avec la convention $Q_0 = 0$.

c) Calculer la densité de modes $\rho(\Omega)$ caractérisant l'environnement.

La ligne de transmission quantifiée est un modèle d'élément résistif couramment utilisé en physique mésoscopique [27, 110, 26].

Objectif de la section 5.4 : Étudier la dynamique de l'oscillateur harmonique couplé à l'environnement, décrit par (151). En particulier, calculer la fonction de réponse $\tilde{\chi}_{xx}(\omega)$ de l'oscillateur dans le cadre de ce modèle quantique.

Fonction de réponse et fonction de Green de l'oscillateur.— Remarquons que

$$\chi_{xx}(t) = i\theta(t)\langle [x(t), x] \rangle \quad (155)$$

$$= \frac{i\theta(t)}{2\omega_0} \left(\langle [a(t), a^\dagger] \rangle + \langle [a^\dagger(t), a] \rangle \right) = \frac{i\theta(t)}{2\omega_0} \left(\langle [a(t), a^\dagger] \rangle - \langle [a(t), a^\dagger]^* \rangle \right) \quad (156)$$

Pour ce problème quadratique il nous suffit donc de calculer la fonction de Green retardée

$$G^{\text{Ret}}(t) \stackrel{\text{def}}{=} -i\theta(t)\langle [a(t), a^\dagger] \rangle \quad (157)$$

▣ **Exercice 5.4** : Fonction de Green avancée.— On introduit : $G^{\text{Adv}}(t) \stackrel{\text{def}}{=} i\theta(-t)\langle [a(t), a^\dagger] \rangle$. Montrer que

$$[G^{\text{Adv}}(t)]^* = G^{\text{Ret}}(-t) \quad (158)$$

En déduire que $\tilde{G}^{\text{Adv}}(\omega) = \tilde{G}^{\text{Ret}}(\omega)^*$. Montrer que la compressibilité s'exprime comme :

$$\chi_{xx}(t) = -\frac{1}{\omega_0} \text{Re } G^{\text{Ret}}(t) \quad (159)$$

Notons que lorsque les oscillateurs sont découplés ($g_k = 0$) : $\tilde{G}^{\text{Ret}}(\omega) = \frac{1}{\omega - \omega_0 + i0^+}$. Nous allons calculer $\tilde{G}^{\text{Ret}}(\omega)$ par une approche perturbative (le résultat sera exact, ce qui est ici possible pour cette théorie quadratique). Pour cela nous allons utiliser un “truc” qui consiste à passer en temps imaginaire $t \rightarrow -i\tau$.

5.4.2 Méthode n°1 : Formalisme de Matsubara

Le formalisme de Matsubara des fonctions de Green à température finie [94, 98, 68, 63] est un cadre couramment utilisé pour l'étude des systèmes corrélés (en interaction) en matière condensée ou d'autres domaines. Le problème des oscillateurs nous fournit un exemple très simple pour l'introduire. Nous verrons toutefois page 60 que ce modèle peut être étudié par une méthode plus directe.

On définit

$$G(\tau, \tau') \stackrel{\text{def}}{=} -\langle T_\tau a_M(\tau) a_M^\dagger(\tau') \rangle \quad \text{pour } \tau, \tau' \in [-\beta, \beta] \quad (160)$$

où $a_M(\tau) \stackrel{\text{def}}{=} e^{\tau H} a e^{-\tau H}$ [la relation à l'opérateur en représentation de Heisenberg est $a_M(\tau) = a_H(t = -i\tau)$]. La moyenne est usuelle : $\langle \dots \rangle = \text{Tr} \{ e^{-\beta H} \dots \} / \text{Tr} \{ e^{-\beta H} \}$. Le produit chronologique est défini par

$$T_\tau [A_M(\tau) B_M(\tau')] = A_M(\tau) B_M(\tau') \quad \text{si } \tau > \tau' \quad (161)$$

$$= B_M(\tau') A_M(\tau) \quad \text{si } \tau < \tau' \quad (162)$$

(pour des opérateurs fermioniques il faudrait introduire un signe $-$ après commutation). Ces définitions ne doivent pas être un motif de perplexité, leur origine réside dans la forme prise par la méthode des perturbations en temps imaginaire, ce qui apparaîtra clairement par la suite.

Attention : ne pas confondre $a_M^\dagger(\tau) \neq [a_M(\tau)]^\dagger = a_M^\dagger(-\tau)$.

En particulier, la définition de G fait bien intervenir $G(\tau, \tau') = -\langle T_\tau a_M(\tau) a_M^\dagger(\tau') \rangle$, qui a les bonnes propriétés de périodicité (voir ci-dessous)⁵², et non $G(\tau, \tau') \neq -\langle T_\tau a_M(\tau) [a_M(\tau')]^\dagger \rangle$.

Par la suite on ne considère que des problèmes invariants par translation dans le temps et il est suffisant de considérer une fonction de Green à un temps :

$$G(\tau) \stackrel{\text{def}}{=} -\langle T_\tau a_M(\tau) a_M^\dagger(0) \rangle \quad \text{pour } \tau \in [-\beta, \beta] \quad (163)$$

Notons que le facteur d'occupation est donné par $\bar{n} = \langle a^\dagger a \rangle = -G(0^-)$ pour des bosons.

⁵² Par exemple, pour un oscillateur harmonique, on vérifie que pour $\tau > \tau'$, $\langle T_\tau a_M(\tau) a_M^\dagger(\tau') \rangle = \langle a a^\dagger \rangle e^{-\omega_0(\tau - \tau')}$ et $\langle T_\tau a_M(\tau) [a_M(\tau')]^\dagger \rangle = \langle a a^\dagger \rangle e^{-\omega_0(\tau + \tau')}$

✎ **Exercice 5.5** : Vérifier que la fonction de Green est périodique $G(\tau + \beta) = G(\tau)$. (Elle serait antipériodique $G(\tau + \beta) = -G(\tau)$ pour des opérateurs fermioniques).

La propriété précédente nous permet d'écrire :

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \tilde{G}(i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} \quad (164)$$

$$\tilde{G}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau G(\tau) e^{i\omega_n \tau} \quad (165)$$

où $\omega_n = 2n\pi/\beta$ sont appelées les *fréquences de Matsubara*. (Pour des fermions $\omega_n = (2n + 1)\pi/\beta$).

✎ **Exercice 5.6** : Considérons le cas d'un oscillateur harmonique de fréquence ω_0 . Vérifier que : $G(\tau) = -[\theta(\tau) + \bar{n}]e^{-\omega_0 \tau}$ avec $\bar{n} = \frac{1}{e^{\beta\omega_0} - 1}$ et que : $\tilde{G}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \omega_0}$.

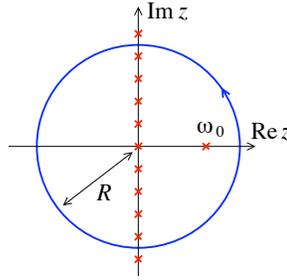


FIGURE 32 : Contour permettant de démontrer (167).

Calcul des sommes sur les fréquences de Matsubara : Les calculs font apparaître des sommes du type : $\frac{1}{\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \varphi(i\omega_n)$. Afin d'évaluer de telles sommes on considère l'intégrale $\oint dz f(z)\varphi(z)$ où

$$f(z) = \frac{1}{e^{\beta z} - 1} \quad (166)$$

Le contour est un cercle de rayon R (figure 32). Nous admettons que la fonction $\varphi(z)$ est méromorphe dans \mathbb{C} et possède des propriétés à l'infini telles que l'intégrale est nulle lorsque $R \rightarrow \infty$. Nous notons z_ℓ les pôles de $\varphi(z)$, supposés simples. Les fréquences de Matsubara étant des pôles simples de $f(z)$ nous déduisons :

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \varphi(i\omega_n) = - \sum_{\ell} f(z_\ell) \text{Résidu}[\varphi(z); z_\ell] \quad (167)$$

La formule se généralise facilement au cas où $\varphi(z)$ possède des pôles multiples. Il arrive également que $\varphi(z)$ possède une coupure sur l'axe réel. Dans ce cas le contour à considérer n'est pas un cercle mais deux demi cercles⁵³.

Exemple : Retrouvons l'expression de la fonction de Green aux temps négatifs dans le cas libre $G(\tau < 0) = \frac{1}{\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{1}{i\omega_n - \omega_0} e^{-i\omega_n \tau}$. Nous devons choisir $\varphi(z) = \frac{e^{-z\tau}}{z - \omega_0}$. On vérifie que la fonction possède les bonnes propriétés⁵⁴. Finalement l'éq. (167) nous donne $G(\tau < 0) = -f(\omega_0)e^{-\omega_0 \tau}$, qui est bien l'expression attendue.

⁵³ Lorsque $\varphi(z)$ possède une coupure sur \mathbb{R} mais pas de pôle, on montre que $\frac{1}{\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}^*} \varphi(i\omega_n) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \text{Im} \varphi(x + i0^+)$.

⁵⁴ $\oint dz f(z)\varphi(z) \rightarrow 0$ pour $R \rightarrow \infty$ est assuré par $\varphi(z)f(z) \simeq e^{-(\beta-|\tau|)z}/z \rightarrow 0$ pour $\text{Re } z \rightarrow +\infty$ et par $\varphi(z)f(z) \simeq -e^{|\tau|z}/z \rightarrow 0$ pour $\text{Re } z \rightarrow -\infty$. Notons qu'il convient de choisir $R = (2N + 1)\pi/\beta$, où $N \in \mathbb{N}$, avec $N \rightarrow \infty$ afin d'éviter que le cercle ne passe par un pôle.

Relation entre la fonction de corrélation retardée et de Matsubara : En général la quantité physique que nous cherchons à calculer est la fonction de corrélation retardée :

$$\chi^{\text{Ret}}(t) \stackrel{\text{def}}{=} -i\theta(t) \langle [A_H(t), B_H(0)] \rangle \quad (168)$$

où $A_H(t) = e^{iHt} A e^{-iHt}$, dont la représentation spectrale est :

$$\tilde{\chi}^{\text{Ret}}(\omega) = \frac{1}{Z_\beta} \sum_{n,m} A_{nm} B_{mn} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{\omega + E_n - E_m + i0^+} \quad (169)$$

(il y a un changement de signe dans la définition par rapport aux sections précédentes).

Définissons la fonction de Green en temps imaginaire correspondante :

$$\chi^{\text{Mat}}(\tau) \stackrel{\text{def}}{=} -\langle T_\tau A_M(\tau) B_M(0) \rangle \quad (170)$$

périodique. Pour $\tau > 0$ on a $\chi^{\text{Mat}}(\tau) = -\frac{1}{Z_\beta} \sum_{n,m} e^{-\beta E_n} A_{nm} B_{mn} e^{\tau(E_n - E_m)}$ d'où on déduit facilement que

$$\tilde{\chi}^{\text{Mat}}(i\omega_p) = \frac{1}{Z_\beta} \sum_{n,m} A_{nm} B_{mn} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{i\omega_p + E_n - E_m} \quad (171)$$

On voit donc que

$$\boxed{\tilde{\chi}^{\text{Ret}}(\omega) = \tilde{\chi}^{\text{Mat}}(i\omega_p \rightarrow \omega + i0^+)} \quad (172)$$

Intérêt : la méthode des perturbations est un outil central dans l'étude des systèmes corrélés. Dans la situation typique l'hamiltonien est de la forme $H = H_{\text{libre}} + H_{\text{int}}$ et la partie H_{int} est traitée perturbativement (la fonction de réponse, qui caractérise la réponse à la perturbation extérieure $H_{\text{pert}}(t)$, est calculée perturbativement par rapport à H_{int} . Ne pas confondre!). Dans ce cas on est conduit à considérer le développement perturbatif d'un opérateur d'évolution. L'examen des deux fonctions de corrélation $\chi^{\text{Ret}}(t)$ et $\chi^{\text{Mat}}(\tau)$ montre que la première fait intervenir un opérateur "d'évolution" $e^{-(\beta-it)H}$ pour un "temps" mélangeant partie réelle et imaginaire, ce qui n'est pas le cas pour la seconde qui dépend de $e^{-(\beta-\tau)H}$. La mise en œuvre de la méthode perturbative pour $\chi^{\text{Mat}}(\tau)$ est grandement simplifiée.

Méthode des perturbations : Soit $H = H_0 + H_{\text{int}}$ où H_{int} est l'hamiltonien d'interaction. L'opérateur "d'évolution" en représentation d'interaction⁵⁵ $\mathcal{U}(\tau) \stackrel{\text{def}}{=} e^{\tau H_0} e^{-\tau H}$ obéit à l'équation

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{U}(\tau) = -H_I(\tau) \mathcal{U}(\tau) \quad (173)$$

où $H_I(\tau) \stackrel{\text{def}}{=} e^{\tau H_0} H_{\text{int}} e^{-\tau H_0}$. La solution de cette équation est :

$$\mathcal{U}(\beta) = T_\tau \exp - \int_0^\beta d\tau H_I(\tau) \quad (174)$$

Le point de départ de l'approche perturbative est la relation :

$$G(\tau) = -\langle T_\tau a_M(\tau) a_M^\dagger(0) \rangle = -\frac{\langle T_\tau \mathcal{U}(\beta) a(\tau) a^\dagger \rangle_0}{\langle \mathcal{U}(\beta) \rangle_0} \quad (175)$$

⁵⁵ Si H_{int} dépend du temps on définit $U(t)$ par $\frac{\partial}{\partial \tau} U(\tau) = -H(\tau) U(\tau)$ et $U(\tau) \stackrel{\text{def}}{=} e^{\tau H_0} U(t)$.

où $a_M(\tau) = e^{\tau H} a e^{-\tau H}$ et $a(\tau) = e^{\tau H_0} a e^{-\tau H_0}$. $\langle \dots \rangle_0$ désigne la moyenne en l'absence de la perturbation. Le calcul de la fonction de Green peut être mené perturbativement en développant l'opérateur $\mathcal{U}(\beta)$ en puissances de H_{int} .

Utiliser le théorème de Wick : Le point de départ étant une théorie quadratique (H_0 est quadratique dans les opérateurs a et a^\dagger) on utilisera le théorème de Wick pour moyenner les produits d'opérateurs :

$$\begin{aligned} & \langle T_\tau a(\tau_1) a^\dagger(\tau_2) \cdots a(\tau_{2n-1}) a^\dagger(\tau_{2n}) \rangle \\ &= \langle T_\tau a(\tau_1) a^\dagger(\tau_2) \rangle \times \cdots \times \langle T_\tau a(\tau_{2n-1}) a^\dagger(\tau_{2n}) \rangle + (\text{autres contractions}) \end{aligned} \quad (176)$$

Notons que le nombre de contractions est ici $n!$ Le théorème de Wick pour $2n$ répliques d'un champ scalaire réel ferait intervenir $(2n - 1)!!$ contractions.

Calcul de $\tilde{\mathcal{G}}(i\omega_n)$ et $\tilde{\mathcal{G}}^{\text{Ret}}(\omega)$:

Théorie libre ($g_k = 0$).— revenons à notre problème d'oscillateurs couplés. On note $G(\tau)$ la fonction de Green de l'oscillateur libre et $D_k(\tau)$ celle des oscillateurs ($-\langle T_\tau b_k(\tau) b_{k'}^\dagger \rangle = \delta_{k,k'} D_k(\tau)$). En l'absence de couplages les fonctions de Green sont :

$$\tilde{G}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \omega_0} \quad (177)$$

$$\tilde{D}_k(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \Omega_k} \quad (178)$$

Calcul perturbatif :

☞ **Exercice 5.7** : Vérifier qu'à l'ordre 2 de la méthode des perturbations

$$\tilde{\mathcal{G}}(i\omega_n) = \tilde{G}(i\omega_n) + \tilde{G}(i\omega_n) \sum_k |g_k|^2 \tilde{D}_k(i\omega_n) \tilde{G}(i\omega_n) + \cdots \quad (179)$$

En déduire les règles de Feynman.

On introduit la *self énergie* :

$$\Sigma(i\omega_n) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_k |g_k|^2 \tilde{D}_k(i\omega_n) = \sum_k \frac{|g_k|^2}{i\omega_n - \Omega_k} \quad (180)$$

Le calcul perturbatif se poursuit aux ordres arbitrairement élevés (car la théorie est ici quadratique). Pour s'aider on peut donner une représentation diagrammatique de la correction d'ordre 2 calculée dans l'exercice.

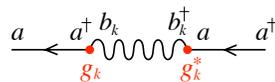


FIGURE 33 : Représentation diagrammatique de la correction perturbative d'ordre 2 calculée dans l'exercice 5.7. Les points représentent les interactions.

La fonction de Green est simplement donnée par une série géométrique⁵⁶ :

$$\tilde{\mathcal{G}}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \omega_0 - \Sigma(i\omega_n)} \quad (181)$$

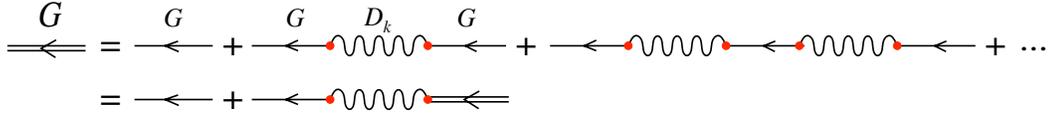


FIGURE 34 : Représentation diagrammatique de la série géométrique conduisant au résultat (181). La deuxième ligne représente l'équation de Dyson de la note de bas de page numéro 56.

✎ **Exercice 5.8** : Dans l'hamiltonien (151), on remplace l'interaction quadratique par une interaction cubique $H_{\text{int}} = a^\dagger a \sum_k \lambda_k (b_k + b_k^\dagger)$. Dessiner les diagrammes de Feynman correspondant à cette interaction. Donner les nouvelles règles de Feynman.

On procède à la substitution $i\omega_n \rightarrow \omega + i0^+$ pour revenir à la fonction de Green retardée. Introduisons

$$\Sigma^{\text{Ret}}(\omega) = \sum_k \frac{|g_k|^2}{\omega - \Omega_k + i0^+} \quad (182)$$

dont la partie imaginaire

$$- \text{Im} \Sigma^{\text{Ret}}(\omega) = \pi \sum_k |g_k|^2 \delta(\omega - \Omega_k) \quad (183)$$

nous redonne la règle d'or de Fermi, *i.e.* $-\text{Im} \Sigma^{\text{Ret}}(\omega_0)$ correspond au taux de probabilité pour que l'oscillateur se désexcite (la partie réelle $\text{Re} \Sigma^{\text{Ret}}(\omega_0)$ correspond au Lamb shift).

En supposant que la self énergie est fonction lente de la fréquence, on admet la structure :

$$\tilde{\mathcal{G}}^{\text{Ret}}(\omega) = \frac{1}{\omega - \omega_0 - \Sigma^{\text{Ret}}(\omega)} \simeq \frac{1}{\omega - \omega_0 - \delta\omega_0 + i/2\tau_0} \quad (184)$$

où $\Sigma^{\text{Ret}}(\omega_0) = \delta\omega_0 - i/2\tau_0$. On en déduit la fonction de réponse :

$$\tilde{\chi}_{xx}(\omega) = -\frac{1}{2\omega_0} \left[\tilde{\mathcal{G}}^{\text{Ret}}(\omega) + \tilde{\mathcal{G}}^{\text{Adv}}(-\omega) \right] \simeq \frac{1}{-\omega^2 + \omega_R^2 + \frac{1}{4\tau_0^2} - \frac{i}{2\tau_0}\omega} \quad (185)$$

La dissipation régularise la divergence de la fonction de réponse de l'oscillateur harmonique libre. Lorsque l'oscillateur harmonique est soumis à une force extérieure $f_\omega e^{-i\omega t}$, la puissance dissipée (l'énergie fournie au système est donc évacuée dans le bain d'oscillateurs harmoniques) est :

$$\overline{\mathcal{P}}_{\text{diss}} \propto \omega \text{Im} \tilde{\chi}_{xx}(\omega) \propto \frac{\omega^2}{(\omega^2 - \omega_{\text{tot}}^2)^2 + \omega^2/4\tau_0^2} \quad (186)$$

où $\omega_{\text{tot}}^2 = \omega_R^2 + \frac{1}{4\tau_0^2}$.

✎ **Exercice 5.9** : Montrer que la fonction de Green des oscillateurs est donnée par :

$$\tilde{D}_{k,k'}(i\omega_n) = \delta_{k,k'} \tilde{D}_k(i\omega_n) + g_k^* g_{k'} \tilde{D}_k(i\omega_n) \tilde{\mathcal{G}}(i\omega_n) \tilde{D}_{k'}(i\omega_n) \quad (187)$$

Les oscillateurs du bain sont couplés via leur couplage à l'oscillateur harmonique. Ce résultat traduit la remarque évidente que les nouveaux modes propres de cette théorie quadratique sont des combinaisons linéaires des modes propres initiaux⁵⁷.

⁵⁶ Une autre manière de voir les choses est d'écrire l'équation de Dyson $\tilde{\mathcal{G}}(i\omega_n) = \tilde{G}(i\omega_n) + \tilde{G}(i\omega_n) \Sigma(i\omega_n) \tilde{\mathcal{G}}(i\omega_n)$ dont la solution est $\tilde{\mathcal{G}}(i\omega_n) = \frac{1}{\tilde{G}(i\omega_n)^{-1} - \Sigma(i\omega_n)}$.

⁵⁷ J'insiste : il n'était nul besoin du formalisme de Matsubara pour étudier le modèle (151). Celui-ci nous a

Comparaison avec l'oscillateur harmonique amorti classique : Considérons l'oscillateur amorti décrit par les équations de Langevin :

$$\begin{cases} \dot{x} = p \\ \dot{p} = -\int dt' \gamma(t-t') p(t') - \omega_0^2 x + F(t) \end{cases} \quad (188)$$

où $F(t)$ est une force de Langevin. L'amortissement est gouverné par une fonction $\gamma(t)$. La fonction de réponse est donnée par :

$$\tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\tilde{\gamma}(\omega)} \simeq -\frac{1}{2\omega_0} \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\tilde{\gamma}(\omega_0)/2} \quad (189)$$

où l'approximation correspond à une faible friction.

Considérons le cas $\gamma(t) \rightarrow \gamma \delta(t)$. Si on introduit la variable complexe $a = \frac{1}{\sqrt{2\omega_0}}x + i\sqrt{\frac{\omega_0}{2}}p$, celle-ci obéit à l'équation $\dot{a} = -(i\omega_0 + \frac{\gamma}{2})a + \frac{\gamma}{2}a^* + i\sqrt{\frac{\omega_0}{2}}F(t)$.

Comme cela apparaîtra dans le paragraphe suivant, à cause du choix de couplage⁵⁸ $g_k a^\dagger b_k + g_k^* a b_k^\dagger$ le modèle décrit par (151) correspond à une version plus symétrique :

$$\begin{cases} \dot{x} = -\frac{\gamma}{2}x + p + F_x(t) \\ \dot{p} = -\frac{\gamma}{2}p - \omega_0^2 x + F_y(t) \end{cases} \quad (190)$$

Dans ce cas l'équation différentielle pour la variable a prend la forme : $\dot{a} = -(i\omega_0 + \frac{\gamma}{2})a + \xi(t)$. L'équation du mouvement $\ddot{x} + \gamma\dot{x} + (\omega_0^2 + \gamma^2/4)x = F(t)$ a la même structure que précédemment. Sa fonction de réponse correspond à l'éq. (185).

5.4.3 Méthode n°2 : Équation de Langevin quantique (équation de Langevin-Mori)

La stratégie de la section précédente était de donner une analyse perturbative dans l'interaction système-environnement, puis de resommer les corrections à tous les ordres, ce qui s'est révélé possible pour cette théorie quadratique. Pour le modèle considéré ici il est possible d'obtenir les mêmes résultats (la fonction de réponse) par une méthode que nous décrivons. La méthode est plus souple et plus directe, mais de portée plus limitée car elle repose sur quelques hypothèses contraignantes notamment sur la forme du couplage.

Idée générale. – Nous décrivons la stratégie présentée dans l'ouvrage [80] qui s'applique à l'étude d'un système couplé à un environnement, à condition de respecter trois conditions :

- (a) L'environnement est décrit comme un ensemble d'oscillateurs harmoniques de fréquences Ω_k . La densité spectrale des fréquences des oscillateurs est continue, ce qui autorise les échanges d'énergie à toute énergie.
- (b) Le couplage système-oscillateur est linéaire.
- (c) Le couplage (g_k) est une fonction régulière de Ω_k .

servi d'alibi pour introduire une méthode populaire.

Les fonctions de Green peuvent être retrouvées plus simplement en reliant l'hamiltonien (151) à une matrice : $H = A^\dagger \mathcal{H} A$ où le vecteur colonne A regroupe tous les opérateurs d'annihilation $A^T = (a \cdots b_k \cdots)$. On écrit la matrice $\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V$ où la partie non diagonale couple l'oscillateur ω_0 aux oscillateurs du bain $V_{0k} = g_k$. Le calcul de $\mathcal{G}(E) = \frac{1}{E - \mathcal{H}}$ est alors élémentaire : $\mathcal{G}_{00} = \frac{1}{E - \omega_0} + \sum_k \frac{1}{E - \omega_0} V_{0k} \frac{1}{E - \Omega_k} V_{k0} \frac{1}{E - \omega_0} + \cdots$. En introduisant $\Sigma(E) = \sum_k \frac{|g_k|^2}{E - \Omega_k}$ nous voyons que $\mathcal{G}_{00} = \frac{1}{E - \omega_0 - \Sigma(E)}$. De même il est facile de vérifier que : $\mathcal{G}_{0k} = \mathcal{G}_{00} \frac{g_k}{E - \Omega_k}$ et $\mathcal{G}_{kk'} = \delta_{kk'} \frac{1}{E - \Omega_k} + \frac{g_k^*}{E - \Omega_k} \mathcal{G}_{00} \frac{g_{k'}}{E - \Omega_{k'}}$. Ici, le calcul est simple (et exact) car l'interaction est quadratique.

⁵⁸ Le terme de friction usuel apparaît pour un choix de couplage de la forme $(a + a^\dagger)(b_k + b_k^\dagger)$.

La méthode permet l'analyse de l'hamiltonien (150).

On procède en trois étapes :

- (1) on écrit les équations du mouvement pour les observables du système et pour les oscillateurs (en représentation de Heisenberg) : $\dot{q}(t) = \partial_p H_{\text{sys}}(p(t), q(t))$, $\dot{p}(t) = -\partial_q H_{\text{sys}}(p(t), q(t)) + \sum_k \tilde{g}_k \chi_k(t)$, $\dot{\chi}_k(t) = \pi_k(t)$ et $\dot{\pi}_k(t) = -\Omega_k^2 \pi_k(t) + \tilde{g}_k q(t)$.
- (2) La linéarité des équations du mouvement pour les oscillateurs (hypothèses (a) et (b)) permet d'intégrer les équations du mouvement des oscillateurs.
- (3) La solution est réinjectée dans l'équation du mouvement des variables du système. Nous verrons que l'équation ainsi obtenue pour le système a la structure d'une équation de Langevin, pour des opérateurs : elle contient un terme de friction avec effet de mémoire. Les opérateurs associés aux oscillateurs harmoniques se combinent dans un terme de "bruit".

L'équation est appelée *équation de Langevin quantique* (ELQ). Cette "recette" est appliquée à l'hamiltonien (150) lorsque $H_{\text{sys}} = p^2/(2m)$ dans l'annexe A.

Une formulation plus générale du problème existe dans laquelle la procédure d'intégration sur certaines variables décrite précédemment s'interprète de manière "géométrique" (dans l'espace des opérateurs) comme une projection dans un sous espace (celui des observables d'intérêt). On aboutit aux *équations de Langevin-Mori* (ce que nous avons préféré dénommer dans ces notes les équations de Langevin quantiques). On pourra trouver une description très claire et détaillée dans les notes de cours du collège de France de 1978-1979 de Claude Cohen-Tannoudji (voir aussi [92], § 9.3.3).

Mettons ce programme en œuvre pour l'hamiltonien (151). Le choix de l'oscillateur harmonique conduit à une équation linéaire pour le système également ; de plus en travaillant avec les opérateurs création/annihilation, nous divisons le nombre d'équations par deux. Les opérateurs en représentation de Heisenberg obéissent aux équations différentielles

$$\frac{d}{dt} \hat{a}(t) = -i\omega_0 \hat{a}(t) - i \sum_k g_k \hat{b}_k(t) \quad (191)$$

$$\frac{d}{dt} \hat{b}_k(t) = -i\Omega_k \hat{b}_k(t) - i g_k^* \hat{a}(t) \quad (192)$$

L'objectif est d'obtenir une équation pour $a(t)$ et d'éliminer les variables du bain. On intègre la seconde équation :

$$\hat{b}_k(t) = \hat{b}_k(0) e^{-i\Omega_k t} - i g_k^* \int_0^t dt' \hat{a}(t') e^{-i\Omega_k(t-t')} \quad (193)$$

En insérant cette solution dans l'équation pour l'oscillateur, celle-ci prend la forme :

$$\boxed{\frac{d}{dt} \hat{a}(t) = -i\omega_0 \hat{a}(t) - \int_0^\infty dt' \gamma(t-t') \hat{a}(t') + \hat{\xi}(t)} \quad (194)$$

L'équation (194) possède bien la structure d'une équation de Langevin, pour des opérateurs. Moyennant quelques hypothèses naturelles, nous allons en effet prouver qu'elle conduit à la phénoménologie de l'équation de Langevin décrivant un oscillateur dans le régime de faible amortissement (oscillations amorties). La *fonction* complexe

$$\gamma(t) \stackrel{\text{def}}{=} \theta(t) \sum_k |g_k|^2 e^{-i\Omega_k t} \quad (195)$$

décrit l'amortissement. Cette fonction n'est en général pas locale en temps, ce qui traduit un effet de *mémoire*. L'opérateur

$$\hat{\xi}(t) \stackrel{\text{def}}{=} -i \sum_k g_k \hat{b}_k e^{-i\Omega_k t} \quad (196)$$

exprimé comme une somme sur tous les degrés de liberté de l'environnement, s'interprète comme un « opérateur de bruit ». Le calcul du commutateur

$$[\hat{\xi}(t), \hat{\xi}^\dagger(0)] = \sum_k |g_k|^2 e^{-i\Omega_k t} = \gamma(t) \quad \text{pour } t > 0 \quad (197)$$

fournit une relation réminiscente du *théorème fluctuation-dissipation* entre l'opérateur de bruit (les fluctuations) et la fonction $\gamma(t)$ contrôlant la relaxation.

Nous procédons maintenant à quelques simplifications. Tout d'abord, nous remarquons que puisque le couplage g_k est supposé varier lentement avec Ω_k , la fonction $\gamma(t)$ sera « étroite » (l'éq. (195) montre que $\gamma(t)$ est en gros la TF de $|g_k|^2$, à une densité d'états près). Nous appelons τ_m la largeur de $\gamma(t)$. Nous supposons que l'amortissement est faible : si nous introduisons le temps de relaxation τ_R , relié à l'amplitude de $\gamma(t)$, la hiérarchie des temps est $\omega_0^{-1} \lesssim \tau_m \ll \tau_R$ (ce qui précise ce que nous entendions par « étroite »). Cette remarque nous montre que dans l'éq. (194), l'intégrale $\int_0^t dt' \gamma(t') a(t-t')$ est dominée par les temps t.q. $t' \sim \tau_m \ll \tau_R$. Sur l'échelle τ_m , l'opérateur ne sent pas l'effet de la relaxation et nous pouvons remplacer l'évolution de l'opérateur par son évolution libre $a(t-t') \rightarrow a(t)e^{i\omega_0 t'}$. D'autre part nous nous intéressons à des temps t sur lesquels la relaxation se manifeste, $t \gtrsim \tau_R \gg \tau_m$; il est donc licite de remplacer la borne supérieure par l' ∞ . Ces remarques nous permettent de simplifier le terme de friction selon

$$\int_0^t dt' \gamma(t') \hat{a}(t-t') \simeq \hat{a}(t) \int_0^t dt' \gamma(t') e^{i\omega_0 t'} \simeq \hat{a}(t) \int_0^\infty d\tau \gamma(t') e^{i\omega_0 t'} \quad (198)$$

qui fait apparaître la TF de $\gamma(t)$ à la fréquence ω_0 correspondant à l'évolution libre de l'opérateur : $\tilde{\gamma}(\omega_0) = \int_0^\infty d\tau \gamma(\tau) e^{i\omega_0 \tau}$. On introduit $\tilde{\gamma}(\omega_0) \stackrel{\text{def}}{=} i\delta\omega_0 + \Gamma/2$ avec

$$\Gamma = 2\pi \sum_k |g_k|^2 \delta(\omega_0 - \Omega_k) \quad (199)$$

$$\delta\omega_0 = \sum_k \mathcal{P} \frac{|g_k|^2}{\omega_0 - \Omega_k} \quad (200)$$

(la règle d'or de Fermi et le Lamb shift). Finalement nous aboutissons à une ELQ locale en temps :

$$\boxed{\frac{d}{dt} \hat{a}(t) \simeq -(i\omega_R + \Gamma/2) \hat{a}(t) + \hat{\xi}(t)} \quad (201)$$

où

$$\omega_R \stackrel{\text{def}}{=} \omega_0 + \delta\omega_0 \quad (202)$$

est la pulsation renormalisée par le couplage à l'environnement. Puisque la friction ralentit la dynamique, on s'attend à ce que $\omega_R < \omega_0$, i.e. $\delta\omega_0 < 0$.

On peut résoudre formellement la nouvelle équation du mouvement

$$\hat{a}(t) = \hat{a}(0) e^{-(i\omega_R + \Gamma/2)t} + \int_0^t dt' \hat{\xi}(t') e^{-(i\omega_R + \Gamma/2)(t-t')} \quad (203)$$

Cette solution va nous permettre d'étudier les propriétés de l'oscillateur.

Afin d'aller plus loin, nous faisons l'hypothèse supplémentaire que les oscillateurs sont à l'équilibre thermodynamique⁵⁹ : $\langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle = \delta_{k,k'} \bar{n}_k$ où $\bar{n}_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{e^{\beta\Omega_k} - 1}$. Cette hypothèse est naturelle puisque l'environnement est constitué d'un nombre macroscopique de degrés de liberté. Nous obtenons :

$$\langle \xi^\dagger(t) \xi(0) \rangle = \sum_k |g_k|^2 \bar{n}_k e^{i\Omega_k t} \quad \text{et} \quad \langle \xi(t) \xi^\dagger(0) \rangle = \sum_k |g_k|^2 (\bar{n}_k + 1) e^{-i\Omega_k t} \quad (204)$$

Une relation utile. – Si $f(\omega)$ est une fonction variant lentement à l'échelle de Γ , nous montrons que :

$$\sum_k |g_k|^2 f(\Omega_k) \frac{e^{-i(\Omega_k - \omega_R)t}}{(\Omega_k - \omega_R)^2 + \Gamma^2/4} \simeq f(\omega_R) e^{-\Gamma|t|/2} \quad (205)$$

Une telle expression apparaît à plusieurs reprises. à des fonctions variant lentement avec Ω_k sur une échelle Γ près (le couplage $|g_k|^2$, la fonction $f(\Omega_k)$ et la densité spectrale), l'expression est celle de la transformée de Fourier d'une Lorentzienne ; elle est donc proportionnelle à $e^{-\Gamma|t|/2}$. D'autre part on remarque que $\sum_k \frac{|g_k|^2}{(\Omega_k - \omega_R)^2 + \Gamma^2/4} \approx \sum_k |g_k|^2 \frac{\pi}{\Gamma/2} \delta(\Omega_k - \omega_R) = 1$. QED.

Occupation moyenne. – Commençons par calculer l'occupation de l'oscillateur. La solution (203) nous donne

$$\langle a(t)^\dagger a(t) \rangle = \langle a(0)^\dagger a(0) \rangle e^{-\Gamma t} + \sum_k |g_k|^2 \bar{n}_k \frac{1 - 2e^{-\Gamma t/2} \cos(\Omega_k - \omega_R)t + e^{-\Gamma t}}{(\Omega_k - \omega_R)^2 + \Gamma^2/4} \quad (206)$$

En vertu du résultat (205) nous pouvons remplacer le $\cos(\Omega_k - \omega_R)t$ dans la somme par $e^{-\Gamma t/2}$

$$\langle a(t)^\dagger a(t) \rangle \simeq \langle a(0)^\dagger a(0) \rangle e^{-\Gamma t} + (1 - e^{-\Gamma t}) \sum_k \underbrace{|g_k|^2}_{\text{couplage}} \underbrace{\frac{1}{(\Omega_k - \omega_R)^2 + \Gamma^2/4}}_{\text{condition de résonance}} \underbrace{\bar{n}_k}_{\text{énergie disponible}} \quad (207)$$

Ce résultat intermédiaire s'interprète aisément : après un temps $t \gtrsim 1/\Gamma$, l'oscillateur perd la mémoire de son occupation initiale. Son occupation est alors gouvernée par celle des modes d'occupation \bar{n}_k . Le facteur $|g_k|^2 \frac{1}{(\Omega_k - \omega_R)^2 + \Gamma^2/4}$ caractérise l'efficacité du couplage en exprimant notamment une condition de résonance $\Omega_k \sim \omega_R$. Finalement, (205) nous donne l'expression plus simple

$$\boxed{\langle a(t)^\dagger a(t) \rangle \simeq \langle a(0)^\dagger a(0) \rangle e^{-\Gamma t} + (1 - e^{-\Gamma t}) \bar{n}(\omega_R)} \quad \text{où} \quad \bar{n}(\omega_R) \equiv \frac{1}{e^{\beta\omega_R} - 1}. \quad (208)$$

où $\bar{n}(\omega_R) \equiv \frac{1}{e^{\beta\omega_R} - 1}$. On retrouve une idée vue page 16 : la probabilité d'occupation des états de l'oscillateur harmonique est la distribution canonique. **L'oscillateur est thermalisé par l'intermédiaire de son interaction avec le bain d'oscillateurs.**

Revenons sur l'hypothèse utilisée que la distribution de Bose-Einstein varie lentement sur l'échelle Γ . Cette condition prend la forme :

$$\boxed{1 + \bar{n}(\omega_R) \ll k_B T / \Gamma} \quad (209)$$

⁵⁹ Autrement dit nous supposons que l'opérateur densité du système est initialement $\rho(0) = \rho_{\text{osc}} \otimes \rho_{\text{Bath}}$ avec $\rho_{\text{Bath}} = \frac{1}{Z} e^{-\beta H_{\text{Bath}}}$. Notons que ce choix, bien que courant, n'a rien d'évident. Un choix plus naturel serait $\rho(0) \propto e^{-\beta H}$ où H est l'hamiltonien complet (151). L'équation (187) suggère que $\langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle = \delta_{k,k'} \bar{n}_k + O(g_k^* g_{k'})$.

Fonction de Green retardée. – (197) nous permet de calculer le commutateur :

$$[a(t), a^\dagger(t')] \simeq \sum_k |g_k|^2 \frac{e^{-i\Omega_k(t-t')}}{(\Omega_k - \omega_R)^2 + \Gamma^2/4} \simeq e^{-i\omega_R(t-t') - \Gamma|t-t'|/2}, \quad (210)$$

pour $t, t' \gg 1/\Gamma$. Ce commutateur nous donne précisément la fonction de Green retardée $\mathcal{G}^{\text{Ret}}(t, t') \stackrel{\text{def}}{=} -i\theta(t-t')\langle [a(t), a^\dagger(t')] \rangle$:

$$\boxed{\mathcal{G}^{\text{Ret}}(t) \simeq -i\theta(t) e^{-(i\omega_R + \Gamma/2)t}} \quad (211)$$

qui est le résultat donné par l'approche diagrammatique, éq.(184).

Fonction de corrélation. – Le calcul de la fonction de corrélation $C_{xx}(t) = \langle x(t)x \rangle = \frac{1}{2\omega_0} (\langle a(t)a^\dagger \rangle + \langle a(t)^\dagger a \rangle)$ est également suggestif :

$$C_{xx}(t) = \frac{1}{\omega_0} \sum_k \frac{|g_k|^2}{(\Omega_k - \omega_R)^2 + \Gamma^2/4} \left[\bar{n}_k \cos \Omega_k t + \frac{1}{2} e^{-i\Omega_k t} \right] \quad (212)$$

où le $[\dots]$ correspond à la fonction de corrélation du mode Ω_k . En utilisant encore une fois (205), nous aboutissons à

$$C_{xx}(t) \simeq \frac{1}{\omega_0} \left[\bar{n}(\omega_R) \cos \omega_R t + \frac{1}{2} e^{-i\omega_R t} \right] e^{-\Gamma|t|/2} \quad (213)$$

que nous comparons à (78). Les corrélations disparaissent pour $t \gtrsim 1/\Gamma$ comme nous pouvions l'attendre.

Fonction de réponse. – Nous déduisons facilement la fonction de réponse, caractérisant la réponse à une force extérieure couplée à la position de l'oscillateur :

$$\chi_{xx}(t) = \frac{\theta(t)}{\omega_0} \sin(\omega_R t) e^{-\Gamma t/2} \quad (214)$$

dont la TF est

$$\boxed{\tilde{\chi}_{xx}(\omega) \simeq \frac{1}{\omega_R^2 - (\omega + i\Gamma/2)^2}} \quad (215)$$

qui présente une partie imaginaire non nulle décrivant de l'absorption $\forall \omega$. L'énergie dissipée est absorbée par le bain d'oscillateur. La fonction est tracée sur la figure.

Exercice 5.10 : Modèle spin-bosons. – On étudie le cas d'un spin couplé à un bain d'oscillateurs. Dans le modèle décrit par (151), cela revient à remplacer la relation de commutation $[a, a^\dagger] = 1$ par une relation d'anticommutation $\{a, a^\dagger\} = 1$. Donner les équations du mouvement pour les opérateurs $a(t)$ et $b_k(t)$ en représentation de Heisenberg. En faisant les mêmes approximations que celles qui ont conduit à (201), déduire l'équation de Langevin quantique pour $a(t)$.

Un article de revue sur le sujet est [36].

Conclusion. – Le résultat de l'étude du modèle de l'oscillateur couplé au bain d'oscillateurs peut paraître décevant à première vue, puisque nous avons retrouvé le résultat donné par l'approche phénoménologique de l'équation de Langevin *classique* : $\ddot{x} = -\omega_0^2 x - \gamma \dot{x} + \xi(t) + f(t)$ où $\xi(t)$ est la force de Langevin, $\langle \xi(t)\xi(t') \rangle = \delta(t-t')$, et $f(t)$ la force extérieure. Cependant notre analyse a permis de montrer rigoureusement sur quelles bases nous pouvons introduire une équation de Langevin *pour des opérateurs*, éqs. (194) & (201). Notons qu'il n'est pas surprenant que les

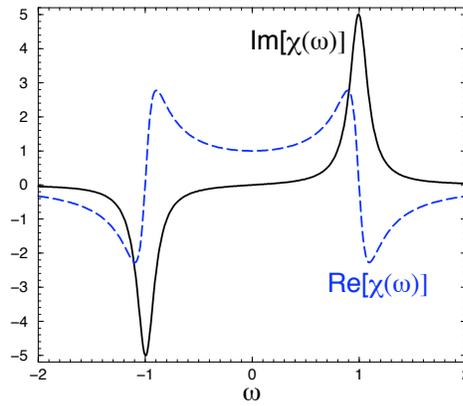


FIGURE 35 : Parties réelle (réactive) et imaginaire (dissipative) de la fonction de réponse de l'oscillateur harmonique amorti : $\tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{\omega_R^2 - (\omega + i\Gamma/2)^2} = \frac{A^2 - \omega^2 + i\Gamma\omega}{(A^2 - \omega^2)^2 + (\Gamma\omega)^2}$ où $A^2 = \omega_R^2 + \Gamma^2/4$. La puissance dissipée $\mathcal{P}_{\text{diss}} \propto \omega \tilde{\chi}(\omega)$ est positive.

résultats classiques et quantiques soient si proches dans le cas de l'analyse de la dynamique de l'oscillateur harmonique. Des propriétés proprement quantiques sont discutées dans le cas du mouvement brownien quantique (annexe A) qui montre la compétition entre fluctuations quantiques et classiques. Puisque notre point de départ a été un modèle “microscopique”, nous avons obtenu l'expression des paramètres Γ et $\delta\omega_0$ en terme des paramètres microscopiques Ω_k et g_k , éqs. (199) & (200). Enfin nous avons à nouveau vu à l'œuvre l'idée intéressante que la mise en équilibre du système microscopique se fait par son interaction avec le système macroscopique thermalisé, éq. (208). Rappelons à nouveau que les réalisations physiques de ce modèle (ou de ses variantes) sont nombreuses, du circuit RLC quantique au cas d'un atome subissant les fluctuations thermiques du champ électromagnétique.

☺ Les idées importantes :

- On peut décrire la dissipation dans un cadre hamiltonien en couplant un système à un “environnement” (un grand système ayant un nombre infini de degré de liberté).
- Un modèle populaire et commode “d'environnement” est celui du bain harmonique : un ensemble d'oscillateurs harmoniques de fréquences distribuées par une densité spectrale continue (ce qui autorise les échanges d'énergie à toute énergie). Le couplage système-environnement est choisi linéaire.
- Dans le cadre de ce modèle on reconstruit l'équation phénoménologique de Langevin, dans un cadre quantique si besoin est.

📖 Pour en savoir plus

- Les cours du collège de France de C. Cohen-Tannoudji des années 88–89 et 89–90 [71].
- L'ouvrage de Gardiner [80] (très bien écrit). Le livre de Weiss [110] (plus difficile).
- Le chapitre 6 de l'ouvrage de Nazarov & Blanter [100].
- Des articles pédagogiques [26, 59] ou plus avancés [16, 36, 60].

6 Transport électronique dans les métaux

Un métal est constitué d'atomes formant des liaisons chimiques et stabilisant leurs positions aux nœuds d'un réseau cristallin. L'énergie du système se décompose d'une part en énergie de vibration des atomes autour de leurs positions d'équilibre, ⁶⁰ et d'autre part en énergie des électrons (cinétique + potentielle). Afin de déterminer cette dernière, il convient de commencer par étudier les états propres d'un électron dans le potentiel cristallin périodique. Ces états quantiques sont décrits par des fonctions d'onde délocalisées à l'échelle du cristal, ayant des propriétés similaires aux ondes planes d'un problème libre ⁶¹. C'est pourquoi un modèle simple, fréquemment utilisé pour décrire les électrons d'un métal, est celui d'un gaz dégénéré d'électrons libres : des états d'énergie $\epsilon_{\vec{k}} = \hbar^2 k^2 / 2m$, occupés jusqu'à l'énergie de Fermi ϵ_F ⁶². L'étude de la thermodynamique des électrons et des phonons dans le cadre de cette modélisation simple a certainement été menée dans le cours de physique statistique d'équilibre. En particulier les deux contributions à l'énergie du métal peuvent être identifiées dans la chaleur spécifique : $C_{\text{phonons}} \sim T^3$ à basse énergie (modèle de Debye) et $C_{\text{electrons}} \sim T$.

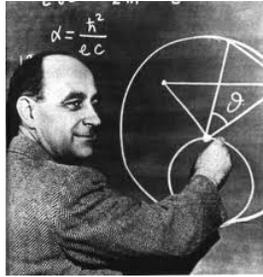


FIGURE 36 : *Enrico Fermi (1901-1954).*

✎ **Exercice 6.2 : Ordres de grandeurs dans Ag.** – Dans le modèle des électrons libres, exprimer la densité n en fonction de k_F . En déduire que la densité d'états par unité de volume est donnée par $\rho_0 = \frac{n d}{2\epsilon_F}$, où d est la dimension. Dans le cas de l'argent, qui a une surface de Fermi quasiment sphérique (figure 37), on donne $k_F^{-1} = 0.83 \text{ \AA}$. Calculer ϵ_F , la vitesse de Fermi v_F , n puis ρ_0 en $\text{eV}^{-1} \text{nm}^{-3}$.

Au moins deux choses viennent compliquer cette première description : d'une part les interactions (entre électrons mais aussi entre électrons et phonons) et d'autre part le désordre (des impuretés ou des défauts structuraux du cristal). L'interaction entre électrons est responsable du phénomène d'écrantage et de l'existence de modes collectifs de vibration du plasma

⁶⁰ les excitations élémentaires des modes propres de vibrations quantifiés sont appelés les phonons.

⁶¹ Rappelons le résultat du **théorème de Bloch** : les états propres du hamiltonien d'un électron soumis à un potentiel périodique sont de la forme $\psi_{\vec{k},n}(\vec{r}) = u_{\vec{k},n}(\vec{r}) e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ où \vec{k} est un indice continu, un vecteur de la première zone de Brillouin, et n un indice discret. La fonction $u_{\vec{k},n}(\vec{r})$ est une fonction ayant la périodicité du réseau. Le spectre des énergies $\epsilon_n(\vec{k})$ est constitué de bandes.

✎ **Exercice 6.1 :** Retrouver le résultat du théorème de Bloch pour le problème $1d : V(x) = \lambda \sum_{n \in \mathbb{Z}} \delta(x - na)$. Calculer explicitement la relation de dispersion $\epsilon_n(k)$ et la densité d'états intégrée.

Le nombre d'électrons par atome détermine le remplissage des bandes. Si la dernière bande est entièrement pleine à $T = 0 \text{ K}$ (le niveau de Fermi est dans un gap), le système est isolant. Si le niveau de Fermi se trouve au milieu d'une bande, le système est métallique.

⁶² Dans de nombreux cas, en l'absence de champ magnétique, la structure de bandes des métaux intervient peu dans leurs propriétés car seuls les électrons d'énergie proche de l'énergie de Fermi interviennent dans la physique (d'énergie $|\epsilon_k - \epsilon_F| \lesssim k_B T$). Une description globale du spectre n'est pas nécessaire : il suffit de se donner une densité d'états régulière au niveau de Fermi, comme celle des électrons libres.

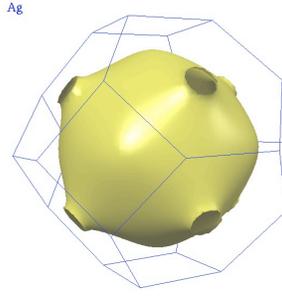


FIGURE 37 : *Surface de Fermi de l'argent*; tiré de <http://www.phys.ufl.edu/fermisurface/>

électronique ⁶³ : les modes plasmons. D'autre part le désordre limite la portée du théorème de Bloch et est responsable d'une conductivité finie à température nulle $\sigma_0 = \frac{ne^2\tau_e}{m_e}$ où n est la densité électronique et τ_e le temps de collision élastique (le temps typique entre deux collisions d'un électron sur des défauts). L'interaction électron-phonon induit des collisions supplémentaires diminuant le temps de relaxation $1/\tau_e \rightarrow 1/\tau > 1/\tau_e$. La conductivité à température finie est $\sigma = \frac{ne^2\tau}{m_e}$. Nous discutons d'abord le rôle des interactions entre électrons puis celui du désordre.

6.1 Conductivité des électrons

6.1.1 Conductivité d'un gaz d'électrons libres pour $\vec{q} = 0$

Commençons par un exercice simple consistant à calculer la conductivité d'un électron libre. Nous cherchons donc la réponse du courant de la densité de courant moyen $\vec{j} = \frac{e}{V}\vec{v}$ à une perturbation $H_{\text{pert}}(t) = -e\vec{\mathcal{E}}(t) \cdot \vec{r}$. L'équation (58) prend la forme :

$$\sigma_{ij}(t) = \frac{i}{\hbar}\theta(t)\frac{e^2}{V}\langle [v_i(t), r_j] \rangle \quad (216)$$

Dans le cas des électrons libres l'équation du mouvement est $\dot{p}_i(t) = 0$. Nous obtenons une expression indépendante de la nature de la moyenne statistique/quantique : $\sigma_{ij}^{(1e^-)}(t) = \delta_{ij}\theta(t)\frac{e^2}{mV}$. Il suffit donc de la multiplier par le nombre d'électrons pour obtenir la conductivité d'un gaz d'électrons libres

$$\sigma_{ij}(t) = \delta_{ij}\theta(t)\frac{ne^2}{m} \quad (217)$$

où $n = N/V$ est la densité moyenne d'électrons. Il traduit simplement qu'en l'absence de collision une impulsion de force à $t = 0$ engendre un mouvement rectiligne uniforme des électrons, c'est-à-dire un courant constant. Ce comportement est associé à la divergence de la transformée de Fourier pour $\omega \rightarrow 0$:

$$\tilde{\sigma}_{ij}(\omega) = \delta_{ij}\frac{ne^2}{m}\frac{i}{\omega + i0^+} \quad (218)$$

Cette divergence de la conductivité à fréquence nulle ne doit pas nous préoccuper : puisqu'elle traduit la conservation de l'impulsion de l'électron, en pratique elle ne résiste pas à l'introduction

⁶³ L'interaction a d'autres effets dont la discussion approfondie [104, 98, 82] dépasse l'ambition de ces notes. Quelques idées ont déjà été introduites au § 4.2.3.

Le régime de faible interaction : Ce chapitre discute le cas des bons conducteurs dans lesquels l'interaction est faible. Discutons précisément comment caractériser une telle situation : dans un gaz dégénéré, les électrons ont une densité $n \sim k_F^d$. Ils sont caractérisés par une énergie cinétique $E_{\text{cin}} \sim k_F^2/m \propto n^{2/d}$. D'autre part, l'énergie d'interaction (interaction coulombienne $\frac{e^2}{r}$) typique est $E_{\text{Coul}} \sim e^2k_F \propto n^{1/d}$. Nous obtenons finalement que $E_{\text{Coul}}/E_{\text{cin}} \propto n^{-1/d}$, i.e. l'interaction est faible dans la limite de *haute* densité.

des processus de collision. Rappelons nous la remarque du début du cours que le 0^+ peut s'interpréter comme un taux de relaxation $1/\tau$ extrêmement petit (pour des collisions élastiques, il s'agit de la relaxation de la direction de la vitesse, son module étant conservé).

6.1.2 Le modèle semiclassique de Drude-Sommerfeld

Le modèle phénoménologique de Drude ⁶⁴ consiste à écrire une équation de Langevin pour la vitesse de l'électron. Après moyenne sur la force de Langevin : $\langle \dot{\vec{v}} \rangle = -\frac{1}{\tau} \langle \vec{v} \rangle + \frac{e}{m} \vec{\mathcal{E}}$ où τ est un temps de relaxation de la vitesse dû aux collisions et \mathcal{E} le champ électrique⁶⁵. En écrivant la densité de courant comme $\vec{j} = ne\langle \vec{v} \rangle$ on montre que

$$\tilde{\sigma}_{\text{Drude}}(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{1}{1/\tau - i\omega} \quad (219)$$

qui correspond bien à la substitution $0^+ \rightarrow 1/\tau$ dans l'équation (218). Retrouver ce résultat par un calcul quantique n'est pas complètement évident pour la raison suivante : le résultat à fréquence nulle $\tilde{\sigma}_{\text{Drude}}(0) = \sigma_0 = \frac{ne^2\tau}{m}$ n'est pas perturbatif puisqu'en mécanique quantique c'est en le *taux* $1/\tau$ qui est calculé perturbativement (par la règle d'or de Fermi). Nous reviendrons sur ce point à la fin du chapitre.

Exercice 6.3 : Dans le cadre du modèle de Drude, calculer le tenseur de conductivité pour un gaz d'électrons bidimensionnel. Montrer que les éléments du tenseur de résistivité sont $\rho_{xx} = 1/\sigma_0$ et $\rho_{yx} = B/(ne)$.



FIGURE 38 : Paul Karl Ludwig Drude (1863-1906) & Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld (1868-1951).

6.1.3 Une règle de somme pour la conductivité

L'expression (216) nous permet de trouver très facilement une règle de somme en calculant : $\int d\omega \int dt e^{i\omega t} \sigma_{ij}(t) = 2\pi\theta(0)\delta_{ij} \frac{ne^2}{m}$ qui découle de $[r_i, p_j] = i\hbar\delta_{ij}$ (pour un électron la densité est $n = 1/V$). En utilisant⁶⁶ $\theta(0) = 1/2$ nous obtenons la règle de somme :

$$\int d\omega \tilde{\sigma}_{ij}(\omega) = \delta_{ij} \pi \frac{ne^2}{m} = \delta_{ij} \frac{\omega_p^2}{4} \quad (220)$$

⁶⁴ Sommerfeld améliore le modèle classique de Drude en prenant en compte la nature fermionique des électrons dans les calculs [64].

⁶⁵ Introduisons la notion de "mobilité", chère aux expérimentateurs : $\mu \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\langle v \rangle}{\mathcal{E}} = \frac{e\tau}{m}$.

⁶⁶ La distribution δ est apparue dans les calculs comme la partie imaginaire de $\frac{1}{t+i\epsilon} = \frac{t-i\epsilon}{t^2+\epsilon^2}$ dans la limite $\epsilon \rightarrow 0^+$. C'est donc la limite d'une fonction $\delta^\epsilon(t) = \frac{\epsilon/\pi}{t^2+\epsilon^2}$ symétrique. La cohérence des calculs impose que la fonction de Heaviside soit reliée à notre définition de la distribution de Dirac et soit donc la limite de $\theta^\epsilon(t) = \int_{-\infty}^t dt' \delta^\epsilon(t')$, qui satisfait bien $\theta^\epsilon(0) = 1/2$.

qui est bien vérifiée par l'expression de la conductivité dans le cas libre et par la formule de Drude. Le sens physique de la pulsation ω_p sera discuté plus loin. Notons que l'utilisation de cette règle de somme donne accès à la densité de porteurs, ce qui peut être utilisé expérimentalement [21].

6.2 Compressibilité du gaz de fermions libres

Avant de discuter l'effet de l'interaction entre électrons, nous introduisons un dernier ingrédient : nous analysons en détail la compressibilité du gaz d'électrons libres, qui a été obtenue dans l'exercice 4.5, p. 39 :

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_k \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+\vec{q}}}{\omega + \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + i0^+}. \quad (221)$$

Une discussion simplifiée, valable en $d = 3$ et pour $q \stackrel{\text{def}}{=} ||\vec{q}|| \ll k_F$, est donnée dans l'annexe C. Nous donnons ici une analyse plus générale, qui suit le § 4.4 de l'ouvrage [82]. Tout d'abord, un changement de variable permet d'écrire

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \left[\frac{1}{\omega - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + \epsilon_{\vec{k}} + i0^+} + \frac{1}{-\omega - \epsilon_{\vec{k}-\vec{q}} + \epsilon_{\vec{k}} - i0^+} \right]. \quad (222)$$

Dans le cadre du modèle des électrons libres $\epsilon_{-\vec{k}} = \epsilon_{\vec{k}}$ et le second terme est simplement obtenu à partir du premier par la substitution $\omega + i0^+ \rightarrow -\omega - i0^+$. En pratique $\epsilon_F \gg T$ et le gaz d'électrons peut être considéré complètement dégénéré. Nous obtenons

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = \int_0^{k_F} \frac{dk k^{d-1}}{(2\pi)^d} \int d\Omega_d \frac{1}{\omega - \frac{q^2}{2m} + i0^+ - \frac{kq}{m} \cos \theta} + (\omega + i0^+ \rightarrow -\omega - i0^+) \quad (223)$$

où $q = ||\vec{q}||$ et $d\Omega_d$ est l'élément d'angle solide en dimension d et θ l'angle entre le vecteur \vec{k} et l'axe associé à la dernière composante.

En remarquant que la densité d'états est $\rho_0 = \frac{S_d m k_F^{d-2}}{(2\pi)^d}$ et en introduisant la vitesse de Fermi $v_F = k_F/m$ on aboutit sans peine à

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = \rho_0 \frac{k_F}{q} \left[\Psi_d \left(\frac{\omega + i0^+}{v_F q} - \frac{q}{2k_F} \right) - \Psi_d \left(\frac{\omega + i0^+}{v_F q} + \frac{q}{2k_F} \right) \right] \quad (224)$$

où

$$\Psi_d(z) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^1 d\kappa \kappa^{d-1} \int \frac{d\Omega_d}{S_d} \frac{1}{z - \kappa \cos \theta} \quad (225)$$

où S_d est la surface de la sphère unité en dimension d ($S_d = 2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2)$).

✎ **Exercice 6.4** : Vérifier que

$$\Psi_2(z) = z - \sqrt{z^2 - 1}, \quad (226)$$

$$\Psi_3(z) = \frac{z}{2} + \frac{z^2 - 1}{4} [\ln(z-1) - \ln(z+1)]. \quad (227)$$

Rq : on fera attention à ce que dans \mathbb{C} on n'a pas toujours égalité entre $\ln z_1 z_2$ et $\ln z_1 + \ln z_2$.

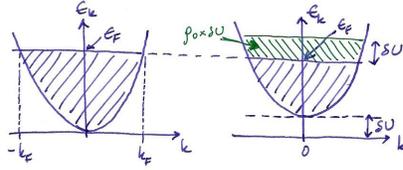


FIGURE 39 : *Interprétation de $\chi_0(\vec{q}, 0) \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} -\rho_0$.*

Le cas statique ($\omega = 0$) en $d = 3$: la fonction de Lindhard.— En utilisant le résultat (227) de l'exercice, nous pouvons nous placer à fréquence nulle. Nous obtenons facilement⁶⁷ [111, 82, 63]

$$\chi_0(\vec{q}, 0) = -\rho_0 \left[\frac{1}{2} + \frac{4k_F^2 - q^2}{8k_F q} \ln \left| \frac{2k_F + q}{2k_F - q} \right| \right] = -\rho_0 [1 + O(q^2/k_F^2)] \quad (228)$$

ce résultat est dû à Lindhard (1954). Le résultat à $q \rightarrow 0$ s'interprète aisément : à ϵ_F fixée, une variation du potentiel statique extérieur δU conduit à une variation de la densité de $\delta n = -\rho_0 \delta U$ (figure 39). La compressibilité statique est tracée sur la figure 40. Notons la divergence de la dérivée pour $q = 2k_F$, appelée **singularité de Kohn** (ou “Kohn anomaly”), sur laquelle nous reviendrons.

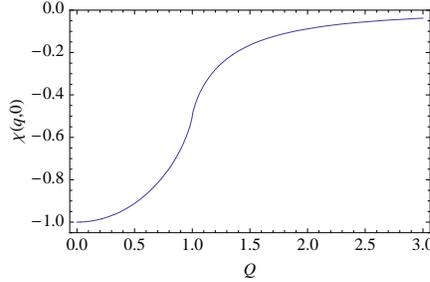


FIGURE 40 : *Fonction de Lindhard $\chi_0(\vec{q}, 0)/\rho_0$ en fonction de $Q = q/(2k_F)$.*

Développement à $\omega \rightarrow 0$ et q fini.— Le développement à $\omega \rightarrow 0$ (pour q fini) est obtenu à l'aide de (224,227) :

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = -\rho_0 \left[1 - \frac{1}{3} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^2 + \frac{i\pi}{2} \frac{\omega}{v_F q} + \dots \right] \quad \text{pour } \frac{\omega}{v_F q} \ll \frac{q}{k_F} \ll 1 \quad (229)$$

(en dimension $d = 3$).

Développement à $q \rightarrow 0$ et ω finie.— Le résultat (227) nous permet d'obtenir sans peine le développement de la compressibilité aux petits q

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = +\rho_0 \left[\frac{1}{3} \left(\frac{v_F q}{\omega} \right)^2 + \frac{1}{5} \left(\frac{v_F q}{\omega} \right)^4 + \dots \right]. \quad (230)$$

La comparaison des deux développements montre que les limites $q \rightarrow 0$ et $\omega \rightarrow 0$ ne commutent pas :

$$\lim_{q \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_0(\vec{q}, \omega) = -\rho_0 \neq \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \chi_0(\vec{q}, \omega) = 0. \quad (231)$$

⁶⁷ Rappelons que pour $x \in \mathbb{R}$, on a $\ln(x + i0^+) = \ln|x| + i\pi\theta(-x)$.

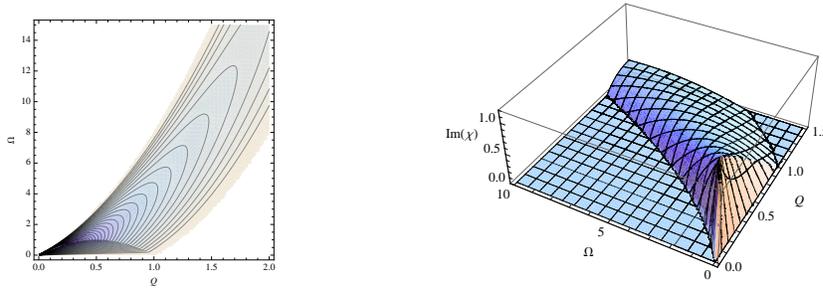


FIGURE 41 : *Domaine du plan ($Q = q/(2k_F)$, $\Omega = \omega/\epsilon_F$) où $\text{Im } \chi_0(\vec{q}, \omega) \neq 0$. Les deux paraboles délimitant la zone hachurée (excitations particule-trou) sont $\omega = q^2/(2m) + v_F q$ et $\omega = q^2/(2m) - v_F q$; cf. figure 24. À droite : plot 3d de $-\text{Im } \chi_0(\vec{q}, \omega)$.*

Partie imaginaire de la compressibilité.— La partie imaginaire de la fonction de réponse joue un rôle particulier puisqu'elle est liée à l'apparition de phénomènes dissipatifs. En utilisant (224,227) nous voyons que la compressibilité acquiert une partie imaginaire lorsque les arguments des logarithmes, $\frac{\omega}{v_F q} \pm \frac{q}{2k_F} \pm 1$, deviennent réels négatifs. Il est aisé de vérifier que ceci se produit dans le domaine du plan (q, ω) délimité par les deux paraboles $\omega = v_F q + \frac{q^2}{2m}$ et $\omega = -v_F q + \frac{q^2}{2m}$ (figure 41). Sans surprise, ce domaine correspond précisément au continuum des excitations particule-trou (figure 24, p. 44).

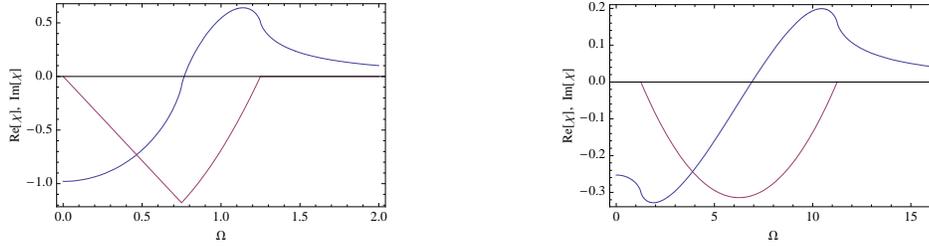


FIGURE 42 : *Parties réelle et imaginaire de la compressibilité dynamique des fermions libres en fonction de la fréquence $\Omega = \omega/\epsilon_F$; à gauche pour $q/(2k_F) = 0.25$ et à droite pour $q/(2k_F) = 1.25$.*

Nous pouvons obtenir l'expression de la partie imaginaire de la susceptibilité (224). On vérifie sans peine que⁶⁸

$$-\frac{1}{\rho_0} \text{Im } \chi_0(\vec{q}, \omega) = \pi \frac{k_F}{4q} \left\{ \left[1 - \left(\frac{\omega}{v_F q} - \frac{q}{2k_F} \right)^2 \right] \theta \left(1 - \left| \frac{\omega}{v_F q} - \frac{q}{2k_F} \right| \right) \right. \quad (232)$$

$$\left. - \left[1 - \left(\frac{\omega}{v_F q} + \frac{q}{2k_F} \right)^2 \right] \theta \left(1 - \left| \frac{\omega}{v_F q} + \frac{q}{2k_F} \right| \right) \right\} \quad (233)$$

$\text{Im } \chi_0(\vec{q}, \omega)$ est représentée sur la figure 41. Partie réelle et partie imaginaire sont tracées sur la figure 42 pour $q < 2k_F$ puis $q > 2k_F$.

⁶⁸ À partir de cette expression, nous pouvons retrouver l'allure tracée schématiquement sur la figure 24 et plus précisément sur la figure 42. Écrivons $-\frac{1}{\rho_0} \text{Im } \chi_0(\vec{q}, \omega) = \pi \frac{k_F}{4q} \Theta(\omega)$.

A) Pour $q < 2k_F$ nous obtenons un comportement linéaire $\Theta(\omega) = \frac{\omega}{\epsilon_F}$ pour $0 < \omega < v_F q - \frac{q^2}{2m}$, puis une parabole $\Theta(\omega) = 1 - \left(\frac{\omega}{v_F q} - \frac{q}{2k_F} \right)^2$ pour $v_F q - \frac{q^2}{2m} < \omega < v_F q + \frac{q^2}{2m}$ (le résultat est continu).

B) Pour $q > 2k_F$ nous n'obtenons que le deuxième de ces comportements.

6.3 Constante diélectrique, écrantage et oscillations plasma

Les électrons d'un métal forment un plasma se mouvant sur un fond chargé (les ions) de façon que l'ensemble soit électriquement neutre. Un premier phénomène induit par l'interaction entre électrons est *l'écrantage* : lorsqu'une charge est introduite dans un métal, les charges du métal se redistribuent autour d'elle pour assurer la neutralité électrique. Si on note $\phi_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega)$ le potentiel électrostatique que crée la charge dans le vide, le potentiel électrostatique prenant en compte l'effet de l'écrantage est réduit

$$\phi(\vec{q}, \omega) = \frac{\phi_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega)}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} \quad (234)$$

Cette réduction est caractérisée par la *constante diélectrique* $\epsilon(\vec{q}, \omega)$. Celle-ci est obtenue en résolvant trois équations :

1. La densité totale est la somme de la densité de charges extérieures (introduites) et de la densité de charges induite

$$\rho = \rho_{\text{ext}} + \rho_{\text{ind}} \quad (235)$$

2. Les charges du métal se réorganisent pour écranter la charge extérieure. ρ_{ind} est la variation de la densité de charges du métal due à l'introduction de la charge extérieure. Elle est donnée par le formalisme de la réponse linéaire :

$$\rho_{\text{ind}}(\vec{q}, \omega) = e^2 \chi(\vec{q}, \omega) \phi_{\text{ext}}(\vec{q}, \omega) \quad (236)$$

où χ est la fonction de réponse densité-densité.

3. La densité de charges totale obéit à l'équation de Poisson⁶⁹ :

$$\Delta\phi + 4\pi\rho = 0 \quad (237)$$

Les données du problèmes sont donc ρ_{ext} (la perturbation introduite) et χ (une propriété du système, en principe connue et qui devra être calculée plus tard). Les inconnues sont ρ_{ind} , ρ et ϕ . La résolution de (235,236,237) conduit à

$$\boxed{\frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} = 1 + U_{\text{Coul}}(\vec{q}) \chi(\vec{q}, \omega)} \quad \text{où} \quad U_{\text{Coul}}(\vec{q}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{4\pi e^2}{q^2} \quad (238)$$

représente l'interaction de Coulomb (en $d = 3$). Pour discuter plus en avant le problème de l'écrantage, il nous faut maintenant préciser l'expression de $\chi(\vec{q}, \omega)$.

Approximation 1 : $\chi \rightarrow \chi_0$

Nous avons étudié la fonction de réponse densité-densité du gaz d'électrons libres et avons en particulier montré que (exercice 4.5 p. 39 ou équation (228)) pour $q \ll k_F$

$$\chi_0(\vec{q}, 0) \simeq -\rho_0 \quad (239)$$

où ρ_0 est la densité d'états par unité de volume. Si l'on introduit ce résultat dans (238) nous sommes immédiatement confronté à un problème qui est la divergence de $1/\epsilon$ et du potentiel écranté :

$$\phi(\vec{q}) \underset{q \rightarrow 0}{\simeq} -\frac{4\pi e^2}{q^2} \phi_{\text{ext}}(\vec{q}) \xrightarrow{q \rightarrow 0} \infty \quad (240)$$

L'origine du problème est aisée à comprendre : l'écrantage n'est pas un effet perturbatif mais correspond à une réorganisation d'une quantité de charges du même ordre que celle introduite.

⁶⁹ écrite en unités CGS, *i.e.* $\epsilon_0 = 1/4\pi$ et $\mu_0 = 4\pi/c^2$. Il est commode de retenir que la charge est alors mesurée selon $e^2 \equiv \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} \simeq 14.4 \text{ eV \AA}$, si q_e est la charge en unité du système MKSA.

6.3.1 Approximation 2 : Raisonnement autocohérent (RPA)

L'écrantage est dû à l'interaction entre électrons, qui doit être prise en compte pour calculer la fonction de réponse $\chi(q, \omega)$. Ceci peut être mené dans le cadre de l'approche diagrammatique, ce qui nécessite des développements assez techniques dont l'exposition [77, 98, 68, 82, 63] va bien au delà de ces brèves remarques sur le transport. Toutefois on peut montrer que la partie dominante du résultat (la fonction diélectrique à l'approximation RPA⁷⁰) peut être retrouvée par un raisonnement autocohérent que nous décrivons [111, 64].

Nous écrivons la réponse de la densité au potentiel extérieur comme :

$$\underbrace{\rho_{\text{ind}} = e^2 \chi_0 \phi_{\text{ext}}}_{\text{approximation 1}} \longrightarrow \rho_{\text{ind}} = e^2 \chi_0 \phi \quad (241)$$

Il s'agit bien d'un raisonnement autocohérent puisque le potentiel écranté ϕ dépend de la charge induite. (235,237,241) conduisent alors à :

$$\frac{1}{\epsilon_{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega)} = \frac{1}{1 - U_{\text{Coul}}(\vec{q}) \chi_0(\vec{q}, \omega)} \quad (242)$$

Cette expression relie la constante diélectrique prenant en compte l'interaction entre électrons à la compressibilité du gaz sans interaction⁷¹. D'après (238) la fonction de réponse densité-densité du gaz d'électrons en interaction, au même niveau d'approximation, *i.e.*

$$\frac{1}{\epsilon_{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega)} = 1 + U_{\text{Coul}}(\vec{q}) \chi_{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega) \quad (243)$$

est :

$$\chi_{\text{RPA}}(q, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 - U_{\text{Coul}}(\vec{q}) \chi_0(\vec{q}, \omega)} = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{\epsilon_{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega)} \quad (244)$$

Cette expression de la compressibilité caractérise bien la réponse linéaire puisqu'elle relie le potentiel extérieur à la densité induite $\rho_{\text{ind}} = e^2 \chi_{\text{RPA}} \phi_{\text{ext}}$. La fonction de réponse χ_{RPA} peut être développée comme une série géométrique de termes en $1/q^{2n}$, qui redonne un résultat $\chi_{\text{RPA}}(\vec{q}, 0) \propto q^2$ pour $q \rightarrow 0$. Ceci soigne le problème de la divergence de $1/\epsilon$ de l'approximation 1 dans la limite $q \rightarrow 0$.

Dans l'approximation dite de Thomas-Fermi, $\chi_0(\vec{q}, 0) \simeq -\rho_0$, nous obtenons :

$$\epsilon_{\text{RPA}}(\vec{q}, 0) = 1 + \frac{\kappa^2}{q^2} \quad (245)$$

où $\kappa \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{4\pi e^2 \rho_0}$ est l'inverse de la longueur d'écrantage de Thomas-Fermi. La présence de la densité d'états dans cette longueur nous rappelle que l'écrantage vient d'une redistribution des charges, ce qui est possible si suffisamment d'états sont libres, *i.e.* si la densité d'états au niveau de Fermi est importante. **L'écrantage n'est efficace que dans un bon métal dans lequel les charges se déplacent librement.**

Pour clarifier le sens de ce résultat, nous introduisons une charge $\rho_{\text{ext}}(\vec{r}) = Q \delta(\vec{r})$ nous constatons que le potentiel dans le métal n'est pas le potentiel de Coulomb, $\phi_{\text{ext}} = \frac{4\pi Q}{q^2}$, mais le potentiel de Yukawa $\phi = \frac{\phi_{\text{ext}}}{\epsilon_{\text{RPA}}(\vec{q}, 0)} = \frac{4\pi Q}{q^2 + \kappa^2}$, *i.e.* :

$$\phi(\vec{r}) = \frac{Q}{|\vec{r}|} e^{-\kappa|\vec{r}|} \quad (246)$$

⁷⁰ RPA = Random Phase Approximation.

⁷¹ La théorie de perturbation par rapport à l'interaction montre que cette remarque doit être nuancée et la susceptibilité du membre de droite peut prendre en compte *partiellement* l'effet de l'interaction; *cf.* § 5.2 de [104] ou [68, 63].

La distribution de charges correspondante est donnée par :

$$\rho(\vec{r}) = Q \left[\underbrace{\delta(\vec{r})}_{\rho_{\text{ext}}} - \underbrace{\frac{\kappa^2}{4\pi|\vec{r}|} e^{-\kappa|\vec{r}|}}_{\rho_{\text{ind}}} \right] \Rightarrow \int d\vec{r} \rho_{\text{ind}}(\vec{r}) = -Q \quad (247)$$

où le second terme correspond à la charge induite, globalement égale à la charge extérieure.

Il est instructif de comparer les dépendances spatiales de $\chi_0(\vec{r}, \omega = 0) \simeq -\rho_0 \delta(\vec{r})$ et $\chi_{\text{RPA}}(\vec{r}, \omega = 0) \simeq -\rho_0 \left[\delta(r) - \frac{\kappa^2}{4\pi|\vec{r}|} e^{-\kappa|\vec{r}|} \right]$: l'approximation 1 ne décrit que le comportement aux distances courtes ($|\vec{r}| \ll 1/\kappa$) sur lesquelles l'écrantage n'est pas encore effectif.

Nous pouvons reformuler ces remarques en comparant ces résultats avec la situation ne prenant pas l'interaction en compte. Alors que nous avons vu que $\chi_0(q \rightarrow 0, 0) \simeq -\rho_0$, ce qui avait été interprété sur la figure 39, nous constatons que l'écrantage conduit à $\chi(q \rightarrow 0, 0) \simeq -\rho_0 \frac{q^2}{q^2 + \kappa^2} \rightarrow 0$, ce qui exprime que, grâce à l'écrantage, l'électronneutralité reste globalement ($q \rightarrow 0$) satisfaite.

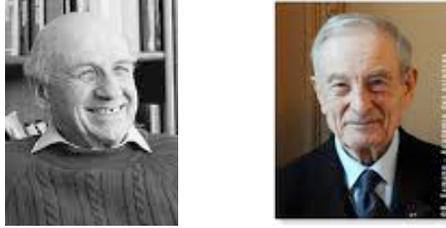


FIGURE 43 : *Walter Kohn (1923-), prix Nobel de chimie 1998, et Jacques Friedel (1921-).*

Singularité de Kohn et oscillations de Friedel.— La discussion précédente repose sur l'approximation RPA, éq. (242), puis sur l'approximation de Thomas-Fermi $\chi_0(\vec{q}, 0) \simeq -\rho_0$. Tout en restant dans le cadre de l'approximation RPA nous aurions aussi bien pu injecter dans l'éq. (242) l'expression de la compressibilité des fermions libres (228), ce qui permettrait d'accéder à la physique aux petites distances (comparables à k_F^{-1}). La structure de la fonction de Lindhard, et en particulier la singularité de Kohn ⁷² à $q = 2k_F$, est responsable de l'existence de petites modulations spatiales de la densité autour de la charge écrantée, sur l'échelle $2k_F$. On parle d'*oscillations de Friedel* [104, 111].

Interaction effective dans un métal.— Une conséquence très importante du phénomène d'écrantage est que l'interaction effective entre deux charges dans le métal n'est pas décrite par le potentiel de Coulomb mais par le potentiel de Yukawa (246). Par exemple dans l'argent ($k_F^{-1} = 0.83 \text{ \AA}$), la densité d'états est $\rho_0 = 18 \text{ eV}^{-1} \text{ nm}^{-3}$. On trouve une longueur d'écran $\kappa^{-1} \simeq 0.5 \text{ \AA}$. *L'interaction effective entre deux électrons du métal est à très courte portée*

$$\mathcal{U}_{\text{eff}}(\vec{r}) = \frac{e^2}{|\vec{r}|} e^{-\kappa|\vec{r}|} \approx \frac{1}{\rho_0} \delta(\vec{r}) . \quad (248)$$

Notons que jusqu'à présent nous n'avons pas évoqué les effets dynamiques : l'écrantage nécessite un déplacement de charges qui n'est pas instantané. En général il faut également prendre en compte la dépendance en fréquence de la constante diélectrique : $\mathcal{U}_{\text{eff}}(\vec{q}, \omega) = \frac{U_{\text{Coul}}(\vec{q})}{\epsilon(\vec{q}, \omega)}$ où $U_{\text{Coul}}(\vec{q}) = 4\pi e^2/q^2$ est l'interaction coulombienne. Dans l'approximation RPA, $\epsilon(\vec{q}, \omega) \rightarrow \epsilon_{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega)$,

⁷² Kohn a proposé d'exploiter la présence de cette "anomalie" (de Kohn) pour visualiser la surface de Fermi d'un métal [33].

on obtient

$$\mathcal{U}_{\text{eff}}(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{U_{\text{Coul}}(\vec{q})^{-1} - \chi_0(\vec{q}, \omega)}. \quad (249)$$

On parle d'*écranage dynamique*.

Par la suite nous notons simplement $\epsilon_{\text{RPA}} \rightarrow \epsilon$ et $\chi_{\text{RPA}} \rightarrow \chi$ que nous distinguons bien de χ_0 , la compressibilité du gaz d'électrons libres.

La conductivité.– La conductivité est définie comme la réponse du courant (induit) au champ électrique (écrané) $\vec{\mathcal{E}} = -\vec{\nabla}\phi$:

$$\vec{j}_{\text{ind}} = \sigma \vec{\mathcal{E}} \quad (250)$$

On trouvera également définie une conductivité [89] reliant courant induit au champ extérieur $\vec{\mathcal{D}} = \epsilon \vec{\mathcal{E}} = -\nabla\phi_{\text{ext}} : \vec{j}_{\text{ind}} = \sigma^e \vec{\mathcal{D}}$. Les deux conductivités sont reliées par $\sigma^e = \sigma/\epsilon$.

À cause de la conservation du courant, $\omega\rho_{\text{ind}} = \vec{q} \cdot \vec{j}_{\text{ind}}$, la conductivité est étroitement liée à la fonction de réponse densité-densité :

$$\boxed{\sigma(\vec{q}, \omega) = \frac{i\omega}{q^2} e^2 \chi_0(\vec{q}, \omega)} \quad (251)$$

ou $\sigma^e = \frac{i\omega}{q^2} e^2 \chi$. Nous déduisons la relation entre constante diélectrique et conductivité⁷³ :

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma(\vec{q}, \omega) \quad (252)$$

Nous vérifions également que $\frac{1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} = 1 - \frac{4\pi i}{\omega} \sigma^e(\vec{q}, \omega)$.

Nous avons vu que la partie réelle de la conductivité décrit la dissipation, sa partie imaginaire est donc liée à l'indice du milieu et au phénomène de réfraction.

6.3.2 Théorème fluctuation-dissipation dans le métal

Nous étudions dans ce paragraphe les fluctuations de charges et de tension dans le métal. La perturbation est de la forme $H_{\text{pert}}(t) = \int d\vec{r} \rho_{\text{ind}}(\vec{r}) \phi_{\text{ext}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \rho_{-\vec{q}}^{\text{ind}} \phi_{\vec{q}}^{\text{ext}}(t)$ (en l'absence de la perturbation le métal est neutre). Rappelons que la réponse de la densité ($n = \rho/e$) au potentiel ($V = e\phi$) est caractérisée par la fonction de réponse densité-densité $\chi_{\vec{q}}(t) = -\frac{i}{\hbar V} \theta(t) \langle [n_{\vec{q}}(t), n_{-\vec{q}}] \rangle$, liée à la fonction spectrale $\xi_{\vec{q}}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\hbar V} \langle [n_{\vec{q}}(t), n_{-\vec{q}}] \rangle$ par : $\xi(\vec{q}, \omega) = -\text{Im} \chi(\vec{q}, \omega)$. On se convainc que cette dernière caractérise la dissipation en introduisant une perturbation sinusoïdale $\phi_{\vec{q}}^{\text{ext}}(t) = \phi_{\vec{q}, \omega}^{\text{ext}} \cos \omega t$. La puissance moyenne dissipée est

$$\overline{\mathcal{P}}_{\text{diss}} = \frac{e^2 \omega}{2} \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \text{Im} [\chi(\vec{q}, \omega)] |\phi_{\vec{q}, \omega}^{\text{ext}}|^2 \quad (253)$$

on a utilisé $\chi(\vec{q}, \omega)^* = \chi(-\vec{q}, -\omega)$.

La fonction de corrélation *non symétrisée* $C_{\vec{q}}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{V} \langle n_{\vec{q}}(t) n_{-\vec{q}} \rangle$, caractérisant les fluctuations, est liée à la fonction spectrale par la relation (72) et donc à la fonction de réponse

$$C(\vec{q}, \omega) = \frac{2\hbar}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \text{Im} [-\chi(\vec{q}, \omega)] \quad (254)$$

Ce résultat caractérise les fluctuations de la densité induite $e n_{\vec{q}} \rightarrow \rho_{\vec{q}}^{\text{ind}}$ (l'opérateur qui apparaît dans $H_{\text{pert}}(t)$); nous introduisons la notation plus suggestive $\langle |\rho_{\vec{q}, \omega}^{\text{ind}}|^2 \rangle \equiv e^2 C(\vec{q}, \omega)$. En

⁷³ dans les unités CGS une conductivité a la dimension d'une fréquence en 3d (car $[e^2] = \text{énergie} \times \text{longueur}$).

utilisant la relation (238) et l'équation de Poisson nous obtenons l'expression pour les fluctuations de potentiel :

$$e^2 \langle |\phi_{\vec{q},\omega}^{\text{ind}}|^2 \rangle = \frac{2\hbar}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \frac{4\pi e^2}{q^2} \text{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(\vec{q}, \omega)} \right] = \frac{2\hbar}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \text{Im} [-\mathcal{U}_{\text{eff}}(\vec{q}, \omega)] \quad (255)$$

où $\mathcal{U}_{\text{eff}}(\vec{q}, \omega)$ est l'interaction dynamiquement écrantée introduite plus haut. Nous rappelons que le théorème fluctuation-dissipation relie les fluctuations (ici du potentiel) en l'absence de la perturbation (*i.e.* lorsque $\phi_{\vec{q},\omega} = \phi_{\vec{q},\omega}^{\text{ind}} = \frac{4\pi}{q^2} \rho_{\vec{q},\omega}^{\text{ind}}$) au coefficient de réponse (ici la compressibilité ou la constante diélectrique).

✎ **Exercice 6.5** : Vérifier que $\langle |\phi_{\vec{q},\omega}^{\text{ind}}|^2 \rangle \simeq \frac{2k_B T}{\sigma_0 q^2}$ pour les basses fréquences (σ_0 est la conductivité de Drude). Discuter la condition “ ω petite”.

📖 Pour en savoir plus

Sur l'écrantage et le théorème fluctuation-dissipation dans les métaux : [111, 68]. Le théorème fluctuation-dissipation dans des géométries complexes a été discuté très récemment dans [54].

6.3.3 Les oscillations plasma et la non commutativité des limites $q \rightarrow 0$ & $\omega \rightarrow 0$

Nous avons déjà observé que $\lim_{q \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \chi(\vec{q}, \omega) \neq \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \chi(\vec{q}, \omega)$ (avec notamment un changement de signe de la compressibilité du gaz d'électrons sans interaction suivant l'ordre des limites : éq. (229) et éq. (230)). Cette propriété est également vraie pour la conductivité $\lim_{q \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma(\vec{q}, \omega) \neq \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \sigma(\vec{q}, \omega)$. Loin d'être une curiosité mathématique, cette remarque est associée à une physique riche.

- $\lim_{q \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0}$: la physique de l'écrantage statique.– L'étude du cas statique, $\omega = 0$, correspond à la discussion de la section précédente de la physique de l'écrantage. Ce résultat conduit au comportement $\sigma(\vec{q}, \omega) \simeq -\frac{i\omega}{q^2} e^2 \rho_0$ pour la conductivité.
- $\lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0}$: les oscillations de plasma.– La limite inverse est associée aux effets dynamiques du gaz de fermions. Si nous injectons les deux premiers termes du développement (230) dans le résultat (244) nous obtenons pour la compressibilité du gaz en interaction

$$\chi(\vec{q}, \omega) \simeq \rho_0 \frac{\frac{1}{3} \left(\frac{v_F q}{\omega} \right)^2}{1 - \frac{\kappa^2}{q^2} \left[\frac{1}{3} \left(\frac{v_F q}{\omega} \right)^2 + \frac{1}{5} \left(\frac{v_F q}{\omega} \right)^4 \right]}. \quad (256)$$

L'analyse du dénominateur nous montre que celui-ci s'annule pour $\omega^2 \simeq \omega_p^2 + \frac{3}{5}(v_F q)^2$, où

$$\omega_p \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\kappa v_F}{\sqrt{3}} = \sqrt{4\pi \frac{n e^2}{m}} \quad (257)$$

est la *fréquence plasma*. Autrement dit nous avons mis en évidence l'existence de *modes collectifs* (résonances) décrivant des ondes de densité du gaz de fermions. Ces ondes de compression du plasma sont appelées les modes de *plasmons*. Leur relation de dispersion est donc donnée par

$$\Omega_p(\vec{q}) = \sqrt{\omega_p^2 + \frac{3}{5}(v_F q)^2} \simeq \omega_p + \frac{3k_F}{5\kappa} \frac{q^2}{2m}. \quad (258)$$

Ces modes ne peuvent être excités qu'en fournissant une énergie importante au système⁷⁴, d'ordre $\omega_p \sim \frac{\kappa}{k_F} \epsilon_F$. La compressibilité présente finalement un comportement divergent sur la relation

⁷⁴ Comme nous l'avons déjà mentionné au § 4.2.3, l'existence du gap ω_p vient de l'interaction de Coulomb. Pour un gaz de fermions neutres (l'Helium-3 par exemple), on parle de “*zero sound*” pour désigner les modes collectifs de compression ; comme on peut s'y attendre (en faisant $\omega_p \rightarrow 0$), leur relation de dispersion est linéaire aux petits vecteurs d'onde $\Omega(\vec{q} \rightarrow \vec{0}) \simeq c_p q$ [104].

de dispersion de ces excitations

$$\chi(\vec{q}, \omega) \underset{q \ll k_F}{\simeq} \rho_0 \frac{\frac{1}{3}(v_F q)^2}{(\omega + i0^+)^2 - [\Omega_p(\vec{q})]^2} \quad (259)$$

(nous avons re-introduit le $+i0^+$ pour satisfaire le principe de causalité). Nous renvoyons à la discussion du § 4.2.3, p. 42.

Nous pouvons maintenant passer à l'analyse de la constante diélectrique. En utilisant (238) nous aboutissons à

$$\epsilon(\vec{q}, \omega) \underset{q \ll k_F}{\simeq} 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \frac{3}{5}(v_F q)^2}. \quad (260)$$

À $q = 0$ nous obtenons simplement

$$\epsilon(\vec{0}, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (261)$$

Ce résultat simple est relié au comportement $\chi_0(\vec{q}, \omega) \simeq \frac{n q^2}{m \omega^2}$ de la compressibilité nue⁷⁵ et au comportement $\sigma(\vec{0}, \omega) \simeq \frac{ne^2}{m} \frac{i}{\omega}$ de la conductivité, obtenu dans le § 6.1.1 d'introduction.

Pour insister sur l'origine du phénomène de résonance, nous reformulons le problème d'une manière plus simple (négligeant la dépendance en \vec{q}). Nous reprenons la résolution du système d'équations (235,241,237), en insistant sur l'image des excitations collectives du gaz d'électrons.

Tout d'abord nous retrouvons la compressibilité libre : considérons une charge en x soumise à un champ électrique oscillant. L'équation fondamentale de la dynamique prend la forme $-\omega^2 m \vec{r}_\omega = e \vec{\mathcal{E}}_\omega$ et donc $\vec{P}_\omega = ne \vec{r}_\omega = -\frac{ne^2}{m \omega^2} \vec{\mathcal{E}}_\omega$. En utilisant $\rho_{\text{ind}} = -\vec{\nabla} \cdot \vec{P}$ on trouve finalement $\rho_{\text{ind}} = i \frac{ne^2}{m \omega^2} \vec{q} \cdot \vec{\mathcal{E}}_\omega = \frac{ne^2 q^2}{m \omega^2} \phi_\omega$ ce qui nous donne bien la compressibilité nue $\chi_0(\vec{q}, \omega) \simeq \frac{n q^2}{m \omega^2}$. Notons que l'aspect dynamique du problème est bien introduit dans l'éq. (241) à travers la réponse (retardée) $\chi_0(\vec{q}, \omega)$.

Rappelons que les trois inconnues du système (235,241,237) sont ρ , ρ_{ind} et ϕ (ρ_{ext} est une "donnée" du problème). Commençons par éliminer ϕ en utilisant (237) : $\rho_{\text{ind}} = \frac{ne^2 q^2}{m \omega^2} \phi_\omega = \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \rho$. Cette équation nous permet de trouver une équation unique pour la densité totale $\rho - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \rho = \rho_{\text{ext}}$, *i.e.* en temps

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega_p^2 \right) \rho = \frac{d^2 \rho_{\text{ext}}}{dt^2} \quad (262)$$

décrivant les *oscillations globales du plasma*, de fréquence propre ω_p . L'écrantage induit une "force" de rappel (la densité induite est $\omega_p^2 \rho = -\frac{d^2 \rho_{\text{ind}}}{dt^2}$) ; celle-ci trouve son origine dans l'interaction entre électrons $\omega_p^2 \propto e^2$. L'annulation de la constante diélectrique à $\omega = \omega_p$ et la divergence de la compressibilité $\chi(\vec{0}, \omega)$ correspondent en effet à la résonance.

Ordres de grandeur.— L'équation (261) montre que les métaux sont opaques au rayonnement électromagnétique pour $\omega < \omega_p$ et transparents pour $\omega > \omega_p$. Pour avoir une idée des ordres de grandeur, considérons le cas de l'argent pour lequel $k_F^{-1} = 0.83 \text{ \AA}$. On déduit que la densité de porteurs est $n = \frac{k_F^3}{3\pi} \simeq 6 \cdot 10^{28} \text{ m}^{-3}$, ce qui conduit à $\omega_p \simeq 1.4 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}$ soit 8.7 eV (ce qui correspond à des transitions dans l'UV de longueur d'onde $\lambda \simeq 140 \text{ nm}$).

⁷⁵ Si on ne s'intéresse pas à la structure à q fini, ce résultat s'obtient plus simplement directement à partir de l'éq. (222) en écrivant $\chi_0(\vec{q}, \omega) = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} f_{\vec{k}} \frac{\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}}}{(\omega + i0^+)^2 - (\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}})^2}$. On injecte $\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} = \vec{v}_{\vec{k}} \cdot \vec{q} + \frac{q^2}{2m}$ au numérateur tandis que la dépendance en \vec{q} du dénominateur est négligée.

✎ **Exercice 6.6** : Quelle est la longueur de pénétration du rayonnement électromagnétique dans un métal à $\omega < \omega_p$? Donner un ordre de grandeur (pour l'argent) à $\omega \ll \omega_p$.

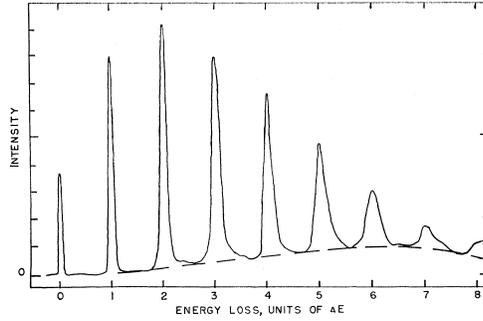


FIGURE 44 : Diffusion vers l'avant d'électrons de haute énergie (20 keV) sur une feuille d'Aluminium. Intensité du faisceau en fonction de l'énergie perdue par ces électrons ; L'écart entre pics $\Delta E = 14.8\text{eV}$ correspond à la fréquence plasma $\hbar\omega_p$ dans l'aluminium. Tiré de la référence [39].

Les modes plasmons ont été observés expérimentalement dans une célèbre expérience par Marton *et al* [39]. On bombarde une feuille d'aluminium par un faisceau d'électrons de très haute énergie (pour la physique de la matière condensée) $E_c^{\text{ini}} = 20\text{keV}$. L'énergie des électrons diffusés vers l'avant est mesurée : on observe des pics dans l'intensité des électrons détectés à des énergies $E_c^{\text{fin}} = E_c^{\text{ini}} - n\hbar\omega_p$, correspondant aux électrons excitant n plasmons lors de la traversée de la feuille (figure 44).

Amortissement des modes plasmons.— L'existence de modes collectifs a été pointée en analysant la divergence de la fonction de réponse à l'approximation RPA

$$\chi(q, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 - \frac{\kappa^2}{q^2} \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{\rho_0}} = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 + \frac{4i\pi}{\omega} \sigma(\vec{q}, \omega)}. \quad (263)$$

Pour $q \ll k_F$ nous avons constaté une annulation du dénominateur pour des valeurs réelles de la fréquence, conséquence du fait que $\text{Im} \chi_0(q \ll k_F, \omega) = 0$. Nous avons toutefois remarqué dans la section 6.2 que la compressibilité du gaz d'électrons libres acquiert une partie imaginaire non nulle dans un domaine du plan $(||\vec{q}||, \omega)$ correspondant au continuum des excitations particule-trou (figure 24). Dans la région hachurée de la figure 24, $\text{Im} \chi_0(\vec{q}, \omega) \neq 0$ (*i.e.* $\text{Re} \sigma(\vec{q}, \omega) \neq 0$) et on obtient donc une structure

$$\chi(\vec{q}, \omega) \sim \frac{1}{\omega - \Omega_p(\vec{q}) + i/\tau(\vec{q})} \quad (264)$$

les oscillations du plasma s'amortissent à cause de la dissipation (l'excitation de paires particule-trou). On parle de “*Landau damping*” (figure 24).⁷⁶

⁷⁶ En écrivant (263) en terme de la conductivité nous avons souhaité insister sur le fait que l'amortissement des plasmons vient de la partie réelle, dissipative, de la conductivité. Il serait tentant d'utiliser la formule de Drude pour rendre plus précise la discussion, toutefois il faut noter que le comportement $\sigma(\vec{0}, \omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{i}{\omega + i/\tau}$ n'est valable que dans un domaine de basses fréquences $\omega\tau \lesssim 1$, alors que les modes plasmons sont associés à de très hautes fréquences, comme on l'a vu. La durée de vie des modes plasmons n'a en général rien à voir avec le taux de relaxation de la formule de Drude. Par exemple, dans les échantillons d'argent très purs Ag6N (moins d'un impureté pour 10^6 atomes, le libre parcours moyen élastique est $\ell_e \approx 30\text{nm}$, *i.e.* $1/\tau_e = v_F/\ell_e \approx 4 \cdot 10^{13}\text{s}^{-1}$ alors que nous avons vu plus haut que $\omega_p \approx 1.4 \cdot 10^{16}\text{s}^{-1}$.

6.4 Conductivité et fonction de Green – Formule de Kubo-Greenwood

Le point de départ de la discussion qui sera menée dans la section suivante est la formule de Kubo-Greenwood que nous démontrons dans ce paragraphe.

Dans un expérience de transport typique, la mesure de la résistance de l'échantillon est une mesure d'une propriété globale du système : le courant total, plutôt qu'une densité de courant locale, en fonction de la d.d.p aux bornes du système. Bien souvent, la mesure est effectuée à une fréquence petite, mais finie, ce qui aide à séparer le signal du bruit. La situation expérimentale qui nous intéresse correspond donc à l'ordre des limites $\lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \sigma(\vec{q}, \omega)$, aussi nous allons directement étudier la réponse du courant moyen ($\vec{q} = 0$), à fréquence finie.

Choix de jauge.– Le calcul de la conductivité dans la section 6.1.1 a été fait pour un choix particulier de jauge : $\phi_{\text{ext}}(\vec{r}, t) = -\vec{\mathcal{E}}(t) \cdot \vec{r}$ et $\vec{A}_{\text{ext}}(\vec{r}, t) = 0$. En appliquant les résultats généraux du cours nous avons abouti à la formule (216). Pour décrire la situation où le champ électrique est uniforme, nous aurions pu faire un autre choix de jauge : $\phi_{\text{ext}}(\vec{r}, t) = 0$ et $\vec{A}_{\text{ext}}(\vec{r}, t) = -\int^t dt' \vec{\mathcal{E}}(t')$. Nous faisons ce choix de jauge dans le paragraphe qui suit.

Le courant total est une moyenne de l'opérateur $m\vec{v}_{\text{tot}} = \vec{p} - e\vec{A} - e\vec{A}_{\text{ext}}$. La réponse linéaire du courant contient donc un terme directement proportionnel au potentiel vecteur extérieur, et la réponse linéaire de $\vec{v} = (\vec{p} - e\vec{A})/m$. Nous aboutissons alors à :

$$\tilde{\sigma}_{ij}(\omega) = \frac{1}{i\omega - 0^+} \frac{e^2}{V} \left(-\frac{1}{m} \delta_{ij} + i \int_0^\infty dt e^{i(\omega - 0^+)t} \langle [v_i(t), v_j] \rangle \right) \quad (265)$$

Cette expression montre clairement que la conductivité est reliée à une fonction de corrélation courant-courant.

✎ **Exercice 6.7** : Vérifier que (216) et (265) sont deux expressions équivalentes.

Nous pouvons écrire l'expression de la conductivité du gaz d'électrons sous la forme :

$$\tilde{\sigma}_{ij}(\omega) = \frac{i}{\omega + i0^+} \frac{e^2}{V} \left[\frac{1}{m} \delta_{ij} \sum_\alpha f_\alpha - \tilde{K}_{ij}(\omega) \right] \quad (266)$$

où

$$\tilde{K}_{ij}(\omega) = - \sum_{\alpha, \beta} (f_\alpha - f_\beta) \frac{(v_i)_{\alpha\beta} (v_j)_{\beta\alpha}}{\omega + \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta + i0^+} \quad (267)$$

est la TF de la fonction de corrélation courant-courant : $K_{ij}(t) = i\theta(t) \langle [v_i(t), v_j] \rangle$. On rappelle que $f_\alpha \equiv f(\epsilon_\alpha)$ désigne la distribution de Fermi-Dirac.

Par la suite nous laissons tomber les indices pour simplifier la discussion (ce qui revient à nous concentrer sur la conductivité longitudinale σ_{xx}).

✎ **Exercice 6.8** : Règle de somme- f .– Montrer que $\frac{1}{2m} + \sum_\beta \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta} = 0$, où $v_{\alpha\beta} \stackrel{\text{def}}{=} \langle \alpha | v_x | \beta \rangle$, puis déduire :

$$\frac{1}{m} \sum_\alpha f_\alpha + \sum_{\alpha, \beta} (f_\alpha - f_\beta) \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta} = 0 \quad (268)$$

✎ **Exercice 6.9** : Dans le cas libre la fonction $\tilde{K}(\omega)$ est discontinue en $\omega = 0$.– On a

$$\tilde{K}(\omega) = - \sum_{\alpha, \beta} (f_\alpha - f_\beta) \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\omega + \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta + i0^+} \quad (269)$$

Lorsque $\omega = 0$, le 0^+ au dénominateur devient inutile car le numérateur s'annule pour⁷⁷ $\epsilon_\alpha = \epsilon_\beta$. En déduire $\tilde{K}(\omega = 0)$. Dans le cas libre les éléments de matrice de la vitesse sont : $\langle \vec{k} | \vec{v} | \vec{k}' \rangle = \frac{\hbar}{m} \delta_{\vec{k}, \vec{k}'}$, ($|\vec{k}\rangle$ est une onde plane). Montrer que $\tilde{K}(\omega \neq 0) = 0$. Retrouver l'expression de la conductivité du gaz de fermions libres.

La règle de somme- f , qui traduit la conservation du nombre de particules nous a permis de montrer que

$$\tilde{\sigma}(\omega) = \frac{ie^2}{V} \frac{\tilde{K}(0) - \tilde{K}(\omega)}{\omega + i0^+} \quad (270)$$

Cette structure peut également se comprendre comme une conséquence de l'invariance de jauge⁷⁸ puisque $\tilde{K}(0)$ traduit la réponse à un potentiel vecteur constant qui peut être éliminé par une transformation de jauge, et ne doit donc pas donner lieu à l'apparition d'un courant.

Notons que l'expression (270) de la conductivité doit être maniée avec précaution. En effet, nous avons vu que la fonction $\tilde{K}(\omega)$ du gaz d'électrons libres est discontinue en $\omega = 0$. Cette fonction n'est pas toujours dérivable à l'origine. Cette expression nous permet d'obtenir l'expression de la partie réelle (dissipative) de la conductivité (longitudinale) en terme des éléments de matrice de l'opérateur vitesse à un corps (formule de Kubo-Greenwood) :

$$\text{Re } \tilde{\sigma}(\omega) = \frac{\pi e^2}{V} \sum_{\alpha, \beta} \frac{f(\epsilon_\alpha) - f(\epsilon_\alpha + \hbar\omega)}{\omega} |v_{\alpha\beta}|^2 \delta(\hbar\omega + \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta) \quad (271)$$

En introduisant $\int d\epsilon \delta(\epsilon - \epsilon_\alpha) = 1$ dans la somme, nous aboutissons à l'expression :

$$\boxed{\text{Re } \tilde{\sigma}(\omega) = \frac{\pi e^2}{V} \int d\epsilon \frac{f(\epsilon) - f(\epsilon + \hbar\omega)}{\omega} \text{Tr} \left\{ \hat{v}_x \delta(\epsilon + \hbar\omega - \hat{H}) \hat{v}_x \delta(\epsilon - \hat{H}) \right\}} \quad (272)$$

où la trace est prise sur les états à une particule (dans l'expression H est l'hamiltonien d'un électron). L'intérêt de cette relation apparaîtra par la suite lorsque nous relierons la conductivité aux fonctions de Green à un corps. Nous en déduisons l'expression de la conductivité à fréquence nulle $\sigma \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\sigma}(\omega = 0)$:

$$\sigma = \frac{\pi e^2}{V} \int d\epsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \text{Tr} \left\{ \hat{v}_x \delta(\epsilon - \hat{H}) \hat{v}_x \delta(\epsilon - \hat{H}) \right\} \xrightarrow{T \rightarrow 0} \frac{\pi e^2}{V} \text{Tr} \left\{ \hat{v}_x \delta(\epsilon_F - \hat{H}) \hat{v}_x \delta(\epsilon_F - \hat{H}) \right\} \quad (273)$$

La fonction $-\frac{\partial f}{\partial \epsilon}$ est une fonction étroite, de largeur $k_B T$: seuls les états dans le voisinage de ϵ_F , t.q. $|\epsilon_\alpha - \epsilon_F| \lesssim k_B T$ interviennent dans le transport longitudinal. La vertu de l'expression est de montrer que **la conductivité longitudinale est une propriété de surface de Fermi** (contrairement à la conductivité transverse [49, 50]). L'expression présente la structure d'un corrélateur de la vitesse (le courant moyen) pour les électrons à la surface de Fermi.

6.4.1 Conductivité d'un anneau mésoscopique

Nous allons voir que la règle de somme (268) est modifiée lorsque le système possède une géométrie non connexe, comme c'est le cas pour un anneau. La conductivité reçoit alors un terme supplémentaire. La présente discussion est inspirée des références [55, 45].

⁷⁷ si $f(0) = 0$ et $|f'(0)| < \infty$ on vérifie sans peine que $\frac{f(x)}{x+i0^+} = \frac{f(x)}{x}$ puisque $f(x)\delta(x) = 0$ et $\mathcal{P} \frac{f(x)}{x} = \frac{f(x)}{x}$.

⁷⁸ Rappelons que l'invariance de jauge est la symétrie continue associée à la conservation de la charge électrique (théorème de Noether). Il n'est donc pas surprenant d'aboutir au même résultat en utilisant l'invariance de jauge ou la conservation du nombre de particules.

✎ **Exercice 6.10** : Courant permanent dans un anneau.— On considère un anneau unidimensionnel de périmètre L traversé par un flux magnétique ϕ . Le potentiel vecteur dans l'anneau peut être choisi constant $A = \phi/L$. Donner le spectre $\{\varphi_n(x), \epsilon_n\}$ de l'hamiltonien $H_\phi = \frac{1}{2m}(p - eA)^2$. Calculer le courant $I_n(\phi)$ associé à l'état $\varphi_n(x)$. Vérifier que $I_n(\phi) = -\partial_\phi \epsilon_n(\phi)$ (on pourra retrouver cette relation par le théorème Feynman-Hellmann).

✎ **Exercice 6.11** : Règle de somme- f dans l'anneau.— Soit $H_{\phi+\delta\phi}$ l'hamiltonien obtenu pour un flux $\phi + \delta\phi$. Expliciter le développement des énergies $\epsilon_\alpha(\phi + \delta\phi) = \epsilon_\alpha(\phi) + \delta\phi \partial_\phi \epsilon_\alpha(\phi) + \frac{1}{2} \delta\phi^2 \partial_\phi^2 \epsilon_\alpha(\phi) + \dots$ en utilisant les formules de la méthode des perturbations stationnaires pour $H_{\phi+\delta\phi} = H_\phi + W$. En déduire que $\sum_\beta \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta} = -\frac{1}{2m} + \frac{L^2}{2e^2} \frac{\partial^2 \epsilon_\alpha}{\partial \phi^2}$ puis

$$\frac{1}{m} \sum_\alpha f_\alpha + \sum_{\alpha,\beta} (f_\alpha - f_\beta) \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta} = -\frac{L^2}{e^2} \sum_\alpha f_\alpha \frac{\partial I_\alpha}{\partial \phi} \quad (274)$$

où $I_\alpha = -\partial_\phi \epsilon_\alpha$ désigne le courant permanent de l'état individuel.

Alors que l'expression (266) de la conductivité est générale, la relation (270) se trouve modifiée par la présence du nouveau terme dans la règle de somme :

$$\tilde{\sigma}_{\text{anneau}}(\omega) = \frac{e^2 \tilde{K}(\omega) - \tilde{K}(0)}{L i\omega} + \frac{L}{i\omega} \frac{\partial I_{\text{perm}}}{\partial \phi} + \frac{L}{i\omega} \sum_\alpha f'_\alpha I_\alpha^2 \quad (275)$$

où $I_{\text{perm}}(\phi) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_\alpha f_\alpha I_\alpha(\phi)$ est le courant permanent total. Nous voyons donc apparaître deux nouveaux termes ayant pour origine la topologie non triviale du système (un anneau). Le troisième terme s'interprète facilement : une modulation du flux $\phi \rightarrow \phi + \delta\phi_\omega e^{-i\omega t}$ correspond à un champ électrique $\mathcal{E}(t) = \frac{i\omega}{L} \delta\phi_\omega e^{-i\omega t}$. Le terme proportionnel à $\frac{\partial}{\partial \phi} I_{\text{perm}}$ est un terme réactif et traduit simplement la modulation du courant permanent : $I_{\text{perm}}(\phi + \delta\phi(t)) \simeq I_{\text{perm}}(\phi) + \frac{L}{i\omega} \frac{\partial I_{\text{perm}}}{\partial \phi} \mathcal{E}(t)$. La présence de $f'_\alpha = \partial_\epsilon f(\epsilon_\alpha)$ dans le quatrième terme indique qu'il s'agit d'un terme de surface de Fermi).

Les deux derniers termes de (275) sont en pratique difficiles à observer car il s'agit d'effets *cohérents*, *i.e.* d'un effet d'interférences quantiques⁷⁹. En pratique la cohérence de phase est limitée sur une échelle L_φ , que nous appellerons *longueur de cohérence de phase*, à cause des interactions avec les autres degrés de liberté (phonons, autres électrons,...). À basse température ($T \sim 1$ K on attend typiquement $L_\varphi \sim 1 \mu\text{m}$). On s'attend à une suppression du courant permanent du type $I_{\text{perm}} \sim e^{-L/L_\varphi}$, qui ne le rend observable que pour des anneaux de diamètre micrométrique.

Conductivité grand-canonique/canonique.— L'expression (275) a été obtenue en supposant que l'équilibre thermodynamique correspond à l'ensemble grand-canonique, *i.e.* pour un potentiel chimique fixé. Il existe différentes manières de mesurer la conductivité d'un anneau [45] : soit en

⁷⁹ **Courant permanent et effet Aharonov-Bohm.**— L'existence du courant permanent est lié à l'effet *Aharonov-Bohm* [2] que nous décrivons. L'équation du mouvement en mécanique classique fait intervenir les champs électrique et magnétique alors que l'équation de Schrödinger (l'équation gouvernant la dynamique quantique) dépend des potentiels scalaire et vecteur. Il est possible d'imaginer une situation où une particule explore une région où les champs sont nuls sans que les potentiels ne le soient. Sa dynamique classique serait la dynamique libre alors que la dynamique quantique est affectée par la présence des potentiels. Dans le cas de l'effet Aharonov-Bohm, on considère un solénoïde infiniment fin traversé d'un flux ϕ . Hors du solénoïde, supposé à l'origine, le potentiel vecteur est $\vec{A} = \frac{\phi}{2\pi r} \vec{u}_\theta$. Alors qu'il n'explore que des régions où le champ magnétique est nul, un électron tournant autour du flux recevra une phase $e^{ie\phi/\hbar}$ qui peut être mise en évidence dans une expérience d'interférences. Dans un anneau traversé d'un flux magnétique, c'est cette phase Aharonov-Bohm qui induit l'existence du courant permanent.



FIGURE 45 : *David Bohm (1917-1992) et Yakir Aharonov (1932-)*.

connectant l'anneau dans une expérience de transport, soit en mesurant l'absorption de l'anneau isolé. Alors que la première situation correspond à fixer le potentiel chimique, la deuxième impose de fixer le nombre de particules, ce qui induit une modulation du potentiel chimique avec le flux et génère l'apparition d'un autre terme dans la conductivité [55, 45].

- The material in the rest of the document (electronic transport in a weakly disordered metal) will be discussed in the optional course (2nd semester)

WAVE IN RANDOM MEDIA – ANDERSON LOCALISATION

Dominique Delande & Christophe Texier

[http://lptms.u-psud.fr/christophe_texier/enseignements/
enseignements-en-master/onde-en-milieu-desordonne/](http://lptms.u-psud.fr/christophe_texier/enseignements/enseignements-en-master/onde-en-milieu-desordonne/)

- The appendices (exams of previous years) can be found in my web site

http://lptms.u-psud.fr/christophe_texier/

6.5 Conductivité d'un métal faiblement désordonné

Jusqu'à présent, notre analyse des propriétés de transport a été essentiellement basée sur la théorie des bandes de Bloch, ou sur sa version simplifiée (le modèle des électrons libres), qui suppose une structure cristalline parfaite. En pratique l'existence de défauts structurels ou la présence d'impuretés brise l'invariance par translation dans le cristal, ce qui a des conséquences importantes sur les propriétés de transport. La modélisation de ces défauts se fait via l'introduction d'un potentiel aléatoire $\mathcal{V}(r)$. Insistons : ce potentiel n'a pas de dynamique, à un échantillon correspond une configuration du potentiel désordonné. On parle de désordre *gelé* (quenched). À une situation expérimentale donnée correspond une réalisation de $\mathcal{V}(r)$ et les quantités physiques dépendent elles-mêmes de la configuration du désordre. Dans le cadre d'une analyse théorique, nous ne serons capables de calculer que des quantités moyennes (ou de caractériser leurs fluctuations). Dans une situation expérimentale il faudra se poser la question de savoir comment la moyenne sur le désordre est réalisée, ou comment utiliser les informations sur la moyenne et les fluctuations pour analyser le résultat obtenu pour une configuration.

La première question est donc : que devons-nous calculer ? La distribution de la conductivité ⁸⁰ $\mathcal{P}(\sigma)$? Sa valeur moyenne $\bar{\sigma}$? Évidemment la réponse n'est pas unique et dépend de la situation (et du courage du physicien). Dressons un panorama pour avoir une idée du comportement d'une onde électronique dans un métal désordonné. ⁸¹ Nous introduisons quelques échelles pour cela. Rappelons que le transport est une propriété de surface de Fermi, une première échelle d'énergie est l'énergie de Fermi ϵ_F . Il faudra lui comparer une échelle d'énergie liée au potentiel désordonné. ⁸² Nous introduisons plutôt le vecteur de Fermi k_F (l'inverse de la longueur d'onde de Broglie) et le libre parcours moyen élastique ℓ_e , la distance entre collisions sur le désordre.

Le régime de faible désordre ($k_F \ell_e \gg 1$).— La conductance adimensionnée ⁸³ est grande $g \gg 1$ (c'est le cas d'un bon métal). La conductance est donnée par le résultat classique (Drude) à de petites corrections quantiques près : $g = g_{\text{Drude}} + \Delta g$ avec $g_{\text{Drude}} \gg 1$ et $\Delta g \lesssim 1$. Les fluctuations relatives de la conductance sont faibles (dans un échantillon macroscopique $g_{\text{Drude}} \gg 1 \gg \overline{\Delta g} \gg (g - \bar{g})^2$). Les fluctuations sont maximales dans le régime mésoscopique où l'échantillon est complètement cohérent ; dans ce cas $g_{\text{Drude}} \gg \overline{\Delta g} \sim (g - \bar{g})^2 \sim 1$; le régime "mésoscopique" est défini ci-dessous).

Le régime de fort désordre ($k_F \ell_e \lesssim 1$).— Lorsque le désordre est trop important le système devient isolant. Ce phénomène d'interférences est appelé *localisation forte* [9]. Dans ce cas la conductance varie fortement d'un échantillon à l'autre (certaines configurations rares des impuretés peuvent favoriser le transport et augmenter énormément la conductance). La distribution de la conductivité est une loi large et la donnée de $\bar{\sigma}$ n'a pas forcément un grand intérêt.

Le critère $\lambda_F \sim \ell_e$ permettant de séparer les deux régimes de localisation est appelé "critère de Ioffe-Regel" [28].

Le rôle de la dimensionnalité.— La dimensionnalité est un paramètre essentiel dans le problème de propagation d'une onde en milieu désordonné et l'effet du désordre est renforcé en allant vers les basses dimensions. ⁸⁴ Dans un échantillon tridimensionnel, la transition de localisation se

⁸⁰ Nous notons $\overline{\dots}$ la moyenne sur le désordre et gardons $\langle \dots \rangle$ pour la moyenne statistique/quantique.

⁸¹ Si nous parlons de transport quantique, les aspects ondulatoires sont importants : nous sommes ici intéressés par la question de la propagation d'une onde dans un milieu désordonné.

⁸² Par exemple l'intégrale de la fonction de corrélation $w = \int dr \overline{\mathcal{V}(r)\mathcal{V}(0)}$ est une échelle pertinente.

⁸³ Dans une expérience de transport on mesure une résistance ou une conductance $G = 1/R$. La conductance adimensionnée est donnée par le rapport de la conductance par le quantum de conductance : $g \stackrel{\text{def}}{=} \frac{G}{e^2/h}$ (si on prend en compte la dégénérescence de spin une meilleure définition est $g \stackrel{\text{def}}{=} \frac{G}{2e^2/h}$; dans cette fin de chapitre nous ignorons le spin qui ne joue aucun rôle dans la discussion). Le quantum de conductance vaut $e^2/h = 1/(25.8\text{k}\Omega)$.

⁸⁴ Par exemple, en dimension 1, le régime diffusif de faible désordre n'existe pas et tout potentiel aléatoire à

produit en augmentant la force du désordre. Dans la situation unidimensionnelle le régime de localisation forte peut être observé pour un désordre faible ($k_F \ell_e \gg 1$). Si on considère un fil quasi-undimensionnel, de longueur L et de section W t.q. $N_c \sim (k_F W)^{d-1} \gg 1$ (le nombre de canaux ⁸⁵). En faisant varier la longueur du fil à désordre (faible) fixé, nous observons trois régimes (a) $L \lesssim \ell_e$ correspond au régime balistique, (b) $\ell_e \lesssim L \lesssim \ell_{\text{loc}} \sim N_c \ell_e$ au régime diffusif et (c) $L \gtrsim \ell_{\text{loc}}$ au régime localisé. ⁸⁶ Le cas extrême montrant le rôle de la dimension est la situation strictement unidimensionnelle pour laquelle le régime intermédiaire de faible désordre n'existe pas car $\ell_{\text{loc}} \sim \ell_e$. Enfin, mentionnons l'approche de la théorie d'échelle [1] : en postulant l'existence d'un unique paramètre d'échelle (la conductance) et moyennant quelques hypothèses minimales, les auteurs montrent que la transition de localisation n'existe que pour $d > 2$.

La décohérence.— Nous avons discuté des propriétés de la diffusion d'une onde électronique dans un environnement désordonné. En pratique, les phénomènes d'interférences sont limités car l'électron interagit avec d'autres degrés de liberté : il subit des collisions *inélastiques* (collisions entre électrons ou avec les phonons) qui modifient son énergie et donc sa phase de manière aléatoire. Dans une situation réelle les phénomènes d'interférences quantiques ne sont observables qu'en deçà d'une certaine échelle de longueur caractérisant l'efficacité des processus inélastiques pour détruire les phénomènes d'interférences. Cette longueur est appelée *longueur de cohérence de phase* L_φ . Nous définissons le régime *mésoscopique* comme le régime où le système est complètement cohérent : $L \lesssim L_\varphi$ où L est la taille typique du système. L_φ dépend fortement de la température. Typiquement $L_\varphi(T = 1 \text{ K}) \sim 1 \mu\text{m}$ et peut atteindre 10 ou 20 μm vers 10 mK. Les phénomènes d'interférences ne sont donc observables qu'aux très basses températures et le phénomène de localisation forte difficile à observer [24]. Bien que l'étude du problème soit grandement compliquée par l'interaction électron-électron [76], puisque celle-ci détruit la cohérence de phase assez vite, nous nous retrouvons *de facto* dans le régime de faible désordre, même en basse dimension (quasi 1D). Pour formuler les choses autrement, disons que le phénomène de localisation forte, un phénomène cohérent, ne peut être observé que pour $L \gtrsim \ell_{\text{loc}}$ mais qu'en pratique il est très difficile que le système soit cohérent à cette échelle : on a en général $L_\varphi(T) \lesssim \ell_{\text{loc}}$.

Toutes ces remarques montrent qu'en ce qui concerne les métaux, il est pertinent de se limiter au problème de l'étude du transport quantique dans un bon conducteur dans le régime de faible désordre et nous nous attacherons à calculer la conductivité *moyennée* sur le potentiel aléatoire.

Le seconde question est d'ordre méthodologique : comment effectuer la moyenne sur le désordre dans le calcul d'une quantité (la conductivité) ? Nous avons souvent décomposé la conductivité sur le spectre de l'Hamiltonien ; il est exclu de résoudre l'équation de Schrödinger pour une configuration du potentiel puis de réinjecter le spectre dans une formule de type Kubo-Greenwood

$$\text{Re } \tilde{\sigma}(\omega) = \frac{\pi e^2}{\text{Vol}} \sum_{\alpha, \beta} \frac{f(\epsilon_\alpha) - f(\epsilon_\alpha + \hbar\omega)}{\omega} |v_{\alpha\beta}|^2 \delta(\hbar\omega + \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta) \quad (276)$$

où la somme porte sur le spectre des états quantiques individuels $\{\epsilon_\alpha, |\varphi_\alpha\rangle\}$ et $v_{\alpha\beta} = \langle \varphi_\alpha | v_x | \varphi_\beta \rangle$ est l'élément de matrice de l'opérateur vitesse. Vol est le volume et $f(\epsilon)$ la distribution de Fermi-Dirac. Il devient donc essentiel de manipuler un objet compact contenant toute l'information sur le spectre, qui sera directement calculé en présence du potentiel désordonné. Un tel objet est la fonction de Green $\mathcal{G}(r, r'; E) \stackrel{\text{def}}{=} \langle r | \frac{1}{E-H} | r' \rangle = \sum_n \frac{\psi_n(r) \psi_n^*(r')}{E - E_n}$, dont les pôles correspondent

corrélations de portée finie conduit à la localisation de toutes les fonctions d'onde [95].

⁸⁵ Un fil balistique se comporte comme un guide d'onde et est caractérisé par un certain nombre de modes transverses. On parle de "canaux".

⁸⁶ Ici nous avons introduit la longueur de localisation calculée dans le contexte de la théorie des matrices aléatoires [20, 40] $\ell_{\text{loc}} \sim N_c \ell_e$. On pourra se référer à l'article de revue très pédagogique de Carlo Beenakker [10].

au spectre des valeurs propres et les résidus aux fonctions d'onde. La conductivité peut en effet être reliée à la fonction de Green

$$\text{Re } \tilde{\sigma}(\omega) = \frac{\pi e^2}{\text{Vol}} \int d\epsilon \frac{f(\epsilon) - f(\epsilon + \hbar\omega)}{\omega} \text{Tr} \left\{ \hat{v}_x \delta(\epsilon + \hbar\omega - \hat{H}) \hat{v}_x \delta(\epsilon - \hat{H}) \right\} \quad (277)$$

où la trace est prise sur les états à une particule (dans l'expression H est l'Hamiltonien d'un électron). Nous introduisons les fonctions de Green retardée et avancée $G^{\text{R,A}}(r, r'; E) \stackrel{\text{def}}{=} \mathcal{G}(r, r'; z = E \pm i0^+)$ qui peuvent être reliées aux opérateurs de la trace : $\Delta G(r, r'; E) \stackrel{\text{def}}{=} G^{\text{R}}(r, r'; E) - G^{\text{A}}(r, r'; E) = -2i\pi \langle r | \delta(E - H) | r' \rangle$. L'étude du transport dans les métaux nous suggère de travailler plutôt dans une base d'ondes planes $|k\rangle$ (états propres du problème non désordonné). Nous introduisons

$$G^{\text{R,A}}(k, k'; E) \stackrel{\text{def}}{=} \langle k | \frac{1}{E - H \pm i0^+} | k' \rangle \quad (278)$$

en terme de laquelle (277) devient :

$$\text{Re } \tilde{\sigma}(\omega) = -\frac{e^2}{4\pi m^2} \int d\epsilon \frac{f(\epsilon) - f(\epsilon + \omega)}{\omega} \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{k, k'} k_x k'_x \Delta G(k, k'; \epsilon + \omega) \Delta G(k', k; \epsilon) \quad (279)$$

La méthode? Maintenant que nous avons introduit le “bon” objet, reste à savoir comment le manipuler, *i.e.* comment effectuer la moyenne sur le désordre de produits de fonctions de Green, supposant donnée la distribution $\mathcal{D}\mathcal{V} P[\mathcal{V}]$ du désordre. La difficulté vient notamment de la présence du potentiel au dénominateur dans $G(E) = \frac{1}{E - H}$. Deux méthodes utilisent un “truc” pour exponentier le dénominateur et faire apparaître la fonctionnelle caractéristique du potentiel : la méthode des répliques [86]⁸⁷ et la méthode supersymétrique [57, 75]. La mise en œuvre de ces deux approches nécessite des techniques de théorie des champs assez sophistiquées.

La troisième méthode, que nous suivrons, est l'approche perturbative où nous développons perturbativement $G(E)$ avant de le moyenné sur le désordre. Comme nous l'avons déjà souligné, les résultats intéressants sont non perturbatifs dans le désordre. Cette approche n'est intéressante que si nous pouvons resommer les corrections perturbatives. Le cas unidimensionnel permet une resommation complète des corrections perturbatives dans le cas où le potentiel est un bruit blanc [11, 12]. En vérité ces techniques assez lourdes ne sont pas indispensables et peuvent être évitées au profit de méthodes non perturbatives probabilistes plus élégantes [95, 96] (au moins à mon goût, par exemple *cf.* [19]). Dans les problèmes à plusieurs dimensions nous devons nous contenter de resommations partielles qui ne seront valables que dans le domaine de *faible désordre*. Nous précisons cette remarque par la suite.

6.5.1 Méthode des perturbations et choix d'un modèle de désordre

Nous avons expliqué plus haut que l'objet de base codant l'information sur le système est la fonction de Green. Celle-ci peut être calculée perturbativement. Si on pose $G = \frac{1}{E - H}$ avec

⁸⁷ **La méthode des répliques** [22, 23] repose sur le truc suivant. On écrit : $\frac{1}{A} = \lim_{n \rightarrow 0} \int d\vec{\phi} \frac{\vec{\phi}^2}{n} e^{-\frac{1}{2}A\vec{\phi}^2}$, où $\vec{\phi}$ est un “champ” à n composantes (les n répliques). On transforme le calcul de $\langle \frac{1}{A} \rangle$ (difficile) en $\langle e^{-kA} \rangle$ (facile). Le prix à payer est de faire tendre le nombre de composantes n vers 0! Appliquons le truc au calcul de la fonction de Green moyenne : $\overline{\langle x | (H - E)^{-1} | x' \rangle} = \lim_{n \rightarrow 0} \int \mathcal{D}\vec{\phi} \frac{\vec{\phi}(x) \cdot \vec{\phi}(x')}{n} e^{-S}$ où $\vec{\phi}(x)$ est un champ à n composantes. La moyenne sur un désordre gaussien, $\mathcal{D}\mathcal{V} P[\mathcal{V}] = \mathcal{D}\mathcal{V} \exp -\frac{1}{2w} \int dx \mathcal{V}(x)^2$, génère une action $S = \int dx L$ pour une théorie des champs en interaction $L = \frac{1}{2}(\partial_x \vec{\phi})^2 - \frac{E}{2} \vec{\phi}^2 - \frac{w}{8} \vec{\phi}^4$ (chapitre 9 du tome 2 de l'ouvrage d'Itzykson & Drouffe [86]). Si on considère un problème invariant par translation (au moins après moyenne sur le désordre) on peut encore simplifier le calcul en écrivant $\overline{\langle x | (H - E)^{-1} | x \rangle} = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{2}{n} \frac{\partial}{\partial E} \int \mathcal{D}\vec{\phi} e^{-S}$ de laquelle on peut extraire la DoS en faisant $E \rightarrow E + i0^+$.

$H = H_0 + \mathcal{V}$ on a $G = G_0 + G_0 \mathcal{V} G_0 + G_0 \mathcal{V} G_0 \mathcal{V} G_0 + \dots$ où $G_0 = \frac{1}{E - H_0}$. La fonction de Green libre est diagonale dans l'espace de Fourier

$$\langle k | \frac{1}{E - H_0} | k' \rangle = \delta_{k,k'} G_0(k) \quad \text{avec } G_0(k) = \frac{1}{E - \epsilon_k} \quad (280)$$

où $\epsilon_k \stackrel{\text{def}}{=} \frac{k^2}{2m}$. (Tant que cela n'est pas nécessaire nous ne spécifions pas s'il s'agit de la fonction de Green avancée ou retardée). Pour aller plus loin il nous faut savoir comment modéliser les défauts (impuretés, défauts structurels) et le choix du modèle a-t'il une influence sur la physique? En général la réponse est oui, évidemment, toutefois nous nous intéresserons à un régime de faible désordre (encore à caractériser) et seul le second cumulant de \mathcal{V} sera important. Pour cette raison nous pouvons nous limiter au choix d'une distribution gaussienne, entièrement caractérisée par la fonction de corrélation $\overline{\mathcal{V}(r)\mathcal{V}(r')}$. En pratique il est raisonnable de supposer que les corrélations du potentiel désordonné sont à courte portée, nous les prendrons de portée nulle pour simplifier. En conclusion, pour l'étude des propriétés de transport dans les métaux faiblement désordonnés il est suffisant de choisir le modèle minimal :

$$\mathcal{D}\mathcal{V} P[\mathcal{V}] = \mathcal{D}\mathcal{V} \exp -\frac{1}{2w} \int dr \mathcal{V}(r)^2 \quad (281)$$

Afin de comprendre comment fonctionne la méthode des perturbations, calculons les premiers termes de la fonction de Green moyenne \overline{G} .

Vertex.— Comme nous travaillons dans l'espace réciproque le calcul fera intervenir la moyenne des éléments de matrice de \mathcal{V} (le vertex élémentaire décrivant l'interaction entre un électron et le potentiel désordonné pour le calcul de quantités moyennées) :

$$\overline{\langle k_g | \mathcal{V} | k_d \rangle \langle k'_g | \mathcal{V} | k'_d \rangle} = \frac{w}{\text{Vol}} \delta_{k_g+k'_g, k_d+k'_d} \quad (282)$$

où k_d et k'_d sont des impulsions entrantes et k_g et k'_g des impulsions sortantes. Cette expression, la TF de la fonction de corrélation $\overline{\mathcal{V}(r)\mathcal{V}(r')} = w\delta(r-r')$, montre que **l'invariance par translation est restaurée après moyenne sur le désordre**. On peut interpréter physiquement le corrélateur comme une double interaction avec un défaut localisé.⁸⁸ Cette diffusion par le défaut permet de transférer de l'impulsion d'une fonction de Green à une autre.

Nous commençons par calculer le premier terme non nul en moyenne : $\overline{G_0 \mathcal{V} G_0 \mathcal{V} G_0}$. Le terme d'ordre 2 de $\overline{G(k, k')}$ s'écrit :

$$\overline{\langle k | G_0 \mathcal{V} G_0 \mathcal{V} G_0 | k' \rangle} = G_0(k) \sum_{k''} \frac{w}{\text{Vol}} \delta_{k,k''} G_0(k'') G_0(k') = \delta_{k,k'} G_0(k)^2 \frac{w}{\text{Vol}} \sum_q G_0(q) \quad (283)$$

D'après la remarque sur l'invariance par translation et la conservation des impulsions au niveau du vertex, il était clair que le résultat avait la structure $\overline{G(k, k')} \equiv \delta_{k,k'} \overline{G(k)}$. Le premier terme du calcul perturbatif de la fonction de Green moyenne est finalement

$$\overline{\delta^2 G(k)} = G_0(k) \left[\frac{w}{\text{Vol}} \sum_q G_0(q) \right] G_0(k) = \begin{array}{c} \begin{array}{c} w \\ \times \\ \swarrow \quad \searrow \\ k-q \quad k-q \end{array} \\ \leftarrow k \quad \leftarrow q \quad \leftarrow k \end{array} \quad (284)$$

La petite représentation graphique nous permet de déduire facilement les règles de Feynman.

⁸⁸ Si nous avons choisi un modèle plus général de désordre, le cumulatif d'ordre p serait associé à p interactions avec un défaut. Pour clarifier cette remarque, considérons le modèle de potentiel désordonné $\mathcal{V}(r) = v_0 \sum_i \delta(r-r_i)$ où les positions sont distribuées selon la loi de Poisson (positions décorréélées pour une densité moyenne n_i). Le calcul du second moment $\overline{\mathcal{V}(r)\mathcal{V}(r')} = v_0^2 \sum_{i \neq j} \delta(r-r_i)\delta(r'-r_j) + v_0^2 \delta(r-r') \sum_i \delta(r-r_i) = (n_i v_0)^2 + n_i v_0^2 \delta(r-r')$ montre que le second cumulatif s'interprète comme une double interaction avec une même impureté. Le cumulatif $\overline{\mathcal{V}(r_1) \dots \mathcal{V}(r_n)}^C = n_i v_0^n \delta(r_1 - r_2) \dots \delta(r_1 - r_n)$ correspond à n interactions avec une impureté.



FIGURE 46 : *Richard Feynman (1918-1988).*

Règles de Feynman.

1. À l'ordre $2n$ des perturbations en \mathcal{V} , on dessine les $(2n - 1)!!$ diagrammes : une ligne continue représente une fonction de Green libre $G_0(k)$, une ligne pointillée une double interaction avec un défaut.
2. On associe des impulsions de façon à respecter la conservation de l'impulsion à chaque vertex.
3. Chaque double interaction est associée à un poids w/Vol .
4. On somme sur toutes les impulsions libres selon \sum_q .

Nous dessinons les trois diagrammes obtenus à l'ordre suivant :

$$\overline{\delta^4 G}(k) = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} \quad (285)$$

Self énergie.— Nous pouvons remarquer que le premier des diagrammes de (285) correspond à une répétition du bloc de la première correction (284), que nous notons :

$$\Sigma_2 = \text{diagram} = \frac{w}{\text{Vol}} \sum_q G_0(q) \quad (286)$$

à chaque ordre, certaines des corrections contiendront également ce bloc et un des $(2n - 1)!!$ termes sera n répétitions de ce bloc. Il y a un moyen très simple de resommer tous ces termes (c'est une série géométrique) :

$$\frac{1}{G_0(k)^{-1} - \Sigma_2} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \quad (287)$$

Nous pouvons donc regrouper dans un objet que nous appelons la *self énergie* et notons $\Sigma(E)$, tous les blocs insecables par un seul "coup de ciseau" dans une ligne de fonction de Green. Outre que cette remarque permet de resommer une infinité de diagrammes sans effort, l'intérêt d'introduire cet objet est de conduire à une fonction de Green moyenne présentant une structure similaire à la fonction de Green libre, donc plus facile à analyser :

$$\overline{G}(k) = \frac{1}{E - \epsilon_k - \Sigma(E)} \quad (288)$$

Le calcul du terme d'ordre n de $\Sigma(E)$ présente moins de diagrammes que celui de $G(E)$. Considérer le développement perturbatif de $\Sigma(E)$ est une manière de prendre en compte des

corrections d'ordre n de $G(E)$ se déduisant de manière évidente des ordres $n' < n$. Par exemple, à l'ordre w^2 , Σ_4 sera donné par le diagramme de Σ_2 plus deux diagrammes d'ordre w^2 correspondant aux deux derniers termes de (285) :

$$\Sigma_4 = \begin{array}{c} \times \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \times \\ \diagup \quad \diagdown \\ \times \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \times \quad \times \\ \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \end{array} \quad (289)$$

✎ **Exercice 6.12** : Dessiner tous les diagrammes de Σ_6 (la self-énergie à l'ordre w^3). Comparer avec $\overline{\delta^2 G}(k) + \overline{\delta^4 G}(k) + \overline{\delta^6 G}(k)$.

Les deux échelles du problème sont l'énergie de Fermi ϵ_F (rappelons-nous que la conductivité longitudinale fait intervenir les fonctions de Green à $E = \epsilon_F$) et le désordre w . Dans la limite de faible désordre nous pouvons rester à l'approximation $\Sigma(E) = \Sigma_2(E) + O(w^2)$. La partie imaginaire est importante car elle décale le pôle de la fonction de Green ⁸⁹

$$\frac{1}{2\tau_e} = -\text{Im} \Sigma^R(E) \simeq -\text{Im} \Sigma_2^R(E) = -\frac{w}{\text{Vol}} \sum_q \text{Im} G_0^R(q) = \pi \rho_0 w \Rightarrow \boxed{\frac{1}{\tau_e} = 2\pi \rho_0 w} \quad (290)$$

où ρ_0 est la densité d'états par unité de volume. Nous oublions sa partie réelle (si elle est constante elle peut être absorbée dans un changement de zéro des énergies). À cette approximation

$$\boxed{\overline{G}^R(k; \epsilon_F) = \frac{1}{\epsilon_F - \epsilon_k + \frac{i}{2\tau_e}}} \quad (291)$$

τ_e s'interprète comme la durée de vie de l'onde plane, *i.e.* le temps pendant lequel la direction de l'impulsion est conservée (le module de l'impulsion est conservé au cours des processus de collision sur le désordre statique). Il s'agit donc du *temps de parcours moyen élastique*. On peut lui associer le libre parcours moyen élastique $\ell_e = v_F \tau_e$, où v_F est la vitesse de Fermi. Nous pouvons maintenant définir précisément le critère de *faible désordre* : l'échelle d'énergie $1/\tau_e$ caractérise la "force" du désordre (le taux de diffusion d'un électron par le potentiel désordonné), le régime de faible désordre correspond donc à

$$\epsilon_F \tau_e \gg 1 \quad \text{ou} \quad \boxed{k_F \ell_e \gg 1} \quad (292)$$

✎ **Exercice 6.13** : Montrer que, dans la limite de faible désordre, la fonction de Green dans l'espace réel présente la structure

$$\overline{G}^R(r, r') \simeq G_0^R(r, r') e^{-R/2\ell_e} \propto \frac{1}{R^{(d-1)/2}} e^{ik_F R - R/2\ell_e} \quad (293)$$

où $R = ||r - r'||$. (Le calcul est simple en $d = 1$ et $d = 3$; en $d = 2$ il n'est valable que pour $k_F R \gg 1$).

✎ **Exercice 6.14** : Dans cet exercice on souhaite resommer une classe particulière de diagrammes pour calculer la self-énergie :

$$\Sigma_{\text{emp}} = \begin{array}{c} \times \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \end{array} = \begin{array}{c} \times \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \times \\ \diagup \quad \diagdown \\ \times \\ \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \end{array} + \begin{array}{c} \times \quad \times \\ \diagup \quad \diagdown \quad \diagup \quad \diagdown \\ \text{---} \end{array} + \dots \quad (294)$$

Dans l'espace de Fourier, écrire une équation de récurrence pour Σ_{emp} . En déduire l'expression de la self-énergie. Montrer que $\Sigma_{\text{emp}} \simeq \Sigma_2$ pour $\epsilon_F \tau_e \gg 1$.

⁸⁹ Nous jetons un voile pudique sur la partie réelle de la self-énergie. A priori celle-ci est une fonction régulière de l'énergie et elle pourrait être éliminée par une reparamétrisation du spectre des énergies. En y regardant de plus près nous constatons que $\text{Re} \Sigma$ diverge en dimension $d > 1$. Ce problème vient de la nature singulière des corrélations du potentiel en δ de Dirac. La même difficulté apparaît dans l'analyse de l'Hamiltonien $-\Delta + v \delta(r)$ en dimension $d > 1$. Une manière de donner un sens au problème a été proposée dans l'article [29].

6.5.2 La conductivité à l'approximation de Drude

Nous commençons par plusieurs remarques permettant de simplifier (279). (i) Dans la pratique les fréquences correspondant à une situation expérimentale sont toujours t.q. $\omega \ll T$ (rappelons-nous que $T = 1 \text{ K}$ correspond à 140 GHz). Nous procédons à la substitution $\frac{f(\epsilon) - f(\epsilon + \omega)}{\omega} \rightarrow -\frac{\partial f}{\partial \epsilon}$. (ii) D'autre part l'élargissement thermique ne joue aucun rôle dans le calcul de la conductivité moyenne (ceci ne serait pas vrai si nous étudions les fluctuations de la conductivité). Nous fixons $T = 0$. (iii) Dans le produit $\Delta G \Delta G = (G^R - G^A)(G^R - G^A)$, on peut montrer que seuls les termes $G^R G^A$ et $G^A G^R$ apportent des contributions importantes, après moyenne. Finalement, notre point de départ est ⁹⁰ :

$$\overline{\sigma(\omega)} = \frac{e^2}{2\pi m^2} \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{k, k'} k_x k'_x \overline{G^R(k, k'; \epsilon_F + \omega) G^A(k', k; \epsilon_F)} \quad (295)$$

La conductivité est donnée par un produit de fonctions de Green. La première chose la plus simple à faire consiste à négliger les corrélations entre les deux fonctions de Green : $\overline{G^R G^A} \simeq \overline{G^R} \overline{G^A}$. En utilisant $\overline{G^R(k, k')} = \delta_{k, k'} \overline{G^R}(k)$, nous obtenons

$$\overline{\sigma(\omega)}^{\text{Drude}} = \frac{e^2}{2\pi m^2} \frac{1}{\text{Vol}} \sum_k k_x^2 \overline{G^R}(k; \epsilon_F + \omega) \overline{G^A}(k; \epsilon_F) \quad (296)$$

Le calcul de ce type de quantité est tout à fait standard et des expressions similaires apparaîtront par la suite. Nous remplaçons k_x^2 par k^2/d (isotropie de la relation de dispersion) puis k^2 par k_F^2 pour le sortir de la somme (ce qu'on peut justifier plus soigneusement en calculant la somme dans l'exercice ci-dessous).

✎ **Exercice 6.15** : Montrer que $\frac{w}{\text{Vol}} \sum_k \overline{G^R}(k; \epsilon_F + \omega) \overline{G^A}(k; \epsilon_F) = \frac{1}{1 - i\omega\tau_e}$.

Indication : justifier $\frac{1}{\text{Vol}} \sum_k \rightarrow \rho_0 \int_{\mathbb{R}} d\epsilon_k$, où ρ_0 est la densité d'états par unité de volume au niveau de Fermi, puis utiliser le théorème des résidus.

Finalement nous aboutissons à :

$$\overline{\sigma(\omega)}^{\text{Drude}} = \frac{e^2}{2\pi m^2} \frac{k_F^2}{d} 2\pi \rho_0 \tau_e \frac{1}{1 - i\omega\tau_e} = \frac{e^2 \tau_e}{m} \frac{2\epsilon_F \rho_0}{d} \frac{1}{1 - i\omega\tau_e} \quad (297)$$

Nous reconnaissons la densité électronique, $n = \frac{2\epsilon_F \rho_0}{d}$, et finalement

$$\boxed{\overline{\sigma(\omega)}^{\text{Drude}} = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau_e}} \quad \text{où} \quad \sigma_0 = \frac{ne^2 \tau_e}{m} \quad (298)$$

Nous avons bien retrouvé le résultat du modèle semi-classique de Drude-Sommerfeld. Alors que la conductivité du système balistique présente une divergence à $\omega \rightarrow 0$, $\sigma(\omega) \propto i/\omega$, que nous avons interprétée, ⁹¹ les collisions sur les défauts sont responsables d'une conductivité finie à fréquence nulle.

✎ **Exercice 6.16** : Montrer que la conductivité de Drude peut également se réécrire sous la forme $\sigma_0 = e^2 \rho_0 D$ (relation d'Einstein) où $D = \ell^2/(\tau_e d)$ est la constante de diffusion. On donne $k_F^{-1} = 0.83 \text{ \AA}$ (argent), quelle est la distance parcourue par un électron balistique en 1 s ? On donne $\ell_e \simeq 30 \text{ nm}$ (Ag6N, argent très pur). Calculer D . Quelle est la distance parcourue par un électron diffusif en 1 s ?

⁹⁰ Notons que ces trois hypothèses conduisent à $\overline{\text{Re} \sigma(\omega)} \propto \sum_{k, k'} k_x k'_x \text{Re}[G^R(k, k'; \epsilon_F + \omega) G^A(k', k; \epsilon_F)]$, ce qui est un petit peu plus faible que (295), sauf dans le cas $\omega = 0$.

⁹¹ elle correspond à un comportement de la réponse impulsionnelle $\sigma(t) \propto \theta(t)$, traduisant l'apparition d'un courant constant (i.e. la conservation de l'impulsion des électrons) suite à une impulsion de champ électrique.

Effet de la température : à $T \neq 0$, le résultat (298) doit être convolué par la dérivée d'une fonction de Fermi $-\partial f/\partial \epsilon$. Comme le résultat à $T = 0$ K dépend faiblement de l'énergie (à travers n et τ_e), la convolution est sans effet. Toutefois la température n'est pas sans effet. En effet, nous venons de montrer que les collisions (élastiques) sur le désordre, induisent une conductivité finie. Si les électrons sont soumis à d'autres processus de collision⁹² (électron-phonon,...) la self énergie de la fonction de Green reçoit les contributions des différentes perturbations : désordre, interaction électron-phonon, etc. Cela correspond à ajouter les taux de relaxation⁹³ selon la loi de Matthiessen

$$\frac{1}{\tau(T)} = \frac{1}{\tau_e} + \frac{1}{\tau_{e-ph}(T)} + \dots \quad (299)$$

Le calcul de la conductivité conduit à $\sigma_{\text{Drude}} = \frac{ne^2\tau(T)}{m}$.

6.5.3 Corrélations entre fonctions de Green

Nous avons retrouvé le résultat semi-classique en négligeant les corrélations entre les fonctions de Green dans l'équation (295). Nous souhaitons maintenant étudier l'effet des corrélations sur la conductivité moyenne. Cette discussion repose sur l'analyse des corrections perturbatives de (295), qui sera menée en analysant physiquement différents types de contributions. À cette fin nous commençons par donner la représentation diagrammatique de (295), que nous dessinons comme une bulle (figure 47) constituée par les deux fonctions de Green. Les lignes ondulées représentent les éléments de matrice de l'opérateur courant moyen, ek_x/m et ek'_x/m , et nous rappellent que la conductivité est une fonction de corrélation courant-courant.

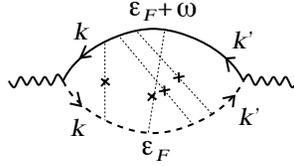


FIGURE 47 : Représentation diagrammatique d'une correction perturbative pour la conductivité moyenne donnée par l'équation (295). Les lignes continues (tirées) représentent des fonctions de Green retardées \bar{G}^R (avancées \bar{G}^A). Les lignes ondulées représentent l'opérateur de courant (ek_x/m et ek'_x/m). Les lignes pointillées reliant les lignes retardées et avancées correspondent à corréler les fonctions de Green G^R et G^A dans l'équation (295).

Dans le cas du terme de Drude les lignes de fonctions de Green sont les fonctions de Green moyennes \bar{G}^R et \bar{G}^A . Les corrélations entre fonctions de Green sont représentées par des dia-

⁹² autres que électron-électron qui conserve le courant total,

⁹³ **Temps de vie et temps de transport.**— Nous devons ici apporter une petite précision sur la nature du temps de relaxation intervenant dans la conductivité. Nous avons introduit le temps de vie des états électroniques comme : $1/\tau = -2 \text{Im} \Sigma^R = 2\pi\rho_0 \langle C(\theta) \rangle_\theta$, où $C(\theta) \stackrel{\text{def}}{=} \int dr e^{-i(k'-k)r} \overline{\mathcal{V}(r)\mathcal{V}(0)}$ où θ est l'angle entre les deux vecteurs k et k' sur la surface de Fermi, $\|k\| = \|k'\| = k_F$ (à l'approximation de Born, $C(\theta)$ est proportionnelle à la section efficace de diffusion dans la direction θ). Le temps qui intervient dans la conductivité n'est en général pas ce temps mais le temps de relaxation de la vitesse [105, 61, 62] : $\sigma = \frac{ne^2\tau_{tr}}{m}$ (ceci est lié à la présence de $k_x k'_x$ dans les relations (279,295)) ; ce temps est appelé *temps de transport* $1/\tau_{tr} = 2\pi\rho_0 \langle C(\theta)(1 - \cos \theta) \rangle_\theta$. Dans le cas de la diffusion isotrope, $C(\theta) = w$ n'a pas de structure et les deux temps coïncident. Dans le cas de diffusion anisotrope (lorsque la fonction de corrélation de \mathcal{V} présente une structure), les deux temps peuvent toutefois différer notablement $\tau_{tr} > \tau$. Cette discussion s'applique au cas de la diffusion électron-phonon (chap. 26 de [64]) : le temps de collision électron-phonon est $\tau_{e-ph} \propto T^{-3}$ mais la diffusion est fortement anisotrope à basse température ($\ll \omega_D$, la coupure de Debye) et le temps de transport correspondant est $\tau_{e-ph, tr} \propto T^{-5}$ ce qui conduit à $\sigma(T) \sim 1/T^5$ pour $T \ll \omega_D$.

grammes dans lesquels les lignes de fonctions de Green retardée et avancée sont couplées par des lignes d'impureté (figure 47).

**** Légère modification des règles de Feynman pour la conductivité ****.– Dans les diagrammes, les lignes de fonctions de Green seront désormais des fonctions de Green *moyennes*, \overline{G}^R et \overline{G}^A (au lieu des fonctions de Green libres), ce qui est une manière de resommer une partie des diagrammes ne couplant pas les fonctions retardées et avancées.

Transport classique et localisation faible : présentation heuristique Nous avons déjà noté au cours du calcul de la conductivité à l'approximation de Drude que les résultats intéressants sont non perturbatifs et correspondent à resommer certaines classes de diagrammes. La question est donc d'identifier les classes de diagrammes qui apportent les corrections dominantes. Pour cela nous faisons une petite digression et donnons une image plus qualitative de l'étude du transport dans un métal diffusif. Lorsqu'on étudie la conductance d'un système relié à deux contacts, on peut montrer que la conductance est reliée à la probabilité de traverser le système. Cette probabilité s'exprime comme le module carré d'une somme d'amplitudes de probabilité :

$$G = \frac{e^2}{h} g \sim \frac{e^2}{h} \left| \sum_{\mathcal{C}} \mathcal{A}_{\mathcal{C}} \right|^2 \quad (300)$$

où la somme porte sur tous les chemins \mathcal{C} allant d'un contact à l'autre, pour un électron d'énergie ϵ_F . La conductance adimensionnée est notée g . Cette formulation des propriétés de transport peut être rendue rigoureuse, c'est l'approche de Landauer-Büttiker. La relation avec la formule de Kubo se comprend en remarquant que l'amplitude $\mathcal{A}_{\mathcal{C}}$ est associée à la fonction de Green retardée, et l'amplitude conjuguée $\mathcal{A}_{\mathcal{C}}^*$ à la fonction de Green avancée (formule de Fisher & Lee $G^R(\text{contact 1} \leftarrow \text{contact 2}; \epsilon_F) \sim \sum_{\mathcal{C}} \mathcal{A}_{\mathcal{C}}$) : cette expression de la conductance possède la structure $g \sim |G^R(\text{contact 1} \leftarrow \text{contact 2}; \epsilon_F)|^2 \sim G^R G^A$.

Dans le cas d'un métal faiblement désordonné ($k_F \ell_e \gg 1$), la somme porte sur les chemins classiques décrivant des collisions sur les impuretés (rappelons qu'avec notre choix de modèle désordonné, après moyenne, l'interaction avec le désordre s'interprète comme une double interaction avec une impureté localisée). La phase d'une amplitude est donc proportionnelle à la longueur $\ell_{\mathcal{C}}$ du chemin de diffusion : $\mathcal{A}_{\mathcal{C}} \propto e^{ik_F \ell_{\mathcal{C}}}$.

La conductance moyenne est donnée en moyennant l'expression :

$$\overline{g} \sim \underbrace{\sum_{\mathcal{C}} |\mathcal{A}_{\mathcal{C}}|^2}_{\text{classique}} + \underbrace{\sum_{\mathcal{C} \neq \mathcal{C}'} \mathcal{A}_{\mathcal{C}} \mathcal{A}_{\mathcal{C}'}^*}_{\text{quantique}} \quad (301)$$

On peut montrer que le premier terme, la somme des probabilités, correspond au terme classique (Drude). C'est le terme dominant car donné par une somme de termes positifs. En revanche le terme d'interférences (quantique) est une somme de termes portant des phases $\mathcal{A}_{\mathcal{C}} \mathcal{A}_{\mathcal{C}'}^* \propto e^{ik_F(\ell_{\mathcal{C}} - \ell_{\mathcal{C}'})}$. On comprend que ce type de contributions a d'autant plus de mal à survivre à la moyenne sur le désordre que la différence $\ell_{\mathcal{C}} - \ell_{\mathcal{C}'}$ est grande (le terme classique $|\mathcal{A}_{\mathcal{C}}|^2$ domine car les deux chemins correspondent à la même séquence de collisions (figure 48)). Une façon de minimiser la différence des longueurs est de considérer une séquence de collisions identiques au milieu de laquelle on introduit un croisement. Cette construction fait apparaître une boucle à l'intérieur de laquelle une des trajectoires est renversée (figure 48). Ce terme décrit l'interférence entre deux trajectoires diffusives renversées : les deux trajectoires subissent les collisions dans l'ordre inverse, ce qui correspond aux *diagrammes maximally croisés* (figure 49) que nous analyserons. À cause du croisement les phases des deux amplitudes diffèrent légèrement et cette contribution est petite (une bonne introduction est donnée au chapitre 1 de [61, 62]).

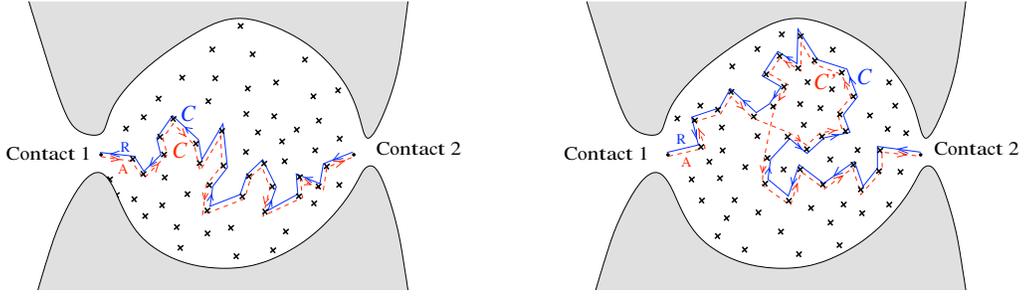


FIGURE 48 : À gauche : contribution au terme classique $\sum_C |\mathcal{A}_C|^2$. À droite : contribution au terme quantique $\sum_{C \neq C'} \mathcal{A}_C \mathcal{A}_{C'}^*$, qui minimise $\ell_C - \ell_{C'}$. La boucle décrit l'interférence quantique de trajectoires renversées.

6.5.4 Diffuson (contribution non cohérente)

Nous venons de montrer par des arguments heuristiques que les séquences de collisions identiques jouent un rôle important. Avant d'étudier les diagrammes maximally croisés de la figure 49, il est instructif de commencer par étudier les diagrammes en échelle :

$$\overline{\sigma(\omega)}^{\text{diff}} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \quad (302)$$

Chaque contribution peut être analysée facilement à l'aide des règles de Feynman énoncées plus haut.

✎ **Exercice 6.17** : Donner l'expression (sans les calculer) des deux premiers termes de (302) en fonctions des \overline{G}^R et \overline{G}^A .

✎ **Exercice 6.18** : Nous introduisons la quantité

$$\Lambda(q, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{w}{\text{Vol}} \sum_k \overline{G}^R(k+q; \epsilon_F + \omega) \overline{G}^A(k; \epsilon_F) = \text{diagram} \quad (303)$$

que nous calculons dans la limite $q \rightarrow 0$ et $\omega \rightarrow 0$.

Vérifier que $\overline{G}^R(k+q; \epsilon_F + \omega) = \overline{G}^R(k) + (v_k \cdot q - \omega) [\overline{G}^R(k)]^2 + (v_k \cdot q)^2 [\overline{G}^R(k)]^3 + \dots$ où toutes les fonctions de Green du membre de droite sont prises à énergie de Fermi; $v_k = k/m$ (on admettra que le terme $\epsilon_q [\overline{G}^R(k)]^2$ d'ordre q^2 peut être négligé, ainsi que le terme ω^2). Comme nous l'avons signalé, les quantités $\frac{w}{\text{Vol}} \sum_k [\overline{G}^R(k)]^n [\overline{G}^A(k)]^m$ se calculent aisément en faisant $\frac{1}{\text{Vol}} \sum_k \rightarrow \rho_0 \int_{\mathbb{R}} d\epsilon_k$ puis en utilisant le théorème des résidus. En déduire que

$$\Lambda(q, \omega) = 1 + i\omega\tau_e - q^2 \ell_e^2/d + \dots \quad (304)$$

Ce résultat sera utilisé à plusieurs reprises.

Nous isolons la série apparaissant au milieu des corrections à la conductivité (302) :

$$\Gamma_d(q, \omega) = \text{diagram 1} = \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \quad (305)$$

(une impulsion supplémentaire q a été introduite dans les fonctions de Green retardées). Cet objet est appelé *diffuson*. Il est facile de voir qu'il obéit à l'équation (de Bethe-Salpether)

$$\Gamma_d(q, \omega) = w + \Lambda(q, \omega) \Gamma_d(q, \omega) \quad (306)$$

où $\Lambda(q, \omega)$ est la quantité introduite dans l'exercice précédent. Autrement dit, Γ_d correspond à une série géométrique que nous resomons :

$$\Gamma_d(q, \omega) = \frac{w}{1 - \Lambda(q, \omega)} \quad (307)$$

Pôle de diffusion.— D'après le résultat de l'exercice nous voyons que, dans la limite $q \rightarrow 0$ et $\omega \rightarrow 0$, le diffuson coïncide avec la fonction de Green de l'équation de diffusion :

$$\Gamma_d(q, \omega) \simeq \frac{w}{\tau_e - i\omega + Dq^2} \quad (308)$$

Nous comprenons qu'il n'est pas possible de tronquer la série perturbative (305) à un ordre donné car la limite $q \rightarrow 0$ et $\omega \rightarrow 0$ nous conduit au bord du domaine de convergence de la série géométrique $\Gamma_d = w \sum_{n=0}^{\infty} \Lambda^n$.

Le comportement de Γ_d est la signature de la nature diffusive des trajectoires électroniques dans le métal (on pourrait s'en convaincre en calculant la fonction de réponse densité-densité du métal qui est reliée au diffuson $\chi_0(q, \omega) \simeq -\rho_0 \frac{Dq^2}{-i\omega + Dq^2}$ [6] ; cette remarque permet de relier le pôle de diffusion à la conservation du nombre de particules [56]).

Nous sommes en mesure de calculer la contribution des diagrammes en échelle à la conductivité

$$\overline{\sigma(\omega)}^{\text{diff}} = \frac{e^2}{2\pi m^2} \frac{1}{\text{Vol}^2} \sum_{k, k'} k_x k'_x |\overline{G}^{\text{R}}(k)|^2 \Gamma_d(0, \omega) |\overline{G}^{\text{R}}(k')|^2 \quad (309)$$

L'isotropie de la relation de dispersion conduit à $\frac{1}{\text{Vol}} \sum_k k_x |\overline{G}^{\text{R}}(k)|^2 = 0$ et donc

$$\overline{\sigma(\omega)}^{\text{diff}} = 0 \quad (310)$$

Ce résultat s'interprète facilement : rappelons-nous que la conductivité est reliée à constante de diffusion, *i.e.* à la fonction de corrélation de la vitesse $\sigma \sim D = \int_0^{\infty} dt \langle v_x(t) v_x \rangle$ (ce que nous rappelle la présence de $k_x k'_x$ dans (295)). Le diffuson (305) décrit une séquence de collisions arbitrairement grande, après laquelle la mémoire de la direction initiale de la vitesse est perdue.⁹⁴

Exercice 6.19 : *Limite $\lim_{q \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma(q, \omega)$.— On admet que la conductivité moyenne à $q \neq 0$ est donnée par : $\overline{\sigma_{xx}(q, \omega)} = \frac{e^2}{2\pi m^2} \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{k, k'} k_x k'_x \overline{G}^{\text{R}}(k+q, k'+q; \epsilon_F + \omega) \overline{G}^{\text{A}}(k', k; \epsilon_F)$. Montrer que la contribution des diagrammes en échelle (le diffuson) est $\overline{\sigma_{xx}(q, 0)}^{\text{diff}} = -\sigma_0 \frac{q_x^2}{q^2}$ (qui diffère donc de $\overline{\sigma_{xx}(0, \omega)}^{\text{diff}} = 0$).*

Indication : En utilisant les mêmes approximations que dans l'exercice 6.18, montrer que $\frac{w}{\text{Vol}} \sum_k k_x \overline{G}^{\text{R}}(k+q) \overline{G}^{\text{A}}(k) \simeq -i \frac{k_F \ell_e}{d} q_x$.

6.5.5 La localisation faible : une correction quantique (cohérente)

Sur la base d'arguments heuristiques, nous avons montré quelle classe particulière de corrections perturbatives domine après moyenne sur le désordre : les lignes d'impuretés maximales croisés (figure 49). Cette correction à la conductivité moyenne s'appelle la *correction de localisation faible*. Physiquement elle trouve son origine dans les interférences quantiques entre trajectoires électroniques symétriques par renversement du sens du temps (ce que les figures 48 et 49 suggèrent). Ces interférences conduisent à une augmentation *cohérente* de la rétrodiffusion des électrons, *i.e.* une diminution de la conductivité.

⁹⁴ Notons que dans le cas où la diffusion est anisotrope, la contribution du diffuson est non nulle. Elle fait apparaître le temps de transport τ_{tr} lorsqu'elle est ajoutée à la contribution de Drude [61, 62].

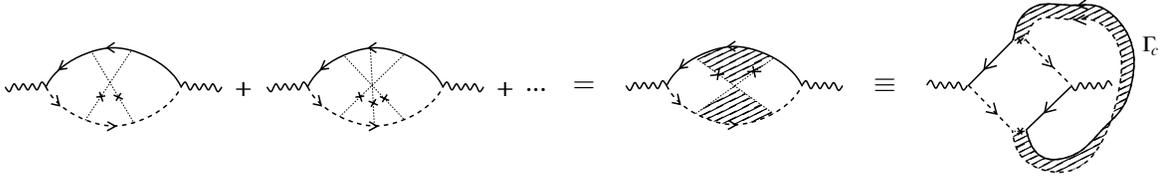


FIGURE 49 : Diagrammes maximalement croisés : correction de localisation faible $\overline{\sigma(\omega)}^{\text{coop}}$.

La structure du bloc central apparaissant sur la figure est très similaire au diffuson, seul le sens des lignes des fonctions de Green avancées a été changé. Lorsque nous retournons les fonctions de Green avancées nous constatons que le vecteur d'onde q du diffuson (305) remplacé par $k + k'$:

$$\Gamma_c(Q = k + k', \omega) = \begin{array}{c} \leftarrow k \quad \leftarrow k' \\ \leftarrow k \quad \leftarrow k' \\ \leftarrow k \quad \leftarrow k' \\ \leftarrow k \quad \leftarrow k' \end{array} = \begin{array}{c} \leftarrow k \quad \leftarrow k' \\ \leftarrow k \quad \leftarrow k' \\ \leftarrow k \quad \leftarrow k' \\ \leftarrow k \quad \leftarrow k' \end{array} = \begin{array}{c} \leftarrow k_1 \\ \leftarrow k_1 \\ \leftarrow k_1 \\ \leftarrow k_1 \end{array} + \begin{array}{c} \leftarrow k_1 \\ \leftarrow k_1 \\ \leftarrow k_1 \\ \leftarrow k_1 \end{array} + \dots \quad (311)$$

Cet objet porte le nom de “cooperon” et présente également un pôle de diffusion pour $Q \rightarrow 0$:

$$\Gamma_c(Q, \omega) = \frac{w}{1 - \Lambda(Q, \omega)} \simeq \frac{w}{\tau_e} \frac{1}{-i\omega + DQ^2}. \quad (312)$$

À la différence du diffuson, la contribution $\overline{\sigma(\omega)}^{\text{coop}}$ à la conductivité moyenne est *cohérente* : elle décrit les interférences quantiques entre trajectoires électroniques renversées par sens du temps. Pour tenir compte de cette remarque, nous introduisons un cutoff $1/\tau_\varphi$ dont le rôle est d'éliminer les contributions des boucles de tailles supérieures à $L_\varphi = \sqrt{D\tau_\varphi}$ (i.e. des $Q \lesssim 1/L_\varphi$) :

$$\Gamma_c(Q, \omega) \simeq \frac{w}{\tau_e} \frac{1}{\frac{1}{\tau_\varphi} - i\omega + DQ^2} \quad (313)$$

Ici l'introduction de L_φ est purement phénoménologique mais elle peut être justifiée un peu plus rigoureusement (on pourra se reporter au chapitre 6 de [61, 62] par exemple, ou plus directement aux articles [7, 18] présentant une description plus microscopique de la décohérence par l'interaction entre électrons ; ou encore à la référence [52, 54] et au chapitre 5 de [51]). Finalement la contribution des diagrammes maximalement croisés à la conductivité prend la forme :

$$\overline{\sigma(\omega)}^{\text{coop}} = \frac{e^2}{2\pi m^2} \frac{1}{\text{Vol}^2} \sum_{k, k'} k_x k'_x |\overline{G}^{\text{R}}(k)|^2 \Gamma_c(k + k', \omega) |\overline{G}^{\text{R}}(k')|^2. \quad (314)$$

À la différence de la contribution du diffuson où l'introduction du diffuson dans (295) conduit à une décorrélation des impulsions k et k' (décorrélation de la direction de l'impulsion après une séquence de collisions), le cooperon introduit une forte corrélation entre les impulsions k et k' : les intégrales de l'équation (295) sont dominées par $k + k' = 0$ (ce qui correspond à la rétrodiffusion). Le découplage entre petites et grandes échelles (dans l'espace réel \overline{G}^{R} décroît sur des distances courtes $\sim \ell_e$ alors que Γ_c décroît sur de grandes distances $\sim L_\varphi$) nous permet d'écrire

$$\sum_{k, k'} k_x k'_x |\overline{G}^{\text{R}}(k)|^2 \Gamma_c(k + k', \omega) |\overline{G}^{\text{R}}(k')|^2 \simeq -\frac{k_F^2}{d} \sum_k |\overline{G}^{\text{R}}(k)|^4 \sum_Q \Gamma_c(Q, \omega) \quad (315)$$

Finalement, en utilisant le résultat de l'exercice 6.20, nous aboutissons à :

$$\overline{\Delta\sigma(\omega)} = -\frac{e^2}{\pi\hbar} \frac{1}{\text{Vol}} \sum_Q \frac{1}{1/L_\varphi^2 - i\omega/D + Q^2} \quad (316)$$

où ⁹⁵ $\overline{\Delta\sigma(\omega)} \stackrel{\text{def}}{=} \overline{\sigma(\omega)^{\text{coop}}} \simeq \overline{\sigma(\omega)} - \overline{\sigma(\omega)}^{\text{Drude}}$. Le signe de la correction est négatif, d'où le nom de correction de *localisation faible*. Une condition de validité de ce résultat est $L_\varphi \gg \ell_e$ puisque $\overline{\Delta\sigma(\omega)}$ décrit des effets d'interférences quantiques sur des échelles sur lesquelles le mouvement de l'électron est diffusif, *i.e.* dans un régime de collisions multiples. ⁹⁶ Par la suite on fixe $\omega = 0$: $\overline{\Delta\sigma} \equiv \overline{\Delta\sigma(\omega = 0)}$

✎ **Exercice 6.20** : Montrer que $\frac{w}{\text{Vol}} \sum_k |\overline{G}^{\text{R}}(k)|^4 = 2\tau_e^2$.

L'expression de la localisation faible est plus aisée à manipuler si nous retournons dans l'espace réel. Nous remarquons que la somme correspond à la trace de la fonction de Green du Laplacien : $\sum_Q \frac{1}{1/L_\varphi^2 + Q^2} = \text{Tr} \left\{ \frac{1}{1/L_\varphi^2 - \Delta} \right\}$. Nous pouvons donc écrire

$$\overline{\Delta\sigma} = -\frac{e^2}{\pi\hbar} \int_0^\infty dt \mathcal{P}_c(t) e^{-t/L_\varphi^2} \quad \text{où} \quad \mathcal{P}_c(t) = \langle r | e^{t\Delta} | r \rangle \quad (317)$$

$\mathcal{P}_c(t)$ s'interprète comme une probabilité de retour à l'origine (nous avons supposé l'invariance par translation). Elle mesure le nombre de boucles renversées pour une échelle t (la constante de diffusion D avait disparu de nos expressions à $\omega = 0$. Nous ne l'avons pas réintroduite et le "temps" t a donc la dimension d'une [longueur]²). Cette expression montre plus clairement que l'introduction de L_φ correspond bien à l'élimination des boucles s'étendant sur des distances supérieures à L_φ .

Correction de localisation faible du fil et du plan.— On utilise l'expression bien connue de la probabilité en dimension d : $1/(4\pi t)^{d/2}$. Pour un fil de longueur $L \gg L_\varphi$, on vérifie facilement que :

$$\overline{\Delta\sigma}_{\text{fil}} = -\frac{e^2 L_\varphi}{h s} \quad (318)$$

où s est la section du fil (si on tient compte de la dégénérescence de spin, le résultat est multiplié par 2). Il est remarquable de noter que, contrairement au terme classique de Drude, ce résultat est indépendant de propriétés telles que la densité n ou le libre parcours moyen élastique. On peut montrer que dans le régime mésoscopique ($L_\varphi \gg L$) la correction de localisation faible à la conductance adimensionnée est *universelle* ^{97,98} $\overline{\Delta g} = -\frac{1}{3}$.

⁹⁵ La contribution du cooperon n'est que la contribution dominante au terme d'interférences quantiques $\overline{\sigma} - \overline{\sigma}^{\text{Drude}}$.

⁹⁶ En pratique L_φ décroît lorsque la température augmente. Pour des températures t.q. $L_\varphi \lesssim \ell_e$, les effets d'interférences se manifestent dans un régime où le mouvement de l'électron est balistique. C'est pourquoi on parle de *régime diffusif* pour $L_\varphi \gg \ell_e$ et de *régime balistique* lorsque $L_\varphi \lesssim \ell_e$.

⁹⁷ Nous partons de l'équation (316) : $\overline{\Delta g} = -\frac{2}{L^2} \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{1/L_\varphi^2 + (n\pi/L)^2}$ où la somme sur le vecteur Q est remplacée par une somme sur les modes propres de l'opérateur de diffusion sur $[0, L]$. La connection du fil à des contacts à ses deux extrémités est prise en compte en considérant des conditions de Dirichlet, ce qui exclut le mode zéro de l'opérateur de diffusion (l'hypothèse semble naturelle, cependant elle touche à un point plus subtil qu'il n'y paraît et mériterait d'être discutée plus en détail, *cf.* [61, 62]).

Le résultat peut être obtenu encore plus directement en utilisant le déterminant spectral [3, 51] $\overline{\Delta g} = \frac{1}{L} \Delta \tilde{\sigma}$ où $\Delta \tilde{\sigma} = -2\partial_\gamma \ln S(\gamma)$. Pour le fil connecté le déterminant spectral est donné par $S(\gamma) = \frac{\sinh \sqrt{\gamma} L}{\sqrt{\gamma}}$ et nous obtenons immédiatement $\overline{\Delta g} = -\frac{L_\varphi}{L} \left(\coth \frac{L}{L_\varphi} - \frac{L_\varphi}{L} \right)$ qui est le résultat de la sommation donnée ci-dessus, et interpole bien entre $-1/3$ et $-L_\varphi/L$.

⁹⁸ La transition entre $\overline{\Delta g} \simeq -\frac{1}{3}$ et $\overline{\Delta g} \simeq -\frac{L_\varphi}{L}$ peut se comprendre de la manière suivante. Dans la limite complètement cohérente, $L_\varphi \gg L$, la correction est d'ordre $\overline{\Delta g}_{\text{coh}} \sim -1$ (rappelons que $g_{\text{cl}} \gg 1$). Si on considère maintenant un échantillon beaucoup plus long que la longueur de cohérence de phase, $L_\varphi \ll L$, nous pouvons le "découper" en $\mathcal{N} = L/L_\varphi$ tranches de tailles L_φ , incohérentes entre elles, dont nous ajoutons les résistances : $\mathcal{R} \simeq \frac{\mathcal{N}}{g_{\text{cl}} + \overline{\Delta g}_{\text{coh}}} \simeq \frac{\mathcal{N}}{g_{\text{cl}}} \left(1 - \frac{\overline{\Delta g}_{\text{coh}}}{g_{\text{cl}}} \right)$. Nous obtenons la correction de localisation faible à la résistance $\overline{\Delta \mathcal{R}} \simeq -\mathcal{N} \overline{\Delta g}_{\text{coh}} / g_{\text{cl}}^2$, *i.e.* $\overline{\Delta g} = -\overline{\Delta \mathcal{R}} / \mathcal{R}^2 = \frac{1}{\mathcal{N}} \overline{\Delta g}_{\text{coh}} \sim -\frac{L_\varphi}{L}$. QED.

Pour un film mince (un plan) l'intégrale de (317) présente une divergence aux petits temps, que nous coupons à $t \sim \ell_e^2$ (temps en deçà duquel le mouvement n'est plus diffusif).

$$\overline{\Delta\sigma}_{\text{plan}} = -\frac{e^2}{\pi h b} \ln(L_\varphi/\ell_e) \quad (319)$$

où b est l'épaisseur du film métallique.

Dimensionnalité effective.— Si on considère un film métallique mince d'épaisseur finie b et de largeur finie W la dimension effective est donnée en comparant la longueur de cohérence de phase L_φ à la longueur, comme on peut s'en convaincre à l'aide de (316). $L_\varphi \gg W$, b correspond à la situation (quasi) unidimensionnelle. $W \gg L_\varphi \gg b$ correspond à la situation bidimensionnelle.

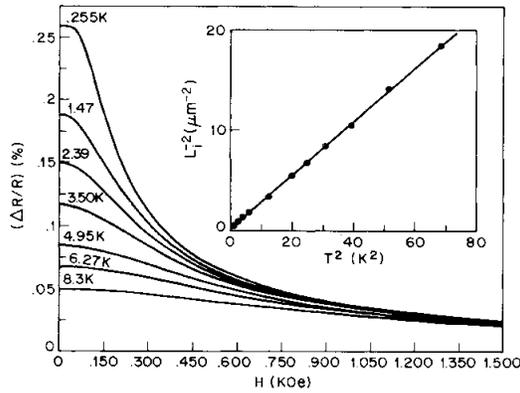


FIG. 3. Detailed fits of magnetoresistance data at various temperatures for $W = 0.074 \mu\text{m}$. Except for the elimination of noise, the fitted curves are indistinguishable from the data. Inset: Values for the quantity $L_1(T)^{-2}$ as a function of T^2 for part of our temperature range.

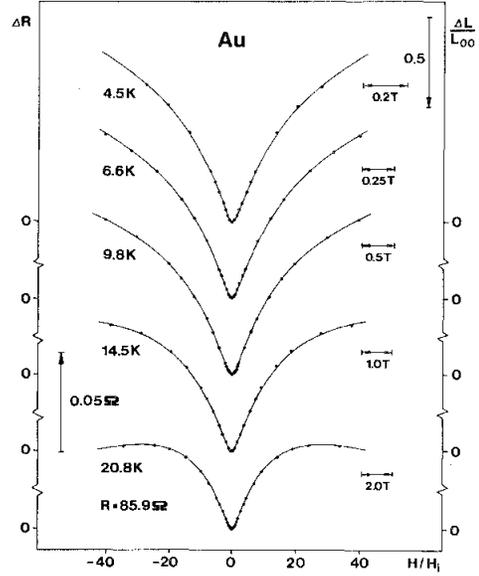


FIG. 4. Magnetoresistance (or $[L(H)-L(0)]/L(0)$) of a Au film as a function of the field H measured in units of the inelastic field $H_i(T)$. The points represent the experimental results. The solid curves are calculated using the characteristic fields plotted in Fig. 5.

FIGURE 50 : à gauche : Magnétorésistance $\frac{\Delta R}{R} = -\frac{\overline{\Delta\sigma}}{\sigma}$ d'un fil quasi 1D de Lithium [37]. à droite : Magnétorésistance de film d'or (situation 2d) [13]. L'inversion de la magnétorésistance s'explique par l'existence d'un fort couplage spin-orbite dans les métaux lourds.

Magnétoconductance positive (anormale).— Quel est l'intérêt à étudier une petite correction quantique (de l'ordre ou inférieure au 1% dans une situation typique, cf. figure 50)? La réponse est fournie par les deux expressions que nous venons d'obtenir : $\overline{\Delta\sigma}$ fournit une mesure de la longueur de cohérence de phase. Elle permet donc de sonder l'efficacité des processus inélastiques (électron-électron, électron-phonon, etc) à détruire la cohérence quantique dans un métal. Elle donne accès à des informations fondamentales du point de vue du transport quantique. En pratique la mesure de la correction de localisation faible est rendue possible grâce à sa sensibilité au champ magnétique. Pour comprendre cela rappelons nous que $\overline{\Delta\sigma}$ décrit l'interférence entre trajectoires renversées par le sens du temps. En présence du champ magnétique, chaque trajectoire porte une phase $e^{ie\Phi_C/h}$ où $\Phi_C = \int_C dr A(r)$ est le flux magnétique à travers la trajectoire fermée, où $A(r)$ est le potentiel vecteur. Parce qu'une des trajectoires est renversée, les deux flux magnétiques s'ajoutent et le terme d'interférence est pondéré par $e^{2ie\Phi_C/h}$. On a

donc un doublement du couplage au champ. L'écriture de $\mathcal{P}_c(t)$ sous forme d'intégrale de chemin permet de prendre facilement en compte cette phase magnétique :

$$\boxed{\mathcal{P}_c(t) = \int_{r(0)=r}^{r(t)=r} \mathcal{D}r(\tau) e^{-\int_0^t d\tau [\frac{\dot{r}^2}{4} + 2ieA(r)\cdot\dot{r}]} \quad (320)}$$

On peut vérifier que la correction de localisation faible du fil de largeur W devient [5] :

$$\overline{\Delta\sigma}_{\text{fil}} = -\frac{e^2}{h} \frac{1}{s} \left[\frac{1}{L_\varphi^2} + \frac{1}{L_B^2} \right]^{-1/2} \quad \text{où} \quad \frac{1}{L_B} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{eBW}{\sqrt{3}\hbar} \quad (321)$$

à fort champ la correction décroît comme $\overline{\Delta\sigma} \propto -1/B$. La conductivité augmente avec le champ magnétique (le comportement inverse de la conductivité de Drude) : on parle de *magnétoconductance positive* ou *anormale*. Le champ magnétique introduit donc un cutoff supplémentaire comme on peut le comprendre facilement à l'aide de l'argument suivant. Pour une échelle de temps t l'aire algébrique typique des trajectoires browniennes fermées est $W\sqrt{t}$ (la largeur du fil W \times la distance typique explorée le long du fil \sqrt{t}). Le flux correspondant est $\Phi_C \sim BW\sqrt{t}$ (il est de signe aléatoire). Pour les trajectoires associées à des temps courts $t \ll \tau_B = (\phi_0/BW)^2$, où $\phi_0 = h/e$ est le quantum de flux, la présence de la phase magnétique est sans importance : $e^{4i\pi\Phi_C/\phi_0} \simeq 1$. En revanche si $t \gg \tau_B$ les contributions des trajectoires sont affectées par une phase importante $\Phi_C/\phi_0 \gg 1$. Le champ magnétique introduit donc un cutoff à $t = \tau_B$ et la correction de localisation faible a la structure $\overline{\Delta\sigma} \sim -\int_0^{\min(\tau_B, \tau_\varphi)} \frac{dt}{\sqrt{4\pi t}}$ (ici $\tau_\varphi = L_\varphi^2$).

↳ Exercice 6.21 : Magnétoconductance classique et magnétoconductance anormale (d'un fil).— On rappelle que la conductivité de Drude varie à “bas” champ comme $\Delta\sigma_{\text{class}}(B)/\sigma_0 \simeq -(B\mu)^2$ où $\mu = \frac{e\tau_e}{m}$ est la mobilité. On considère de l'argent avec $\ell_e = 30 \text{ nm}$ (on rappelle que $k_F^{-1} = 0.83 \text{ \AA}$). Vérifier que $\Delta\sigma_{\text{class}}(B)/\sigma_0 \simeq -10^{-5} B^2$ (B en Tesla).

On considère un fil d'argent de section $S = W \times a = 60 \text{ nm} \times 50 \text{ nm}$ soumis à un champ magnétique perpendiculaire. Calculer la longueur L_B pour $B = 1 \text{ T}$. Vérifier que la localisation faible décroît comme $\overline{\Delta\sigma}/\sigma_0 \simeq -10^{-5}/B$ (B en Tesla).

La figure 50 (gauche) présente un résultat expérimental pour un fil de Lithium. La mesure est effectuée à différentes températures : on observe une disparition de cette correction quantique lorsque la température augmente, due à une augmentation de la fréquence des collisions inélastiques, *i.e.* une diminution de L_φ . L'analyse des données avec (321) permet de déduire la dépendance de L_φ avec la température.

Le résultat expérimental pour le film mince (situation 2d) est représenté sur la partie droite de la figure 50 et montre bien la dépendance logarithmique aux forts champs. Notons que le résultat expérimental de [13] présente une variation avec le signe opposé ($\frac{\Delta R}{R} = -\frac{\overline{\Delta\sigma}}{\sigma} \propto \ln(B)$ sur la figure). Ce changement de signe, ainsi que le changement de signe de la dérivée de $\frac{\Delta R}{R}$ à fort champ pour $T = 20.8 \text{ K}$, s'expliquent par la présence d'un fort couplage spin-orbite dans les métaux lourds tels que l'or.

🔍 Pour en savoir plus

- Sur la question de l'écrantage et des interactions électroniques : à un niveau très basique on pourra lire le chapitre 10 de [87] et un ouvrage un peu plus avancé [111]. Avec le formalisme de problème à N corps : [68] est assez pédagogique, [104] & [82] sont plus avancés.
- Sur le rôle du désordre : Il existe de nombreux articles de revue sur le sujet : un article introductif est celui de B. Al'tshuler & P. Lee [8]. Une revue classique est celle de G. Bergmann [14], avec de nombreux résultats expérimentaux. L'article de Chakravarty & Schmid [18] donne

une vision plus intuitive basée sur l'intégrale de chemin et l'approche semiclassique. Une référence récente et complète est l'ouvrage d'É. Akkermans & G. Montambaux [61], qui présentent les concepts en les appliquant en parallèle à l'optique et au transport électronique.

7 Au delà de la réponse linéaire

Dans ce cours j'ai souhaité appliquer les concepts du formalisme de la réponse linéaire à différents problèmes physiques et principalement au transport électronique. D'une part ces notes n'ont donné qu'un très bref aperçu des questions traitées. D'autre part il faut garder à l'esprit que l'étude du régime non linéaire (la caractéristique $I(V)$ d'un conducteur par exemple) donne accès à des informations d'autre nature, fort intéressantes. Le théorème fluctuation-dissipation nous a montré que les fluctuations dans le régime linéaire n'apportent pas d'information supplémentaire par rapport aux coefficients de réponse, autrement dit la mesure de $\langle \delta I^2 \rangle$ n'apporte rien de plus que celle de $\langle I \rangle$. Il a été mentionné en TD que l'étude des fluctuations dans le régime non linéaire pouvait en revanche apporter des informations très différentes (bruit de Nyquist/bruit de Shottky). Parmi les méthodes permettant d'attaquer ces questions, mentionnons le formalisme des fonctions de Green de Keldysh, ou le formalisme de Landauer-Büttiker (l'approche de “*scattering*” du transport et du bruit, plus intuitive).

A Problème : Mouvement brownien quantique

Nous étudions la dynamique d'une particule libre de position q et d'impulsion p couplée à un bain d'oscillateurs harmoniques décrits par les variables canoniquement conjuguées x_n, p_n . Nous dérivons une équation de Langevin quantique. La dynamique du problème est décrite par :

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \sum_n \left(\frac{\hat{p}_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2} m_n \omega_n^2 \left(\hat{x}_n - \frac{c_n}{m_n \omega_n^2} \hat{q} \right)^2 \right) \quad (322)$$

$$\hat{H}_S = \frac{\hat{p}^2}{2M} + V(\hat{q}) \quad (323)$$

Le problème est inspiré de l'article [26] et du chapitre 3 de [80].

1/ Préciser l'état d'équilibre (classique). Commenter l'intérêt de la forme de couplage choisi.

Par la suite nous considérons la particule libre $V(q) = 0$.

2/ *Équations du mouvement.* – On introduit les opérateurs en représentation de Heisenberg $\hat{q}(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{i\hat{H}t} \hat{q} e^{-i\hat{H}t}$, etc. Calculer $\frac{d}{dt} \hat{q}(t)$, $\frac{d}{dt} \hat{p}(t)$, $\frac{d}{dt} \hat{x}_n(t)$ et $\frac{d}{dt} \hat{p}_n(t)$.

3/ *Intégration des équations du mouvement des oscillateurs.* – Montrer que

$$\hat{x}_n(t) = \hat{x}_n(0) \cos \omega_n t + \frac{\hat{p}_n(0)}{m_n \omega_n} \sin \omega_n t + \frac{c_n}{m_n \omega_n} \int_0^t dt' \sin \omega_n (t - t') \hat{q}(t') \quad (324)$$

Indication : Vérifier que : $\exp \left[t \begin{pmatrix} 0 & 1/m \\ -m\omega^2 & 0 \end{pmatrix} \right] = \begin{pmatrix} \cos \omega t & \frac{1}{m\omega} \sin \omega t \\ -m\omega \sin \omega t & \cos \omega t \end{pmatrix}$

4/ *Équation de Langevin quantique.* – En réinjectant cette solution dans l'équation pour q , montrer que l'équation du mouvement présente la structure :

$$\boxed{M \frac{d^2}{dt^2} \hat{q}(t) + M \int_0^t dt' \gamma(t - t') \hat{q}(t') = \hat{\xi}(t)} \quad (325)$$

Donner l'expression de la fonction $\gamma(t)$. Montrer que l'opérateur $\xi(t)$ peut se décomposer comme : $\xi(t) = \zeta(t) - \gamma(t) q(0)$ où $\zeta(t)$ est une combinaison linéaire des opérateurs x_n et p_n .

5/ Montrer que $[\zeta(t), \zeta(0)] = -i\hbar M \gamma'(t)$.

Dans la suite on suppose que le couplage des oscillateurs au système ne modifie pas leur propriétés d'équilibre thermodynamique. La nature macroscopique du bain d'oscillateurs nous permet de le supposer à l'équilibre thermodynamique.

6/ Calculer $\langle x_n x_m \rangle$, $\langle p_n p_m \rangle$ et $\langle x_n p_m \rangle$. En déduire que

$$\langle \zeta(t) \zeta(0) \rangle = \frac{\hbar}{2} \sum_n \frac{c_n^2}{m_n \omega_n} \left(\coth \frac{\hbar \omega_n}{2k_B T} \cos \omega_n t - i \sin \omega_n t \right) \quad (326)$$

où $\langle \dots \rangle$ est la moyenne grand canonique. Montrer qu'à la limite classique le corrélateur est relié à $\gamma(t)$.

7/ *Fonction spectrale.* – On définit⁹⁹ :

$$J(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \pi \sum_n \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n} \delta(\omega - \omega_n) \quad (327)$$

⁹⁹ Rq : Il faut noter que dans le cadre du modèle général présenté au début du problème, la particule ne présente pas systématiquement un comportement diffusif. L'existence de celui-ci est lié au comportement aux temps courts de la fonction spectrale. Si on fixe les constantes de couplage comme $c_n = m_n \omega_n^2$ on peut montrer que la masse

Cette fonction code toute l'information sur les oscillateurs nécessaire pour notre problème. Pour le vérifier montrer que

$$\gamma(t) = \frac{2}{M} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega} \cos \omega t \quad (328)$$

et exprimer le corrélateur $\langle \zeta(t)\zeta(0) \rangle$ en fonction de $J(\omega)$.

8/ Calculer $\gamma(t)$ pour une densité spectrale $J(\omega) = M\gamma\omega \frac{\omega_D^2}{\omega_D^2 + \omega^2}$. Interpréter ω_D .

9/ Le cas "ohmique".- le cas ohmique correspond à la limite $\omega_D \rightarrow \infty$ du cas précédent : $J(\omega) = M\gamma\omega$. Montrer que l'équation du mouvement pour l'opérateur devient locale en temps

$$\frac{d^2}{dt^2} \hat{q}(t) + \gamma \frac{d}{dt} \hat{q}(t) = \frac{1}{M} \hat{\xi}(t) \quad (329)$$

(au cours du calcul on devra utiliser $\int_0^\infty dt \delta(t) = 1/2$, ce qu'on justifiera à l'aide de la question précédente). Vérifier que

$$\frac{1}{2} \langle \{\zeta(t), \zeta(0)\} \rangle = M\hbar\gamma \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \omega \coth \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \cos \omega t \quad (330)$$

On se place dans le cas ohmique jusqu'à la fin de l'exercice.

10/ Intégrer l'équation du mouvement. On exprimera $q(t) - q(t')$ en fonction de $\zeta(t)$ (on négligera les termes transitoires).

11/ Déplacement moyen.- Montrer que

$$\left\langle [\hat{q}(t) - \hat{q}(t')]^2 \right\rangle = \frac{2\hbar}{M} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\gamma/\pi}{\omega^2 + \gamma^2} \omega \coth \left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right) \frac{\sin^2 \omega(t-t')/2}{\omega^2} \quad (331)$$

Pour aboutir à cette équation il faut négliger les termes transitoires (qui sont reliés à des intégrales sur les fréquences divergentes. Ces divergences ne doivent pas nous préoccuper : elles proviennent de la divergence de $J(\omega)$ à haute fréquence qui peut être régularisée comme on l'a vu à la question 8).

12/ Mouvement brownien classique.- Montrer que dans le régime $|t - t'| \gg 1/\gamma, \hbar/k_B T$ le résultat correspond au déplacement d'une particule brownienne.

13/ Température nulle : mouvement brownien quantique.- Montrer que dans la limite $\hbar/k_B T \gg |t - t'|, 1/\gamma$ le déplacement, induit par les fluctuations de point zéro des oscillateurs, est de la forme :

$$\left\langle [q(t) - q(t')]^2 \right\rangle \sim \frac{\hbar\gamma}{M} \ln \gamma |t - t'| \quad (332)$$

14/ On considère la diffusion d'un neutron. On choisit $\gamma = 10^{10} \text{ s}^{-1}$. Commenter la condition de validité du régime de température nulle.

totale des oscillateurs est reliée à la fonction spectrale selon $\mathcal{M}_{\text{osc}} = \sum_n m_n \sim \int_0^\infty d\omega \frac{J(\omega)}{\omega^3}$. La fonction spectrale est naturellement coupée aux hautes fréquences, puisqu'il existe toujours un cutoff naturel ω_D dans ce type de modèles (sauf lorsque le bain d'oscillateurs est le champ électromagnétique). Supposons que son comportement de basse fréquence est $J(\omega) \sim \omega^\alpha$. On a [26] :

(1) Pour $\alpha \leq 2$ on a $\mathcal{M}_{\text{osc}} = \infty$ et le comportement de la particule est diffusif.

(2) Pour $\alpha > 2$ on a $\mathcal{M}_{\text{osc}} < \infty$. Le comportement de la particule est balistique, avec une masse renormalisée par le couplage aux oscillateurs.

B Problème : Ondes de spin dans un ferromagnétique - magnons

On étudie¹⁰⁰ un modèle (quantique) phénoménologique de ferromagnétique. Soit $\hat{S}(\vec{r})$ l'opérateur densité de spins (l'aimantation locale) correspondant à des spins localisés ou aux spins des électrons de conduction. Nous écrivons l'énergie d'interaction entre spins sous la forme :

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \int d\vec{r} d\vec{r}' v(\vec{r} - \vec{r}') \hat{S}(\vec{r}) \cdot \hat{S}(\vec{r}') \quad (333)$$

où $v(\vec{r} - \vec{r}')$ est un potentiel d'interaction. Cette interaction, supposée *isotrope*, est une interaction effective qui trouve son origine dans l'interaction de Coulomb entre électrons et le principe de Pauli (mécanisme d'échange dans le cas d'une interaction ferromagnétique ou de superéchange dans le cas d'une interaction antiferromagnétique). Nous nous intéressons à la situation où l'interaction est responsable de l'alignement de l'ensemble des spins dans une même direction, en dessous d'une certaine température, dite de Curie. L'objet du problème est d'étudier la susceptibilité magnétique dans cette phase ferromagnétique et de mettre en évidence l'existence de modes collectifs d'excitation, les magnons, correspondant à des ondes de densité de spin.

Puisque nous ne sommes pas capables de trouver le spectre d'états propres de l'hamiltonien en interaction, nous allons adopter la stratégie suivante pour le calcul de la fonction de réponse : une dérivation par rapport au temps de la fonction de corrélation conduira à une équation différentielle soluble, moyennant certaines approximations (cette approche est appelée "*equation of motion theory*" [68]; elle consiste à obtenir une hiérarchie d'équations couplées pour des corrélateurs. Négliger certaines corrélations d'ordre élevé rend le système tronqué soluble).

Afin d'éviter des ambiguïtés, ou simplement pour aider la discussion, les opérateurs seront "chapeautés".

1/ Justifier que

$$[\hat{S}_i(\vec{r}), \hat{S}_j(\vec{r}')] = i\epsilon_{ijk} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{S}_k(\vec{r}) \quad (\text{on choisit } \hbar = 1) \quad (334)$$

(avec **sommation implicite sur les indices répétés**) où ϵ_{ijk} est le tenseur de Levi-Civita¹⁰¹.

Suggestion : on peut considérer la densité de spin pour une particule : $\hat{S}(\vec{r}) = \hat{S} \delta(\vec{r} - \hat{r})$ où \hat{r} est l'opérateur position et \hat{S} l'opérateur de spin.

2/ **Équation du mouvement.**— On introduit l'opérateur en représentation de Heisenberg $\hat{A}(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{i\hat{H}_0 t} \hat{A} e^{-i\hat{H}_0 t}$. Montrer que

$$\frac{d}{dt} \hat{S}(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' v(\vec{r} - \vec{r}') \hat{S}(\vec{r}', t) \times \hat{S}(\vec{r}, t) - i v(0) \hat{S}(\vec{r}, t) \quad (335)$$

Vérifier l'hermiticité du résultat.

Indication : On rappelle que $(\vec{A} \times \vec{B})_i = \epsilon_{ijk} A_j B_k$ et $\epsilon_{ijk} \epsilon_{ijl} = 2\delta_{kl}$.

3/ **Susceptibilité magnétique.**— Le système est soumis à un champ magnétique extérieur $\vec{B}(\vec{r}, t)$, ce qui apporte la contribution à l'énergie :

$$\hat{H}_{\text{pert}}(t) = - \int d\vec{r} \hat{S}(\vec{r}) \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) \quad (336)$$

¹⁰⁰Il s'agit du sujet d'examen du 19 décembre 2007, complété par quelques questions.

¹⁰¹ ϵ_{ijk} est le tenseur antisymétrique par rapport à l'échange de couples d'indices : $\epsilon_{ijk} = -\epsilon_{jik}$, etc, avec $\epsilon_{123} = +1$.

La susceptibilité magnétique est définie selon

$$\langle S_i(\vec{r}, t) \rangle_{\mathcal{B}} \stackrel{\text{def}}{=} \langle S_i(\vec{r}) \rangle + \int dt' d\vec{r}' \chi_{ij}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \mathcal{B}_j(\vec{r}', t') + O(\mathcal{B}^2) \quad (337)$$

où $\langle \dots \rangle$ et $\langle \dots \rangle_{\mathcal{B}}$ sont respectivement les moyennes quantiques/statistiques à l'équilibre et en présence de la perturbation. Exprimer la susceptibilité comme une fonction de corrélation du système à l'équilibre.

4/ Utiliser l'équation du mouvement pour calculer $\frac{d}{dt} \chi_{ij}(\vec{r} - \vec{r}', t)$.

5/ On suppose que l'interaction est telle que le système est dans une phase **ferromagnétique** à suffisamment basse température. On note \vec{M} l'aimantation moyenne $\vec{M} \stackrel{\text{def}}{=} \langle \vec{S}(\vec{r}) \rangle$ et on introduit l'opérateur $\vec{m}(\vec{r})$ décrivant les fluctuations d'aimantation ($\|\vec{m}\| \ll \|\vec{M}\|$) :

$$\vec{S}(\vec{r}) = \vec{M} + \vec{m}(\vec{r}) \quad (338)$$

En négligeant les termes d'ordre $\|\vec{m}\|^3$ dans l'équation obtenue au 4, montrer qu'on obtient une équation différentielle pour la susceptibilité.

6/ **Susceptibilité dans l'espace de Fourier.**— On définit

$$\tilde{\chi}_{ij}(\vec{q}, \omega) = \int dt d\vec{r} \chi_{ij}(\vec{r}, t) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r} + i\omega t} \quad (339)$$

On suppose l'aimantation selon Oz : $\vec{M} = \vec{u}_z M_0$. On s'intéresse aux composantes $\chi_{xx} = \chi_{yy}$ et $\chi_{xy} = -\chi_{yx}$ (pour un système isotrope). Montrer que celles-ci obéissent au système d'équations :

$$i[\omega - v(0)] \tilde{\chi}_{xx}(\vec{q}, \omega) = M_0 [\tilde{v}(\vec{q}) - \tilde{v}(0)] \tilde{\chi}_{xy}(\vec{q}, \omega) \quad (340)$$

$$i[\omega - v(0)] \tilde{\chi}_{xy}(\vec{q}, \omega) = -M_0 [\tilde{v}(\vec{q}) - \tilde{v}(0)] \tilde{\chi}_{xx}(\vec{q}, \omega) + M_0 \quad (341)$$

où $\tilde{v}(\vec{q}) \stackrel{\text{def}}{=} \int d\vec{r} v(\vec{r}) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}}$

7/ **Magnons.**

a/ Résoudre le système. Montrer que les susceptibilités divergent sur une ligne $\omega = \omega_{\vec{q}}$. Donner l'expression de $\omega_{\vec{q}}$ (la relation de dispersion). Interpréter physiquement cette divergence.

b/ La divergence de $\tilde{\chi}_{ij}(\vec{q}, \omega)$ se produit-elle vraiment pour $\omega \in \mathbb{R}$? à quel principe ce problème est-il relié ?

c/ à quelle(s) condition(s) le développement de la transformée de Fourier du potentiel pour $\vec{q} \rightarrow 0$ est-il de la forme : $\tilde{v}(\vec{q}) \simeq \tilde{v}(0) - \frac{A}{2} \vec{q}^2$. Relier A à une propriété du potentiel. Dédire que la relation de dispersion des magnons est quadratique, $\omega_{\vec{q}} \underset{\vec{q} \rightarrow 0}{\simeq} \text{cste} + \frac{\vec{q}^2}{2m^*}$, et exprimer la masse effective m^* en terme du potentiel et de l'aimantation.

d/ *Ferromagnétique isotrope - théorème de Goldstone.*— À quoi correspondent les magnons de vecteur $\vec{q} \rightarrow 0$? Dédire la valeur de $v(0)$ dans un ferromagnétique isotrope.

Rq : ce résultat est lié au **théorème de Goldstone**. Dans un ferromagnétique isotrope, alors que l'hamiltonien est invariant par rotation, sous la température de Curie le système fixe son aimantation dans une certaine direction. L'état fondamental (la phase ferro) possède une symétrie, $SO(2)$, plus basse que celle de l'hamiltonien, $SO(3)$. On parle de *brisure spontanée* de symétrie.

Ce phénomène s'accompagne de l'apparition de *modes de Goldstone*, des modes collectifs non massifs (sans gap)¹⁰². L'origine de ce(s) mode(s) vient du fait que l'aimantation peut être tournée sans coût énergétique.

e/ Commenter la figure 51. L'expérience pour un alliage de cobalt avec 8% de fer trouve $\hbar\omega_q \simeq C + \frac{1}{2}JSa^2\vec{q}^2$ où $JS \simeq 14.7\text{meV}$ et $C \simeq 1.3\text{meV}$. En supposant un paramètre de maille $a \sim 1\text{\AA}$, donner la valeur de la masse effective en unité de masse de l'électron.

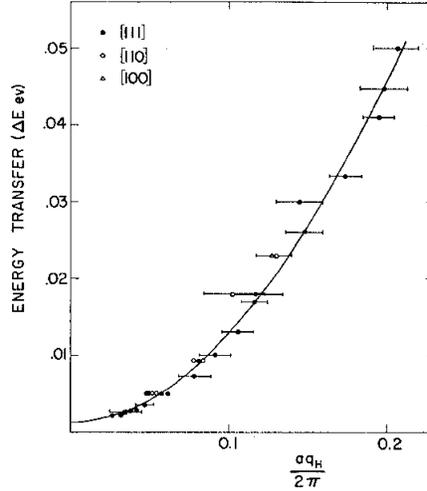


FIG. 2. The energy transfer ΔE as a function of the reduced vector of the spin waves. The error bars are about half of the full width at half maximum of the neutron groups. The solid line is the best fit to Eq. (3).

FIGURE 51 : *R. N. Sinclair & B. N. Brockhouse, Phys. Rev. 120(5), 1638 (1960). Expérience de diffusion de neutrons par un alliage de cobalt avec 8% de fer (fcc).*

8/ Loi de Bloch.— On admet que les fluctuations de l'aimantation $\delta M(T)$ sont proportionnelles au nombre de modes de magnons excités thermiquement. Donner la densité de modes $\rho_M(\omega)$ et déduire le comportement de δM avec T et M (on ne s'intéresse pas aux préfacteurs numériques)¹⁰³.

¹⁰² ne pas confondre la notion de mode *massif* avec la masse effective m^* introduite ci-dessus. Dans la terminologie standard, un mode massif correspond à des excitations avec un gap fini. L'origine de cette terminologie vient de la structure de la fonction de Green $\langle r | \frac{1}{-\Delta + m^2} | 0 \rangle$ associée à une relation de dispersion $k^2 + m^2$. La quantité m joue le rôle de gap dans le spectre de l'opérateur (ou de masse dans une théorie relativiste $\partial_t^2 \phi = (-\Delta + m^2)\phi$).

¹⁰³ Cette question offre une autre illustration du théorème de **Mermin-Wagner** : soit $\rho_M(\omega)$ la densité de modes magnons. La relation de dispersion quadratique montre que $\rho_M(\omega) \propto \omega^{d/2-1}$. Les fluctuations sont données par $\delta M(T) \sim \int_0^\infty d\omega \frac{\rho_M(\omega)}{e^{\beta\omega}-1} \sim T \int_0^T d\omega \frac{\rho_M(\omega)}{\omega}$. Nous voyons que l'intégrale ne converge que pour $d \geq 3$. En dimension $d \leq 2$ les fluctuations sont infinies, ce qui signale la destruction de l'ordre (la phase ferromagnétique) induit par la brisure de la symétrie continue (de rotation).

C Problème : Compressibilité des fermions chargés - plasmons

Nous analysons la compressibilité d'un liquide d'électrons dans un métal¹⁰⁴. Dans un premier temps nous étudions la compressibilité χ_0 du gaz de fermions sans interaction. Celle-ci sera prise en compte dans un second temps, à l'approximation RPA.

Le gaz de Fermi.— Nous nous plaçons dans le cadre du modèle des électrons libres (dans l'espace tridimensionnel) : $\hat{H}_0 = \frac{1}{2m} \sum_i \hat{p}_i^2 = \sum_{\vec{k}} \epsilon_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}}$ où $\hat{c}_{\vec{k}}^\dagger$ et $\hat{c}_{\vec{k}}$ sont les opérateurs création et annihilation de fermions dans les états individuels $\phi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ d'énergie $\epsilon_{\vec{k}} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ (on fera $\hbar = 1$) ; V désigne le volume occupé par les fermions. L'état fondamental du gaz de fermions est une mer de Fermi : $|\text{Fermi Sea}\rangle = |\text{all } \phi_{\vec{k}} \text{ with } \|\vec{k}\| < k_F \text{ occupied}\rangle$. En pratique l'énergie de Fermi $\epsilon_F = \frac{1}{2m} k_F^2$ est beaucoup plus grande que la température et nous pouvons considérer que le système est à température nulle (gaz dégénéré). Nous rappelons que la densité des états individuels par unité de volume, mesurée à l'énergie de Fermi est $\rho_0 \equiv \rho(\epsilon_F) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \delta(\epsilon_F - \epsilon_{\vec{k}}) = \frac{mk_F}{2\pi^2}$. La densité d'électrons à $T = 0$ est donc $n = \int_0^{\epsilon_F} d\epsilon \rho(\epsilon) = k_F^3 / (6\pi^2)$ (nous omettons la dégénérescence de spin).

Compressibilité dynamique.— La compressibilité caractérise la réponse de la densité à une perturbation scalaire

$$\hat{H}_{\text{pert}}(t) = + \int d\vec{r} \hat{n}(\vec{r}) U^{\text{pert}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \hat{n}_{-\vec{q}} U_{\vec{q}}^{\text{pert}}(t). \quad (342)$$

La composante de Fourier de la compressibilité dynamique est définie comme

$$\langle \hat{n}_{\vec{q}}(t) \rangle_{U^{\text{pert}}} = n V \delta_{\vec{q},0} + \int dt' \chi_{\vec{q}}(t-t') U_{\vec{q}}^{\text{pert}}(t') + O[(U^{\text{pert}})^2], \quad (343)$$

où $\langle \dots \rangle_{U^{\text{pert}}}$ désigne la moyenne quantique et statistique en présence de la perturbation.

1. Question de cours : compressibilité du gaz de fermions sans interaction.

a. Exprimer $\chi_{\vec{q}}(t)$ comme une fonction de corrélation du problème à l'équilibre.

b. Montrer que la transformée de Fourier $\chi_0(\vec{q}, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} dt \chi_{\vec{q}}(t) e^{i\omega t}$ est donnée par

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{f(\epsilon_{\vec{k}}) - f(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{\omega + \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + i0^+}, \quad (344)$$

où $f(\epsilon_{\vec{k}})$ est la distribution de Fermi-Dirac. Interpréter physiquement la position des pôles.

Indication :

• On rappelle l'expression de la composante de Fourier de la densité : $\hat{n}_{\vec{q}} = \sum_i e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}_i} = \sum_{\vec{k}} \hat{c}_{\vec{k}}^\dagger \hat{c}_{\vec{k}+\vec{q}}$ où \vec{r}_i est l'opérateur position de la particule i .

2/ Développement à $q \rightarrow 0$ et ω finie.— Afin d'étudier cette limite, nous faisons deux approximations dans l'éq. (344) :

(i) si $q \ll k_F$ nous pouvons négliger le terme en q^2 dans $\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} - \epsilon_{\vec{k}} \simeq \frac{1}{m} \vec{k} \cdot \vec{q}$.

(ii) Le gaz peut être considéré dégénéré, donc $-\frac{\partial f(\epsilon)}{\partial \epsilon} \simeq \delta(\epsilon - \epsilon_F)$.

a. Nous introduisons la vitesse de Fermi $v_F \stackrel{\text{def}}{=} k_F/m$. Pour $q \equiv \|\vec{q}\| \ll k_F$, montrer que

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) \simeq \frac{\rho_0}{2v_F q} \int_{-v_F q}^{+v_F q} d\Omega \frac{\Omega}{\omega - \Omega + i0^+}, \quad (345)$$

¹⁰⁴Sujet d'examen du 17 décembre 2008.

b. Dédurre que : $\chi_0(\vec{q} \rightarrow 0, \omega) \simeq \rho_0 [a_1(\frac{q}{\omega})^2 + a_2(\frac{q}{\omega})^4]$ et donner les expressions de a_1 et a_2 .

3/ Compressibilité des fermions en interaction à l'approximation RPA.— Nous considérons maintenant le liquide de fermions chargés. On peut montrer que la compressibilité prenant en compte l'effet de l'interaction entre électrons à l'approximation RPA est reliée à la compressibilité du gaz sans interaction par

$$\chi_{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 - \frac{\kappa^2}{q^2} \frac{1}{\rho_0} \chi_0(\vec{q}, \omega)}, \quad (346)$$

où $\kappa \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{4\pi e^2 \rho_0}$ est l'inverse de la longueur d'écrantage de Thomas-Fermi (la portée du potentiel de Coulomb écranté). $e = \frac{q_e^2}{4\pi\epsilon_0} = 1.44 \text{ eV}\cdot\text{nm}$ est la charge de l'électron en unité CGS.

a. Montrer que la compressibilité présente la structure $\chi_{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega) \propto \frac{q^2}{\omega^2 - [\Omega_p(q)]^2}$. Quelle est l'expression de $\Omega_p(q)$? Quelle interprétation physique pouvez-vous donner à cette divergence?

b. La divergence de $\chi_{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega)$ se produit-elle pour $\omega \in \mathbb{R}$? Comment corriger le résultat obtenu? À quel principe ce problème est-il lié?

c. Montrer que $\Omega_p(q \rightarrow 0) \simeq \omega_p + \frac{1}{2m_p^*} q^2$. Exprimer ω_p en fonction de v_F et κ , puis vérifier que $\omega_p \propto \frac{\kappa}{k_F} \epsilon_F$ et préciser la constante de proportionnalité. Montrer que $m_p^* \propto \frac{\kappa}{k_F} m$ et donner le préfacteur adimensionné.

d. Vérifier que pour q assez grand, $\chi_0(\vec{q}, \omega)$ acquiert une partie imaginaire et donner son expression. Quelle est la conséquence physique (pour les excitations du liquide d'électrons en *interaction*)?

e. AN : Dans l'aluminium, $k_F^{-1} = 0.57 \text{ \AA}$ et $\epsilon_F = 11.7 \text{ eV}$ (Ashcroft & Mermin). La densité d'états vaut $\rho_0 = 20 \text{ eV}^{-1}\text{nm}^{-3}$ (cette valeur tient compte de la dégénérescence de spin). Dédurre κ^{-1} puis $\hbar\omega_p$ (en eV).

Expérience : Dans une expérience réalisée en 1962, Marton *et al* ont envoyé un faisceau d'électrons de haute énergie (20 keV) sur une feuille d'Aluminium. L'intensité du pic de diffusion vers l'avant est représentée en fonction de l'énergie perdue par ces électrons lors de la traversée du métal (en unité de $\Delta E = 14.8 \text{ eV}$). Interpréter les différents pics.

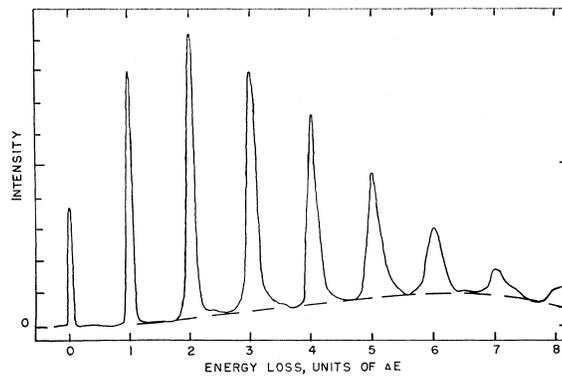


FIGURE 52 : Diffusion vers l'avant d'électrons de haute énergie (20 keV) sur une feuille d'Aluminium. Intensité du faisceau en fonction de l'énergie perdue par ces électrons ; $\Delta E = 14.8 \text{ eV}$. L. Marton, J. Arol Simpson, H. A. Fowler & N. Swanson, *Plural Scattering of 20-keV electrons in Aluminium*, Phys. Rev. **126**, p. 182 (1962).

D Problème : Obstacle en mouvement dans un superfluide

Nous étudions le problème du mouvement d'un obstacle dans un superfluide.¹⁰⁵ La phase condensée de Bose est décrite par l'équation (de champ moyen) de Gross-Pitaevskii pour la fonction d'onde du condensat¹⁰⁶ $\psi(x, t)$

$$i\frac{\partial}{\partial t}\psi(x, t) = -\frac{1}{2m}\frac{\partial^2}{\partial x^2}\psi(x, t) + [U(x, t) + \epsilon(|\psi(x, t)|^2)]\psi(x, t) \quad (347)$$

où $\epsilon(|\psi|^2)$ décrit l'interaction entre bosons. ($\hbar = 1$). Nous traitons le problème en dimension $d = 1$ pour simplifier¹⁰⁷. À l'équilibre $\psi(x, t) = \sqrt{n_0}e^{-i\mu t}$ où la densité n_0 est reliée au potentiel chimique par $\mu = \epsilon(n_0)$. Nous nous intéressons aux faibles excitations $\psi(x, t) = [\sqrt{n_0} + \varphi(x, t)]e^{-i\mu t}$ avec $|\varphi| \ll \sqrt{n_0}$. On a donc $n(x, t) = n_0 + \delta n(x, t) \simeq n_0 + 2\sqrt{n_0}\text{Re}[\varphi(x, t)]$.

Partie A : calcul de la compressibilité

La réponse de la densité est reliée à la perturbation ($U(x, t)$) via la compressibilité (en Fourier) $\delta\tilde{n}(q, \omega) = \tilde{\chi}(q, \omega)\tilde{U}(q, \omega)$. Dans cette partie nous montrons que celle-ci prend la forme

$$\tilde{\chi}(q, \omega) = \frac{n_0}{m} \frac{q^2}{\omega^2 - \omega_B^2(q)} \quad \text{où } \omega_B^2(q) = q^2 c^2 + \left(\frac{q^2}{2m}\right)^2 \quad (348)$$

est le spectre de Bogoliubov (avec $c \stackrel{\text{def}}{=} \sqrt{\frac{1}{m}n_0\epsilon'(n_0)}$).

1. Une petite perturbation $U(x, t)$ introduit une fluctuation $\varphi(x, t)$ autour de l'équilibre. Nous étudions la réponse $\varphi(x, t)$ à l'ordre le plus bas dans la perturbation. Vérifier que $\varphi(x, t)$ obéit à l'équation d'onde :

$$i\partial_t\varphi = -\frac{1}{2m}\partial_x^2\varphi + \lambda(\varphi + \varphi^*) + \sqrt{n_0}U \quad (349)$$

Donner l'expression du paramètre λ en terme de la vitesse du son c .

2. Montrer que seules les composantes de Fourier $\tilde{\varphi}(q, \omega)$ et $\tilde{\varphi}(-q, -\omega)^*$ sont couplées.
3. Résoudre ce système d'équations et déduire $\delta\tilde{n}(q, \omega) = \sqrt{n_0}[\tilde{\varphi}(q, \omega) + \tilde{\varphi}(-q, -\omega)^*]$, et donc (348) (notons que $U \in \mathbb{R} \Rightarrow \tilde{U}(-q, -\omega)^* = \tilde{U}(q, \omega)$; le champ φ étant complexe il n'y a pas de propriété équivalente).
4. Tracer le spectre de Bogoliubov. Discuter les limites de petit q et de grand q .

Partie B : analyse de la réponse du fluide

1. Discuter physiquement la structure de la fonction de réponse.
2. Comment modifier l'équation (348) pour satisfaire le principe de causalité?
3. On considère un obstacle en mouvement, induisant la perturbation $U(x, t) = f(x - Vt)$ avec $V > 0$, où $f(x)$ est une fonction positive, rapidement décroissante, localisée autour de $x = 0$. La transformée de Fourier correspondante est $\tilde{U}(q, \omega) = 2\pi\delta(\omega - qV)\tilde{f}(q)$ où $\tilde{f}(q)$ est la TF de $f(x)$. Montrer que les fluctuations de densité sont de la forme $\delta n(x, t) = \Phi(x - Vt)$ où $\Phi = K * f$. Exprimer¹⁰⁸ $K(x)$ comme une intégrale.

¹⁰⁵ La partie B était le premier exercice du sujet d'examen du 16 décembre 2009.

¹⁰⁶ Normalisé selon $\int dx |\psi(x, t)|^2 = N$, où N est le nombre de bosons.

¹⁰⁷ Rappelons toutefois que la condensation de Bose n'existe pas en $d = 1$. Considérer $d > 1$ ne changerait pas fondamentalement notre analyse.

¹⁰⁸ En simplifiant, faire attention à $(x + i0^+)^2 = x^2 + i0^+ \text{sign}(x)$.

4. **Cas $V < c$.**— Calculer explicitement $K(x)$. Donner une expression approchée du profil de densité $\delta n(x, t)$ en supposant que la fonction K est “étroite” comparativement au profil de $U(x, t)$. Dessiner l’allure de $n(x, t)$.
5. **Cas $V > c$.**— Calculer $K(x)$. Tracer l’allure de $n(x, t)$. Commenter.
6. Que laissent penser ces observations sur la dissipation dans les deux cas ?

Annexe :

- Convention pour les transformations de Fourier :

$$\tilde{f}(q, \omega) = \int dt dx e^{i\omega t - iqx} f(x, t) \quad \text{et} \quad f(x, t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{dq}{2\pi} \tilde{f}(q, \omega) e^{-i\omega t + iqx} \quad (350)$$

E Problème : Effet Hall

Nous étudions¹⁰⁹ la conductivité d'un gaz d'électrons se mouvant dans un plan¹¹⁰ xOy soumis à un champ magnétique perpendiculaire homogène (figure 53).

Rq : Les opérateurs sont repérés avec des $\hat{\cdot}$. Ces derniers peuvent être épargnés au correcteur.

A/ Hamiltonien de Landau.— La dynamique d'une particule de charge e (supposée sans spin pour simplifier) est décrite par l'Hamiltonien :

$$\hat{H}_L = \frac{1}{2}m\hat{v}^2 = \frac{1}{2m} \left[\hat{p} - e\vec{A}(\vec{r}) \right]^2 \quad (351)$$

où le potentiel vecteur décrit un champ magnétique **uniforme** : $\text{rot}\vec{A} = \partial_x A_y - \partial_y A_x = B$.

1. Donner la dimension¹¹¹ de $\omega_c \stackrel{\text{def}}{=} \frac{eB}{m}$.
A.N. : calculer $\hbar\omega_c$ (en eV) pour $B = 1$ T. Convertir cette énergie en Kelvin.
2. Montrer que $[\hat{v}_x, \hat{v}_y] = i\frac{\hbar\omega_c}{m}$.
3. On introduit $\hat{v}_a(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{i\hat{H}_L t/\hbar} \hat{v}_a e^{-i\hat{H}_L t/\hbar}$ où $a \in \{x, y\}$. Donner les équations du mouvement de Heisenberg $\frac{d}{dt}\hat{v}_x(t) = ?$ et $\frac{d}{dt}\hat{v}_y(t) = ?$

B/ Conductivité pour un électron.— Nous introduisons un champ électrique homogène, décrit par la perturbation $\hat{H}_{\text{pert}}(t) = -e\mathcal{E}(t)\hat{x}$. L'invariance par translation du problème nous permet de considérer la densité de courant *moyennée* spatialement $\hat{j}_y \stackrel{\text{def}}{=} \int \frac{d\vec{r}}{\text{Surf}} \hat{j}_y(\vec{r}) = \frac{e}{\text{Surf}} \hat{v}_y$. La conductivité relie le champ électrique extérieur à la densité de courant :

$$\langle \hat{j}_a(t) \rangle_{\mathcal{E}} = \int dt' \sum_b \sigma_{ab}(t-t') \mathcal{E}_b(t') + O(\mathcal{E}^2) \quad (352)$$

1. (QUESTION IMPORTANTE) Exprimer $\sigma_{xx}(t)$ et $\sigma_{yx}(t)$ sous la forme de deux corrélateurs du problème à l'équilibre.
2. On écrit $\sigma_{xx}(t) = \frac{e^2}{\hbar\text{Surf}} \theta(t) X(t)$ et $\sigma_{yx}(t) = \frac{e^2}{\hbar\text{Surf}} \theta(t) Y(t)$. Calculer $\dot{X}(t)$ et $\dot{Y}(t)$. Préciser la valeur de $X(0)$ et $Y(0)$.
3. On introduit $Z(t) \stackrel{\text{def}}{=} X(t) + iY(t)$. Montrer que $Z(t) = \frac{\hbar}{m} e^{-i\omega_c t}$. Dédire l'expression de $\sigma_{xx}(t)$ et $\sigma_{yx}(t)$. Expliquer physiquement la dépendance temporelle de ce résultat.

C/ Conductivité du gaz d'électrons.— Nous considérons maintenant un gaz de N électrons (les interactions entre électrons ne sont pas considérées).

1. Comment interprétez-vous que le résultat pour $\sigma_{ab}^{(1\text{élec.})}(t)$ soit indépendant de la moyenne statistique/quantique ? Dédire la conductivité du gaz de N électrons (on note $n = N/\text{Surf}$ la densité surfacique moyenne d'électrons).
2. Calculer $\Sigma(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\sigma}_{xx}(\omega) + i\tilde{\sigma}_{yx}(\omega)$. Commenter la structure analytique. Dédire la conductivité Hall du gaz $\sigma_H \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\sigma}_{xy}(\omega = 0) = -\tilde{\sigma}_{yx}(\omega = 0)$ (pour $B \neq 0$).

¹⁰⁹Second exercice du sujet d'examen du 16 décembre 2009.

¹¹⁰Il s'agit des électrons piégés à une interface de semiconducteurs GaAs/GaAl_xAs_{1-x}, par exemple.

¹¹¹Ne pas confondre "dimension" et "unité".

- On rappelle que le spectre de Landau de l'Hamiltonien (351) est $E_n = \hbar\omega_c(n+1/2)$, $n \in \mathbb{N}$ où chaque niveau de Landau est dégénéré $N_{LL} = \frac{eBS_{\text{surf}}}{h}$ fois, où $h = 2\pi\hbar$. Exprimer la conductivité Hall en fonction du facteur de remplissage $\nu \stackrel{\text{def}}{=} \frac{N}{N_{LL}}$.
- Relier la résistance Hall $R_H = V/I$ (V et I sont définis sur la figure 53 à la conductivité Hall. Donner la valeur numérique de h/e^2 en $k\Omega$. Commenter la courbe expérimentale de la figure 53.

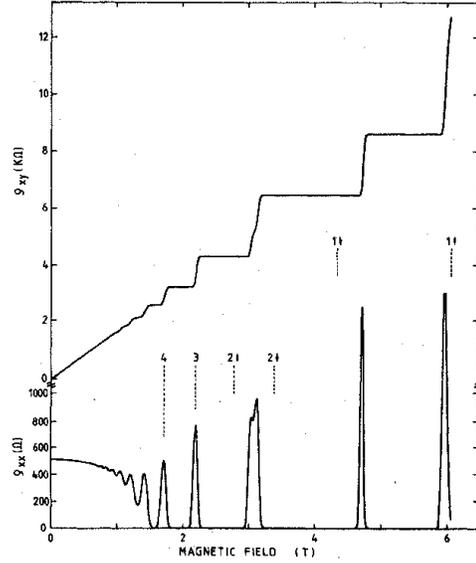
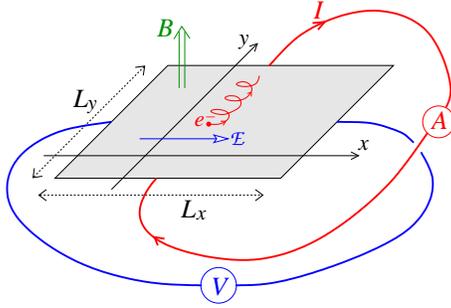


FIG. 14. Experimental curves for the Hall resistance $R_H = \rho_{xy}$ and the resistivity $\rho_{xx} \sim R_x$ of a heterostructure as a function of the magnetic field at a fixed carrier density corresponding to a gate voltage $V_g = 0$ V. The temperature is about 8 mK.

FIGURE 53 : À GAUCHE : Gaz d'électrons bidimensionnel soumis à un champ magnétique perpendiculaire homogène et à un champ électrique longitudinal. Klaus von Klitzing (1943-), prix Nobel 1985. À DROITE : Résistivité Hall et longitudinale d'un gaz d'électrons bidimensionnel.

D/ Épilogue.— Le calcul que nous venons de faire, qui a montré que $\rho_{yx} \propto B$, ne permet pas d'expliquer la quantification mise en évidence expérimentalement. Pour cela nous devons invoquer la présence de désordre (impuretés, défauts structurels) expliquant la *localisation* d'une partie des états quantiques, et donc leur non-participation au transport électronique. L'effet remarquable est que, même si seule une fraction des N_{LL} états d'un niveau de Landau participe au transport, la contribution *totale* des N_{LL} états à la conductivité Hall est insensible à la présence du désordre. Pour davantage d'informations, on pourra aller lire la conférence Nobel de K. von Klitzing : http://nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/1985/klitzing-lecture.html

Annexe :

- Quelques constantes fondamentales : $e \simeq 1.602 \cdot 10^{-19}$ C, $\hbar \simeq 1.054 \cdot 10^{-34}$ J.s et $k_B \simeq 1.380 \cdot 10^{-23}$ J.K⁻¹. Masse effective dans un 2DEG à une interface GaAs/GaAlAs : $m \simeq 0.067 m_e$ avec $m_e \simeq 0.9 \cdot 10^{-30}$ kg.

F Problème : Formule de Kubo dans un anneau

Introduction :¹¹² Nous étudions le transport électrique dans un anneau métallique mésoscopique, une question discutée dans un article de Nandini Trivedi & Dana A. Browne, “*Mesoscopic ring in a magnetic field : reactive and dissipative response*”, Phys. Rev. B **38**, 9581 (1988). Les auteures montrent que la topologie non triviale du système est à l’origine de termes supplémentaires dans la conductivité, par rapport au résultat obtenu pour un fil infini.

A. Équation de Schrödinger dans un anneau et courant permanent (~ 2)

On considère un électron dans un anneau de périmètre L , supposé **unidimensionnel** pour simplifier, traversé par un flux magnétique ϕ . L’hamiltonien est

$$\hat{H}_\phi = \frac{1}{2m_e}(\hat{p} - eA)^2 + V(\hat{x}), \quad (353)$$

où l’opérateur agit sur les fonctions périodiques définies sur $[0, L]$ [i.e. t.q. $\psi(0) = \psi(L)$ et $\psi'(0) = \psi'(L)$]. Le potentiel vecteur dans l’anneau peut être choisi **uniforme** $A = \phi/L$.

1/ Théorème de Feynman-Hellmann (cas particulier).– L’opérateur densité de courant électrique (moyenné spatialement) est $\hat{j} = \frac{e}{L}\hat{v}$, où $\hat{v} = \frac{\hat{p}-eA}{m_e}$ est l’opérateur vitesse. Soit $|\varphi_\alpha\rangle$ un **état propre** de \hat{H}_ϕ , d’énergie $\epsilon_\alpha(\phi)$. Montrer que le courant permanent moyen est donné par

$$j_\alpha(\phi) \stackrel{\text{def}}{=} \langle \varphi_\alpha | \hat{j} | \varphi_\alpha \rangle = -\frac{\partial \epsilon_\alpha(\phi)}{\partial \phi} \quad (354)$$

2/ Pouvez-vous justifier (brièvement) que le problème est périodique en fonction du flux, i.e. que la physique est inchangée si $\phi \rightarrow \phi + \phi_0$. **Appl. Num. :** Donner la valeur du quantum de flux $\phi_0 = h/e$ en Gauss. μm^2 (1 T=10 000 Gauss). Quelle variation du champ magnétique δB correspondrait à une variation du flux $\delta\phi = \phi_0$ pour un anneau de périmètre $L = 5 \mu\text{m}$?

L’existence du courant permanent est un effet **cohérent** ayant pour origine la phase Aharonov-Bohm de la fonction d’onde. Dans la pratique la cohérence est limitée par les interactions avec l’environnement. On s’attend alors à une suppression (exponentielle) de $j_{\text{perm}} = \sum_\alpha f_\alpha j_\alpha$ si L excède la *longueur de cohérence de phase* L_φ (dans un cas typique $L_\varphi \sim 1 \mu\text{m}$ à $T = 1 \text{ K}$). C’est pourquoi l’anneau doit être *mésoscopique*.

B. Conductivité (~ 4)

Nous supposons que l’anneau est soumis à un champ électrique uniforme $\mathcal{E}(t)$ (en plus du flux ϕ). Nous choisissons la jauge telle que les potentiels scalaire et vecteur soient respectivement $\phi_{\text{ext}} = 0$ et $A_{\text{ext}}(t) = -\int^t dt' \mathcal{E}(t')$. L’hamiltonien de perturbation est donc de la forme

$$\hat{H}_{\text{pert}}(t) = -e\hat{v} A_{\text{ext}}(t) \quad \text{avec} \quad \hat{v} = \frac{1}{m_e}[\hat{p} - eA] \quad (\text{et } A = \phi/L). \quad (355)$$

L’opérateur de densité de courant contient maintenant deux contributions : $\hat{\mathcal{J}} = \frac{e}{L}[\hat{v} - \frac{e}{m_e}A_{\text{ext}}(t)] = \hat{j} - \frac{e^2}{m_e L}A_{\text{ext}}(t)$.

1/ Réponse de \hat{v} (Question de cours).– La réponse de l’opérateur vitesse est donnée par

$$\langle \hat{v}(t) \rangle_{A_{\text{ext}}} = \langle \hat{v} \rangle + e \int dt' K(t-t') A_{\text{ext}}(t') + O(A_{\text{ext}}^2). \quad (356)$$

¹¹²Sujet d’examen du 5 janvier 2011.

a/ Donner l'expression de $K(t)$.

b/ Montrer que la réponse fréquentielle d'un gaz d'électrons en contact avec un thermostat/réservoir est

$$\tilde{K}(\omega) = - \sum_{\alpha, \beta} (f_\alpha - f_\beta) \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\hbar\omega + \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta + i0^+} \quad \text{où} \quad v_{\alpha\beta} \stackrel{\text{def}}{=} \langle \varphi_\alpha | \hat{v} | \varphi_\beta \rangle. \quad (357)$$

$\tilde{K}(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \int dt e^{i\omega t} K(t)$ et $f_\alpha \equiv f(\epsilon_\alpha)$ est la distribution de Fermi/Dirac.

Indication (rappel) : Soit \hat{A} et \hat{B} deux opérateurs à N corps, sommes d'opérateurs à un corps $\hat{A} = \sum_i \hat{a}^{(i)}$ et $\hat{B} = \sum_i \hat{b}^{(i)}$. On rappelle qu'à l'équilibre thermodynamique, la moyenne du commutateur peut s'exprimer à l'aide du spectre des états individuels $\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = \text{tr}\{f(\hat{h})[\hat{a}, \hat{b}]\} = \sum_{\alpha, \beta} (f_\alpha - f_\beta) (\hat{a})_{\alpha\beta} (\hat{b})_{\beta\alpha}$ où f_α est la distribution de Bose/Einstein ou de Fermi/Dirac.

2/ Conductivité.— La conductivité caractérise la réponse de la densité de courant au champ électrique

$$\langle \hat{\mathcal{J}}(t) \rangle_{A_{\text{ext}}} = \langle \hat{\mathcal{J}} \rangle + \int dt' \sigma(t-t') \mathcal{E}(t') + O(\mathcal{E}^2). \quad (358)$$

Montrer que

$$\tilde{\sigma}(\omega) = \frac{i e^2}{\omega L} \left[\frac{1}{m_e} \sum_\alpha f_\alpha - \tilde{K}(\omega) \right]. \quad (359)$$

C. Règle de somme- f dans un anneau (~ 4)

On peut montrer (cela n'est pas demandé) que ¹¹³ $\sum_\beta \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta} + \frac{1}{2m_e} = \frac{L^2}{2e^2} \frac{\partial^2 \epsilon_\alpha}{\partial \phi^2}$.

1/ Dédurre la règle de somme- f dans l'anneau

$$\frac{1}{m_e} \sum_\alpha f_\alpha + \sum_{\alpha, \beta} (f_\alpha - f_\beta) \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta} = - \frac{L^2}{e^2} \sum_\alpha f_\alpha \frac{\partial j_\alpha}{\partial \phi}, \quad (360)$$

où $j_\alpha(\phi)$ est le courant permanent associé à l'état individuel (dans un fil infini $j_\alpha \rightarrow 0$).

2/ Montrer que la conductivité peut se mettre finalement sous la forme

$$\tilde{\sigma}(\omega) = \frac{e^2}{L} \frac{\tilde{K}(\omega) - \tilde{K}(0)}{i\omega} + \frac{L}{i\omega} \frac{\partial j_{\text{perm}}}{\partial \phi} + \frac{L}{i\omega} \sum_\alpha f'_\alpha j_\alpha^2 \quad \text{où} \quad j_{\text{perm}} \stackrel{\text{def}}{=} \sum_\alpha f_\alpha j_\alpha. \quad (361)$$

Cette expression respecte-t-elle le principe de causalité ?

3/ Quel terme de la conductivité caractérise la dissipation ? Que devient le troisième terme à $T = 0$ K ? Donner une interprétation physique du deuxième terme.

Indication : Si on applique un flux variant très lentement au cours du temps, $\phi \rightarrow \phi + \delta\phi_\omega e^{-i\omega t}$ avec $\omega \rightarrow 0$, on pourrait utiliser l'approximation adiabatique.

¹¹³ Pour cela on considère $H_{\phi+\delta\phi}$ l'hamiltonien obtenu pour un flux $\phi + \delta\phi$. On écrit $H_{\phi+\delta\phi} = H_\phi + W$ puis on explicite le développement perturbatif des énergies $\epsilon_\alpha(\phi + \delta\phi) = \epsilon_\alpha(\phi) + \delta\phi \partial_\phi \epsilon_\alpha(\phi) + \frac{1}{2} \delta\phi^2 \partial_\phi^2 \epsilon_\alpha(\phi) + \dots$

G Problème : Ferromagnétisme itinérant & continuum de Stoner

Introduction :¹¹⁴ On étudie un modèle de ferromagnétisme itinérant (magnétisme porté par les électrons de conduction d'un métal). Si elles sont assez fortes, les interactions électroniques induisent une instabilité ferromagnétique et sont responsables de la polarisation en spin du gaz d'électrons, i.e. d'une aimantation spontanée du métal. Nous supposons que cette condition est satisfaite et décrivons le métal dans le cadre d'un modèle d'électrons libres et *indépendants*, où tout l'effet des interactions est inclu dans le champ d'échange B_{ech} lié à l'aimantation spontanée, supposée dans la direction Oz . Les états propres à un corps sont donc

$$|\vec{k}, \pm\rangle = \underbrace{|\vec{k}\rangle}_{\text{onde plane}} \otimes \underbrace{|\pm\rangle}_{\text{etat propre de } S_z} \quad \text{d'énergie} \quad \epsilon_{\vec{k}, \pm} = \frac{\vec{k}^2}{2m_e} \pm \underbrace{\frac{|q_e|}{2m_e} B_{\text{ech}}}_{\stackrel{\text{def}}{=} \Delta_{\text{ech}}/2} \quad (362)$$

($\hbar = 1$). À $T = 0$, les électrons de spin $\uparrow (+)$ et $\downarrow (-)$ forment chacun deux mers de Fermi indépendantes (figure 54), avec $k_{F\uparrow} < k_{F\downarrow}$ si $B_{\text{ech}} > 0$.

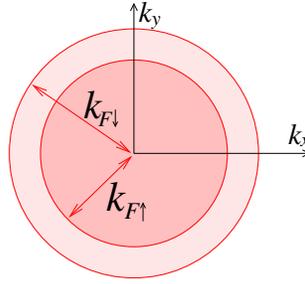


FIGURE 54 : Coupe dans le plan $k_z = 0$ des deux mers de Fermi : $\epsilon_F = \frac{k_{F\uparrow}^2}{2m_e} + \frac{\Delta_{\text{ech}}}{2} = \frac{k_{F\downarrow}^2}{2m_e} - \frac{\Delta_{\text{ech}}}{2}$.

Nous étudions la dynamique des composantes de l'aimantation du gaz dans le plan xOy perpendiculaire à la direction de l'aimantation spontanée. Considérons **un** électron dont nous notons les opérateurs position et spin \hat{r} et \hat{S} . L'opérateur densité de spin (la densité d'aimantation en unités appropriées) correspondant est

$$\hat{m}(\vec{r}) = \hat{S} \delta(\vec{r} - \hat{r}), \quad \text{c'est-à-dire} \quad \hat{m}_{\vec{q}} = \hat{S} e^{-i\vec{q}\cdot\hat{r}} \quad (363)$$

dans l'espace de Fourier. Si l'on souhaite étudier m^x et m^y , il est commode d'introduire les composantes $m^\pm \stackrel{\text{def}}{=} m^x \pm im^y$. Les opérateurs correspondants (à un corps) sont

$$\hat{m}_{\vec{q}}^+ = |+\rangle\langle -| e^{-i\vec{q}\cdot\hat{r}} \quad \text{et} \quad \hat{m}_{\vec{q}}^- = |-\rangle\langle +| e^{-i\vec{q}\cdot\hat{r}} \quad (364)$$

(on a utilisé $S_\pm = S_x \pm iS_y = |\pm\rangle\langle \mp|$).

1/ Que valent les éléments de matrice $\langle \vec{k}, \sigma | \hat{m}_{\vec{q}}^- | \vec{k}', \sigma' \rangle$ et $\langle \vec{k}, \sigma | \hat{m}_{\vec{q}}^+ | \vec{k}', \sigma' \rangle$?

2/ On introduit un faible champ magnétique extérieur $\vec{B}(\vec{r}, t)$ dans le plan xOy perpendiculaire à l'aimantation. L'hamiltonien de perturbation est donc

$$\hat{H}_{\text{pert}}(t) = - \int d\vec{r} \vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \hat{m}(\vec{r}) = - \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{\vec{q}} \left(B_{\vec{q}}^+(t) \hat{m}_{-\vec{q}}^+ + B_{\vec{q}}^-(t) \hat{m}_{-\vec{q}}^- \right) \quad (365)$$

¹¹⁴Sujet d'examen du 4 janvier 2012.

où $B^\pm \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(B^x \mp iB^y)$. On introduit la fonction de réponse χ^{-+} caractérisant la réponse linéaire à une perturbation du type ¹¹⁵ $B^+ = \frac{1}{2}(B^x - iB^y)$:

$$\langle \hat{m}_{\vec{q}}^-(t) \rangle_B = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi_{\vec{q}}^{-+}(t-t') B_{\vec{q}}^+(t') + \mathcal{O}(B^2). \quad (366)$$

Exprimer $\chi_{\vec{q}}^{-+}(t)$ en termes des opérateurs $\hat{m}_{\vec{q}}^\pm$.

3/ Susceptibilité magnétique dynamique.– On introduit la transformée de Fourier temporelle de la fonction de réponse

$$\chi_{-+}(\vec{q}, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \chi_{\vec{q}}^{-+}(t). \quad (367)$$

a) Montrer que (cf. annexe)

$$\chi_{-+}(\vec{q}, \omega) = -\frac{1}{\text{Vol}} \sum_{\vec{k}} \frac{f(\epsilon_{\vec{k},\downarrow}) - f(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow})}{\omega + \epsilon_{\vec{k},\downarrow} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow} + i0^+} \quad (368)$$

où $f(\epsilon)$ est la fonction de Fermi. Justifier que $\chi_{--}(\vec{q}, \omega) = 0$

b) Quel rôle joue le $i0^+$?

c) Donner l'expression de $\text{Im} [\chi_{-+}(\vec{q}, \omega)]$. Que représente physiquement cette quantité ?

d) **Continuum de Stoner.**– Montrer que, pour chaque valeur de \vec{q} , il existe un continuum de valeurs de ω telles que $\text{Im} [\chi_{-+}(\vec{q}, \omega)] \neq 0$ (on suppose le gaz à température nulle). Trouver un encadrement des $\omega_{\vec{q},\vec{k}} \stackrel{\text{def}}{=} \epsilon_{\vec{k}+\vec{q},\uparrow} - \epsilon_{\vec{k},\downarrow}$ correspondantes pour \vec{q} fixé. Quelle interprétation physique ? Discuter et interpréter la limite $\vec{q} \rightarrow 0$.

e) Représenter dans un diagramme ($|\vec{q}|, \omega$) la région où $\text{Im} [\chi_{-+}(\vec{q}, \omega)]$ est non nulle (on supposera que $\Delta_{\text{ech}} \ll \epsilon_F \simeq k_{F\uparrow} v_{F\uparrow} \simeq k_{F\downarrow} v_{F\downarrow}$, où $v_F = k_F/m_e$ est la vitesse de Fermi).

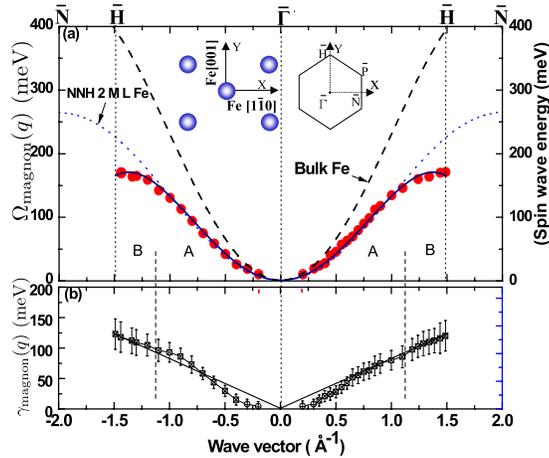


FIGURE 55 : Deux couches atomiques de Fer dans une phase ferromagnétique : en haut la relation de dispersion des magnons $\Omega_{\text{magnon}}(q)$. En bas la largeur de la résonance $\gamma_{\text{magnon}}(q)$. W. X. Tang et al, « Large wave vector spin waves and dispersion in two monolayer Fe on W (110) », Phys. Rev. Lett. **99**, 087202 (2007).

¹¹⁵ Pour un système isotrope avec $\chi^{xx} = \chi^{yy}$ et $\chi^{xy} = -\chi^{yx}$ on aurait $\chi^{-+} = \chi^{xx} + i\chi^{xy}$.

4/ Magnons et continuum de Stoner.— En TD nous avons montré que la phase ferromagnétique est caractérisée par l'existence de *modes collectifs* appelés *magnons*, des ondes d'aimantation dans le plan xOy (notons qu'ils ne sont pas prédits au niveau des calculs précédents : il faudrait pour cela tenir compte de l'effet des interactions dans l'analyse de la susceptibilité).

a) Quelle est la différence de nature avec les excitations rencontrées au **3** ? Représenter le spectre des magnons sur le même diagramme ($||\vec{q}||, \omega$) que le continuum de Stoner (on rappelle que $\Omega_{\text{magnon}}(\vec{q}) \simeq \frac{1}{2m_*} \vec{q}^2$ aux petits vecteurs d'onde).

b) Des mesures récentes ont été faites sur un film ultramince constitué de deux couches d'atomes de Fer déposées sur un substrat de tungstène. Le film est dans une phase ferromagnétique. La technique SPEELS (« spin polarized electron energy loss spectroscopy ») a permis d'obtenir le spectre des magnons (ondes de spin, « spin waves »), montré sur la partie supérieure de la figure (on voit que la relation est bien quadratique pour $\vec{q} \rightarrow 0$). La partie inférieure montre la dépendance de la largeur du pic des magnons $\gamma_{\text{magnon}}(q)$ (inverse de la durée de vie des magnons) en fonction du vecteur d'onde. Proposer une explication possible justifiant *qualitativement* le comportement observé de $\gamma_{\text{magnon}}(q)$.

☞ Annexe :

- Convention pour les transformations de Fourier :

$$f_q = \int_{\text{Vol}} dr e^{-iqr} f(r) \quad \text{et} \quad f(r) = \frac{1}{\text{Vol}} \sum_q f_q e^{iqr} \xrightarrow{\text{Vol} \rightarrow \infty} \int \frac{dq}{(2\pi)^d} f_q e^{iqr} \quad (369)$$

- On rappelle que la moyenne d'un commutateur d'opérateurs à N corps somme d'opérateurs à un corps, du type $\hat{A} = \sum_i \hat{a}^{(i)}$, est

$$\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = \sum_{\alpha, \beta} (f_\alpha - f_\beta) a_{\alpha\beta} b_{\beta\alpha}, \quad (370)$$

où la somme porte sur les états individuels stationnaires. $a_{\alpha\beta} = \langle \varphi_\alpha | \hat{a} | \varphi_\beta \rangle$ est un élément de matrice de l'opérateur à un corps et $f_\alpha = f(\epsilon_\alpha)$ est l'occupation moyenne de l'état individuel.

☞ Pour en savoir plus :

- R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer (2006), third edition.
- J. F. Cooke, J. W. Lynn and H. L. Davis, Calculations of the dynamic susceptibility of nickel and iron, Phys. Rev. B **21**, 4118–4131 (1980).

H Problème : Peierls instability in one-dimensional metals

H.1 Subject of the exam

Introduction :¹¹⁶ Some metallic compounds are organised as weakly coupled one-dimensional (1D) chains. It is possible to show that the 1D metallic phase is unstable below a critical temperature T_{Peierls} under a periodic distortion of the lattice with wavevector $q = 2k_F$, where k_F is the Fermi wavevector of the 1D metal : despite the cost in elastic energy, it is more favorable for the system to open a gap Δ at the Fermi level, what put the system in an *insulating* phase. At the same time the lattice distortion induces a modulation of the electronic density called a *charge density wave*. It is the aim of the problem to study this metal-insulator transition from above ($T \geq T_{\text{Peierls}}$) by analysing the response of the electronic gas.

A. Compressibility of the 1D electronic gas.— We provide a **continuous description** of the electronic gas (we forget the lattice of atoms) : **electrons are free** and occupy usual 1D plane waves $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}}e^{ikx}$ of energy $\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$, with $k \in \mathbb{R}$ and where L is the length of the line (hence the wavevector is quantified). We set $\hbar = 1$. We will forget the spin and will treat electrons as **spinless fermions**.

1/ We consider the density operator for a *single electron* $\hat{n}(x)$ and its Fourier component $\hat{n}_q = e^{-iq\hat{x}}$, where \hat{x} is the position operator for one electron. Give the matrix element $\langle \psi_k | \hat{n}_q | \psi_{k'} \rangle$.

2/ **Compressibility of the electron gas.**— Suppose that a perturbation is introduced under the form of a scalar external potential $V(x, t) = \frac{1}{L} \sum_q V_q(t) e^{iqx}$. The perturbation reads

$$\hat{H}_{\text{pert}}(t) = \int dx V(x, t) \hat{n}(x) = \frac{1}{L} \sum_q V_q(t) \hat{n}_{-q}, \quad (371)$$

where $\hat{n}(x)$ is now the density of the electron gas. The compressibility characterizes its response :

$$\langle \hat{n}(x, t) \rangle_V = \langle \hat{n}(x) \rangle + \int dt' dx' \chi(x - x', t - t') V(x', t') + \mathcal{O}(V^2) \quad (372)$$

i.e. $\langle \hat{n}_q(t) \rangle_V = n L \delta_{q,0} + \int dt' \tilde{\chi}_q(t - t') V_q(t') + \mathcal{O}(V^2)$, where $n = \langle \hat{n}(x) \rangle$.

a) Express $\tilde{\chi}_q(t)$ as an equilibrium correlation function.

b) Express its Fourier transform $\tilde{\chi}(q, \omega) = \int dt \tilde{\chi}_q(t) e^{i\omega t}$ as a sum over contributions of plane waves. Analyse its analytical structure. Interpret the position of the poles of the integrand.

3/ Static compressibility.— In the rest of the problem we will consider the static response $\chi_T(q) \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\chi}(q, 0)$ at temperature T .

a) We denote $f_k \equiv f(\epsilon_k)$ the Fermi-Dirac distribution. Show that

$$\chi_T(q) = -\frac{1}{L} \sum_k \frac{f_k - f_{-k-q}}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k} = -\frac{2}{L} \sum_k \mathcal{P} \frac{f_k}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k} \quad (373)$$

b) At zero temperature $T = 0$, we can use that $\frac{1}{L} \sum_k f_k \rightarrow \int_{-k_F}^{k_F} \frac{dk}{2\pi}$, where $\epsilon_F = \frac{1}{2m} k_F^2$ is the Fermi energy. Compute explicitly $\chi_0(q)$.

c) Show that $\lim_{q \rightarrow 0} \chi_0(q)$ is related to the density of states at Fermi level $\rho_0 = \frac{m}{\pi k_F}$. Analyse $\chi_0(q)$ for $q \rightarrow 2k_F$ and $q \rightarrow \infty$. Plot carefully $\chi(q)/\rho_0$ as a function of $q/(2k_F)$.

¹¹⁶Sujet d'examen du 9 janvier 2013.

4/ **Static response at $q = 2k_F$ for finite T .**— We assume that the chemical potential is independent on temperature, $\mu = \epsilon_F \forall T$. The divergence of $\chi_0(2k_F)$ originates from the neighbourhood of $k \sim -k_F$ in the sum (373). When $q \sim 2k_F$, it is therefore justified to linearize the spectrum as $\epsilon_k - \epsilon_F \simeq -v_F(k + k_F)$ and $\epsilon_{k+q} - \epsilon_F \simeq v_F(k + q - k_F)$, where $v_F = k_F/m$ is the Fermi velocity; hence we may simplify the sum in Eq. (373) as

$$\frac{1}{L} \sum_k \mathcal{P}\mathcal{P} \frac{f_k}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k} \xrightarrow{q \sim 2k_F} \int_{-k_F - k_c}^{-k_F + k_c} \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \epsilon_F)} + 1} \frac{1}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k}, \quad (374)$$

where k_c is a cutoff (a scale over which the linearization of the spectrum is justified).

a) Compute $\chi_T(2k_F)$ for small temperatures $k_B T \ll \epsilon_c \stackrel{\text{def}}{=} v_F k_c$ and deduce that the divergence of $\chi_0(2k_F)$ is regularized by thermal fluctuations (use integral given in the appendix).

b) Assuming that $\chi_T(q) \simeq \chi_0(q)$ far from $2k_F$ (when $|\frac{q}{2k_F} - 1| \gtrsim \frac{k_B T}{\epsilon_c}$), give a sketch of $\chi_T(q)$.

B. Coupling between electrons and lattice distortions.— If $\delta n(x) = \langle \hat{n}(x) \rangle_V - n$ denotes the variation of density, the change in energy of the electron gas due to the introduction of the potential $V(x)$ can be expressed as

$$\delta E_{\text{elec}} = \frac{1}{L} \sum_q V_{-q} \delta n_q = \frac{1}{L} \sum_q \chi_T(q) |V_q|^2 \quad (375)$$

1/ Discuss the sign of δE_{elec} .

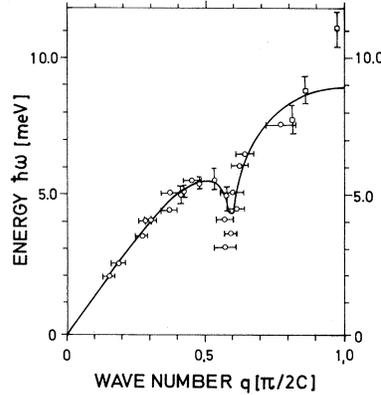


FIGURE 56 : *Kohn anomaly in the phonon spectrum of the quasi-1D conductor $\text{K}_2\text{Pt}(\text{CN})_4\text{Br}_{0.3} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ at $T = 300\text{ K}$. From : B. Renker et al, *Phys. Rev. Lett.* **30**, 1144 (1973).*

The potential $V(x)$ is caused by a lattice distortion characterised by some elastic energy E_{vib} . We consider a simple model of cristal : $N = L/a$ identical atoms of mass M with lattice spacing a . Elastic energy can be expressed in terms of the displacement of the n -th atom $\xi_n = \frac{1}{N} \sum_q \tilde{\xi}_q e^{iqna}$

$$E_{\text{vib}} = \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} M \omega_0^2 (\xi_{n+1} - \xi_n)^2 = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{2} M \omega_q^2 |\tilde{\xi}_q|^2 \quad (376)$$

where $\omega_q = 2\omega_0 |\sin(qa/2)|$ is the phonon dispersion relation. Displacement of atoms is responsible for the potential « seen » by the electrons, therefore $\tilde{\xi}_q$ and V_q are related. We assume :

$$V_q = \sqrt{\lambda a \frac{M}{2}} \omega_q \tilde{\xi}_q, \quad (377)$$

where λ is a constant characterizing the electron-phonon coupling.

2/ Writing the total energy characterising the lattice distortion as $\delta E_{\text{elec}} + E_{\text{vib}} = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{2} M \Omega_q^2 |\tilde{\xi}_q|^2$, deduce the renormalised phonon dispersion relation Ω_q as a function of ω_q , λ and $\chi_T(q)$. Assuming weak coupling, $\lambda \rho_0 \ll 1$, give a sketch of Ω_q as a function of q for different temperatures. Discuss the experimental data (Fig. 56).

3/ Show that our approach can only be valid above a certain critical temperature, denoted T_{Peierls} . Express this temperature in terms of ϵ_c , λ and ρ_0 . More difficult : interpret physically what occurs for $T = T_{\text{Peierls}}$.

Appendix :

- Convention for Fourier transform in dimension d :

$$f_q = \int_{\text{Vol}} dr e^{-iqr} f(r) \quad \& \quad f(r) = \frac{1}{\text{Vol}} \sum_q f_q e^{iqr} \xrightarrow{\text{Vol} \rightarrow \infty} \int \frac{dq}{(2\pi)^d} f_q e^{iqr} \quad (378)$$

- Consider two operators \hat{A} and \hat{B} sums of one-particle operators, as $\hat{A} = \sum_i \hat{a}^{(i)}$. If $\langle \dots \rangle$ is the grand canonical averaging, we recall the useful relation

$$\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \langle \varphi_{\alpha} | [\hat{a}, \hat{b}] | \varphi_{\alpha} \rangle = \sum_{\alpha, \beta} (f_{\alpha} - f_{\beta}) a_{\alpha\beta} b_{\beta\alpha} \quad \text{where } f_{\alpha} = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_{\alpha} - \mu)} \pm 1} \quad (379)$$

and the summations run over individual (one-particle) stationary states. $a_{\alpha\beta} = \langle \varphi_{\alpha} | \hat{a} | \varphi_{\beta} \rangle$ is a matrix element of the one-body operator.

- We give the integral

$$\int_0^x \frac{dy}{y} \tanh y \simeq \ln\left(\frac{4}{\pi} e^{-C} x\right) \quad \text{for } x \gg 1 \quad (380)$$

where $C = -0.577215\dots$ is the Euler-Mascheroni constant.

Peierls instability in 1D conductors

We analyse two oversimplified models of 1D metal and show that the metallic phase is unstable under lattice distortion with wavevector $2k_F$.

References are : [103, 53, 25, 83]. See also [48] for a recent overview. The lecture notes of Gilles Montambaux [99] were a source of inspiration of the present text.

H.2 Electron gas on a lattice of atoms

We consider a tight-binding Hamiltonian. We treat electrons as spinless fermions to avoid spin degeneracy factor. Anticipating that the lattice distortion will open a gap, we consider successively two phases and will compare the energy of the electron gas in the two situations.

H.2.1 Metallic phase

We consider a regular chain of atoms with lattice spacing a . Schrödinger equation for a given electron is

$$-t(\psi_{n+1} + \psi_{n-1}) = \epsilon \psi_n. \quad (381)$$

Spectrum is given by plane waves, $\psi_n^{(k)} = \frac{1}{\sqrt{N}} e^{ikna}$, with dispersion relation

$$\epsilon_k^{(\text{metal})} = -2t \cos ka \quad \text{with } k \in \left] -\frac{\pi}{a}, +\frac{\pi}{a} \right] \quad (382)$$

Periodic boundary conditions imply quantification of the wavevector as $k = \frac{2\pi m}{N}$ with $m \in \{-\frac{N}{2} + 1, \dots, +\frac{N}{2}\}$. In order to mimic spin degeneracy we consider the case where each atom releases half electron, the system is in a *metallic phase* with half-filling

$$\boxed{k_F = \frac{\pi}{2a}} \quad (383)$$

Group velocity is $v_k = \frac{\partial}{\partial k} \epsilon_k^{(\text{metal})} = 2ta \sin ka$, therefore Fermi velocity is $v_F = 2ta$. Near Fermi energy $\epsilon_F = 0$, the spectrum may be linearised as

$$\epsilon_k^{(\text{metal})} - \epsilon_F \underset{|k| \sim k_F}{\simeq} v_F (|k| - k_F) \quad (384)$$

H.2.2 Insulating phase

We assume that a periodic distortion for wavevector $q = 2k_F$ is introduced (this will be the aim of the next section to understand its origin). The nearest-neighbour coupling alternate as $t \pm \delta t$. The lattice cell has now size $2a$, with two types of atoms, say A and B (more precisely, the same atom with two different environments). Schrödinger equation now reads

$$-(t - \delta t) \psi_{B,n-1} - (t + \delta t) \psi_{B,n} = \epsilon \psi_{A,n} \quad (385)$$

$$-(t + \delta t) \psi_{A,n} - (t - \delta t) \psi_{A,n+1} = \epsilon \psi_{B,n} \quad (386)$$

Using again Bloch theorem we find the two band spectrum

$$\epsilon_{k,\pm}^{(\text{insul})} = \pm 2 |t \cos ka - i\delta t \sin ka| \quad \text{with } k \in \left] -\frac{\pi}{2a}, +\frac{\pi}{2a} \right] \quad (387)$$

separated by the gap

$$\boxed{\Delta = 2|\delta t|} \quad (388)$$

Because the Brillouin zone is divided by two, compared to the metal, the lower band is now filled and the upper band empty. The system is therefore in an *insulating phase*. It is also convenient to approximate the spectrum near its boundary

$$\epsilon_{k,\pm}^{(\text{insul})} \underset{|k| \sim k_F}{\simeq} \pm \sqrt{v_F^2 (|k| - k_F)^2 + \Delta^2}, \quad (389)$$

where $k_F = \pi/2a$ is the Fermi wavevector of the metallic phase and the edge of the Brillouin zone of the insulating phase.

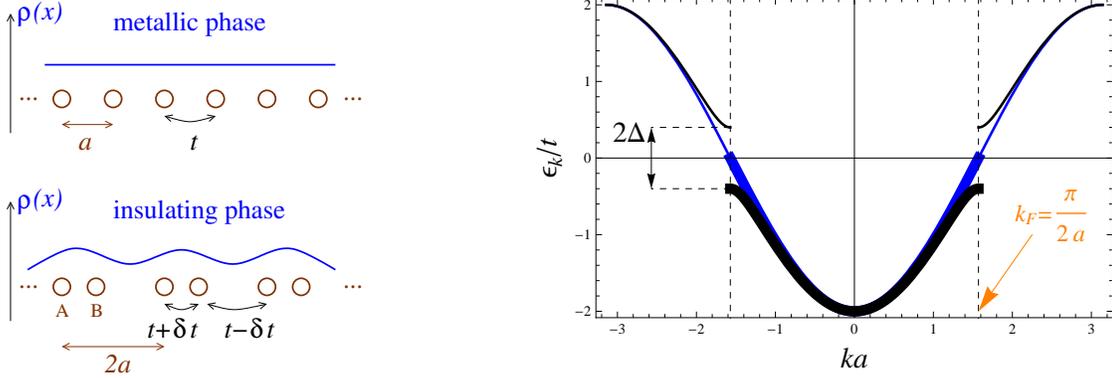


FIGURE 57 : Dispersion relation in the metallic phase (blue) and the insulating phase (black) after unfolding of the Brillouin zone. Thick lines indicate filling with electrons.

H.2.3 Comparison of the two phases

We may compute the difference in energy of the two phases at $T = 0$:

$$\delta\epsilon_{\text{elec}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{E_{\text{insulator}} - E_{\text{metal}}}{L} \quad (390)$$

$$= \int_{-k_F}^{+k_F} \frac{dk}{2\pi} \left[\epsilon_{k,-}^{(\text{insul})} - \epsilon_k^{(\text{metal})} \right] \simeq \int_{-k_c}^0 \frac{d\kappa}{\pi} \left[-\sqrt{v_F^2 \kappa^2 + \Delta^2} - v_F \kappa \right] \quad (391)$$

where we have used that the main difference in energy is due to the neighbourhood of $|k| \sim k_F$: this allows to use the linearised spectra, on a scale given by the cutoff $k_c \sim 1/a$ above which linearisation does not hold. Using

$$\int dx \sqrt{x^2 + b^2} = \frac{1}{2} x \sqrt{x^2 + b^2} + \frac{1}{2} b^2 \text{argsh}(x/b) \quad (392)$$

we finally obtain (for $\Delta \ll \epsilon_c = v_F k_c \sim 1/a^2$)

$$\boxed{\delta\epsilon_{\text{elec}} = -\frac{\rho_0}{2} \Delta^2 \left[\frac{1}{2} + \ln \left(\frac{\epsilon_c}{\Delta} \right) \right]} \quad (393)$$

where $\rho_0 = \frac{1}{\pi v_F}$ is the DoS at Fermi level. From the point of view of the 1D electron gas, the insulating phase is therefore energetically more favorable.

Remark : It is important to have in mind that this instability is related to the electron gas : it is due to the degeneracy of the energies $\epsilon_{k_F} = \epsilon_{-k_F}$, which makes the Fermi surface very sensitive to perturbations. The choice made above of a Fermi wavevector commensurate with

the lattice was convenient in order to analyse the metallic and insulating phases on the same footing. However we will show within a continuum model that the energy of the Fermi sea is lowered when a modulated external potential is introduced; this diminishing of the energy is maximised when the modulation is characterised by a wavevector $q = 2k_F$, which is in general incommensurate with the lattice spacing. This analysis will be presented below in section H.5.

H.3 Lattice of atoms

Lattice distortion has an elastic energy cost. A simple model for the potential (elastic) energy of the lattice is

$$E_{\text{vib}} = \sum_{n=1}^N \frac{1}{2} M \omega_0^2 (\xi_{n+1} - \xi_n)^2 \quad (394)$$

where ξ_n measures the displacement of atom n with mass M . Set $\xi_{N+1} \equiv \xi_1$. Introducing the normal coordinate

$$\tilde{\xi}_q \stackrel{\text{def}}{=} \sum_n \xi_n e^{-iqna} \quad \text{i.e.} \quad \xi_n = \frac{1}{N} \sum_q \tilde{\xi}_q e^{iqna} \quad (395)$$

the energy rewrites

$$E_{\text{vib}} = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{2} M \omega_q^2 |\tilde{\xi}_q|^2 \quad (396)$$

where

$$\boxed{\omega_q = 2\omega_0 |\sin(qa/2)|} \quad \text{for } q \in \left] -\frac{\pi}{a}, +\frac{\pi}{a} \right] \quad (397)$$

is the phonon dispersion relation.

H.4 Peierls transition

H.4.1 Electron-phonon interaction

The coupling between atomic orbitals leading to electronic transport depends on the distance between atoms. Assuming weak displacements, we may write the hopping energy between atoms n and $n+1$ as

$$t_n = t + \delta t_n \quad \text{with} \quad \delta t_n \propto \xi_n - \xi_{n+1} \quad (398)$$

(the shorter the distance $a - \xi_n + \xi_{n+1}$ is, the stronger the coupling is). The lattice distortion responsible for the insulating phase occurs at frequency $q = 2k_F$ (note that in general $2k_F$ does not coincide with the edge of the phonon dispersion relation, when the crystal is more complex). We have seen above that the metal is driven to the insulator when the modulation of the couplings of amplitude $\delta t = \Delta/2$ occurs with frequency $q = 2k_F$, i.e. is due to a periodic displacement of atoms

$$\xi_n = 2\delta_{2k_F} \cos(2k_F n a) \quad \text{i.e.} \quad \frac{1}{N} \tilde{\xi}_{\pm 2k_F} = \delta_{2k_F} \quad (399)$$

characterised by an energy

$$E_{\text{vib}} = N M \omega_{2k_F}^2 \delta_{2k_F}^2. \quad (400)$$

Assumption of a linear relation between atomic displacements and hopping can now be translated as a relation between the gap and the displacement amplitude, $\Delta = 2|\delta t| \propto 2\delta_{2k_F} [1 - \cos(2k_F a)]$, conveniently rewritten as

$$\Delta = \sqrt{\frac{\lambda M}{a}} \omega_{2k_F} \delta_{2k_F} \quad (401)$$

where λ is the electron-phonon coupling constant at $q = 2k_F$. The elastic energy per unit length can therefore be rewritten in term of the gap

$$\boxed{\epsilon_{\text{vib}} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{E_{\text{vib}}}{Na} = \frac{1}{\lambda} \Delta^2} \quad (402)$$

H.4.2 Insulating phase at $T = 0$ – Charge density wave

We now determine the gap by minimizing the total energy

$$\frac{\partial}{\partial \Delta} (\delta\epsilon_{\text{elec}} + \epsilon_{\text{vib}}) = 0 \quad \Rightarrow \quad \boxed{\Delta = 2\epsilon_c e^{-2/\rho_0\lambda}} \quad (403)$$

We check that this value of the gap corresponds to a negative energy (i.e. the insulator has a lower energy than the metal)

$$\delta\epsilon_{\text{elec}} + \epsilon_{\text{vib}} = -\frac{\rho_0}{2} \Delta^2. \quad (404)$$

The opening of the gap in the electronic spectrum is due to a lattice distorsion for wavevector $q = 2k_F$ to which corresponds a modulation of the electronic density

$$\delta n(x) = \delta n_{2k_F} \cos(2k_F x + \phi) \quad (405)$$

The line is therefore in a charge density wave (CDW) phase. The amplitude of this modulation is related to the gap (the order parameter) and the electron-phonon coupling constant $\delta n_{2k_F} \sim \Delta/\lambda$ [99].

H.4.3 Peierls transition

We now study the effect of temperature and determine the position of the critical temperature where the metal-insulator transition takes place.

We come back to the simple model of two band insulator. A first important remark is that since the spectrum have the symmetry $\epsilon_{k,+} = -\epsilon_{k,-}$, the Fermi level remains at $\epsilon_F = 0 \forall T$. This allows to write the grand potential of the electronic gas as

$$J_{\text{insulator}} = -\frac{1}{\beta} \sum_{k,\pm} \ln \left(1 + e^{-\beta\epsilon_{k,\pm}^{(\text{insul})}} \right) \quad (406)$$

Using the same approximation as above (linearisation of spectra) we find

$$\frac{J_{\text{insulator}} - J_{\text{metal}}}{L} = -\frac{\rho_0}{\beta} \int_0^{\epsilon_c} d\epsilon \ln \left[\left(1 + e^{\beta\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} \right) \left(1 + e^{-\beta\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} \right) \right] + \text{cste} \quad (407)$$

where the constant is independent on Δ . The grand potential for the vibration reads

$$\frac{J_{\text{vib}}}{L} = \frac{J_{\text{thermal}}}{L} + \frac{1}{\lambda} \Delta^2 \quad (408)$$

where the first part is the contribution of phonons excited by thermal fluctuations, independent on the gap. The second term is the cost of lattice distorsion, obtained above. Minimization of the total grand potential

$$\frac{\partial}{\partial \Delta} \left(\frac{J_{\text{insulator}} - J_{\text{metal}}}{L} + \frac{J_{\text{vib}}}{L} \right) = 0 \quad (409)$$

leads to the gap equation

$$\boxed{\int_0^{\epsilon_c} \frac{d\epsilon}{\sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2}} \tanh \frac{\beta}{2} \sqrt{\epsilon^2 + \Delta^2} = \frac{2}{\rho_0\lambda}} \quad (410)$$

This equation in principle allows us to determine the temperature dependence of the gap $\Delta(T)$.

At zero temperature, we obtain $\operatorname{argsh} \frac{\epsilon_c}{\Delta} = \frac{2}{\rho_0 \lambda}$, i.e. $\Delta(0) \simeq 2\epsilon_c e^{-2/\rho_0 \lambda}$, that is (403). The gap equation allows us to determine the position of the transition. Setting $\Delta(T_{\text{Peierls}}) = 0$ we obtain the equation

$$\int_0^{\epsilon_c} \frac{d\epsilon}{\epsilon} \tanh\left(\frac{\epsilon}{2k_B T_{\text{Peierls}}}\right) = \frac{2}{\rho_0 \lambda} \quad (411)$$

Using that

$$\int_0^x \frac{dy}{y} \tanh y \simeq \ln\left(\frac{4}{\pi} e^{-C} x\right) \quad \text{for } x \gg 1, \quad (412)$$

where $C = -0.577215\dots$ is the Euler-Mascheroni constant, we finally get the critical temperature where the Peierls transition takes place

$$\boxed{k_B T_{\text{Peierls}} \simeq \frac{2}{\pi} e^{-C} \epsilon_c e^{-2/\rho_0 \lambda}} \quad (413)$$

that is of the same order as the gap $\Delta(0)$.

Remark : The equation for the gap (410) is formally similar to the one describing a superconductor.

H.5 A continuous description of the electronic gas

In this section we consider a different model of metal and forget the lattice of atoms : we provide a **continuous description** of the electronic gas. This analysis will emphasize that **the $q = 2k_F$ instability originates from the properties of the 1D Fermi gas**. This is due to the fact that the two plane waves $|\psi_{-k_F}\rangle$ and $|\psi_{k_F}\rangle$ (the Fermi surface) have the same energy, therefore any perturbation that couples these two states (a potential with Fourier component $V_{\pm 2k_F} \neq 0$) has a strong effect : it lifts the degeneracy and open a gap at Fermi energy. The 1D Fermi surface is unstable under perturbations. This explains why the Peierls transition may occurs although $\lambda_F/2 = \pi/k_F$ is not commensurate with the lattice spacing.

Electrons occupy usual 1D plane waves $\psi_k(x) = \frac{1}{\sqrt{L}} e^{ikx}$ of energy $\epsilon_k = \frac{k^2}{2m}$, with $k \in \mathbb{R}$ and where L is the length of the line (hence the wavevector is quantified). As before, we will forget the spin and will treat electrons as **spinless fermions**.

The aim of this section is to analyse the response of the electron gas to a perturbing potential. This perturbation theory will hold only above the Peierls transition.

H.5.1 Linear response theory – compressibility of the electronic gas

Suppose that a perturbation is introduced under the form of a scalar external potential $V(x, t) = \frac{1}{L} \sum_q V_q(t) e^{iqx}$. The perturbation reads

$$\hat{H}_{\text{pert}}(t) = \int dx V(x, t) \hat{n}(x) = \frac{1}{L} \sum_q V_q(t) \hat{n}_{-q}. \quad (414)$$

The compressibility characterizes the response of the electronic density :

$$\langle \hat{n}(x, t) \rangle_V = \langle \hat{n}(x) \rangle + \int dt' dx' \chi(x - x', t - t') V(x', t') + \mathcal{O}(V^2) \quad (415)$$

i.e.

$$\langle \hat{n}_q(t) \rangle_V = n L \delta_{q,0} + \int dt' \tilde{\chi}_q(t - t') V_q(t') + \mathcal{O}(V^2) \quad (416)$$

where $n = \langle \hat{n}(x) \rangle$.

Linear response theory gives the compressibility $\tilde{\chi}_q(t) = -\frac{i}{L}\theta_H(t) \langle [\hat{n}_q(t), \hat{n}_{-q}] \rangle$. Some algebra gives the Fourier transform

$$\tilde{\chi}(q, \omega) = \int dt \tilde{\chi}_q(t) e^{i\omega t} = \frac{1}{L} \sum_k \frac{f_k - f_{k+q}}{\omega + \epsilon_k - \epsilon_{k+q} + i0^+} \quad (417)$$

where $f_k \equiv f(\epsilon_k)$ is the Fermi-Dirac distribution.

H.5.2 Static compressibility

We consider the static limit and denote $\chi_T(q) \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\chi}(q, 0)$ the static compressibility at temperature T . Using symmetry of the spectrum, $\epsilon_{-k} = \epsilon_k$, we find

$$\chi_T(q) = -\frac{1}{L} \sum_k \frac{f_k - f_{-k-q}}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k} = -\frac{2}{L} \sum_k \mathcal{P}\mathcal{P} \frac{f_k}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k} = -\frac{2}{L} \sum_k \mathcal{P}\mathcal{P} \frac{f_k}{\frac{q}{m}(k + \frac{q}{2})} \quad (418)$$

where we have used the symmetry of the integrand under $k \leftrightarrow -(k+q)$ (i.e. around the pole at $k = -q/2$) in order to re-introduce the principal part.¹¹⁷ The zero temperature compressibility is straightforwardly obtained

$$\chi_0(q) = -\frac{m}{\pi q} \int_{-k_F}^{k_F} dk \frac{1}{k + q/2} = -\frac{m}{\pi q} \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \left(\int_{-k_F}^{-q/2-\eta} + \int_{-q/2+\eta}^{k_F} \right) dk \frac{1}{k + q/2} \quad (419)$$

hence

$$\boxed{\chi_0(q) = -\frac{m}{\pi q} \ln \left| \frac{q + 2k_F}{q - 2k_F} \right|} \simeq -\rho_0 \times \begin{cases} 1 & \text{for } q \ll k_F \\ \frac{1}{2} \ln \frac{4k_F}{|q - 2k_F|} & \text{for } q \sim 2k_F \\ \left(\frac{2k_F}{q} \right)^2 & \text{for } q \gg k_F \end{cases} \quad (420)$$

where $\rho_0 = \frac{m}{\pi k_F} = \frac{1}{\pi v_F}$ is the DoS at Fermi level and $v_F = k_F/m$ is the Fermi velocity. It is negative.

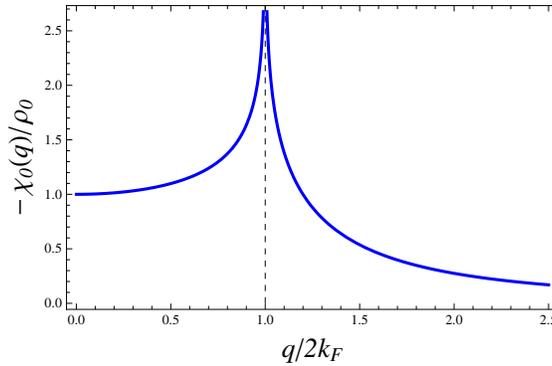


FIGURE 58 : Zero temperature compressibility with logarithmic divergence at $q = 2k_F$.

¹¹⁷ We use that $\int_{\mathbb{R}} dx \frac{f(x) - f(-x)}{2x} = \int_{\mathbb{R}} dx \frac{f(x)}{x}$. In other terms, we could have kept the $i0^+$ and write

$$\frac{1}{L} \sum_k \frac{f_k - f_{k+q}}{\epsilon_k - \epsilon_{k+q} + i0^+} = \frac{1}{L} \sum_k f_k \left(\frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_{k+q} + i0^+} + \frac{1}{\epsilon_k - \epsilon_{k+q} - i0^+} \right) = \frac{2}{L} \sum_k \mathcal{P}\mathcal{P} \frac{f_k}{\epsilon_k - \epsilon_{k+q}}$$

Divergence at $q = 2k_F$ is regularised by thermal fluctuations. For $q \sim +2k_F$ the integral is dominated by the transition between $k \sim -k_F$ to $k + q \sim +k_F$:

$$\chi_T(q) = -\frac{2}{L} \sum_k \mathcal{P}\mathcal{P} \frac{f_k}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k} \underset{q \sim 2k_F}{\simeq} -2 \int_{-k_F - k_c}^{-k_F + k_c} \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \epsilon_F)} + 1} \frac{1}{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k}, \quad (421)$$

where k_c is a cutoff. In this small energy domain, we may linearise the spectrum as $\epsilon_k - \epsilon_F \simeq -v_F(k + k_F)$ and $\epsilon_{k+q} - \epsilon_F \simeq v_F(k + q - k_F)$. The sum simplifies as

$$\chi_T(q) \underset{q \sim 2k_F}{\simeq} -\frac{\rho_0}{2} \int_{-\beta\epsilon_c}^{+\beta\epsilon_c} \frac{du}{e^{-u} + 1} \frac{1}{u + \beta\epsilon_F \left(\frac{q}{2k_F} - 1\right)} \Rightarrow \chi_T(2k_F) \simeq -\frac{\rho_0}{2} \int_0^{\beta\epsilon_c/2} \frac{dy}{y} \tanh y, \quad (422)$$

where $\epsilon_c = v_F k_c$. Using (412) we find

$$\boxed{\chi_T(2k_F) \simeq -\frac{\rho_0}{2} \ln \left(\frac{2e^{-C}}{\pi} \frac{\epsilon_c}{k_B T} \right)} \quad (423)$$

Therefore the logarithmic divergence of $\chi_0(2k_F) = -\infty$ is regularised by temperature. For $\left| \frac{q}{2k_F} - 1 \right| \gtrsim \frac{k_B T}{\epsilon_c}$ we expect $\chi_T(q) \simeq \chi_0(q)$.

H.5.3 Energy of the electron gas and cost of the distorsion

The variation of the energy of the electron gas due to the static potential $V(x)$ may be expressed in terms of the static compressibility as

$$\delta E_{\text{elec}} = \frac{1}{L} \sum_q V_{-q} \delta n_q = \frac{1}{L} \sum_q \chi_T(q) |V_q|^2 \quad (424)$$

The fact that $\chi_T(q) < 0$ shows that lattice distorsion *decreases* the energy of the electron gas.

The potential is due to displacement of atoms, characterised by the elastic energy

$$E_{\text{vib}} = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{2} M \omega_q^2 |\tilde{\xi}_q|^2 \quad (425)$$

where ω_q is the phonon dispersion relation. Displacement of atoms is responsible for the potential « seen » by the electrons, therefore $\tilde{\xi}_q$ and V_q are related. We write this relation as :

$$V_q = \sqrt{\lambda a} \frac{M}{2} \omega_q \tilde{\xi}_q, \quad (426)$$

where λ is a constant characterizing the electron-phonon coupling. We may write the total energy as

$$\delta E_{\text{elec}} + E_{\text{vib}} = \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{2} M \Omega_q^2 |\tilde{\xi}_q|^2 \quad (427)$$

where the renormalised phonon dispersion relation is

$$\boxed{\Omega_q = \omega_q \sqrt{1 + \lambda \chi_T(q)}} \quad (428)$$

In the weak coupling limit $\lambda \rho_0 \ll 1$, the renormalised phonon spectrum is almost unchanged apart for $q \sim 2k_F$, corresponding to the divergence of the static compressibility (see sketch on Fig. 59).

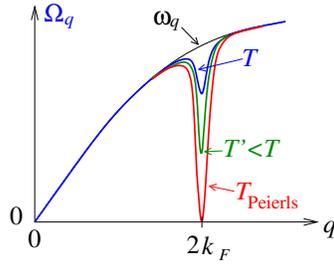


FIGURE 59 : Sketch of the renormalised phonon dispersion relation for different temperatures.

Linear response theory is based on perturbation theory, what can only hold in the *metallic phase*. The description of the section only works for $T \geq T_{\text{Peierls}}$ as long as $1 + \lambda \chi_T(2k_F) \geq 0$. Writing

$$\chi_T(2k_F) = -\frac{1}{\lambda} \quad \text{for} \quad T = T_{\text{Peierls}} \quad (429)$$

and using (423), we recover exactly the expression of the Peierls critical temperature (413). For $T = T_{\text{Peierls}}$ the phonon dispersion relation presents a *soft mode* $\Omega_{2k_F} = 0$, i.e. a static deformation of the lattice at wavevector $q = 2k_F$ is costless. This announces the Peierls instability for $T < T_{\text{Peierls}}$ (below the critical temperature $\delta E_{\text{elec}} + E_{\text{vib}}$ can be made negative if the potential presents a modulation for wavevector $2k_F$).

H.5.4 Experiments

Two experiments where the phonon spectrum is measured : in $\text{K}_2\text{Pt}(\text{CN})_4\text{Br}_{0.3} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ [44] and in TTF-TCNQ [42]. See figure 60.

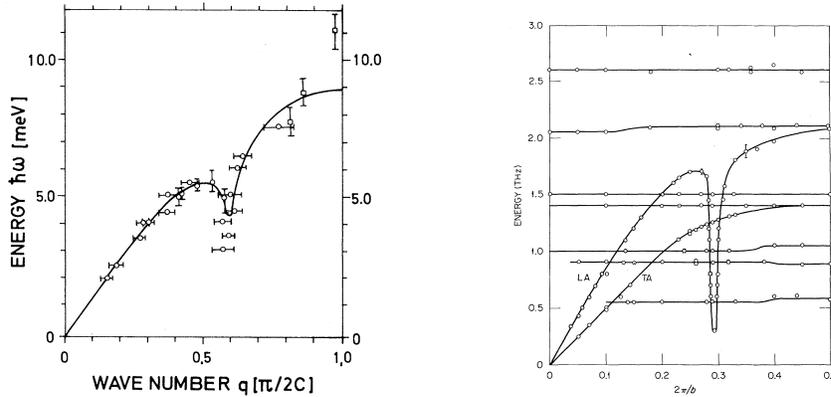


FIGURE 60 : Kohn anomaly in the acoustic phonon spectrum of two quasi-1D conductors. Left : $\text{K}_2\text{Pt}(\text{CN})_4\text{Br}_{0.3} \cdot 3\text{H}_2\text{O}$ at room temperature ; from B. Renker et al, *Phys. Rev. Lett.* **30**, 1144 (1973). Right : TTF-TCNQ above $T \simeq 55$ K ; from H. A. Mook et al, *Phys. Rev. Lett.* **36**, 801 (1976).

H.6 Final remarks

I borrow few remarks from Gilles Montambaux's lecture notes [99].

- In practice, it is important to remember that the Mermin-Wagner theorem [41] prevents for the existence of an ordered phase in low dimension $d = 1$ or 2 : quantum and/or

thermal fluctuations destroy any ordered phase and no phase transition can take place (in particular we have seen in the lecture that the 1D crystal cannot exist). For this reason, the **coupling between 1D chains is crucial** in order to stabilize the charge density wave phase, and the Peierls transition can only exist in systems of weakly coupled chains.

- In strongly anisotropic materials, the Brillouin zone is not anymore one dimensional, although very anisotropic. The $2k_F$ instability of the Fermi surface can however appear for an open Fermi surface with parallel planes : this phenomenon is referred as **nesting** of the Fermi surface. For example if the dispersion relation can be approximated as

$$\epsilon_{\vec{k}} \simeq v_F (|k_x| - k_F) + t_{\perp}(k_y) \quad (430)$$

For a periodic modulation $t_{\perp}(k_y) = -2t_b \cos k_y b$ (perfect nesting), where b is the distance between chains, we still have a divergence of the static compressibility $\chi_0(2k_F, \pi/b) = -\infty$. In general there is however no reason for perfect nesting. An additional modulation $t_{\perp}(k_y) = -2t_b \cos k_y b - 2t'_b \cos 2k_y b$ regularises the divergence of the static compressibility $\chi_0(2k_F, \pi/b) = -\frac{\rho_0}{2b} \ln(\epsilon_c/t'_b)$. In experiment the ratio t'_b/t_b may be tuned by applying an external pressure.

- A final remark is that spin may also play an important role. A spin density wave is also possible at low temperature without lattice distortion [48].

📖 More about quasi-1D conductors :

Few references :

- R. E. Peierls, Quantum theory of solids, Clarendon, Oxford, 1955.
- G. Grüner, Density waves in solids, Perseus, Cambridge, 1994.
- For a recent overview : P. C. Snijders & H. H. Weitering, *Electronic instabilities in self-assembled atom wires*, Rev. Mod. Phys. **82**, 307–329 (2010).

I Problème : Métaux quasi-ferromagnétiques – Paramagnons

Introduction :¹¹⁸ Les propriétés magnétiques des métaux sont dominées par les électrons de conduction (on parle de « magnétisme itinérant »). L'interaction coulombienne joue un rôle très important : répulsive et à très courte portée à cause de l'écrantage, elle peut être modélisée comme

$$\hat{H}_{\text{int}} = U \int_V d\vec{r} \hat{n}_{\uparrow}(\vec{r}) \hat{n}_{\downarrow}(\vec{r}) = \frac{U}{V} \sum_{\vec{q}} \hat{n}_{\vec{q}\uparrow} \hat{n}_{\vec{q}\downarrow} \quad \text{avec } U > 0, \quad (431)$$

où $\hat{n}_{\sigma}(\vec{r})$ est la densité des électrons de spin $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$. Le volume est noté V . Lorsque l'interaction est suffisamment forte, la polarisation du gaz (en spin) devient favorable énergétiquement, i.e. il apparaît une aimantation spontanée et le métal est ferromagnétique.

L'objet du problème est d'étudier les métaux **paramagnétiques** dans lesquels l'interaction est très proche de la valeur critique correspondant à la transition vers le ferromagnétisme. Nous allons analyser un effet précurseur qui est l'apparition d'importantes fluctuations de spin, dénommées « *paramagnons* ».

A. Électrons libres sans interaction.– Dans cette première partie, nous étudions la réponse magnétique du métal d'électrons libres sans interaction.

Considérons dans un premier temps **un** électron dont nous notons les opérateurs position et spin \hat{r} et \hat{S} . Les états stationnaires sont des ondes planes $\psi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ d'énergie $\epsilon_{\vec{k}}$, combinées à des états de spin (on notera $|\pm\rangle$ les états propres de \hat{S}_z ; on notera $\uparrow \equiv +$ & $\downarrow \equiv -$). Nous introduisons l'opérateur densité d'aimantation pour un électron

$$\hat{m}(\vec{r}) = \mu_B \hat{S} \delta(\vec{r} - \hat{r}), \quad \text{i.e.} \quad \hat{m}_{\vec{q}} = \mu_B \hat{S} e^{-i\vec{q}\cdot\hat{r}} \quad \text{dans l'espace de Fourier.} \quad (432)$$

$\mu_B = \frac{e\hbar}{2m_e}$ est le magnéton de Bohr (on fixe un facteur de Landé égal à 1 pour simplifier). Si l'on souhaite étudier les composantes m^x et m^y , il est commode d'introduire les combinaisons $m^{\pm} \stackrel{\text{def}}{=} m^x \pm im^y$. Les opérateurs correspondants (à un corps) sont

$$\hat{m}_{\vec{q}}^{+} = \mu_B |+\rangle \langle -| e^{-i\vec{q}\cdot\hat{r}} \quad \text{et} \quad \hat{m}_{\vec{q}}^{-} = \mu_B |-\rangle \langle +| e^{-i\vec{q}\cdot\hat{r}} \quad (433)$$

(on a utilisé $\hat{S}^{\pm} = \hat{S}^x \pm i\hat{S}^y = |\pm\rangle \langle \mp|$, avec $\hbar = 1$).

1/ Que valent les éléments de matrice $\langle \vec{k}, \sigma | \hat{m}_{\vec{q}}^{+} | \vec{k}', \sigma' \rangle$ et $\langle \vec{k}, \sigma | \hat{m}_{\vec{q}}^{-} | \vec{k}', \sigma' \rangle$?

2/ **Susceptibilité magnétique.**– On introduit un faible champ magnétique extérieur $\vec{B}(\vec{r}, t)$ dans le plan xOy . L'hamiltonien de perturbation correspondant est

$$\hat{H}_{\text{pert}}(t) = - \int_V d\vec{r} \vec{B}(\vec{r}, t) \cdot \hat{M}(\vec{r}) = - \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \left(B_{\vec{q}}^{+}(t) \hat{M}_{-\vec{q}}^{+} + B_{\vec{q}}^{-}(t) \hat{M}_{-\vec{q}}^{-} \right) \quad (434)$$

où $\vec{M}(\vec{r})$ désigne la densité d'aimantation du gaz et $B^{\pm} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2}(B^x \mp iB^y)$. On introduit la fonction de réponse χ^{+-} caractérisant la réponse linéaire à une perturbation du type¹¹⁹ $B^{-} = \frac{1}{2}(B^x + iB^y)$:

$$\langle \hat{M}_{\vec{q}}^{+}(t) \rangle_B = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi_{\vec{q}}^{+-}(t-t') B_{\vec{q}}^{-}(t') + \mathcal{O}(B^2). \quad (435)$$

Exprimer $\chi_{\vec{q}}^{+-}(t)$ comme une fonction de corrélation.

¹¹⁸Sujet d'examen du 8 janvier 2014.

¹¹⁹ Pour un système isotrope avec $\chi^{xx} = \chi^{yy}$ et $\chi^{yx} = -\chi^{xy}$ on a $\chi^{+-} = \chi^{xx} - i\chi^{xy}$.

3/ On considère maintenant la transformée de Fourier temporelle de la susceptibilité $\chi^{+-}(\vec{q}, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \chi_{\vec{q}}^{+-}(t)$.

a) Calculer $\chi^{+-}(\vec{q}, \omega)$ en fonction du spectre des énergies à un corps, $\epsilon_{\vec{k}}$. Montrer qu'elle est proportionnelle à la compressibilité du gaz de fermions libres

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = -\frac{i}{V} \int_0^{\infty} dt e^{(i\omega - 0^+)t} \langle [\hat{n}_{\vec{q}}(t), \hat{n}_{-\vec{q}}] \rangle = \frac{2}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{f(\epsilon_{\vec{k}}) - f(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{\omega + \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + i0^+}, \quad (436)$$

où $f(\epsilon)$ est la fonction de Fermi. Le facteur 2 est la dégénérescence de spin.

b) Quel rôle joue le $i0^+$?

4/ Réponse statique ($\omega = 0$).— On note k_F le vecteur de Fermi.

a) Calculer $\chi_0(\vec{q}, 0)$ lorsque $q \stackrel{\text{def}}{=} \|\vec{q}\| \ll k_F$. Interpréter physiquement son signe.

b) Dédurre $\chi^{+-}(\vec{q}, 0)$ dans la même limite. Commenter le signe de la susceptibilité magnétique.

B. Électrons en interaction.— Dans la suite du problème on discute l'effet de l'interaction (431), traitée à l'approximation RPA (\sim champ moyen). On peut montrer que la susceptibilité magnétique du gaz en interaction est donnée par

$$\chi_{\text{RPA}}^{+-}(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi^{+-}(\vec{q}, \omega)}{1 + \frac{1}{2}U \chi_0(\vec{q}, \omega)}, \quad (437)$$

où $\chi_0(\vec{q}, \omega)$ et $\chi^{+-}(\vec{q}, \omega)$ désignent respectivement la compressibilité et la susceptibilité du gaz d'électrons sans interaction étudiées au **A**.¹²⁰

1/ Instabilité de Stoner.— Donner une forme approchée de la susceptibilité dans la limite statique $\chi_{\text{RPA}}^{+-}(\vec{q}, 0)$ lorsque $q \ll k_F$. Montrer qu'elle diverge pour une certaine valeur critique de l'interaction, notée U_c . Interpréter physiquement cette divergence.

On considèrera le cas où l'interaction est proche mais inférieure à cette valeur critique : $U < U_c$. On introduira le paramètre $\varepsilon \stackrel{\text{def}}{=} \frac{U_c}{U} - 1 > 0$ avec $\varepsilon \ll 1$.

On donne le développement de la compressibilité (436) :

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = -2\rho_0 \left[1 + \frac{i\pi}{2} \frac{\omega}{v_F q} - \frac{1}{3} \left(\frac{q}{2k_F} \right)^2 + \dots \right] \quad \text{pour } \frac{\omega}{v_F q} \ll \frac{q}{k_F} \ll 1 \quad (438)$$

où $\rho_0 = \rho(\epsilon_F)$ est la densité d'états au niveau de Fermi (par spin et par unité de volume) et $v_F = k_F/m_e$ est la vitesse de Fermi.

2/ Pouvez-vous interpréter le comportement de $\chi_{\text{RPA}}^{+-}(\vec{q}, \omega)$ obtenu dans la limite $\frac{\omega}{v_F q} \ll \frac{q}{k_F} \ll 1$ comme l'existence d'un mode collectif ?

3/ On introduit le facteur de structure $S^{+-}(\vec{q}, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{V} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle \hat{M}_{\vec{q}}^+(t) \hat{M}_{-\vec{q}}^- \rangle$. Celui-ci est relié à la susceptibilité par

$$S^{+-}(\vec{q}, \omega) = \frac{2}{1 - e^{-\omega/k_B T}} \text{Im} [\chi_{\text{RPA}}^{+-}(\vec{q}, \omega)]. \quad (439)$$

a) Quelle propriété de l'aimantation est-elle caractérisée par $S^{+-}(\vec{q}, \omega)$? Quel est le sens physique de la relation (439) ?

¹²⁰ Corrélativement, la compressibilité à l'approximation RPA est $\chi_{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega) = \chi_0(\vec{q}, \omega) / [1 - \frac{1}{2}U \chi_0(\vec{q}, \omega)]$.

b) Dans la limite $\omega \ll k_B T$, montrer que le facteur de structure présente le comportement

$$S^{+-}(\vec{q}, \omega) \propto \frac{\Gamma(q)}{\omega^2 + \Gamma(q)^2} \quad (440)$$

où l'on donnera l'expression de $\Gamma(q)$ en fonction de q et du paramètre $\varepsilon = \frac{U_c}{U} - 1 \ll 1$.

4/ Il est possible de mesurer le facteur de structure par diffusion de neutrons. La figure montre le résultat d'une telle expérience de diffusion sur un métal de Ni_3Ga à $T = 22\text{ K}$, en fonction de l'énergie transférée $\hbar\omega$ et de l'angle de diffusion θ , lui-même relié au transfert d'impulsion par $q^2 = k_N^2 [2 + \hbar\omega/E_N - 2 \cos\theta \sqrt{1 + \hbar\omega/E_N}]$ où k_N et E_N sont le vecteur d'onde et l'énergie des neutrons incidents [si l'on néglige $\hbar\omega$, on a $q \simeq 2k_N \sin(\theta/2)$]. Commenter l'allure des données expérimentales à l'aide de l'analyse précédente.

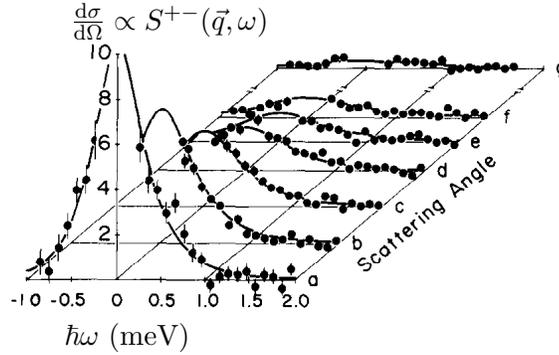


FIGURE 61 : Section efficace différentielle pour la diffusion de neutrons en fonction de l'énergie transférée $E_N^{\text{finale}} - E_N^{\text{initiale}} = \hbar\omega$ et de l'angle de diffusion (i.e. du moment transféré). G. G. Lonzarich, N. R. Bernhoeft and D. McK. Paul, *Spin density fluctuations in magnetic metals*, Physica B156&157, 699–705 (1989).

☞ Annexe :

- Convention pour les transformations de Fourier :

$$f_{\vec{q}} = \int_{\text{Vol}} d\vec{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} f(\vec{r}) \quad \text{et} \quad f(\vec{r}) = \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{\vec{q}} f_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \xrightarrow{\text{Vol} \rightarrow \infty} \int \frac{d\vec{q}}{(2\pi)^d} f_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \quad (441)$$

- On rappelle que la moyenne grand canonique d'un commutateur d'opérateurs à N corps somme d'opérateurs à un corps, du type $\hat{A} = \sum_{i=1}^N \hat{a}^{(i)}$, est

$$\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \langle \varphi_{\alpha} | [\hat{a}, \hat{b}] | \varphi_{\alpha} \rangle = \sum_{\alpha, \beta} (f_{\alpha} - f_{\beta}) a_{\alpha\beta} b_{\beta\alpha}, \quad (442)$$

où la somme porte sur les états individuels stationnaires. $a_{\alpha\beta} = \langle \varphi_{\alpha} | \hat{a} | \varphi_{\beta} \rangle$ est un élément de matrice de l'opérateur à un corps et $f_{\alpha} = f(\epsilon_{\alpha})$ est l'occupation moyenne de l'état individuel.

- ☞ Pour en savoir plus :

- P. Fulde, *Electron correlations in molecules and solids*, Solid State Science, Springer, 1995.
- R. M. White, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer, 2006.

J Problème : Oscillations de Weiss de la magnétorésistivité d'un 2DEG

J.1 Subject of the exam

Introduction :¹²¹ Gerhardtts, Weiss and von Klitzing analysed the conductivity of a **two dimensional** electron gas (electrons confined at the interface of two semiconductors) submitted to a strong magnetic field. They were able to introduce some additional external (scalar) potential modulated in space in one direction only, $V(x) = V_0 \cos(2\pi x/a)$. The aim of the problem is to study the effect of $V(x)$ on the longitudinal conductivity.

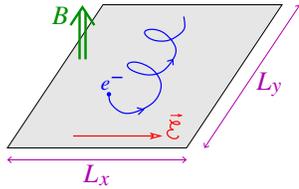
The Hamiltonian describing the dynamics of **one** electron moving in the plane xOy is

$$H_0 = \frac{1}{2}m_*\vec{v}^2 + V(x) = \frac{(\vec{p} - e\vec{A}(\vec{r}))^2}{2m_*} + V(x) \quad (443)$$

where $\vec{v} = (v_x, v_y)$ is the velocity operator and $\vec{A} = (0, Bx, 0)$ describes a magnetic field perpendicular to the plane. $m_* = 0.067m_e$ is the effective mass in AsGa ($m_e \simeq 10^{-30}$ kg).

We denote by $\{\varepsilon_\alpha, |\varphi_\alpha\rangle\}$ the spectrum of H_0 .

A. Conductivity.– The conductivity tensor characterizes the response of the spatially averaged current density \vec{j} to an external uniform time dependent electric field :



$$\langle j_i(t) \rangle_{\vec{\mathcal{E}}} = \sum_j \int dt' \sigma_{ij}(t-t') \mathcal{E}_j(t') + \mathcal{O}(\mathcal{E}^2). \quad (444)$$

The current density operator for one electron is $\vec{j} = \frac{e}{\text{Surf}}\vec{v}$, where $\text{Surf} = L_x L_y$ is the surface of the plane. The perturbation is chosen under the form $H_{\text{pert}}(t) = -e\vec{\mathcal{E}}(t) \cdot \vec{r}$.

1. Express the conductivity tensor as an equilibrium correlation function (for one electron).
2. Show that the frequency dependent conductivity for the electron **gas** is given by

$$\tilde{\sigma}_{ij}(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \sigma_{ij}(t) = -\frac{i\hbar e^2}{\text{Surf}} \sum_{\alpha, \beta} \frac{f_\alpha - f_\beta}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \frac{(v_i)_{\alpha\beta}(v_j)_{\beta\alpha}}{\hbar\omega + \varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta + i0^+}, \quad (445)$$

where $f_\alpha \equiv f(\varepsilon_\alpha)$ is the Fermi function.

Hint : use the formula recalled in the appendix.

3. Discuss the role and the origin of the $\ll i0^+ \gg$ in the denominator.
4. **Zero frequency.**– We will consider the zero frequency conductivity $\sigma_{ij} \equiv \tilde{\sigma}_{ij}(\omega = 0)$:

$$\sigma_{ij} = -\frac{i\hbar e^2}{\text{Surf}} \sum_{\alpha, \beta} \frac{f_\alpha - f_\beta}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta} \frac{(v_i)_{\alpha\beta}(v_j)_{\beta\alpha}}{\varepsilon_\alpha - \varepsilon_\beta + i\hbar/\tau}, \quad (446)$$

where we performed the substitution $0^+ \rightarrow \hbar/\tau$. What is the physical meaning of τ ?

We admit that the formula is meaningful for a finite $1/\tau$.

¹²¹Sujet d'examen du 7 janvier 2015.

B. Conductivity of the Landau problem (case $V(x) = 0$).

The Landau problem.– The one body Hamiltonian has the explicit form

$$H_0 = \frac{1}{2}m_*\vec{v}^2 = \frac{1}{2m_*}p_x^2 + \frac{1}{2}m_*\omega_c^2 \left(x - \frac{p_y}{eB}\right)^2 \quad (447)$$

where $\omega_c = \frac{eB}{m_*} > 0$ is the cyclotron pulsation. Translation invariance in the y direction allows to write the eigenstates as $\varphi(x, y) = f(x) e^{iky}$. We obtain that $f(x)$ is the eigenstate for a 1D harmonic oscillator centered around $x_c = \hbar k/eB$. Denoting by $\phi_n(x)$ the well-known eigenfunctions of the harmonic oscillator (Gaussian \times Hermite polynomial), we find that the eigenstates of H_0 are

$$\varphi_{n,x_c}(x, y) = \phi_n(x - x_c) \frac{e^{ix_c y/\ell_B^2}}{\sqrt{L_y}} \quad \text{for an energy } \varepsilon_n = \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right), \quad n \in \mathbb{N}. \quad (448)$$

$\ell_B = \sqrt{\hbar/(eB)}$ is the magnetic length setting the typical width of the narrow function $\phi_n(x)$. The quantum number x_c replaces the wavevector k . Imposing periodic boundary condition in the y direction, we obtain that x_c is quantised as $x_c = 2m\pi\ell_B^2/L_y$, with $m \in \mathbb{N}$. The spectrum of the one particle Hamiltonian is similar to that of a harmonic oscillator (reflecting the existence of the cyclotron orbits) with **macroscopically degenerate** Landau levels (because ε_n is independent on quantum number x_c): degeneracy of levels is $d_{LL} = L_x L_y / (2\pi\ell_B^2)$, which follows from $x_c \in [0, L_x]$.

Matrix elements of \vec{v} are deduced from standard properties of the 1D harmonic oscillator

$$\langle \varphi_{n,x_c} | v_x | \varphi_{m,x'_c} \rangle = -i \delta_{x_c, x'_c} \sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2m_*}} (\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} - \sqrt{n} \delta_{m,n-1}) \quad (449)$$

$$\langle \varphi_{n,x_c} | v_y | \varphi_{m,x'_c} \rangle = -\delta_{x_c, x'_c} \sqrt{\frac{\hbar\omega_c}{2m_*}} (\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1}) \quad (450)$$

1. Compute explicitly the longitudinal (zero frequency) conductivity $\sigma_{xx} = \sigma_{yy}$ from Eq. (446). Express the result in terms of the Drude conductivity $\sigma_0 = \frac{n_e e^2 \tau}{m_*}$, where $n_e = N/\text{Surf}$ is the electronic density, and a dimensionless function of $\omega_c \tau$. Plot neatly σ_{yy} as a function of the magnetic field and explain physically the behaviour.

Hint : the filling factor (number of filled Landau levels) may be written as $N/d_{LL} = n_e \hbar / (eB) = \sum_{n=1}^{\infty} n [f(\varepsilon_{n-1}) - f(\varepsilon_n)]$

2. One could compute the Hall conductivity along the same lines : one obtains $\sigma_{xy} = -\sigma_{yx} = \sigma_0 \omega_c \tau / [1 + (\omega_c \tau)^2]$. Deduce the resistivity tensor $\rho = \sigma^{-1}$.

C. Effect of the oscillating potential $V(x)$.– We now consider the experimental situation described by the Hamiltonian (443) where $V(x) = V_0 \cos(2\pi x/a)$.

1. If the modulation occurs on large scale, $a \gg \ell_B$, justify that (448) are still eigenstates of the Hamiltonian, with eigenvalues now depending on the quantum number x_c as

$$\varepsilon_{n,x_c} \simeq \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2}\right) + V(x_c). \quad (451)$$

2. Show that the speed operator in the y direction now acquires some non zero diagonal matrix element, given by the Feynman-Hellmann theorem :

$$\langle \varphi_{n,x_c} | v_y | \varphi_{n,x'_c} \rangle = \delta_{x_c, x'_c} \frac{1}{m_* \omega_c} \frac{\partial \varepsilon_{n,x_c}}{\partial x_c}. \quad (452)$$

Hint : write $v_y = \omega_c(x_c - x)$.

In the expression of the conductivity (446), considering separately the diagonal terms $\sum_{\alpha=\beta}$ and non diagonal term $\sum_{\alpha\neq\beta}$ [the indices designate each a pair of quantum numbers $\alpha \equiv (n, x_c)$], leads to the conclusion that the longitudinal conductivity receives an additional contribution $\sigma_{yy} \rightarrow \sigma_{yy} + \Delta\sigma_{yy}$ due to the introduction of the oscillating potential :

$$\Delta\sigma_{yy} = \frac{e^2\tau}{\text{Surf}} \sum_{n, x_c} -f'(\varepsilon_{n, x_c}) |\langle \varphi_{n, x_c} | v_y | \varphi_{n, x_c} \rangle|^2 \quad (453)$$

3. Is the conductivity σ_{xx} affected by the presence of $V(x)$? Justify your answer.
4. BONUS : Assuming that $\hbar\omega_c > V_0$, show that the zero temperature result reads

$$\Delta\sigma_{yy} = \frac{e^2}{h} \frac{2\tau\ell_B^2}{a\hbar} |V'(X_n)| \quad \text{where } V(X_n) = \varepsilon_F - \hbar\omega_c(n + 1/2). \quad (454)$$

Hint : $\sum_{x_c} \rightarrow \frac{L_y}{2\pi\ell_B^2} \int_0^{L_x} dx_c$

5. The expression (454) does not allow for a simple analysis of the experiment for two reasons : (i) one should add several such contributions when $\hbar\omega_c < V_0$ ($0 < \hbar\omega_c < 1.2$ meV and $V_0 = 0.3$ meV) and (ii) thermal effect is not negligible ($k_B T = 0.19$ meV); many Landau levels are filled ($\varepsilon_F = 11$ meV). Recalling that the longitudinal transport involves cyclotron orbits of energy $\varepsilon_F = \frac{\hbar^2 k_F^2}{2m^*}$, i.e. of radius $R_c = k_F \ell_B^2$, argue that one expects that $\Delta\sigma_{yy}$ is (pseudo) periodic as a function of $1/B$. Give the period of these oscillations.

Explain qualitatively the data of Fig. 62 in the low magnetic field domain ($B \lesssim 0.5$ T).

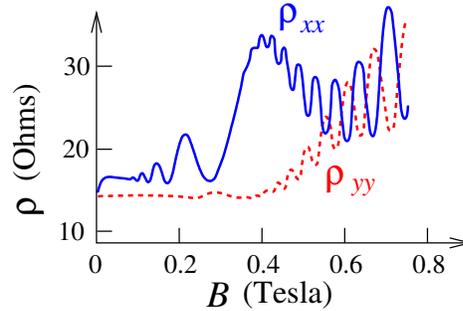


FIGURE 62 : Magneto-resistivities ρ_{xx} (continuous) and ρ_{yy} (dashed) at $T = 2.2$ K (i.e. $k_B T = 0.19$ meV). Data from : Gerhardt, et al, *Phys. Rev. Lett.* **62**, 1173 (1989).

6. BONUS : What is the origin of the rapid oscillations appearing at larger field ($B \gtrsim 0.4$ T)?

Appendix :

We recall that the grand canonical average of a commutator of many body operators, sums of one particle operators, of the form $\hat{A} = \sum_{i=1}^N \hat{a}^{(i)}$ and $\hat{B} = \sum_{i=1}^N \hat{b}^{(i)}$, is

$$\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \langle \varphi_{\alpha} | [\hat{a}, \hat{b}] | \varphi_{\alpha} \rangle = \sum_{\alpha, \beta} (f_{\alpha} - f_{\beta}) a_{\alpha\beta} b_{\beta\alpha}, \quad (455)$$

where the sum runs over one particle stationary states. $a_{\alpha\beta} = \langle \varphi_{\alpha} | \hat{a} | \varphi_{\beta} \rangle$ is a matrix element of the one particle operator and $f_{\alpha} = f(\varepsilon_{\alpha})$ denotes the occupancy of the individual eigenstate.

J.2 Solutions of the problem

A. Conductivity.

1. With the perturbation of the form $H_{\text{pert}}(t) = -e \vec{\mathcal{E}}(t) \cdot \vec{r}$, we get the conductivity for one electron as $\sigma_{ij}(t) = \frac{i}{\hbar} \theta_{\text{H}}(t) \langle [\frac{e}{\text{Surf}} v_i(t), e r_j] \rangle$.
2. The conductivity of the gas of N electrons is obtained by doing $v_i \rightarrow \sum_{a=1}^N v_i^{(a)}$ and $r_j \rightarrow \sum_{a=1}^N r_j^{(a)}$ in the correlator. Using the formula of the appendix for the grand canonical average of the commutator, we get

$$\sigma_{ij}(t) = \frac{ie^2}{\hbar \text{Surf}} \theta_{\text{H}}(t) \text{tr} \{ f(H_0) [v_i(t), r_j] \} \quad (456)$$

$$= \frac{ie^2}{\hbar \text{Surf}} \theta_{\text{H}}(t) \sum_{\alpha, \beta} (f_{\alpha} - f_{\beta}) (v_i)_{\alpha\beta} e^{i(\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\beta})t/\hbar} (r_j)_{\beta\alpha} \quad (457)$$

where the trace, running in the one electron Hilbert space, has been expanded over the one electron eigenstates; $f_{\alpha} \equiv f(\varepsilon_{\alpha})$ is the Fermi function.

The last steps are :

- (i) Fourier transform $\int dt e^{+i\omega t}$ and use $\int_0^{\infty} dt e^{i\Omega t} = \frac{1}{0^+ - i\Omega}$, where 0^+ is a regulator.
- (ii) Make use of $\vec{v} = \frac{i}{\hbar} [H_0, \vec{r}]$ to relate the matrix elements $(r_j)_{\beta\alpha} = i\hbar (v_j)_{\beta\alpha} / (\varepsilon_{\alpha} - \varepsilon_{\beta})$. We get (445).

3. The $i0^+$ is a *regulator* which shifts the pole away from the real axis of the frequency. It originates from the heaviside function, i.e. from the *causality* of the response.
4. The substitution $0^+ \rightarrow \hbar/\tau$ recalls the physical interpretation of the regulator as an infinitely small *damping rate* (here this should correspond to the relaxation of the momentum orientation due to collisions).

The formula (446) will be the starting point of the analysis in the following, assuming that it is correct to consider a constant damping rate (this is the \ll constant relaxation rate approximation \gg).

B. Conductivity of the Landau problem (case $V(x) = 0$).

1. The index α labelling the eigenstates is replaced by the quantum numbers (n, x_c) . Injecting the matrix element in (446) we get

$$\sigma_{yy} = -\frac{ie^2\hbar}{\text{Surf}} \sum_{n, x_c, m, x'_c} \frac{f_n - f_m}{\varepsilon_n - \varepsilon_m} \delta_{x_c, x'_c} \frac{\hbar\omega_c}{2m_*} \frac{(\sqrt{n+1} \delta_{m, n+1} + \sqrt{n} \delta_{m, n-1})^2}{\varepsilon_n - \varepsilon_m + i\hbar/\tau} \quad (458)$$

$$= -\frac{ie^2\hbar}{\text{Surf}} \frac{\hbar\omega_c}{2m_*} d_{\text{LL}} \left(\sum_{n=0}^{\infty} \frac{f_n - f_{n+1}}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n+1}} \frac{n+1}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n+1} + i\hbar/\tau} + \sum_{n=1}^{\infty} \frac{f_n - f_{n-1}}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1}} \frac{n}{\varepsilon_n - \varepsilon_{n-1} + i\hbar/\tau} \right)$$

$$= \frac{ie^2\hbar}{\text{Surf}} \frac{\hbar\omega_c}{2m_*} d_{\text{LL}} \left(\frac{1}{-\hbar\omega_c + i\hbar/\tau} + \frac{1}{\hbar\omega_c + i\hbar/\tau} \right) \frac{1}{\hbar\omega_c} \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} n [f_{n-1} - f_n]}_{=N/d_{\text{LL}}=n_e h/(eB) \text{ (filling factor)}} \quad (459)$$

Finally we obtain

$$\sigma_{yy} = \sigma_{xx} = \sigma_0 \frac{1}{1 + (\omega_c \tau)^2} \quad (460)$$

where $\sigma_0 = \frac{n_e e^2 \tau}{m_*}$ is the Drude conductivity.

The magnetoconductivity has the form of a Lorentzian as a function of $B \propto \omega_c$. The decay of the longitudinal conductivity comes from the effect of the Lorentz force which bends the electronic trajectories.

2. The calculation of the Hall conductivity (not asked) follows the same lines. The product of matrix element is

$$\begin{aligned} \sigma_{yy} &= \dots \left(\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \right)^2 \dots \\ &\xrightarrow{\text{replaced by}} \sigma_{xy} = \dots \left(\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} - \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \right) \left(\sqrt{n+1} \delta_{m,n+1} + \sqrt{n} \delta_{m,n-1} \right) \dots \end{aligned}$$

hence there is now a minus sign :

$$\sigma_{xy} = \dots \left(-\frac{1}{-\hbar\omega_c + i\hbar/\tau} + \frac{1}{\hbar\omega_c + i\hbar/\tau} \right) \dots \Rightarrow \sigma_{xy} = (\omega_c \tau) \sigma_{yy} = \sigma_0 \frac{\omega_c \tau}{1 + (\omega_c \tau)^2} \quad (461)$$

The inversion of the conductivity tensor reads :

$$\sigma = \sigma_0 \frac{1}{1 + (\omega_c \tau)^2} \begin{pmatrix} 1 & \omega_c \tau \\ -\omega_c \tau & 1 \end{pmatrix} \Rightarrow \rho = \frac{1}{\sigma_0} \begin{pmatrix} 1 & -\omega_c \tau \\ \omega_c \tau & 1 \end{pmatrix} \quad (462)$$

i.e. explicitly

$$\rho_{xx} = \rho_{yy} = \frac{1}{\sigma_0} \quad \text{and} \quad \rho_{yx} = -\rho_{xy} = \frac{B}{n_e e}. \quad (463)$$

C. Effect of the oscillating potential $V(x)$.— The complete Hamiltonian is now

$$H_0 = \frac{1}{2m_*} p_x^2 + \frac{1}{2} m_* \omega_c^2 \left(x - \frac{p_y}{eB} \right)^2 + V(x). \quad (464)$$

1. We can still look for eigenstates under the form $\varphi(x, y) = f(x) e^{ixcy/\ell_B^2}$.

The low energy states of the quadratic potential ($V(x) = 0$) are spread over a distance $\sim \ell_B = \sqrt{\hbar/(eB)}$. If the potential $V(x)$ is smooth at this scale (for $a \gg \ell_B$), it may be considered as constant, replaced by its value at the minimum of the quadartic potential $\rightarrow V(x_c)$, hence the spectrum of energy

$$\varepsilon_{n,x_c} \simeq \hbar\omega_c \left(n + \frac{1}{2} \right) + V(x_c). \quad (465)$$

The denegeracy of Landau levels is now lifted.

2. We write

$$\langle \varphi_{n,x_c} | \hat{v}_y | \varphi_{n,x_c} \rangle = \langle \varphi_{n,x_c} | \omega_c (x_c - \hat{x}) | \varphi_{n,x_c} \rangle = \frac{1}{m_* \omega_c} \langle \varphi_{n,x_c} | \frac{\partial}{\partial x_c} \frac{1}{2} m_* \omega_c^2 (x_c - \hat{x})^2 | \varphi_{n,x_c} \rangle$$

We may now introduce the other terms of the Hamiltonian as they do not depend on x_c :

$$\frac{1}{m_* \omega_c} \langle \varphi_{n,x_c} | \frac{\partial}{\partial x_c} \left[\frac{1}{2} m_* \hat{v}_x^2 + \frac{1}{2} m_* \omega_c^2 (x_c - \hat{x})^2 + V(\hat{x}) \right] | \varphi_{n,x_c} \rangle.$$

The partial derivative may be extracted from the quantum averaging thanks to normalisation condition $\frac{\partial}{\partial x_c} \langle \varphi_{n,x_c} | \varphi_{n,x_c} \rangle = 0$. Finally we obtain the desired relation (application of the Feynman-Hellmann theorem)

$$\langle \varphi_{n,x_c} | \hat{v}_y | \varphi_{n,x_c} \rangle = \frac{\partial \varepsilon_{n,x_c}}{\partial x_c} = \frac{V'(x_c)}{m_* \omega_c} \quad (466)$$

The fact that the Landau band is not flat anymore (degeneracy lifted) is related to the presence of a current in the y direction.

Note that the current in the other direction is not affected : $\langle \varphi_{n,x_c} | \hat{v}_x | \varphi_{n,x_c} \rangle = 0$ (it follows from the effective confinement by the quadratic potential in the x direction).

3. Off-diagonal matrix elements of the velocity operator are not changed by the introduction of the smooth $V(x)$.

Hence the non vanishing diagonal matrix elements $\langle \varphi_{n,x_c} | \hat{v}_y | \varphi_{n,x_c} \rangle$ brings an additional contribution, $\sigma_{yy} \rightarrow \sigma_{yy} + \Delta\sigma_{yy}$, to the longitudinal conductivity (446) :

$$\Delta\sigma_{yy} = \frac{e^2\tau}{\text{Surf}} \sum_{\alpha} -f'(\varepsilon_{\alpha}) |(v_y)_{\alpha\alpha}|^2 \quad (467)$$

σ_{xx} is not changed by the introduction of $V(x)$ since $(v_x)_{\alpha\alpha} = 0$.

4. We analyse the conductivity at $T = 0$. We assume $\hbar\omega_c > V_0$ for simplicity, which means that at most one oscillating Landau band may cross the Fermi level ε_F (Fig. 63).

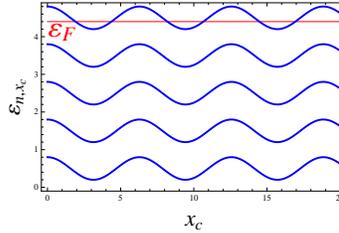


FIGURE 63 : *Landau bands.*

We can write

$$\Delta\sigma_{yy} = \frac{e^2\tau}{L_x L_y} \frac{L_y}{2\pi\ell_B^2} \int_0^{L_x} dx_c \sum_n \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{n,x_c}) \left| \frac{V'(x_c)}{m_*\omega_c} \right|^2 \quad (468)$$

Using the periodicity of the potential : $\int_0^{L_x} dx_c \rightarrow \frac{L_x}{a/2} \int_0^{a/2}$ and that $\delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{n,x_c}) = \delta(x_c - X_n)/|V'(X_n)|$, we obtain (454).

We may be more explicit by using the expression of the cosine potential. We obtain finally

$$\Delta\sigma_{yy} = \frac{2e^2}{\hbar} \frac{\ell_B^2}{a^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\tau \sqrt{V_0^2 - (\varepsilon_F - \hbar\omega_c(n + 1/2))^2}}{\hbar} \quad (469)$$

where we have reintroduced the sum over Landau bands in order to account for the case where several bands cross the Fermi level (when $\hbar\omega_c < V_0$). It is understood that the contribution is zero when the argument of the square root is negative.

Assuming that this correction remains small compare to σ_{ij} for $V(x)$, we obtain that the longitudinal resistivity are

$$\Delta\rho_{xx} \simeq \frac{\Delta\sigma_{yy}}{\sigma_{xx}^2 + \sigma_{xy}^2} \quad \text{and} \quad \Delta\rho_{yy} = 0 \quad (470)$$

In the experiment of Weiss et al, the parameters are :

- $\varepsilon_F = 11$ meV

- $0 < B < 0.8$ T, i.e. $0 < \hbar\omega_c < 1.2$ meV
- $V_0 = 0.3$ meV
- $T = 2.2$ K i.e. $k_B T = 0.19$ meV
- $\hbar/\tau = 0.013$ meV

If we plot (470) with the $T = 0$ expression (469), we obtain the Fig. 64 (the range corresponds to $0 < B < 0.8$ T).

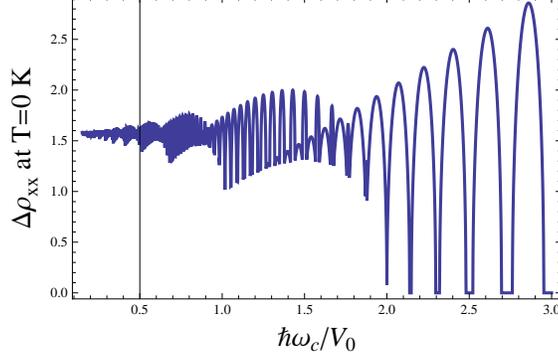


FIGURE 64 : *Weiss oscillations at $T = 0$ K.*

For a finite temperature, all the rapid oscillations are smoothed and only the smooth envelope remains.

5. The form of the smooth envelope can be understood by a semiclassical argument : the transport properties are controlled by cyclotron orbits. The electron of energy ε_F (longitudinal conductivity is a Fermi surface property) has a circular trajectory of radius $R_c = \frac{\sqrt{2\varepsilon_F/m_*}}{\omega_c} = \ell_B^2 k_F$.

The periodic potential $V(x)$ is equivalent to a periodic electric field $\vec{\mathcal{E}} = -\vec{u}_x V'(x)/e$.

If the radius is commensurate with the period, $2nR_c = a$, the electron feels an electric field with the same sign at the left and the right of the orbit, what induces a drift in the y direction, hence the anisotropy in the transport properties. The period is

$$\Delta(1/B) \sim \frac{e a}{\hbar k_F} \quad (471)$$

On the experimental data (Fig. 62), we can see that, in the low field part of the graph ($B \lesssim 0.4$ T) the resistivity ρ_{xx} oscillates while ρ_{yy} is flat. These oscillations becomes slower as B increases. This is consistent with our analysis.

6. The rapid oscillations appearing at larger magnetic field ($B \gtrsim 0.4$ T) are **Shubnikov-de Haas oscillations**.

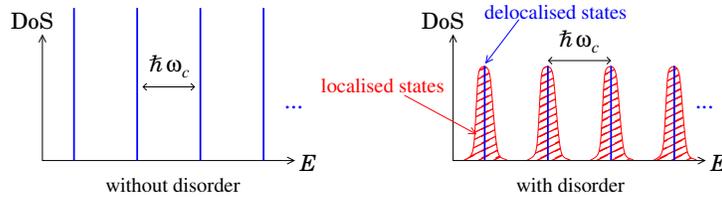


FIGURE 65 : *Landau spectrum (density of states) without and with disorder.*

The expected density of states (DoS) of a disordered 2DEG is represented on Fig. 65. The oscillations of the DoS (i.e. the quantisation of energy) are responsible for oscillations of thermodynamic quantities (like the de Haas-van Alphen effect for the magnetisation).

Concerning the transport properties : the constant relaxation rate approximation ($0^+ \rightarrow \hbar/\tau$) has led to the semi-classical (Drude-Sommerfeld) expression for $\rho_{xx} = 1/\sigma_0$ (with no oscillation). A more realistic treatment of scattering processes on the disordered potential (by self consistent Born approximation for example) shows that the conductivity presents oscillations as a function of $1/B$ similar to oscillations of thermodynamic quantities (remind that the conductivity is proportional to the DoS by the Einstein relation $\sigma_{xx} = e^2\rho(\varepsilon_F)D$). We emphasize that, contrarily to the case of thermodynamic properties, the conductivity oscillations relies crucially on the presence of disorder : it localises a fraction of eigenstates which do not participate to transport. The period of SdH oscillations is

$$\Delta(1/B) = \frac{2e}{\hbar k_F^2} = \frac{2e}{n_e h} \quad (472)$$

Remark : the study of SdH oscillations is a common experimental tool to determine the density of charge carriers at low temperature.

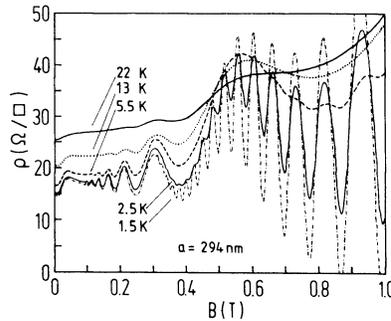


Figure 4. ρ_{xx} vs. B in the temperature range between 1.5 and 22K. The commensurability oscillations are less temperature dependent compared to the SdH-oscillations.

FIGURE 66 : From D. Weiss, « *Magnetoquantum oscillations in a lateral superlattice* » (1990).

The two types of oscillations (Weiss oscillations and SdH oscillations) do not have the same period (besides, the Weiss oscillations signals anisotropic transport). They have different temperature dependences : the SdH oscillations rapidly disappear due to thermal broadening whereas the Weiss oscillations are weakly dependent on temperature (see Fig. 66).

📖 To learn more :

- Experiment analysed here was reported in : R. R. Gerhardts, D. Weiss and K. von Klitzing, *Novel magnetoresistance oscillations in a periodically modulated two-dimensional electron gas*, Phys. Rev. Lett. **62**, 1173 (1989).
- A semiclassical theory, which is more appropriate to describe the experiment, was developed in : C. W. J. Beenakker, *Guiding-center-drift resonance in a periodically modulated two-dimensional electron gas*, Phys. Rev. Lett. **62**, 2020 (1989); R. R. Gerhardts, *Quasiclassical calculation of magnetoresistance oscillations of a 2D electron gas in an anharmonic lateral superlattice potential*, Phys. Rev. B **45**, 3449 (1989).
- A little review which may be found on the internet is : D. Weiss, « *Magnetoquantum oscillations in a lateral superlattice* », pp. 133–150, in *Electronic properties of multilayers and low-dimensional semiconductor structures*, Edited by J. M. Chamberlain et al., Plenum Press, New York, 1990.

- The detailed analysis of the Landau problem can be found in : L. Landau & E. Lifchitz, volume 3 or my book, C. Texier, « Mécanique quantique », chapter 16, 2nd edition, Dunod (2015). Discussion of the Feynman-Hellmann theorem can be found in my book as well.

K Problème : Zero sound in Helium-3

K.1 Subject of the exam

Introduction :¹²² In usual fluids, the propagation of sonic waves (first sound) is explained by compression waves where local thermal equilibrium is ensured. Dissipation arises from temperature and velocity gradients. The absorption coefficient of a wave of frequency ω is found to depend on temperature as $\Gamma_1 \sim \omega^2/T^2$; such increase at low temperature makes propagation of first sound impossible at low T . In 1957, Landau predicted the existence of another type of waves in electrically neutral Fermi liquids, which can propagate at zero temperature, hence the denomination « *zero sound* ». These waves are of different nature than first sound as they arise from Fermi distribution deformations (an out-of-equilibrium phenomenon). Dissipation of zero sound is controlled by the collision rate in Fermi liquid, which vanishes at low temperature as $\Gamma_0 \sim T^2$.

Parts A & B are (almost) independent

A. Compressibility of non-interacting Fermions.— We first derive the compressibility of the Fermi gas within the model of non-interacting free fermions. The one-body Hamiltonian is simply

$$\hat{H}_0^{(\text{one body})} = \frac{\hat{p}^2}{2m_*} \quad (473)$$

where m_* is the effective mass. Eigenstates are simply the plane waves $\varphi_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}$ of energy $\varepsilon_{\vec{k}} = \vec{k}^2/(2m_*)$, with $\hbar = 1$ (V is the volume; we recall that the momentum is quantised in finite volume). We introduce the Fourier component of the one body density operator

$$\hat{n}_{\vec{q}} \stackrel{\text{def}}{=} \int_V d^3\vec{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} \hat{n}(\vec{r}) = e^{-i\vec{q}\cdot\hat{\vec{r}}} \quad (474)$$

where $\hat{\vec{r}}$ is the position operator.

1/ Calculate the matrix element $\langle \varphi_{\vec{k}} | \hat{n}_{\vec{q}} | \varphi_{\vec{k}'} \rangle$.

2/ An external scalar potential is applied, leading to the perturbation Hamiltonian

$$\hat{H}_{\text{ext}}(t) = \int d^3\vec{r} \hat{n}(\vec{r}) V^{\text{ext}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \hat{n}_{-\vec{q}} V_{\vec{q}}^{\text{ext}}(t). \quad (475)$$

The compressibility is defined by

$$\langle \hat{n}_{\vec{q}}(t) \rangle_{V^{\text{ext}}} = \langle \hat{n}_{\vec{q}} \rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi_{\vec{q}}(t-t') V_{\vec{q}}^{\text{ext}}(t') + \dots \quad (476)$$

Express the response function as an equilibrium correlation function.

3/ We denote by $\chi_0(\vec{q}, \omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \chi_{\vec{q}}(t)$ the compressibility of the *fermion gas* where $\chi_{\vec{q}}(t)$ now denotes the response function of the *many body* problem. Express it in terms of the matrix elements of the one body operator of question 1 (Hint : use appendix).

4/ Show that $\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_0(\vec{q}, \omega)$ is related to the density of states ν_0 per unit volume at Fermi energy ε_F , assuming that the temperature is small compared to the Fermi energy, $k_B T \ll \varepsilon_F$. Justify physically the sign.

¹²²Sujet d'examen du 6 janvier 2016.

B. Interacting Fermions.– We first reformulate the result of part **A** by introducing the notation

$$\delta n(\vec{q}, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \int dt e^{i\omega t} (\langle \hat{n}_{\vec{q}}(t) \rangle_{V^{\text{ext}}} - \langle \hat{n}_{\vec{q}} \rangle) \quad (477)$$

for the extra density induced by the external perturbation in the gas. $\delta n(\vec{q}, \omega)$ is controlled by the compressibility $\chi_0(\vec{q}, \omega)$ studied in part **A** :

$$\delta n(\vec{q}, \omega) = \chi_0(\vec{q}, \omega) V^{\text{ext}}(\vec{q}, \omega). \quad (478)$$

We now consider a fluid of **interacting fermions** described by the many-body Hamiltonian

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{\text{int}} = \hat{H}_0 + \frac{1}{2} \int d^3\vec{r} d^3\vec{r}' \hat{n}(\vec{r}) u(\vec{r} - \vec{r}') \hat{n}(\vec{r}'). \quad (479)$$

Due to the interaction, a variation of the density produces a contribution to the potential :

$$V^{\text{Hartree}}(\vec{r}) = \frac{\delta H_{\text{int}}}{\delta n(\vec{r})} = \int d^3\vec{r}' u(\vec{r} - \vec{r}') n(\vec{r}'). \quad (480)$$

We now follow a *self consistent* approach in order to determine the compressibility $\chi(\vec{q}, \omega)$ for the interacting fermions. Introducing $\tilde{u}(\vec{q}) = \int_V d^3\vec{r} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} u(\vec{r})$, we write the total potential as

$$V^{\text{tot}}(\vec{q}, \omega) = V^{\text{ext}}(\vec{q}, \omega) + V^{\text{Hartree}}(\vec{q}, \omega) = V^{\text{ext}}(\vec{q}, \omega) + \tilde{u}(\vec{q}) \delta n(\vec{q}, \omega). \quad (481)$$

In the self consistent approach, one replaces Eq. (478) of part **A** by the equation

$$\delta n(\vec{q}, \omega) = \chi_0(\vec{q}, \omega) V^{\text{tot}}(\vec{q}, \omega). \quad (482)$$

1/ Deduce the expression of the compressibility of the interacting gas, defined by $\delta n(\vec{q}, \omega) = \chi(\vec{q}, \omega) V^{\text{ext}}(\vec{q}, \omega)$. Express $\chi(\vec{q}, \omega)$ in terms of $\chi_0(\vec{q}, \omega)$ and $\tilde{u}(\vec{q})$.

A lengthy calculation shows that the compressibility for the non-interacting fermions found in part **A** is $\chi_0(\vec{q}, \omega) \simeq +\nu_0 \frac{1}{3} \left(\frac{v_F q}{\omega}\right)^2$ for $v_F q \ll \omega$, where $q \stackrel{\text{def}}{=} \|\vec{q}\|$ and v_F is the Fermi velocity.

For **electrically neutral** fermions like Helium-3 atoms, interaction can be considered purely local, i.e $\tilde{u}(\vec{q}) \simeq \tilde{u}(0) = \text{cst}$.

2/ Show that the compressibility presents the behaviour

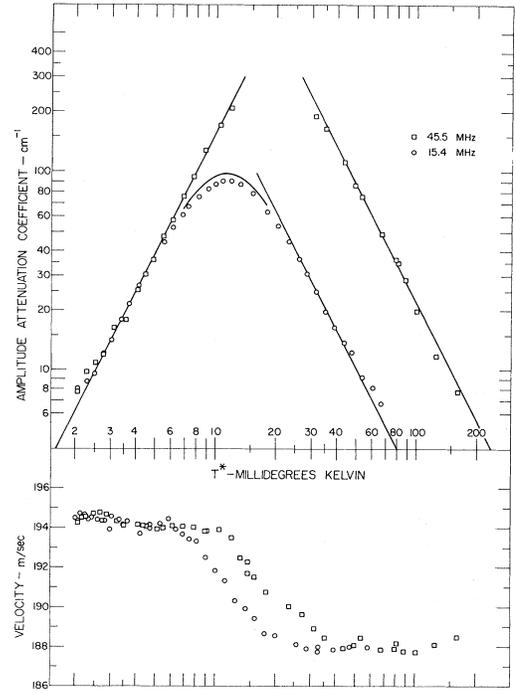
$$\chi(\vec{q}, \omega) \propto \frac{q^2}{\omega^2 - \omega_0(q)^2}. \quad (483)$$

Discuss the physical meaning of such a structure. Identify an important aspect which has been forgotten in this derivation and correct the expression.

3/ We recall the expressions of the density of states $\nu_0 = m_* k_F / (\pi \hbar)^2$ and the fermion density $n = k_F^3 / (3\pi^2)$. Identify the speed of zero sound c_0 in the dispersion relation and express it as a function of n , m_* and the interaction strength $\tilde{u}(0)$.

FIGURE 1 : *Dissipation rate and celerity of sound waves in liquid Helium-3 at $p = 0.32$ atm as a function of temperature.*

From : W. R. Abel, A. C. Anderson and J. C. Wheatley, « *Propagation of zero sound in He^3 at low temperatures* », Phys. Rev. Lett. **17**, 74 (1966).



4/ Discuss the experimental result of Fig. 1 (at the light of the discussion of the introduction).

5/ A.N. : The Fermi velocity given in the article is $v_F = 54$ m/s. Deduce the value of the interaction strength $\tilde{u}(0)$ in meV.nm³ (we recall that the proton mass is $m_p = 1.67 \times 10^{-27}$ kg).

6/ BONUS : Comparison with electrically charged Fermi liquid.— We now compare the previous discussion with the case of *charged* Fermi liquids. In this case the interaction is the Coulomb interaction $\tilde{u}(\vec{q}) = 4\pi e^2/q^2$, where $e^2 = q_e^2/(4\pi\epsilon_0) = 1.44$ eV.nm. Given that the two first terms of the expansion of the compressibility of the free fermion gas are

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) \simeq +\nu_0 \left[\frac{1}{3} \left(\frac{v_F q}{\omega} \right)^2 + \frac{1}{5} \left(\frac{v_F q}{\omega} \right)^4 \right] \quad \text{for } v_F q \ll \omega, \quad (484)$$

analyse the compressibility $\chi(\vec{q}, \omega)$ in this case (show that it involves the characteristic frequency $\omega_p = \sqrt{4\pi n e^2/m_*}$). Deduce a new dispersion relation $\omega_{p1}(q)$. Compare with the dispersion relation of the neutral Fermi liquid. Estimate ω_p for $n \simeq 6 \times 10^{28}$ m⁻³ and $m_* \simeq 10^{-30}$ kg (electrons in silver).

☞ Appendix :

We recall that the grand canonical average of a commutator of many body operators, sums of one particle operators, of the form $\hat{A} = \sum_{i=1}^N \hat{a}^{(i)}$ and $\hat{B} = \sum_{i=1}^N \hat{b}^{(i)}$, is

$$\langle [\hat{A}, \hat{B}] \rangle = \sum_{\alpha} f_{\alpha} \langle \varphi_{\alpha} | [\hat{a}, \hat{b}] | \varphi_{\alpha} \rangle = \sum_{\alpha, \beta} (f_{\alpha} - f_{\beta}) a_{\alpha\beta} b_{\beta\alpha}, \quad (485)$$

where the sum runs over one particle stationary states. $a_{\alpha\beta} = \langle \varphi_{\alpha} | \hat{a} | \varphi_{\beta} \rangle$ is a matrix element of the one particle operator and $f_{\alpha} = f(\epsilon_{\alpha})$ denotes the occupancy of the individual eigenstate.

K.2 Solutions of the problem

A. Compressibility of non-interacting Fermions.

1/ Preliminary : we need the matrix element

$$\langle \varphi_{\vec{k}} | \hat{n}_{\vec{q}} | \varphi_{\vec{k}'} \rangle = \int_V \frac{d^3\vec{r}}{V} e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r}} e^{i\vec{k}'\cdot\vec{r}} = \delta_{\vec{k}', \vec{k}+\vec{q}}$$

2/ Within the notations of the course : $f(t) \rightarrow V_{\vec{q}}^{\text{ext}}(t)$, $A \rightarrow -(1/V)\hat{n}_{-\vec{q}}$ and $B \rightarrow \hat{n}_{\vec{q}}$, thus the response function is

$$\chi_{\vec{q}}(t) = -\frac{i}{V} \theta_{\text{H}}(t) \langle [\hat{n}_{\vec{q}}(t), \hat{n}_{-\vec{q}}] \rangle \quad (486)$$

3/ Using the formula of the appendix we get

$$\begin{aligned} \chi_0(\vec{q}, \omega) &= -\frac{i}{V} \int_0^\infty dt e^{i(\omega-0^+)t} \sum_{\vec{k}, \vec{k}'} (f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}'}) e^{i\varepsilon_{\vec{k}}t} \langle \varphi_{\vec{k}} | \hat{n}_{\vec{q}} | \varphi_{\vec{k}'} \rangle e^{-i\varepsilon_{\vec{k}'}t} \langle \varphi_{\vec{k}'} | \hat{n}_{-\vec{q}} | \varphi_{\vec{k}} \rangle \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+\vec{q}}}{\omega + \varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + i0^+} \end{aligned}$$

4/ We first consider the limit $\omega \rightarrow 0$, then

$$\chi_0(\vec{q}, 0) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{f_{\vec{k}} - f_{\vec{k}+\vec{q}}}{\varepsilon_{\vec{k}} - \varepsilon_{\vec{k}+\vec{q}}}$$

(the regulator is not needed as the fraction is regular for $\vec{q} \rightarrow 0$). In the small wavevector limit we can write

$$\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \chi_0(\vec{q}, 0) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{\partial f_{\vec{k}}}{\partial \varepsilon_{\vec{k}}} \simeq -\frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \delta(\varepsilon_F - \varepsilon_{\vec{k}}) = -\nu_0$$

(in usual metals we can always assume $k_B T \ll \varepsilon_F$). The negative sign is interpreted as follows : a positive uniform static potential changes the spectrum as $\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\vec{k}^2}{2m_*} \rightarrow \varepsilon_{\vec{k}} = \frac{\vec{k}^2}{2m_*} + V^{\text{ext}}$. At fixed ε_F , the electron density is thus diminished by $\delta n \simeq -\nu_0 V^{\text{ext}}$.

Remark : Note that the two limits do not commute. We see from (484) that $\lim_{\vec{q} \rightarrow 0} \chi_0(\vec{q}, \omega) = 0$.

B. Interacting Fermions.

1/ We use the self consistent argument : we replace $\delta n(\vec{q}, \omega) = \chi_0(\vec{q}, \omega) V^{\text{ext}}(\vec{q}, \omega)$ for the non-interacting fermions by $\delta n(\vec{q}, \omega) = \chi_0(\vec{q}, \omega) V^{\text{tot}}(\vec{q}, \omega)$, thus

$$\delta n(\vec{q}, \omega) = \chi_0(\vec{q}, \omega) [V^{\text{ext}}(\vec{q}, \omega) + \tilde{u}(\vec{q}) \delta n(\vec{q}, \omega)]$$

leading to

$$\delta n(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{\underbrace{1 - \chi_0(\vec{q}, \omega) \tilde{u}(\vec{q})}_{=\chi(\vec{q}, \omega)}} V^{\text{ext}}(\vec{q}, \omega)$$

This coincides with the RPA approximation

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{1/\chi_0(\vec{q}, \omega) - \tilde{u}(\vec{q})} \quad (487)$$

2/ Assuming constant interaction and using the expansion of the free compressibility we get

$$\chi(\vec{q}, \omega) \simeq \frac{1}{\frac{3}{\nu_0} \left(\frac{\omega}{v_F q}\right)^2 - \tilde{u}(0)} = \frac{\nu_0 v_F^2}{3} \frac{q^2}{\omega^2 - (\nu_0/3)v_F^2 \tilde{u}(0) q^2}$$

Defining $c_0 \stackrel{\text{def}}{=} v_F \sqrt{\nu_0 \tilde{u}(0)/3}$ and re-introducing the regulator ensuring causality we obtain

$$\chi(\vec{q}, \omega) \simeq \frac{\nu_0}{3} \frac{(v_F q)^2}{(\omega + i0^+)^2 - c_0^2 q^2} \quad (488)$$

The resonance line in the plane (q, ω) corresponds to the spectrum of *collective excitations* with a *linear* dispersion relation $\omega = \omega_0(q) = c_0 q$ (like usual sound). Since we are studying density modulations, these collective excitations are density waves mediated by the interaction : this is the zero sound.

3/ Using the expression of the DoS and the density we can rewrite the zero sound velocity as

$$c_0 = \sqrt{\frac{n \tilde{u}(0)}{m_*}} = v_F \sqrt{\frac{\nu_0 \tilde{u}(0)}{3}}. \quad (489)$$

The measure of sound velocity directly provides the interaction strength. Nice !

4/ The experimental data shows a clear crossover between the dissipation rate $\Gamma_1 \sim \omega^2/T^2$ characteristic for first sound (high T) to the collision rate $\Gamma_0 \sim T^2$ (low T) between fermions controlling the damping of zero sound. This is a clear indication that sound waves characterised by celerity $c_0 \simeq 194$ m/s (for $T \lesssim 10$ mK) is zero sound.

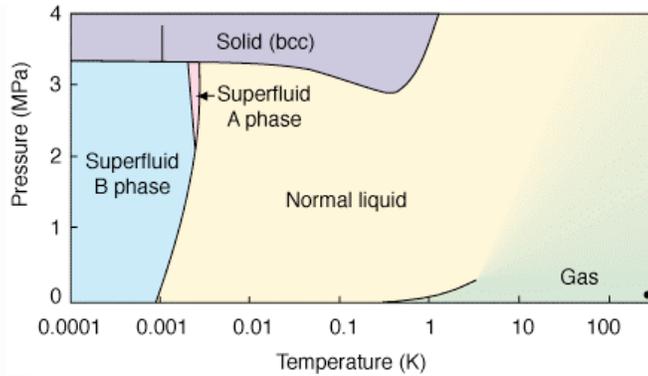


FIGURE 2 : Phase diagram of Helium-3. Experiment was realised at $p = 0.32$ atm.

5/ A.N. : Given the Fermi velocity $v_F = 54$ m/s (measured by Wheatley) we deduce the Fermi energy $\varepsilon_F = 45 \mu\text{eV}$ ($T_F = 0.53$ K), the Fermi wavevector $k_F = 2.7 \text{ nm}^{-1}$ and the density $n = k_F^3/(3\pi^2) = 0.66 \text{ nm}^{-3}$ (this corresponds to a volumic mass $\rho = 3.3$ g/liter).¹²³

The density of states is $\nu_0 = 3n/(2\varepsilon_F) = 22 \text{ meV}^{-1}.\text{nm}^{-3}$.

In the experiment, Abel *et alter* measured the zero sound velocity $c_0 \simeq 194$ m/s, thus $\tilde{u}(0)\nu_0 \simeq 39$ i.e. $\tilde{u}(0) \simeq 1.76 \text{ meV}.\text{nm}^3$.

¹²³ Temperature and pressure dependences of the density of Helium-3 were studied in the article : J. E. Rives and H. Meyer, Phys. Rev. Lett. **7**, 217 (1961).

Note that Helium-3 boils at $T = 3.19$ K (at $p = 1$ atm). At the boiling point, the mass per unit volume is $\rho = 59$ g/liter (Wikipedia).

Remark : The form $\chi_0 \simeq \frac{1}{3}\nu_0 \left(\frac{v_F q}{\omega}\right)^2$ is only the first term of the expansion (484). If instead of one term, one has kept the two first terms, the denominator of χ would take the form

$$\omega^2 [1 - \chi_0(\vec{q}, \omega) \tilde{u}(0)] = \frac{1}{\omega^2}(\omega^2 - \lambda_+)(\omega^2 - \lambda_-)$$

with $\lambda_{\pm} = (c_0 q)^2 \frac{1}{2} [1 \pm \sqrt{1 + 36/(5\tilde{u}(0)\nu_0)}]$. For $\tilde{u}(0)\nu_0 \gg 1$, the denominator then reads

$$\omega^2 [1 - \chi_0(\vec{q}, \omega) \tilde{u}(0)] \simeq (\omega^2 - (c_0 q)^2) \frac{\omega^2 + 9(c_0 q)^2/(5\tilde{u}(0)\nu_0)}{\omega^2} \simeq \omega^2 - (c_0 q)^2,$$

for small q and finite ω . The calculation performed above is thus valid in the limit $\tilde{u}(0)\nu_0 \gg 1$.

6/ Electrically charged Fermi liquids.— If we introduce the Coulomb interaction in the RPA compressibility, we obtain a completely different result,

$$\chi(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 - \chi_0(\vec{q}, \omega) 4\pi e^2/q^2} = \frac{\nu_0}{3} \frac{(v_F q)^2 + \dots}{\omega^2 - 4\pi e^2 \nu_0 v_F^2 \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{5} \left(\frac{v_F q}{\omega}\right)^2 + \dots \right]}, \quad (490)$$

as the q^2 in χ_0 simplifies with the $1/q^2$ in \tilde{u} . As for neutral fermions, we must identify the pole.

a) **Shortcut** : for $q \rightarrow 0$ the denominator is simply $\omega^2 - \omega_p^2$ where we have introduced the *plasma* frequency $\omega_p \stackrel{\text{def}}{=} v_F \sqrt{4\pi e^2 \nu_0/3} = \sqrt{4\pi n e^2/m_*}$. For finite q we may therefore simply replace the $1/\omega^2$ by $1/\omega_p^2$ in the denominator of (490). Thus, reintroducing the regulator ensuring causality, we deduce

$$\boxed{\chi(\vec{q}, \omega) \simeq \frac{\nu_0}{3} \frac{(v_F q)^2}{(\omega + i0^+)^2 - \omega_p^2 - (3/5)(v_F q)^2}}$$

We deduce the dispersion relation for the plasmon modes

$$\omega_{\text{pl}}(q) = \sqrt{\omega_p^2 + c_p^2 q^2} \quad \text{with} \quad c_p = v_F \sqrt{\frac{3}{5}},$$

characterising *charge density waves*. For silver we obtain $\omega_p \simeq 1.3 \times 10^{16} \text{ s}^{-1} = 8.1 \text{ eV}$, i.e. a very big gap.

b) **Direct analysis** : If you prefer, you can write

$$\omega^2 - 4\pi e^2 \nu_0 v_F^2 \left[\frac{1}{3} + \frac{1}{5} \left(\frac{v_F q}{\omega}\right)^2 \right] = \frac{1}{\omega^2}(\omega^2 - \lambda_+)(\omega^2 - \lambda_-)$$

with now $\lambda_{\pm} = \omega_p^2 \frac{1}{2} [1 \pm \sqrt{1 + (12/5)(v_F q/\omega_p)^2}]$. Hence the denominator of (490) is

$$\simeq \left(\omega^2 - \omega_p^2 - \frac{3}{5}(v_F q)^2 \right) \frac{\omega^2 + (3/5)(v_F q)^2}{\omega^2} \simeq \omega^2 - \omega_p^2 - (3/5)(v_F q)^2$$

for small q and finite ω .

Références

- [1] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello and T. V. Ramakrishnan, Scaling theory of localization : absence of quantum diffusion in two dimensions, *Phys. Rev. Lett.* **42**(10), 673 (1979).
- [2] Y. Aharonov and D. Bohm, Significance of electromagnetic potentials in the quantum mechanics, *Phys. Rev.* **115**(3), 485–491 (1959).
- [3] E. Akkermans, A. Comtet, J. Desbois, G. Montambaux and C. Texier, On the spectral determinant of quantum graphs, *Ann. Phys. (N.Y.)* **284**, 10–51 (2000).
- [4] E. Akkermans, P. E. Wolf and R. Maynard, Coherent Backscattering of Light by Disordered Media : Analysis of the Peak Line Shape, *Phys. Rev. Lett.* **56**(14), 1471–1474 (1986).
- [5] B. L. Al'tshuler and A. G. Aronov, Magnetoresistance of thin films and of wires in a longitudinal magnetic field, *JETP Lett.* **33**(10), 499 (1981).
- [6] B. L. Altshuler and A. G. Aronov, Electron-electron interaction in disordered conductors, in *Electron-electron interactions in disordered systems*, edited by A. L. Efros and M. Pollak, p. 1, North-Holland (1985).
- [7] B. L. Altshuler, A. G. Aronov and D. E. Khmel'nitsky, Effects of electron-electron collisions with small energy transfers on quantum localisation, *J. Phys. C : Solid St. Phys.* **15**, 7367 (1982).
- [8] B. L. Al'tshuler and P. A. Lee, Disordered Electronic Systems, *Physics Today* **41**, 36 (december 1988).
- [9] P. W. Anderson, Absence of diffusion in certain random lattices, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [10] C. W. J. Beenakker, Random-matrix theory of quantum transport, *Rev. Mod. Phys.* **69**(3), 731–808 (1997).
- [11] V. L. Berezinskiĭ, Kinetics of a quantum particle in a one-dimensional random potential, *Sov. Phys. JETP* **38**(3), 620 (1974), [*Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **65**, 1251 (1973)].
- [12] V. L. Berezinskiĭ and L. P. Gor'kov, On the theory of electrons localized in the field of defects, *Sov. Phys. JETP* **50**(6), 1209 (1979).
- [13] G. Bergmann, Consistent temperature and field dependence in weak localization, *Phys. Rev. B* **28**(2), 515 (1983).
- [14] G. Bergmann, Weak localization in thin films, *Phys. Rep.* **107**(1), 1–58 (1984).
- [15] Ya. M. Blanter and M. Büttiker, Shot noise in mesoscopic conductors, *Phys. Rep.* **336**(1-2), 1–166 (2000).
- [16] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Quantum tunnelling in a dissipative system, *Ann. Phys. (N.Y.)* **149**, 374 (1983).
- [17] H. B. Callen and T. A. Welton, Irreversibility and Generalized noise, *Phys. Rev.* **83**(1), 34 (1951).
- [18] S. Chakravarty and A. Schmid, Weak localization : the quasiclassical theory of electrons in a random potential, *Phys. Rep.* **140**(4), 193 (1986).

- [19] A. Comtet, J. Desbois and C. Texier, Functionals of the Brownian motion, localization and metric graphs, *J. Phys. A : Math. Gen.* **38**, R341–R383 (2005).
- [20] O. N. Dorokhov, Solvable model of multichannel localization, *Phys. Rev. B* **37**(18), 10526–10541 (1988).
- [21] M. Dressel, A. Schwartz, G. Grüner and L. Degiorgi, Deviations from Drude response in low-dimensional metals : electrodynamics of the metallic state of (TMTSF)₂PF₆, *Phys. Rev. Lett.* **77**(2), 398 (1996).
- [22] S. F. Edwards and P. W. Anderson, Theory of spin glasses, *J. Phys. F : Metal Phys.* **5**(5), 965–974 (1975).
- [23] V. J. Emery, Critical properties of many-component systems, *Phys. Rev. B* **11**(1), 239–247 (1975).
- [24] M. E. Gershenson, Yu. B. Khavin, A. Mikhailchuk, H. M. Bolzer and A. L. Bogdanov, Crossover from Weak to Strong Localization in Quasi-One-Dimensional Conductors, *Phys. Rev. Lett.* **79**(4), 725 (1997).
- [25] G. Grüner, The dynamics of charge-density waves, *Rev. Mod. Phys.* **60**(4), 1129–1181 (1988).
- [26] G.-L. Ingold, Path integrals and their application to dissipative quantum systems, in *Coherent Evolution in Noisy Environments*, edited by A. Buchleitner and K. Hornberger, Lecture Notes in Physics, Vol. 611, p. 1, Springer (2002), (also available as quant-ph/0208026).
- [27] G.-L. Ingold and Yu. V. Nazarov, Charge tunneling rates in ultrasmall junctions, in *Single charge tunneling*, edited by H. Grabert and M. H. Devoret, pp. 21–106, Plenum Press (1992).
- [28] A. F. Ioffe and A. R. Regel, *Prog. Semicond.* **4**, 237 (1960).
- [29] R. Jackiw, δ -function potentials in two- and three-dimensional quantum mechanics, in *M. A. B. Bég memorial volume*, edited by A. Ali and P. Hoodbhoy, p. 1, World Scientific, Singapore (1991).
- [30] J. B. Johnson, Thermal Agitation of Electricity in Conductors, *Phys. Rev.* **32**(1), 97–109 (1928).
- [31] R. H. Koch, D. J. van Harlingen and J. Clarke, Quantum-noise theory for the resistively shunted Josephson junction, *Phys. Rev. Lett.* **45**(26), 2132 (1980).
- [32] R. H. Koch, D. J. van Harlingen and J. Clarke, Observation of zero-point fluctuations in a resistively shunted Josephson tunnel junction, *Phys. Rev. Lett.* **47**(17), 1216 (1981).
- [33] W. Kohn, Image of the Fermi Surface in the Vibration Spectrum of a Metal, *Phys. Rev. Lett.* **2**(9), 393–394 (1959).
- [34] J. Kurchan, Non-equilibrium work relations, *J. Stat. Mech.* p. P07005 (2007).
- [35] M. Lax, Quantum noise. IV. Quantum theory of noise sources, *Phys. Rev.* **145**(1), 110 (1966).
- [36] A. J. Leggett, S. Chakravarty, A. T. Dorsey, M. P. A. Fisher, A. Garg and W. Zwerger, Dynamics of the dissipative two-state system, *Rev. Mod. Phys.* **59**(1), 1–85 (1987).

- [37] J. C. Licini, G. J. Dolan and D. J. Bishop, Weakly Localized Behavior in Quasi-One-Dimensional Li Films, *Phys. Rev. Lett.* **54**(14), 1585 (1985).
- [38] U. M. B. Marconi, A. Puglisi, L. Rondoni and A. Vulpiani, Fluctuation-dissipation : Response theory in statistical physics, *Physics Reports* **461**(4-6), 111–195 (2008).
- [39] L. Marton, J. Arol Simpson, H. A. Fowler and N. Swanson, Plural scattering of 20-keV electrons in Aluminium, *Phys. Rev.* **126**(1), 182 (1962).
- [40] P. A. Mello, P. Pereyra and N. Kumar, Macroscopic approach to multichannel disordered conductors, *Ann. Phys. (N.Y.)* **181**, 290–317 (1988).
- [41] N. D. Mermin and H. Wagner, Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models, *Phys. Rev. Lett.* **17**(22), 1133–1136 (1966).
- [42] H. A. Mook and C. R. Watson Jr., Neutron inelastic scattering study of Tetrathiafulvalene Tetracyanoquinodimethane (TTF-TCNQ), *Phys. Rev. Lett.* **36**(14), 801–803 (1976).
- [43] H. Nyquist, Thermal agitation of electric charge in conductors, *Phys. Rev.* **32**(1), 110–113 (1928).
- [44] B. Renker, H. Rietschel, L. Pintschovius, W. Gläser, P. Brüesch, D. Kuse and M. J. Rice, Observation of giant Kohn anomaly in the one-dimensional conductor $K_2Pt(CN)_4Br_{0.3} \cdot 3H_2O$, *Phys. Rev. Lett.* **30**(22), 1144–1147 (1973).
- [45] B. Reulet, *Susceptibilité magnétique orbitale et conductance AC d’anneaux mésoscopiques isolés*, Ph.D. thesis, Université Paris 11 (1994), *Ann. Phys. (France)* **20**, 233 (1995).
- [46] R. J. Schoelkopf, A. A. Clerk, S. M. Girvin, K. W. Lehnert and M. H. Devoret, Qubits as spectrometers of quantum noise, in *Quantum Noise*, edited by Ya. M. Blanter and Yu. V. Nazarov, Kluwer (2002), preprint cond-mat/02 10 247.
- [47] I. R. Senitzky, Dissipation in Quantum Mechanics. The Harmonic Oscillator, *Phys. Rev.* **119**(2), 670 (1960).
- [48] P. C. Snijders and H. H. Weitering, Electronic instabilities in self-assembled atom wires, *Rev. Mod. Phys.* **82**, 307–329 (2010).
- [49] P. Středa, Theory of quantised Hall conductivity in two dimensions, *J. Phys. C : Solid St. Phys.* **15**, L717 (1982).
- [50] P. Středa and L. Smrčka, Transport coefficient in strong magnetic fields, *J. Phys. C : Solid St. Phys.* **16**, L895 (1983).
- [51] C. Texier, ζ -regularised spectral determinants for metric graphs, *J. Phys. A : Math. Theor.* **43**, 425203 (2010).
- [52] C. Texier, P. Delplace and G. Montambaux, Quantum oscillations and decoherence due to electron-electron interaction in networks and hollow cylinders, *Phys. Rev. B* **80**, 205413 (2009).
- [53] G. A. Toombs, Quasi-one-dimensional conductors, *Phys. Rep.* **40**(2), 181–240 (1978).
- [54] M. Treiber, C. Texier, O. M. Yevtushenko, J. von Delft and I. V. Lerner, Thermal noise and dephasing due to electron interactions in non-trivial geometries, *Phys. Rev. B* **84**, 054204 (2011).

- [55] N. Trivedi and D. A. Browne, Mesoscopic ring in a magnetic field : reactive and dissipative response, *Phys. Rev. B* **38**(14), 9581 (1988).
- [56] D. Vollhardt and P. Wölfle, Diagrammatic, self-consistent treatment of the Anderson localization problem in $d \leq 2$ dimensions, *Phys. Rev. B* **22**(10), 4666 (1980).
- [57] F. Wegner, The mobility edge problem : continuous symmetry and a conjecture, *Z. Phys. B* **35**(3), 207 (1979).
- [58] P.-E. Wolf and G. Maret, Weak Localization and Coherent Backscattering of Photons in Disordered Media, *Phys. Rev. Lett.* **55**(24), 2696–2699 (1985).
- [59] B. Yurke, Quantizing the damped harmonic oscillator, *Am. J. Phys.* **54**(12), 1133 (1986).
- [60] B. Yurke and J. S. Denker, Quantum network theory, *Phys. Rev. A* **29**(3), 1419–1437 (1984).

Livres

- [61] É. Akkermans and G. Montambaux, *Physique mésoscopique des électrons et des photons*, EDP Sciences, CNRS éditions (2004).
- [62] E. Akkermans and G. Montambaux, *Mesoscopic physics of electrons and photons*, Cambridge University Press (2007).
- [63] A. Altland and B. Simons, *Condensed matter field theory*, Cambridge University Press (2006).
- [64] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College (1976).
- [65] R. Balian, *From microphysics to macrophysics. Volume I*, Springer, Berlin (1992).
- [66] R. Balian, *From microphysics to macrophysics. Volume II*, Springer, Berlin (1992).
- [67] J.-L. Basdevant and J. Dalibard, *Mécanique quantique*, Les éditions de l'École polytechnique, Palaiseau (2004).
- [68] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-body quantum theory in condensed matter physics*, Oxford University Press (2004).
- [69] R. Castaing, *Thermodynamique statistique*, Masson, Paris (1970).
- [70] C. Cohen-Tannoudji, *Cours de physique atomique et moléculaire*, Collège de France, Paris (1977-78).
- [71] C. Cohen-Tannoudji, *Cours de physique atomique et moléculaire : cohérence quantique et dissipation*, Collège de France, Paris (1988–89 et 1989–90).
- [72] C. Cohen-Tannoudji, B. Diu and F. Laloë, *Mécanique Quantique*, Hermann, Paris (1973), tomes 1 et 2.
- [73] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc and G. Grynberg, *Processus d'interaction entre photons et atomes*, Interéditions/Éditions du CNRS (1988).

- [74] B. Diu, C. Guthman, D. Lederer and B. Roulet, *Physique Statistique*, Hermann, Paris (1989).
- [75] K. Efetov, *Supersymmetry in disorder and chaos*, Cambridge University Press (1997).
- [76] A. L. Efros and M. Pollak (editors), *Electron-electron interactions in disordered systems*, North-Holland (1985).
- [77] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems*, McGraw-Hill (1971).
- [78] R. P. Feynman, *Le Cours de physique de Feynman : Électromagnétisme, tome 2*, InterÉditions, Paris (1979), réédité par Dunod.
- [79] C. W. Gardiner, *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and the natural sciences*, Springer (1989).
- [80] C. W. Gardiner and P. Zoller, *Quantum noise : a handbook of Markovian and non-Markovian quantum stochastic methods with applications to quantum optics*, Springer (2004).
- [81] A. Georges and M. Mézard, *Physique Statistique*, édité par l'École Polytechnique, Palaiseau (2008), ISBN 978-2-7302-1484-1.
- [82] G. F. Giuliani and G. Vignale, *Quantum theory of the electron liquid*, Cambridge University Press (2005).
- [83] G. Grüner, *Density waves in solids*, Perseus, Cambridge (1994).
- [84] K. Huang, *Statistical mechanics*, John Wiley & Sons, New York (1963).
- [85] A. Ishimaru, *Wave propagation and scattering in random media*, Academic Press, New York (1978).
- [86] C. Itzykson and J.-M. Drouffe, *Théorie statistique des champs*, Interéditions–CNRS, Paris (1989), Tomes 1 et 2.
- [87] C. Kittel, *Physique de l'état solide*, Dunod (1994), 5ème édition.
- [88] H. Krivine, *Exercices de mathématiques pour physiciens*, Cassini, Paris (2003).
- [89] R. Kubo, M. Toda and N. Hashitsume, *Statistical physics II : non-equilibrium statistical mechanics*, Springer-Verlag (1992).
- [90] L. D. Landau and E. Lifchitz, *Physique statistique*, Mir (1966), tome 5.
- [91] M. Le Bellac, *Physique quantique*, EDP Sciences – CNRS Éditions (2003).
- [92] M. Le Bellac, F. Mortessagne and G. G. Batrouni, *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics*, Cambridge University Press (2004).
- [93] L.-P. Lévy, *Magnétisme et supraconductivité*, CNRS-InterÉditions, Paris (1997).
- [94] E. Lifchitz and L. P. Pitaevskii, *Cours de physique théorique de Landau & Lifchitz, tome 9. Physique statistique, deuxième partie : théorie de l'état condensé*, Mir (1990).
- [95] I. M. Lifshits, S. A. Gredeskul and L. A. Pastur, *Introduction to the theory of disordered systems*, John Wiley & Sons (1988).

- [96] J.-M. Luck, *Systèmes désordonnés unidimensionnels*, CEA, collection Aléa Saclay, Saclay (1992).
- [97] S.-K. Ma, *Statistical mechanics*, World Scientific, Singapore (1985).
- [98] G. D. Mahan, *Many-particle physics*, Plenum Press, New York (1990).
- [99] G. Montambaux, *Conducteurs quasi-unidimensionnels* (2000), cours de l'École polytechnique.
- [100] Yu. V. Nazarov and Ya. M. Blanter, *Quantum transport – Introduction to nanoscience*, Cambridge University Press (2009).
- [101] H. M. Nussenzveig, *Causality and dispersion relations*, Academic Press, New York (1972).
- [102] R. K. Pathria and P. D. Beale, *Statistical mechanics*, Academic Press, Elsevier (2011), 3rd edition.
- [103] R. E. Peierls, *Quantum theory of solids*, Clarendon, Oxford (1955).
- [104] D. Pines and P. Nozières, *The theory of quantum liquids, volume 1*, W. A. Benjamin (1966), reedited by Perseus Books Publishing in 1989.
- [105] N. Pottier, *Mécanique statistique hors d'équilibre : processus irréversibles linéaires*, EDP Sciences – CNRS Éditions (2007), version publiée d'un cours du DEA de physique des solides, disponible sur le site du CCSD <http://cel.archives-ouvertes.fr/>, référence cel-00092930.
- [106] N. Pottier, *Nonequilibrium statistical physics : linear irreversible processes*, Oxford University Press (2009).
- [107] F. Reif, *Fundamentals of statistical and thermal physics*, McGraw-Hill, New York (1965).
- [108] C. Texier, *Mécanique quantique*, Dunod, Paris, second edition (2015).
- [109] M. Toda, R. Kubo and N. Saitô, *Statistical physics I : equilibrium statistical mechanics*, Springer-Verlag (1992).
- [110] U. Weiss, *Quantum dissipative systems*, World Scientific (1999).
- [111] J. M. Ziman, *Principles of the theory of solids*, Cambridge University Press (1972).

Index

- A**
- Aharonov, Yakir 81
- Albedo 31
- Amittance 18
- B**
- Bilan détaillé (relation de) 14, 16, 39
- Bohm, David 81
- Bragg (diffraction de) 33, 35
- Bragg, William H. 33
- Bragg, William L. 33
- Bravais (réseau de) 35
- Bruit
- Johnson-Nyquist 6
 - opérateur de bruit 62
 - Shottky (bruit de grenaille) 6
 - spectre de bruit 9
- C**
- Cable coaxial 47
- Callen, Herbert B. 49
- Capacité calorifique 21
- Causalité 19
- Chaleur spécifique 21
- Cohérence de phase 84, 85, 94
- longueur de cohérence de phase 85, 97
- Compressibilité 34, 38
- approximation RPA 73, 106
 - gaz de fermions chargés 72, 105
 - gaz de fermions libres 69
- Conductivité 67, 75, 79
- approximation de Drude 90
 - correction de localisation faible 94, 96
 - formule de Kubo-Greenwood 85
- Constante diélectrique 72
- Constante diélectrique RPA 73
- Continuum particule-trou 43, 71
- Cooperon 95
- Courant permanent 80
- D**
- de Laer Kronig, Ralph 19
- Décohérence 85, 95
- Densité d'états 89
- Désordonné (métal) 84
- Diagrammes
- règles de Feynman 88
- Diffraction (expérience de) 29, 40
- Diffuson 94
- Dissipation 18, 25, 47
- Drude, Paul 68
- Drude-Sommerfeld (modèle de) 68
- Duhamel (formule de) 21
- Dyson (équation de) 58
- E**
- Écrantage 73
- Einstein, Albert 5
- Environnement dissipatif 47, 52, 60
- Équation de Langevin 10
- Équation de Langevin quantique ... 60–62, 100
- Équation de Langevin-Mori 60, 61
- F**
- Facteur de forme 42
- Facteur de structure dynamique 39, 43
- Facteur de structure statique 31
- Ferromagnétisme 102
- Feynman (règles de) 88
- Feynman, Richard P. 87
- Fisher & Lee (relation de) 92
- Fluctuation-dissipation (théorème) .. 5, **25**, 51, 75
- classique 26
- Fonction de corrélation 14
- Fonction de corrélation canonique de Kubo 15
- Fonction de corrélation de paires 32
- Fonction de Lindhard 70, 74
- Fonction de réponse dynamique 23
- Fonction de réponse statique 21
- Fonction spectrale 15
- Fonctions de Green à T finie 55
- Forces d'oscillateur 28
- Formule de Poisson 35
- Friedel (oscillations de) 74
- Friedel, Jacques 74
- G**
- Gibbs-Duhem (relation de) 34
- Goldstone (théorème de) 104
- Green (fonction de) 86
- calcul perturbatif 86
 - corrélations entre fonctions de Green .. 91
 - fonction de Green moyenne 89
- Grenaille (bruit de) 6

I	
Instabilité de Peierls	119
Ioffe-Regel (critère de)	84
J	
Johnson, John B.	6
Johnson-Nyquist (bruit de)	6
K	
Khinchin, Aleksandr	10
Kohn (singularité de)	70, 74, 126
Kohn, Walter	74
Kramers, Hendrik A.	19
Kramers-Kronig (relations de)	19
Kubo, Ryogo	22
Kubo-Greenwood (formule de)	79
L	
Landau, Lev D.	11
Langevin (équation de)	10
Langevin, Paul	11
Lehman (représentation de)	23
Ligne de transmission	47
Lindhard (fonction de)	70, 74
Localisation	
localisation faible	84, 92, 94, 96
localisation faible dans un fil	96
localisation faible dans un plan	96
localisation forte	84
magnétoconductance anormale	97
Longueur de cohérence de phase	85, 95, 97
M	
Magnétoconductance anormale	97
Magnons	102, 103
Matrice densité	11
Matrices aléatoires	85
Matsubara (formalisme de)	55
Mermin-Wagner (théorème de)	37, 104
Métal	66
Métal désordonné	84
Modes collectifs	43, 76, 103, 106
Mori-Langevin (équations de)	60, 61
Mouvement brownien	5
Mouvement brownien quantique	100
N	
Nyquist (théorème de)	5, 49, 51
Nyquist, Harry	6, 49, 51
O	
Ondes de spin	102
Opalescence critique	35
Ornstein, Leonard S.	34
Ornstein-Zernike (relation d')	34, 45
Oscillateur harmonique	14, 26, 52, 64
Oscillations de Friedel	74
P	
Peierls (instabilité de)	119
Pilote (équation)	17, 53
Plasma (oscillations de)	76
Plasmons	43, 76, 78, 105, 106
Poisson (formule de)	35
Pôle de diffusion	94
Q	
Quasiparticule	42
Qubit	53
R	
Règle de somme de la compressibilité ...	34, 45
Règle de somme de Thomas-Reichl-Kuhn ..	28
Règle de somme f	45, 79, 81
Relation d'Ornstein-Zernike	34, 45
Relation de Fisher & Lee	92
Relation de Gibbs-Duhem	34
Relaxation	25
Répliques (méthode des)	86
Réseau de Bravais	35
Rétrodiffusion cohérente	31
RPA	73
compressibilité	74
constante diélectrique	73
S	
Singularité de Kohn	70, 74, 126
Sommerfeld, Arnold	68
Soustractions	20
Spectre de bruit	9
Supersymétrie	
méthode supersymétrique	86
Susceptibilité magnétique	102
T	
Temps de libre parcours moyen élastique ...	89
Temps de transport	91
Temps de vie	91
Théorème d'équipartition	5, 27, 36
Théorème de Bloch	66
Théorème de Feynman-Hellmann	81
Théorème de Goldstone	104
Théorème de Mermin-Wagner	37, 104
Théorème de Noether	80

Théorème de Nyquist	5, 49
Théorème de Wick.....	58
Théorème de Wiener-Khintchine	9 , 32
Théorème fluctuation-dissipation . 4, 5, 25 , 51, 75	
classique.....	26
Thomas-Reichl-Kuhn (règle de somme de) .	28

V

Viriél (développement du)	34
von Neumann, John	11

W

Weiss oscillations	131
Welton, T. A.....	49
Wiener, Norbert	10
Wiener-Khintchine (théorème de)	9, 32

Z

Zernike, Frits	34
Zero sound	43, 76, 140