

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

Christophe Texier

Laboratoire de Physique Statistique et Modèles Statistiques
 Université Paris-Sud

Table des matières

1	Introduction	3
	Conseils bibliographiques	6
2	Fonctions de corrélation et fonctions de réponse	7
2.1	Analyse de Fourier des processus aléatoires et théorème de Wiener-Khintchine :	7
2.2	Fonctions de corrélation et fonctions de réponse	9
2.2.1	Une interprétation de la relation de bilan détaillé	13
2.3	Dissipation	14
2.4	Causalité et relations de dispersion	15
3	Réponse linéaire	18
3.1	Parentèse : la réponse linéaire statique	18
3.2	Calcul de la fonction de réponse dynamique $\chi_{BA}(t)$	19
3.3	Relaxation	21
3.4	Forme généralisée du théorème fluctuation-dissipation	21
3.5	La limite classique	22
3.6	Fonctions de corrélation et fonction de réponse de l'oscillateur harmonique	22
4	Structure spatiale des fonctions de corrélation	25
4.1	Expérience de diffraction et facteur de structure dynamique	26
4.2	Le facteur de structure statique et la fonction de corrélation de paires	28
4.3	De la fonction de réponse $\tilde{\chi}(q, \omega)$ au spectre des excitations	32
4.4	Un mot sur les règles de somme	34
	Annexe : différents régimes de diffusion	37
5	Dissipation quantique	39
5.1	Introduction : la ligne de transmission	39
5.2	Bruit quantique : version quantique du théorème de Nyquist	41
5.3	Un modèle complètement quantique : couplage à un environnement	44
5.3.1	Formalisme de Matsubara	46
5.3.2	Calcul de $\tilde{\mathcal{G}}(i\omega_n)$ et $\tilde{\mathcal{G}}^{\text{Ret}}(\omega)$	49
5.3.3	Équation de Langevin quantique (équation de Langevin-Mori)	51

6	Transport électronique dans les métaux	57
6.1	Conductivité d'un gaz d'électrons libres pour $q = 0$	58
6.2	Le modèle semiclassique de Drude-Sommerfeld	58
6.3	Une règle de somme pour la conductivité	59
6.4	Compressibilité du gaz de fermions libres	59
6.5	Constante diélectrique, écrantage et oscillations plasma	62
6.5.1	Approximation 2 : Raisonement autocohérent (RPA)	63
6.5.2	Théorème fluctuation-dissipation dans le métal	66
6.5.3	Les oscillations plasma et la non commutativité des limites $q \rightarrow 0$ & $\omega \rightarrow 0$	66
6.6	Formule de Kubo-Greenwood	69
6.6.1	Conductivité d'un anneau mésoscopique	71
6.7	Conductivité d'un métal faiblement désordonné	72
6.7.1	Méthode des perturbations et choix d'un modèle de désordre	75
6.7.2	La conductivité à l'approximation de Drude	78
6.7.3	Corrélations entre fonctions de Green	80
6.7.4	Diffuson (contribution non cohérente)	81
6.7.5	La localisation faible : une correction quantique (cohérente)	83
7	Au delà de la réponse linéaire	87
A	Problème : Mouvement brownien quantique	88
B	Problème : Ondes de spin dans un ferromagnétique - magnons	90
C	Problème : Compressibilité des fermions chargés - plasmons	93
D	Problème : Obstacle en mouvement dans un superfluide	95
E	Problème : Effet Hall	97
	Bibliographie	98
	Index	104

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 inspiré la section 5.3.3 (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, fonction de partition, etc.

L'étude de la situation hors équilibre est nettement moins bien balisée. Une relativement 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 § 5.3.3 page 51, équation maîtresse quantique, mouvement brownien quantique (annexe A), etc ; on pourra consulter les ouvrages de C. W. Gardiner [39, 40]). 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 $\langle X(t) \rangle_{\text{hors eq.}}$, d'autre part nous n'en considérerons que la partie *linéaire* dans la "force" responsable de la mise hors équilibre. Moyennant ces restrictions nous développerons ces idées dans un cadre complètement quantique.

Motivation : 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.

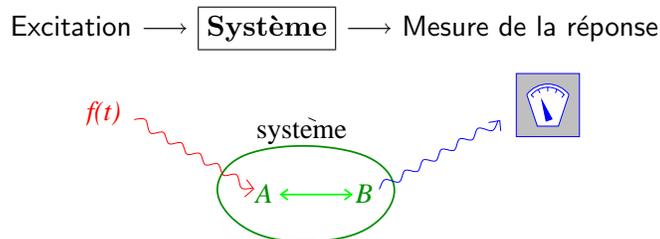


FIGURE 1 – Représentation schématique de la situation décrite par la relation (7) : La force excitatrice $f(t)$ se couple à l'observable A . Les dynamiques des observables du système sont couplées (corrélations représentées par la double flèche). L'appareil de mesure suit l'évolution de l'observable B .

¹Notons toutefois les progrès récents quant à la généralisation du théorème de fluctuation-dissipation à des situations fortement hors équilibre : théorème de fluctuation de Gallavoti-Cohen [38], travaux récents de Bernard Derrida et ses collaborateurs, etc. Ces résultats s'appliquent néanmoins plutôt dans un cadre classique.

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 d'un même système, les évolutions temporelles des observables A et B sont 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 donnée 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 $\mu = 1/\gamma$: $D = \mu k_B T$.

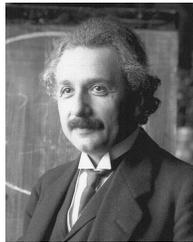


FIGURE 2 – *Albert Einstein (1879-1955).*

2. *Le théorème de Nyquist* (1928) est l'analogie 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

³La théorie a été proposée par Harry Nyquist [66] et l'expérience réalisée par John B. Johnson [49].

$2D\gamma^2/\gamma = 2k_B T$ vue dans le paragraphe précédent devient $S_U = 2k_B TR$, *i.e.* reliant 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 le 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 caractérisés 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).

⁴Bruit 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 $S_I = \frac{2k_B T}{R}$. (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 $S_I = e|\langle I \rangle|$ 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 [20].

- 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

La référence canonique sur le sujet est le livre de R. Kubo, M. Toda & N. Hashitsume [54]. Les deux premiers chapitres du présent texte sont basés sur le cours du collège de France de C. Cohen-Tannoudji [25]. Un livre récent qui couvre assez bien le sujet est le livre de Le Bellac, Mortessagne & Batrouni [56]. D'autres références ont inspiré ces notes : [65, 78, 68, 39, 40, 67, 85, 13, 30, 43].

2 Fonctions de corrélation et fonctions de réponse

La physique statistique analyse les propriétés statistiques de différentes quantités physiques caractérisant l'état d'un système. Les quantités physiques peuvent être considérées comme des variables aléatoires car soumises aux fluctuations thermiques et/ou quantiques. Une question intéressante concerne l'étude de l'évolution temporelle des quantités physiques (dans la situation à l'équilibre ou hors équilibre). Si $x(t)$ est un processus stochastique⁵, une partie de l'information⁶ est codée dans la fonction de corrélation $\langle x(t)x(t') \rangle$. Nous commençons par discuter le sens physique de la transformée de Fourier de la fonction de corrélation, dont nous avons déjà annoncé le rôle central dans ce cours.

Rq. : en mécanique quantique, $x(t)$ est un opérateur et ne commute pas avec $x(0)$. La moyenne est dans ce cas la moyenne quantique et statistique décrivant l'équilibre thermodynamique. Les différentes possibilités pour ordonner les opérateurs ($x(t)x(0)$, $x(0)x(t)$, $\{x(t), x(0)\}$, etc) correspondent à différentes fonctions de corrélation. Cette remarque n'affecte pas la discussion menée ci-dessous.

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

Convention (TF) : La transformation de Fourier est définie selon la convention $\tilde{C}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt C(t) e^{i\omega t}$ et $C(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{C}(\omega) e^{-i\omega t}$.

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. On peut décomposer le processus sur un ensemble de composantes de Fourier $x(t) = \sum_n \tilde{x}_n e^{-i\omega_n t}$ où $\omega_n = \frac{2n\pi}{T}$ avec $n \in \mathbb{Z}$.

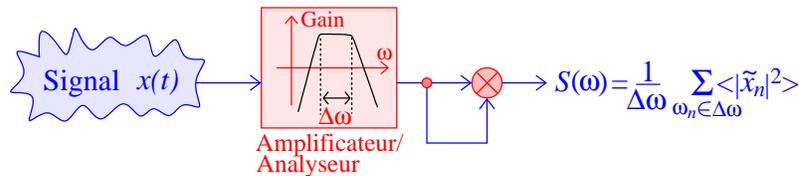


FIGURE 4 – Schéma d'un dispositif de mesure de bruit : le signal est amplifié, dupliqué et multiplié. Le résultat est moyenné (en général sur une temps long).

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 $[\omega, \omega + \Delta\omega]$:

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

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

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

⁶toute l'information si le processus est gaussien.



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 : ⁷

$$\langle \tilde{x}_n \tilde{x}_m^* \rangle = \frac{1}{T} \delta_{n,m} \tilde{C}_{xx}(\omega_n) \quad (2)$$

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 corrélées⁸. 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

$$\boxed{\mathcal{S}(\omega) = \frac{\tilde{C}_{xx}(\omega)}{2\pi}} \quad (3)$$

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*”.

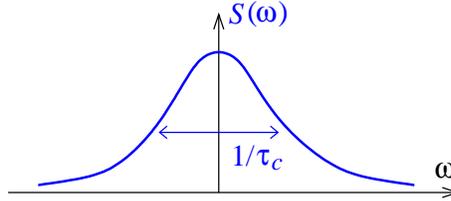


FIGURE 6 – Illustration du théorème de Wiener-Khintchine : la largeur du spectre de bruit est égale à l'inverse du temps de corrélation du processus.

▣ **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 de Langevin

$$\frac{dv(t)}{dt} = - \int dt' \gamma(t-t') v(t') + F(t) \quad (4)$$

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 finie⁹. Montrer que

$$C_{vv}(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\tilde{C}_{FF}(\omega)}{|\tilde{\gamma}(\omega) - i\omega|^2} e^{-i\omega\tau} \quad (5)$$

⁷On 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 $\int_{-t}^{T-t} d(t-t') \dots \rightarrow \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') \dots$.

⁸On 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 $2\pi \delta(\omega - \omega') \leftrightarrow T \delta_{n,n'}$.

⁹On 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

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 (rappels, cf. [14, 28]) :

- $\rho = |\psi\rangle\langle\psi|$ 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 moyenne, statistique et quantique, d’une observable A s’effectue efficacement à l’aide la matrice densité : $\langle A \rangle = \underbrace{\sum_a P_a}_{\text{statistique}} \underbrace{\langle \psi_a | A | \psi_a \rangle}_{\text{quantique}} = \text{Tr} \{ \rho A \}$.
- La matrice densité¹⁰ obéit à l’équation d’évolution (éq. de Liouville) : $\frac{d}{dt}\rho(t) = \frac{i}{\hbar}[\rho(t), H]$.
- 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.

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 $\tau_c \lesssim \tau_m \ll 1/\gamma$. Nous verrons au chapitre 5 que les modèles quantiques de dissipation conduisent naturellement à une fonction $\gamma(t)$ de largeur finie.

¹⁰Il 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 $\frac{d}{dt}A(t) = \frac{i}{\hbar}[H, A(t)]$.

Fonction de réponse : définitions.— Soit f une “force” extérieure conjuguée à une grandeur physique A : i.e. l'énergie contient la contribution

$$\boxed{\hat{H}_{\text{pert}}(t) = -f(t) \hat{A}} \quad (6)$$

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 :

$$\boxed{\langle \hat{B}(t) \rangle_f \stackrel{\text{def}}{=} \langle \hat{B} \rangle + \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \chi_{BA}(t-t') f(t') + O(f^2)} \quad (7)$$

où $\langle \dots \rangle$ et $\langle \dots \rangle_f$ désignent respectivement la moyenne en l'absence et en présence de la perturbation. Puisque nous recherchons la réponse à l'ordre $O(f^1)$, $\chi_{BA}(t)$ est d'ordre $O(f^0)$, i.e. doit caractériser une propriété *d'équilibre*. 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*. Notons que la fonction $\chi_{BA}(t)$ est *causale*, $\chi_{BA}(t < 0) = 0$ (nous en analyserons plus bas les conséquences). Sa transformée de Fourier est appelée la *fonction de réponse fréquentielle*

$$\tilde{\chi}_{BA}(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \int dt \chi_{BA}(t) e^{i\omega t} \quad (8)$$

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

$$\langle B(t) \rangle_f = \langle \hat{B} \rangle + \text{Re} [\tilde{\chi}_{BA}(\omega) f_\omega e^{-i\omega t}] + O(f^2) \quad (9)$$

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

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

Rq : Il peut être nécessaire de rajouter une partie imaginaire à la fréquence $\omega \rightarrow \omega + i0^+$ pour assurer la convergence de l'intégrale (8). 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 $\chi_{zpz}(t)$.
- 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 $A \rightarrow \vec{M} = \gamma \vec{S}$. Étudier la réponse des spins ($B \equiv A$) se fait en considérant la *susceptibilité magnétique* : $\langle S_i(t) \rangle_{\vec{B}} = \int dt' \chi_{ij}(t-t') B_j(t')$.
- 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 mouvement¹¹, 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 :

$$\tilde{C}_{BA}(\omega) = 2\pi \sum_{n,m} P_n B_{nm} A_{mn} \delta(\omega + \omega_{nm}) \quad (10)$$

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

$$\boxed{\tilde{C}_{BA}(-\omega) = \tilde{C}_{AB}(\omega) e^{-\beta\hbar\omega}} \quad (11)$$

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 symétrique¹² $\tilde{C}_{BA}(-\omega) \simeq \tilde{C}_{AB}(\omega)$; (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 (10).

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

¹¹Pour un système classique décrit par une équation du mouvement $\ddot{x} = F(x) + f(t)$ la fonction de réponse impulsionnelle est 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, $\chi(t)$ est une fonction de $x_0(0)$ et $\dot{x}_0(0)$.

¹²Stricto 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 :

$$\tilde{S}_{BA}(\omega) = \pi \sum_{n,m} (P_n + P_m) B_{nm} A_{mn} \delta(\omega + \omega_{nm}) \quad (12)$$

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

$$\tilde{\xi}_{BA}(\omega) = \frac{\pi}{\hbar} \sum_{n,m} (P_n - P_m) B_{nm} A_{mn} \delta(\omega + \omega_{nm}) \quad (13)$$

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 :

$$\frac{i}{\hbar} \langle [B(t), A] \rangle = \int_0^\beta d\lambda \langle \dot{A}(-i\hbar\lambda) B(t) \rangle \quad \Rightarrow \quad \xi_{BA}(t) = -\frac{i\beta}{2} K_{B\dot{A}}(t) \quad (14)$$

Le membre de droite est appelé *fonction de corrélation canonique de Kubo* (la photographie du grand homme se trouve p. 19) :

$$K_{BA}(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\beta} \int_0^\beta d\lambda \langle A(-i\hbar\lambda) B(t) \rangle \quad (15)$$

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

$$\tilde{K}_{BA}(\omega) = -2\pi \sum_{n,m} \frac{P_n - P_m}{\beta \hbar \omega_{nm}} B_{nm} A_{mn} \delta(\omega + \omega_{nm}) \quad (16)$$

Puisqu'il est clair que $\lim_{\hbar \rightarrow 0} K_{BA}(t) = \langle AB(t) \rangle = C_{BA}^{\text{class}}(t)$, la relation (14) permet d'obtenir la limite classique de la fonction spectrale :

$$\xi_{BA}^{\text{class}}(t) = \lim_{\hbar \rightarrow 0} \xi_{BA}(t) = -\frac{i\beta}{2} \langle B(t) \dot{A} \rangle = \frac{i\beta}{2} \frac{d}{dt} \langle B(t) A \rangle \quad (17)$$

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) :

$$H = -\frac{\omega_0}{2} \sigma_z + H_{\text{int}} + H_{\text{sys. macro.}} = H_0 + H_{\text{int}} \quad (18)$$

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 $|e\rangle$:

$$H_{\text{int}} = -\sigma_x X \quad (19)$$

où X est une observable du système macroscopique.

La référence [70] (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 niveaux¹³ 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 donc¹⁴ :

$$|\psi(t)\rangle \simeq e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} \left(1 + \frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau \sigma_x(\tau) X(\tau) \right) |\alpha\rangle \otimes |\Phi_n\rangle \quad (20)$$

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 $|\Phi_n\rangle$:

$$\mathcal{P}_{\text{abs}}^{(\Phi_n)}(t) = \sum_m |(\langle e | \otimes \langle \Phi_m |) |\psi(t)\rangle|^2 \simeq \frac{1}{\hbar^2} \sum_m \left| \int_0^t d\tau e^{i\omega_0 \tau} \langle \Phi_m | e^{-\frac{i}{\hbar} H_0 t} X(\tau) | \Phi_n \rangle \right|^2 \quad (21)$$

$$= \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau d\tau' e^{-i\omega_0(\tau-\tau')} \langle \Phi_n | X(\tau) X(\tau') | \Phi_n \rangle \quad (22)$$

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

$$\mathcal{P}_{\text{abs}}(t) \simeq \frac{1}{\hbar^2} \int_0^t d\tau d\tau' e^{-i\omega_0(\tau-\tau')} \langle X(\tau) X(\tau') \rangle \quad (23)$$

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

¹³le système à deux niveaux de la référence [70] est une boîte à paires de Cooper.

¹⁴**Opérateur d'évolution.**— L'opérateur d'évolution temporelle, $|\psi(t)\rangle = U(t)|\psi(0)\rangle$, est solution de l'équation de Schrödinger $i \frac{d}{dt} U(t) = H U(t)$ 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 $\mathcal{U}(t) = T \exp -\frac{i}{\hbar} \int_0^t d\tau H_I(\tau)$, où T désigne le produit chronologique, défini par $T[f(t)g(t')] = \theta(t-t')f(t)g(t') + \theta(t'-t)g(t')f(t)$.

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 $\mathcal{P}_{\text{abs}}(t) \simeq \frac{t}{\hbar^2} \tilde{C}_{XX}(-\omega_0)$, ce qui donne le taux d'absorption :

$$\Gamma_{\text{abs}} = \frac{1}{\hbar^2} \tilde{C}_{XX}(-\omega_0) \quad (24)$$

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

$$\Gamma_{\text{em}} = \frac{1}{\hbar^2} \tilde{C}_{XX}(\omega_0) \quad (25)$$

La condition de bilan détaillé devient donc dans ce contexte :

$$\tilde{C}_{XX}(-\omega_0) = \tilde{C}_{XX}(\omega_0) e^{-\beta \hbar \omega_0} \quad \Leftrightarrow \quad \Gamma_{\text{abs}} = \Gamma_{\text{em}} e^{-\frac{\hbar \omega_0}{k_B T}} \quad (26)$$

et correspond à la distribution canonique de la mécanique statistique (figure 8). Le système à deux niveaux est mis à l'équilibre thermodynamique grâce aux interactions avec le système macroscopique thermalisé. Le bilan détaillé traduit donc le déséquilibre des occupations des états quantiques à l'équilibre thermodynamique.

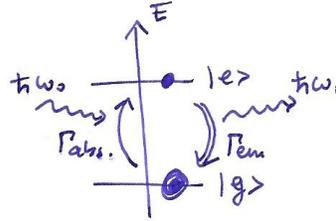


FIGURE 8 –

$\tilde{C}_{XX}(\omega < 0)$ 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

$$\tilde{C}_{XX}(\omega > 0) \quad : \text{ processus d'absorption} \quad (27)$$

$$\tilde{C}_{XX}(\omega < 0) \quad : \text{ processus d'émission} . \quad (28)$$

2.3 Dissipation

Dissipation.– Le terme ajouté dans l'énergie par la perturbation extérieure est $dE = -f(t) dA$. La puissance dissipée est donc $\mathcal{P}_{\text{diss}}(t) = f(t) \langle \frac{dA}{dt} \rangle$. 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

$$\langle A(t) \rangle_f \simeq \text{Re} [\tilde{\chi}_{AA}(\omega) f_\omega e^{-i\omega t}] = f_\omega (\tilde{\chi}'_{AA}(\omega) \cos \omega t + \tilde{\chi}''_{AA}(\omega) \sin \omega t) \quad (29)$$

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 : $\overline{\mathcal{P}_{\text{diss}}} = \frac{1}{2} \omega f_\omega^2 \tilde{\chi}''_{AA}(\omega)$. **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 $\overline{\mathcal{P}}_{\text{diss}} \propto \omega \text{Im} \tilde{\chi}_{xx}(\omega)$.

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* : $Y(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\chi}_{\dot{A}A}(\omega)$, reliée à l'impédance par $Y(\omega) = 1/Z(\omega)$.

$$\overline{\mathcal{P}}_{\text{diss}} = \frac{1}{2} \omega f_\omega^2 \text{Im} \tilde{\chi}_{AA}(\omega) = \frac{1}{2} f_\omega^2 \text{Re} Y(\omega) \quad (30)$$

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.

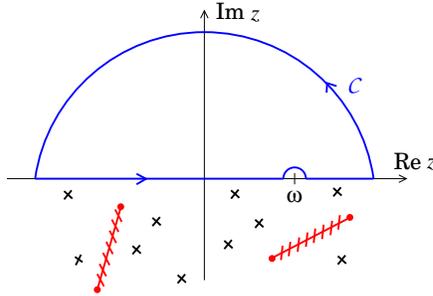


FIGURE 9 – Contour d'intégration pour obtenir l'éq. (32). Les croix représentent les pôles de la fonction $\tilde{\chi}(z)$, et les lignes rayées rouges les coupures.

La fonction de réponse est causale :

$$\boxed{\chi(t) = 0 \quad \text{pour } t < 0} \quad (31)$$

Nous supposons que sa transformée de Fourier est de carré sommable [65] : $\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega |\tilde{\chi}(\omega)|^2 < \infty$. 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. 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 $l'\infty$ et 0. Nous obtenons :

$$\tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\tilde{\chi}(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (32)$$

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

$$\operatorname{Re} \tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Im} \tilde{\chi}(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (33)$$

$$\operatorname{Im} \tilde{\chi}(\omega) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\operatorname{Re} \tilde{\chi}(\omega')}{\omega' - \omega} \quad (34)$$

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



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

Rqs. :

- *Soustractions.* – Il peut arriver que la fonction $\tilde{\chi}(\omega)$ ne soit pas de carré sommable. Dans ce cas, étant donné $\operatorname{Im} \tilde{\chi}(\omega)$, la causalité ne suffit pas à déterminer $\operatorname{Re} \tilde{\chi}(\omega)$. Il est toutefois possible de trouver des relations de dispersion analogues aux formules de Plemelj en procédant à des soustractions [65]. 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 :

$$\tilde{\chi}(\omega) = \tilde{\chi}(\omega_0) + \frac{\omega - \omega_0}{i\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\tilde{\chi}(\omega') - \tilde{\chi}(\omega_0)}{\omega' - \omega_0} \frac{1}{\omega' - \omega} \quad (35)$$

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 ".
- 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 [65]. Par extension les relations de Plemelj sont dénommées relations de Kramers-Kronig par les physiciens.

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

De même, sachant que $\operatorname{Im} \tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{1/\tau^2 + (\omega - \omega_0)^2}$, 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 $Y \stackrel{\text{def}}{=} \chi_{\dot{A}A}$) 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 : il éloigne la singularité de l'axe réel. Il peut s'interpréter physiquement comme un taux de relaxation infinitésimal ¹⁵ $1/\tau \leftrightarrow 0^+$.

¹⁵C'est explicite dans le cas de l'oscillateur classique amorti, exercice 2.4, ou dans la formule de Drude $\sigma(\omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{i}{\omega + i/\tau}$.

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

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 connue $C_V \propto \langle \delta E^2 \rangle \propto \frac{\partial^2 F}{\partial \beta^2}$ montre que la réponse de l'énergie à une élévation de température est reliée aux fluctuations d'énergie.

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 a¹⁶

$$\boxed{e^{-\beta H} = e^{-\beta H_0} - \int_0^\beta d\lambda e^{-(\beta-\lambda)H_0} V e^{-\lambda H}} \quad (36)$$

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 :

$$\text{Tr} \{ e^{-\beta H} B \} = Z_0 \left[\langle B \rangle + f \int_0^\beta d\lambda \langle A(-i\hbar\lambda) B \rangle + O(f^2) \right] \quad (37)$$

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

$$\chi_{BA}^{\text{statique}} = \int_0^\beta d\lambda [\langle A(-i\hbar\lambda) B \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle] \quad (38)$$

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

$$\chi_{BA}^{\text{statique}} = \beta K_{BA}(t=0) \quad (39)$$

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

La fonction de réponse $\chi_{BA}^{\text{statique}}$ est également appelée *fonction de réponse isotherme* [54] puisqu'elle décrit une situation où le système est maintenu à une température T par le thermostat¹⁷. 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 $\chi_{BA}(t)$.

¹⁶Dém. : $G(\beta) = e^{-\beta H}$ 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 (36).

¹⁷On peut également construire une fonction de réponse adiabatique décrivant la réponse du système isolé [54].



Ryogo Kubo, 久保亮五 (1920-1995).

FIGURE 11 –

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

Dérivation du résultat central : Nous souhaitons prendre en compte la perturbation extérieure $H_{\text{pert}}(t) = -f(t)A$ à l'ordre le plus bas dans l'équation de Liouville $\dot{\rho}(t) = \frac{i}{\hbar}[\rho(t), H(t)]$. Afin de développer l'approche perturbative, nous transformons la matrice densité selon $\tilde{\rho}(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{iH_0 t/\hbar} \rho(t) e^{-iH_0 t/\hbar}$, de telle sorte à intégrer l'évolution libre :

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}(t) = \frac{i}{\hbar} [\tilde{\rho}(t), H_I(t)] . \quad (40)$$

$H_I(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{iH_0 t/\hbar} H_{\text{pert}}(t) e^{-iH_0 t/\hbar}$ désigne la perturbation en représentation dite "d'interaction". Dans le calcul de la moyenne de B , la partie libre de l'évolution est maintenant reportée sur l'opérateur : $\text{Tr} \{\rho(t)B\} = \text{Tr} \{\tilde{\rho}(t)B(t)\}$ où $B(t) \stackrel{\text{def}}{=} e^{iH_0 t/\hbar} B e^{-iH_0 t/\hbar}$. L'équation (40) 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

$$\frac{d}{dt} \tilde{\rho}^{(n)}(t) = \frac{i}{\hbar} [\tilde{\rho}^{(n-1)}(t), H_I(t)] \quad (41)$$

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 : $\tilde{\rho}^{(n)}(-\infty) = \rho_0 \delta_{n,0}$, ce qui conduit à

$$\tilde{\rho}^{(n)}(t) = -\frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' f(t') [\tilde{\rho}^{(n-1)}(t'), A(t')] . \quad (42)$$

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

$$\tilde{\rho}(t) = \rho_0 - \frac{i}{\hbar} \int_{-\infty}^t dt' f(t') [\rho_0, A(t')] + O(f^2) , \quad (43)$$

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

$$\boxed{\underbrace{\chi_{BA}(t)}_{\text{réponse}} = \frac{i}{\hbar} \overbrace{\theta(t)}^{\text{causalité}} \underbrace{\langle [B(t), A] \rangle}_{\text{corrélation à l'équil.}}} = 2i\theta(t) \xi_{BA}(t) = \theta(t) \beta K_{B\dot{A}}(t) \quad (44)$$

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.

Rq : 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

$$\langle B(t) \rangle_f \stackrel{\text{def}}{=} \langle B \rangle + \int dt' \chi_{BA}(t, t') f(t') + \int dt' dt'' \chi_{BA}(t, t', t'') f(t') f(t'') + O(f^3), \quad (45)$$

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

$$\chi_{BA}(t, t', t'') = \left(\frac{i}{\hbar} \right)^2 \theta(t - t') \theta(t' - t'') \langle [[B(t), A(t')] , A(t'')] \rangle. \quad (46)$$

Formule de Kubo : La relation $\chi_{BA}(t) = \theta(t) \beta K_{B\dot{A}}(t)$ porte le nom de "formule de Kubo" [54].¹⁸

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

$$\tilde{\chi}_{BA}(\omega) = -\frac{1}{\hbar} \sum_{n,m} (P_n - P_m) B_{nm} A_{mn} \frac{1}{\omega + \omega_{nm} + i0^+} \quad (47)$$

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

$$\tilde{\chi}_{BA}(\omega) = \int \frac{d\omega'}{\pi} \frac{\tilde{\xi}_{BA}(\omega')}{\omega - \omega' + i0^+} \quad (48)$$

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. (8) 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

$$\tilde{\chi}_{BA}(\omega = 0) = \int_0^\infty dt \beta K_{B\dot{A}}(t) = \beta [K_{BA}(t = 0) - K_{BA}(t = \infty)] \quad (49)$$

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.– 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 $f_\alpha \equiv f(\epsilon_\alpha) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_\alpha - \mu)} \pm 1}$ la fonction de Fermi-Dirac/Bose-Einstein (ϵ_α est la valeur propre de l'énergie associée à $|\varphi_\alpha\rangle$). Montrer que $\langle [B, A] \rangle = \text{tr}\{f(h)[b, a]\}$ où $\langle \dots \rangle$ est la moyenne grand-canonique et $\text{tr}\{\dots\}$ est la trace dans l'espace de Hilbert d'une particule. En déduire que

$$\tilde{\chi}_{BA}(\omega) = - \sum_{\alpha, \beta} (f_\alpha - f_\beta) \frac{b_{\alpha\beta} a_{\beta\alpha}}{\hbar\omega + \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta + i0^+} \quad (50)$$

¹⁸On 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).

où $q_{\alpha\beta} \stackrel{\text{def}}{=} \langle \varphi_\alpha | q | \varphi_\beta \rangle$.

En pratique, cette représentation est beaucoup plus utile que la représentation de Lehman (47). 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 4.1 page 25).

3.3 Relaxation

L'expérience de relaxation correspond à un choix particulier de force excitatrice : $f(t) = f_0 \theta(-t)$. En utilisant (44) et en supposant que¹⁹ $K_{BA}(\infty) = 0$ on obtient :

$$\langle B(t) \rangle_f \simeq \langle B \rangle + f_0 \beta K_{BA}(t) \quad \text{pour } t > 0 \quad (51)$$

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 (39) 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. (14). En isolant le membre de gauche et de droite de l'éq. (44), nous obtenons une relation entre réponse et relaxation :

$$\underbrace{\chi_{BA}(t)}_{\text{réponse}} = -\theta(t) \beta \frac{d}{dt} \underbrace{K_{BA}(t)}_{\text{relaxation}} . \quad (52)$$

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 $\overline{\mathcal{P}}_{\text{diss}} = \frac{1}{2} f_\omega^2 \text{Re} [Y(\omega)]$ est proportionnelle à la partie imaginaire de la fonction de réponse $\text{Im} \tilde{\chi}_{AA}(\omega)$. Le résultat central (44) nous permet d'identifier cette partie dissipative de la réponse à la fonction spectrale :

$$\boxed{\overline{\mathcal{P}}_{\text{diss}} = \frac{1}{2} \omega f_\omega^2 \text{Im} \tilde{\chi}_{AA}(\omega) = \frac{1}{2} \omega f_\omega^2 \tilde{\xi}_{AA}(\omega)} \quad (53)$$

Montrons maintenant que la fonction spectrale peut être reliée aux autres fonctions de corrélation. Pour cela nous partons de la représentation spectrale (13) 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

$$\boxed{\underbrace{\tilde{C}_{BA}(\omega)}_{\text{corrél.-fluct.}} = \frac{2\hbar}{1 - e^{-\beta \hbar \omega}} \underbrace{\tilde{\xi}_{BA}(\omega)}_{\text{“dissipation”}}} \quad (54)$$

Cette relation est donc la forme généralisée du théorème de fluctuation-dissipation reliant corrélation-fluctuation (C_{BA}) et dissipation (ξ_{BA}). “Dissipation” a été mis entre guillemets pour noter que, *stricto sensu*, c'est seulement dans le cas de l'auto-corrélation, $B = A^\dagger$, que nous avons montré que $\xi_{A^\dagger A}$ est proportionnelle à la puissance dissipée.

¹⁹L'intégration donne $\langle B(t) \rangle_f \simeq \langle B \rangle + f_0 \beta [K_{BA}(t) - K_{BA}(\infty)]$.

- La fonction de corrélation non symétrisée est donnée par :

$$C_{xx}(t) = \frac{\hbar}{m\omega_0} \left(\bar{n} \cos \omega_0 t + \frac{1}{2} e^{-i\omega_0 t} \right) \quad (59)$$

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

$$\tilde{C}_{xx}(\omega) = \frac{\pi\hbar}{m\omega_0} \left[\underbrace{(\bar{n} + 1) \delta(\omega - \omega_0)}_{\text{absorption}} + \underbrace{\bar{n} \delta(\omega + \omega_0)}_{\text{émission}} \right] \quad (60)$$

satisfait le bilan détaillé (11). 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 :

$$K_{xx}(t) = \frac{\cos \omega_0 t}{\beta m \omega_0^2} \quad (61)$$

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 $K_{xx}(t) = -\frac{d}{dt} K_{xx}(t)$ ou se calculent directement en utilisant l'éq. (58) :

$$\xi_{xx}(t) = \frac{\sin \omega_0 t}{2im\omega_0} \quad \text{et} \quad \chi_{xx}(t) = \theta(t) \frac{\sin \omega_0 t}{m\omega_0} \quad (62)$$

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 :

$$\tilde{\xi}_{xx}(\omega) = \frac{\pi}{2m\omega_0} \left[\underbrace{\delta(\omega - \omega_0)}_{\text{absorption}} - \underbrace{\delta(\omega + \omega_0)}_{\text{émission}} \right] \quad \text{et} \quad \tilde{\chi}_{xx}(\omega) = \frac{1}{m} \frac{1}{\omega_0^2 - (\omega + i0^+)^2} \quad (63)$$

La différence de signe des deux termes de la fonction spectrale est liée à leur interprétation physique. Les parties réelle et imaginaire de la fonction de réponse sont tracées sur la figure 32 (page 55) 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. (56). 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 22).

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 :

$$\langle x_H(t) \rangle = \langle x(t) \rangle + \int dt' \chi_{xx}^{\text{class}}(t - t') f(t') \quad (64)$$

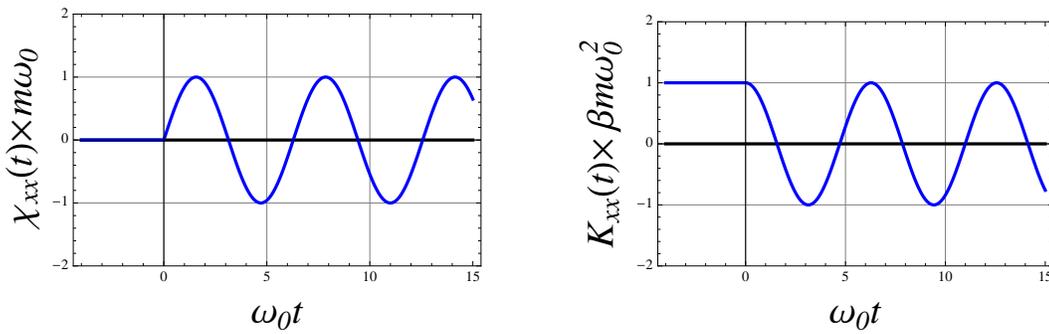


FIGURE 13 – À gauche : Fonction de réponse de l'oscillateur harmonique non amorti : à $t = 0$ l'oscillateur est forcé par une impulsion $f(t) \propto \delta(t)$; la réponse est $\langle x(t) \rangle_f - \langle x \rangle_{\text{eq.}} \propto \chi_{xx}(t)$. À droite : Relaxation. – L'oscillateur est écarté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

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

✎ **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 $f_{n0} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2m\omega_{n0}}{\hbar} |\langle \phi_n | z | \phi_0 \rangle|^2$:

$$\chi_{zz}(t) = \theta(t) \sum_n f_{n0} \frac{\sin \omega_{n0} t}{m\omega_{n0}} \quad (65)$$

Que valent les f_{n0} pour l'oscillateur harmonique ? Démontrez²¹ 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 le 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 à la fonction spectrale par la causalité et le FDT.

²¹Indication : 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) mais les concepts statistiques seront plus pertinents pour l'étude de systèmes complexes à grand nombre de particules ($\sim \mathcal{N}_A \sim 10^{23}$). Dans ce cas, bien souvent les observables d'intérêt (les A et B des chapitres précédents) contiendront des dépendances spatiales. C'est en effet le cas si on s'intéresse à la densité de particules $\hat{n}(r)$ du système (§ 4.3, 6.4 et 6.5), à une densité de courant $\hat{j}(r)$ (§ 6.5), une densité de spins (annexe B page 90), 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 complexe homogène. Afin de dire des choses précises 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).

Compressibilité : réponse densité-densité.— Lorsqu'un potentiel $U_{\text{ext}}(r, t)$ perturbe le système, il se couple à la densité $\hat{n}(r) = \sum_j \delta(r - \hat{r}_j)$ où \hat{r}_j est l'opérateur de position de la particule j : $\hat{H}_{\text{pert}}(t) = + \int dr \hat{n}(r) U_{\text{ext}}(r, t) = \frac{1}{V} \sum_q \hat{n}_{-q} \tilde{U}_q^{\text{ext}}(t)$, où V est le volume et $\hat{n}_q = \int dr e^{-iqr} \hat{n}(r)$ désigne la composante de Fourier de la densité. La fonction de réponse densité-densité caractérise la réponse de la densité $\langle n(r, t) \rangle_{U_{\text{ext}}} = \langle n(r) \rangle + \int dt' dr' \chi(r, t; r', t') U_{\text{ext}}(r', t') + \dots$. Si le système est homogène, $\chi(r, t; r', 0) = \chi(r - r', t; 0, 0)$ et l'on peut passer dans l'espace de Fourier $\langle n_q(t) \rangle_{U_{\text{ext}}} = \langle n_q \rangle + \int dt' \chi_q(t - t') U_q^{\text{ext}}(t') + \dots$. D'après (44) on a donc $\chi_q(t) = -\frac{i}{V\hbar} \theta(t) \langle [\hat{n}_q(t), \hat{n}_{-q}] \rangle$ (le signe $-$ est déplacé par rapport aux conventions choisies plus haut pour définir la perturbation). Il est utile d'exprimer la compressibilité

$$\tilde{\chi}(q, \omega) = \int dt e^{(i\omega - 0^+)t} \chi_q(t) = -\frac{i}{\hbar V} \int_0^\infty dt e^{(i\omega - 0^+)t} \langle [\hat{n}_q(t), \hat{n}_{-q}] \rangle \quad (66)$$

dans la représentation de Lehman, éq. (47) :

$$\tilde{\chi}(q, \omega) = \frac{1}{\hbar V} \sum_{n,m} (P_n - P_m) \frac{|(\hat{n}_q)_{nm}|^2}{\omega + \omega_{nm} + i0^+} \quad (67)$$

où $(n_q)_{nm} = \langle \varphi_n | \hat{n}_q | \varphi_m \rangle$.

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. 20).

Exercice 4.1 : 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 $\varphi_k(r) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{ikr}$. L'opérateur densité²² pour une particule est $\hat{n}(r) = \delta(r - \hat{r})$, i.e. $\hat{n}_q = e^{-iq\hat{r}}$. Calculer ses éléments de matrice $\langle \varphi_k | \hat{n}_q | \varphi_{k'} \rangle$. Montrer que la fonction de réponse densité-densité du système est donnée par :

$$\tilde{\chi}_0(q, \omega) = \frac{1}{V} \sum_k \frac{f_k - f_{k+q}}{\hbar\omega + \epsilon_k - \epsilon_{k+q} + i0^+} \quad (68)$$

²²Dans les livres il est assez courant de trouver l'opérateur densité des fermions exprimé en terme des opérateurs d'annihilation et de création : $n(r) = \frac{1}{V} \sum_{k,q} e^{-iqr} c_{k+q}^\dagger c_k$ i.e. $n_q = \sum_k c_{k-q}^\dagger c_k$. Deux états $|\varphi_n\rangle$ et $|\varphi_m\rangle$ du problème à N fermions couplés par la densité, i.e. tels que $(n_q)_{nm} \neq 0$, diffèrent donc par une paire particule-trou d'énergie $\omega_{mn} = E_m - E_n = \epsilon_{k+q} - \epsilon_k$.

où f_k sont les facteurs d'occupation (Fermi-Dirac) des états individuels (ondes planes). Donner la valeur de $\tilde{\chi}_0(q, 0)$ 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 $\omega = \epsilon_{k+q} - \epsilon_k$. Ces pôles correspondent à des excitations élémentaires faciles à interpréter : il s'agit des excitations particule-trou²³. Nous reviendrons sur cette fonction de réponse que nous calculerons et étudierons en détail plus tard.

Facteur de structure dynamique et fonction spectrale.— La discussion portera soit sur la fonction de réponse $\tilde{\chi}(q, \omega)$, soit sur la fonction de corrélation qui lui est associée, *le facteur de structure dynamique* :

$$\tilde{S}(q, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\text{Vol}} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle \hat{n}_q(t) \hat{n}_{-q} \rangle = \frac{2\pi}{\text{Vol}} \sum_{n,m} P_n |(\hat{n}_q)_{nm}|^2 \delta(\omega + \omega_{nm}) \quad (69)$$

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 (11) correspond à changer le signe de l'impulsion :

$$\tilde{S}(-q, -\omega) = \tilde{S}(q, \omega) e^{-\beta\hbar\omega} \quad (70)$$

Enfin nous introduisons la fonction spectrale $\tilde{\xi}(q, \omega) = \frac{1}{V2\hbar} \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} \langle [\hat{n}_q(t), \hat{n}_{-q}] \rangle$, reliée à la fonction de réponse par²⁴ $\text{Im} \tilde{\chi}(q, \omega) = -\tilde{\xi}(q, \omega)$. En écrire la représentation spectrale permet immédiatement de trouver la relation avec le facteur de structure

$$\tilde{\xi}(q, \omega) = \frac{1}{2\hbar} [\tilde{S}(q, \omega) - \tilde{S}(-q, -\omega)] . \quad (71)$$

Combinée avec la relation de bilan détaillé, cette dernière équation n'est rien d'autre que l'expression du théorème fluctuation-dissipation, éq. (54) : $\tilde{\xi}(q, \omega) = \frac{1}{2\hbar} (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \tilde{S}(q, \omega)$.

Notons qu'à température nulle le facteur de structure s'annule pour les fréquences négatives en vertu de la relation de bilan détaillé $\tilde{S}(q, \omega < 0) = 0$ (absence de processus d'émission à $T = 0$). Dans ce cas on a simplement $\tilde{\xi}^{(T=0)}(q, \omega > 0) = \frac{1}{2\hbar} \tilde{S}(q, \omega)$ et $\tilde{\xi}^{(T=0)}(q, \omega < 0) = -\frac{1}{2\hbar} \tilde{S}(-q, -\omega)$.

4.1 Expérience de diffraction 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 [7], 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 q et ω , etc.

Commençons par montrer précisément comment nous pouvons extraire le facteur de structure dynamique $\tilde{S}(q, \omega)$ dans une expérience de diffraction. Considérons une matière dense constituée de particules ayant pour positions $\{r_j\}$, sur laquelle est envoyée une onde (photons, électrons, neutrons,...), décrite par une relation de dispersion Ω_k (par exemple $\Omega_k = |k|c$ pour des photons, $\Omega_k = \frac{k^2}{2M}$ pour des neutrons,...). Le vecteur d'onde incident est k et le détecteur sélectionne des particules de vecteur d'onde k' (la position du détecteur sélectionne la direction du vecteur ; nous supposons que le détecteur possède un filtre en énergie permettant de sélectionner également le

²³Un électron d'énergie ϵ_k est envoyé dans l'état d'énergie ϵ_{k+q} . à $T = 0$ on doit avoir $\epsilon_k < \epsilon_F$ et $\epsilon_{k+q} > \epsilon_F$. Cette excitation correspond donc à créer un trou sous la surface de Fermi et une particule au dessus.

²⁴Le signe vient de la définition de χ .

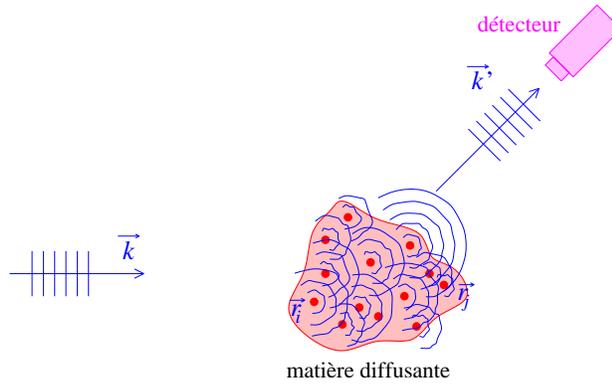


FIGURE 14 – Diffraction d'une onde sur des diffuseurs en r_j .

module de 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 ²⁵ (l'onde incidente n'est diffusée vers le détecteur que par une seule particule). L'onde incidente est donc diffusée par un potentiel $\hat{V} = \sum_i v(\hat{R} - \hat{r}_i)$ où \hat{R} est la position de la particule incidente et $v(R)$ désigne le potentiel vu par celle-ci pour un diffuseur à l'origine. Afin de séparer les observables associées au système ($\{r_j\}$) et à la particule diffusée (R), nous introduisons l'opérateur densité de particules : $\hat{V} = \int dr v(\hat{R} - r) \hat{n}(r)$.

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

$$\frac{d\sigma^{(\varphi_n)}}{d\Omega} \propto \sum_{f \text{ t.q. } k' \text{ fixé}} |\langle \Phi_f | \hat{V} | \Phi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (72)$$

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

$$\omega \stackrel{\text{def}}{=} \Omega_{k'} - \Omega_k \quad (73)$$

$$q \stackrel{\text{def}}{=} k' - k \quad (74)$$

pour désigner les transferts d'énergie et d'impulsion. L'élément de matrice est

$$\langle \Phi_f | \hat{V} | \Phi_i \rangle = \int dr \langle k' | v(\hat{R} - r) | k \rangle \langle \varphi_m | \hat{n}(r) | \varphi_n \rangle = \tilde{v}(q) \langle \varphi_m | \hat{n}_q | \varphi_n \rangle \quad (75)$$

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

$$I(q, \omega) \propto \sum_n P_n \frac{d\sigma^{(\varphi_n)}}{d\Omega} \propto |\tilde{v}(q)|^2 \sum_{n,m} P_n |\langle \varphi_m | \hat{n}_q | \varphi_n \rangle|^2 \delta(\omega - \omega_{nm}); \quad (76)$$

elle est donc proportionnelle au facteur de structure

$$I(q, \omega) \propto |\tilde{v}(q)|^2 \tilde{S}(-q, -\omega) \quad (77)$$

²⁵ Les phénomènes liés à la diffusion multiple d'une onde sur des diffuseurs statiques distribués aléatoirement seront discutés au chapitre 6.

$|\tilde{v}(q)|^2$ est la section efficace sur un diffuseur (dans l'approximation de Born) et $\tilde{S}(-q, -\omega)$ contient l'information sur la distribution des diffuseurs et leur dynamique. Le signe ne doit pas nous surprendre, il nous rappelle que $\tilde{S}(q, \omega < 0)$ est associé à un processus d'émission pour le système d'intérêt, comme nous l'avons noté dans le chapitre 2, page 13.

4.2 Le facteur de structure statique et la fonction de corrélation de paires

Reprenons la discussion précédente en supposant cette fois que le détecteur ne possède pas de filtre en énergie. La section efficace de diffusion est maintenant donnée par

$$\frac{d\sigma^{(\varphi_n)}}{d\Omega} \propto \sum_{f \text{ t.q. } k' \in d\Omega} |\langle \Phi_f | \hat{V} | \Phi_i \rangle|^2 \delta(E_f - E_i) \quad (78)$$

et contient une intégrale $\int d\Omega_{k'}$ supplémentaire par rapport au cas de la section précédente. L'intensité mesurée est obtenue en intégrant toutes les fréquences le résultat (77) :

$$\int d\omega I(q, \omega) \propto |\tilde{v}(q)|^2 S(-q), \quad (79)$$

où nous avons introduit le facteur de structure statique $S(q) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \tilde{S}(q, \omega)$:

$$S(q) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\text{Vol}} \langle \hat{n}_q \hat{n}_{-q} \rangle = \frac{1}{\text{Vol}} \left\langle \sum_{i,j} e^{-iq(\hat{r}_i - \hat{r}_j)} \right\rangle. \quad (80)$$

Nous allons commencer par faire quelques remarques sur celui-ci avant de nous intéresser aux aspects liés à la dynamique.

Fonction de corrélation de paires - ordre de la matière

Nous pointons une relation entre $S(q)$ et une fonction assez intéressante dont nous pouvons avoir une image assez intuitive : la fonction de corrélation de paires

$$g(\vec{r}) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{nN} \left\langle \sum_{i \neq j} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i + \vec{r}_j) \right\rangle \quad (81)$$

caractérisant la distribution de la distance entre paires de particules. Notons que le facteur de normalisation, faisant intervenir le nombre de particules N et la densité moyenne $n = N/\text{Vol}$, est choisi pour qu'en l'absence de corrélation la fonction de corrélation de paires vaille $g(\vec{r}) = 1$: dans ce cas $\langle \sum_{i \neq j} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i + \vec{r}_j) \rangle \simeq N \langle \sum_i \delta(\vec{r} - \vec{r}_i) \rangle = nN$. Une transformation de Fourier de $\langle \sum_{i,j} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i + \vec{r}_j) \rangle = N\delta(\vec{r}) + \langle \sum_{i \neq j} \delta(\vec{r} - \vec{r}_i + \vec{r}_j) \rangle$ montre immédiatement que

$$S(\vec{q}) = n [1 + n \tilde{g}(\vec{q})]. \quad (82)$$

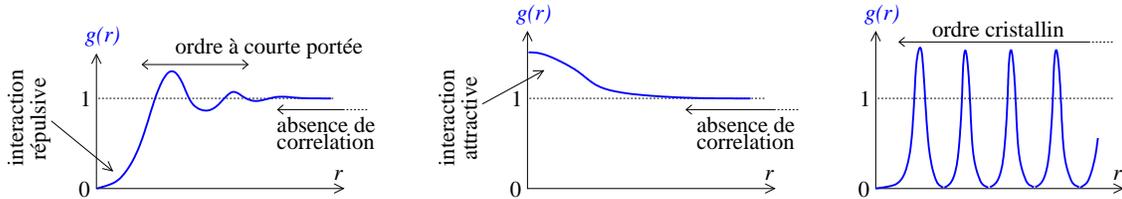


FIGURE 15 – Allure schématique de la fonction de corrélation de paires.

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 15). Un exemple précis illustrant ces remarques est étudié dans l'exercice 4.4. 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 15 pour $g(r)$ et 16 pour $S(q)$).

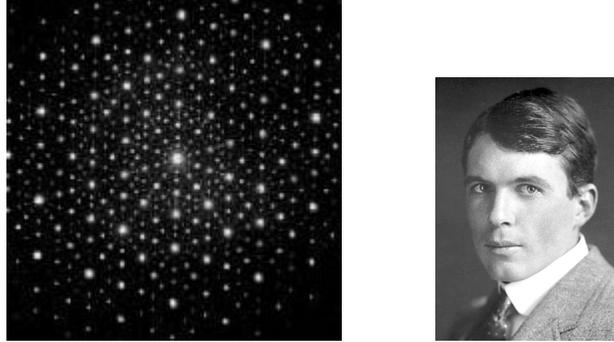


FIGURE 16 – *Pics de Bragg obtenus par diffraction sur un quasicristal (symétrie d'ordre 5). Sir William L. Bragg (1890-1971).*

Une règle de somme sur la fonction de corrélation de paires : la relation d'Ornstein-Zernike.– 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). En écrivant $g(r) = \frac{1}{n^2 V} \langle \sum_{i \neq j} \delta(r - r_i + r_j) \rangle$, avec $n = \langle N \rangle / V$, nous voyons que $\int dr [g(r) - 1] = \frac{1}{n^2 V} \langle N(N - 1) \rangle - V$. Autrement dit l'intégrale de la fonction de corrélation de paires est reliée aux fluctuations du nombre de particules : $1 + n \int dr [g(r) - 1] = \frac{\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2}{\langle N \rangle}$. Notons que le membre du milieu est bien intensif en vertu du théorème de la limite centrale qui assure $\Delta N^2 \propto \langle N \rangle$. Ces fluctuations peuvent être reliées [76] à la compressibilité isotherme $\chi_T \stackrel{\text{def}}{=} -\frac{1}{V} \left(\frac{\partial V}{\partial p} \right)_T$ et nous obtenons :

$$\boxed{1 + n \int dr [g(r) - 1] = n k_B T \chi_T} \quad (83)$$

La relation est intéressante car elle connecte des propriétés macroscopiques (densité, température, compressibilité) à des propriétés microscopiques. L'intégrale peut également être reliée au facteur de structure $\int dr [g(r) - 1] = \lim_{q \rightarrow 0} \left[\frac{1}{n} S(q) - 2\pi n \delta(q) \right] - 1$.

Pour en apprécier la portée nous pouvons considérer différents cas. Tout d'abord, dans le cas d'un gaz parfait classique (particules sans corrélations, i.e $g(r) = 1$), nous vérifions cette règle de somme : $\chi_T = 1/p$ et donc $\int dr [g(r) - 1] = 0$.

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 divergence de la portée des corrélations (décroissance lente de $g(r)$).

Enfin, remarquons que dans l'approximation du viriel (développement de basse densité de l'équation d'état) $p = nk_B T [1 + n B(T) + \dots]$, l'intégrale est directement proportionnelle au second coefficient du viriel $\int dr [g(r) - 1] \simeq -2B(T)$. À partir du cas du gaz parfait, lorsqu'on



FIGURE 17 – Les deux physiciens hollandais Leonard S. Ornstein (1880-1941) & Frits Zernike (1888-1966).

branche une interaction attractive, $p \searrow$, $B < 0$ et donc $g(r) > 1$ en moyenne. Inversement si on branche une interaction répulsive $p \nearrow$, $B > 0$ et donc $g(r) < 1$ en moyenne (figure 15).

✎ **Exercice 4.2** : 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

$$S(q) = \frac{1}{a} + \frac{2\pi}{a^2} \sum_n \delta\left(q - \frac{2n\pi}{a}\right) \times e^{-\frac{q^2 \hbar}{2m\omega_0} \coth \frac{\hbar\omega_0}{2T}} \quad (84)$$

(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 Bragg²⁶ 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 4.3** : Montrer que la fonction de corrélation de paires associée au facteur de structure (84) est donnée par

$$g(x) = a \sum_n \sqrt{\frac{m\omega_0^2}{4\pi T}} e^{-\frac{m\omega_0^2}{4T}(x-na)^2}. \quad (85)$$

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 4.4** : 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 $\xi_n = x_n - na$.

²⁶ L'idée se généralise facilement en dimension supérieure. Dans ce cas les pics de Bragg seraient 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.

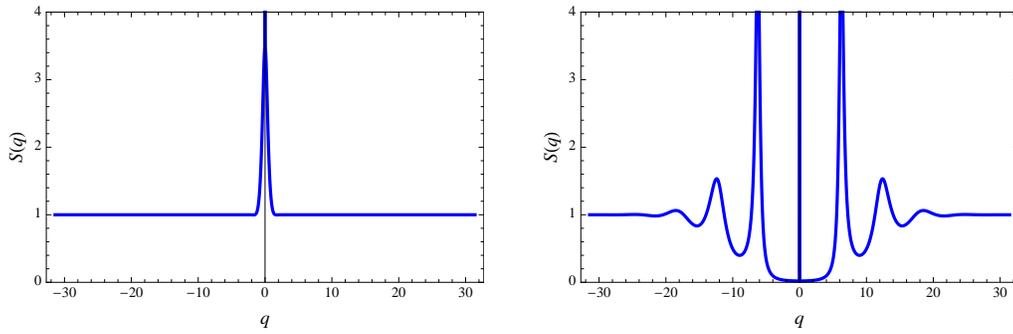


FIGURE 18 – Facteur de structure de la chaîne de ressorts classique, éq. (88), à haute température ($T = 1.75$ avec $m\omega_0^2 = a = 1$) et basse température ($T = 0.01$). Au centre de la figure on a représenté le pic $2\pi\delta(q)$.

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 $n = 1, \dots, N$). Dédire 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

$$S(q) = \frac{1}{a} \sum_n e^{-iqna} e^{-\frac{1}{2}q^2 \langle (\xi_n - \xi_0)^2 \rangle} \quad (86)$$

où

$$\langle (\xi_n - \xi_0)^2 \rangle = \frac{2\hbar}{m\omega_0} \int_{-\pi}^{+\pi} \frac{dQ}{2\pi} \coth\left(\frac{\hbar\omega_0}{T} |\sin(Q/2)|\right) \frac{\sin^2(Qn/2)}{|\sin(Q/2)|} \quad (87)$$

(on a posé $k_B = 1$).

c) Limite classique. – Montrer que dans la limite classique ($\hbar \rightarrow 0$)²⁷ $\langle (\xi_n - \xi_{n'})^2 \rangle = \frac{2T}{m\omega_0^2} |n - n'|$. À quoi correspond ce résultat ? Dans la limite continue, quel processus aléatoire $\xi_n \rightarrow \xi(x = na)$ possède cette propriété ? Montrer que²⁸

$$S_{\text{class}}(q) = \frac{1}{a} \left[\frac{2\pi}{a} \delta(q) + \frac{\sinh\left(\frac{q^2 T}{m\omega_0^2}\right)}{\cosh\left(\frac{q^2 T}{m\omega_0^2}\right) - \cos(qa)} \right] \quad (88)$$

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.

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 19) du fait de l'interaction attractive.

²⁷On 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 $\int_0^{2\pi} \frac{d\theta}{2\pi} \frac{\sinh a \mathcal{O}^{in\theta}}{\cosh a - \cos\theta} = e^{-|n|a}$

²⁸Indications : analyser $S(q)$, éq. (86), pour $q = 0$ et $q \neq 0$ pour un volume N fini. Puis faire $N \rightarrow \infty$.

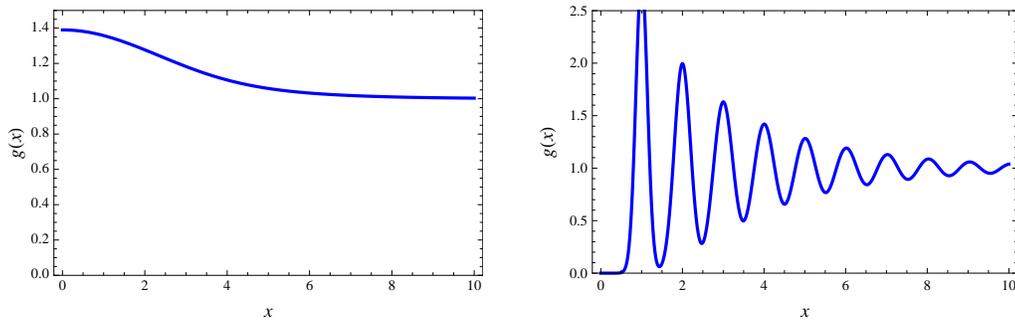


FIGURE 19 – Fonction de corrélation de paires correspondant au facteur de structure de l'éq. (88) (figure 18), à haute température ($T = 1.75$ avec $m\omega_0^2 = a = 1$) et basse température ($T = 0.01$). Les oscillations de période $a = 1$ indiquent l'apparition d'un ordre à courte portée.

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 19, 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 $|n| \ll m\omega_0^2 a^2 / T$.

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 continue²⁹ causée par des interactions à courte portée en dimension $d \leq 2$ est détruite par les fluctuations quantiques et/ou thermiques).

✎ **Exercice 4.5** : Calculer la fonction de corrélation de paires d'un gaz de fermions libres à $T = 0$.

4.3 De la fonction de réponse $\tilde{\chi}(q, \omega)$ 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. (68) (la fonction de réponse sera calculée explicitement dans le chapitre 6, section 6.4). Commençons par décrire les différents types d'excitations du système et comment ils se manifestent dans le facteur de structure $\tilde{S}(q, \omega)$. Je reprends ici essentiellement la discussion très complète de l'ouvrage de Pines & Nozières [67], § 2.4 (on pourra également se reporter aux ouvrages [21, 42]).

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 fermions³⁰ ayant

²⁹Dans l'exercice, la symétrie continue brisée 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).

³⁰Lorsqu'une quasiparticule est introduite dans un état d'énergie $\epsilon_k > \epsilon_F$, 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

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 masse³¹.

Les excitations particule-trou.— Puisque la compressibilité fait intervenir l’opérateur densité $\hat{n}_q = \sum_k \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_{k+q}$ qui conserve le nombre de particules, la représentation de Lehman (67) 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. (68).

Exercice 4.6 : 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 20 & 21).

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 21.

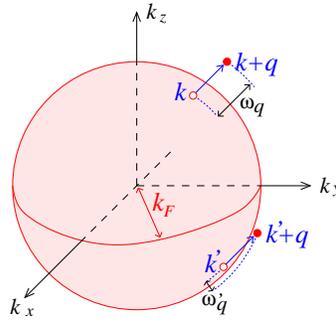


FIGURE 20 – Soit ω_q l’énergie d’une excitation particule-trou de moment q (la sphère représente la mer de Fermi à $T = 0$). La figure illustre qu’à une valeur de q donnée est associé un continuum de valeurs de l’énergie, parmi lesquelles $\omega_q = \epsilon_{k+q} - \epsilon_k$ et $\omega'_q = \epsilon_{k'+q} - \epsilon_{k'}$ du schéma.

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}_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 $\Omega = \omega_{q_1} + \dots + \omega_{q_n}$ (avec $\omega_q = \epsilon_{k+q} - \epsilon_k$). Contrairement au cas précédent, l’énergie est peu contrainte en terme des vecteurs q_i , ce qui indique que la contribution de plusieurs paires à la fonction spectrale est une structure très molle (figure 21).

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

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”.

³¹Cet “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 [13] (m_e est la masse de l’électron nu).

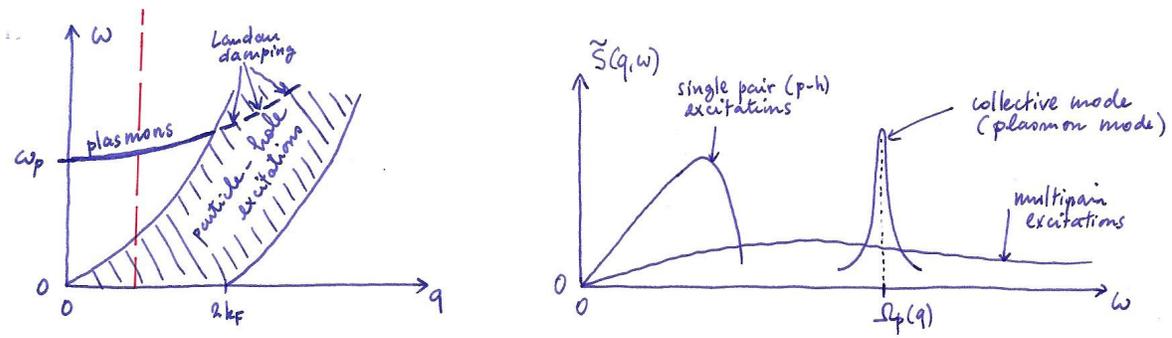


FIGURE 21 – À gauche : Domaine du plan (q, ω) où est concentré le facteur de structure. La zone hachurée représente le continuum particule-trou (exercice 4.6). La ligne la relation de dispersion des plasmons (mode collectif). À droite : Le long de la ligne rouge de la figure gauche, nous représentons 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”.

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 fréquences³² $\Omega_q \simeq \omega_p + a q^2$. 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 harmonique³³, éq. (63) : $\tilde{\chi}(q, \omega) \propto \frac{1}{\Omega_q^2 - (\omega + i0^+)^2}$. On s’attend donc à observer une *divergence* de la fonction de réponse, sur le spectre des modes propres, $\omega = \Omega_q$. En pratique ces résonances sont amorties et la fonction de réponse présente la structure

$$\tilde{\chi}(q, \omega) \sim \frac{1}{\omega - \Omega_q + i/\tau_q} \quad (89)$$

Nous illustrons cette discussion sur la figure 21 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 22, une autre illustration est donnée de cette idée générale de la divergence de la fonction de réponse sur le spectre des excitations.

4.4 Un mot sur les règles de somme

Les règles de somme du type de la règle de somme de Thomas-Reich-Kuhn discutée précédemment (exercice 3.4 page 24) 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 [67].

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_q

³²Dans un gaz de fermions neutre on parle de “zero sound”, associé à une relation de dispersion linéaire $\Omega_q \simeq c|q|$. *c.f.* §3.3 de la Ref. [67].

³³Rappelons qu’identifier les modes propres d’un système correspond à écrire son hamiltonien sous forme quadratique $H = \sum_q \Omega_q a_q^\dagger a_q + (\text{interactions résiduelles})$.

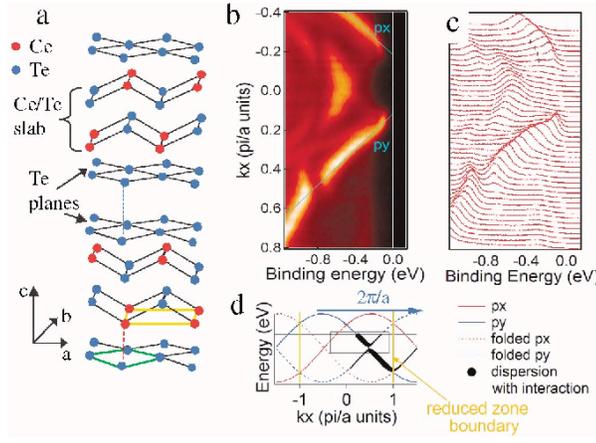


FIG. 2 (color). (a) Sketch of the CeTe_3 structure, indicating the unit cells corresponding to the orange and green BZ represented in Fig. 1. (b) Color-scale image and (c) Energy-distribution curve stacks of the band structure for $k_y = 0.45\pi/a$. In (b), the light blue lines are guide for the eyes. (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 22 – 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).

la composante de Fourier de l’opérateur densité. Nous introduisons les “forces d’oscillateurs” $f_{n0} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{2m_e}{q^2} \omega_{n0} |(n_q)_{0n}|^2$, analogues à celles de l’exercice 3.4.

Nous utilisons trois ingrédients :

- l’invariance par renversement du sens du temps³⁴ permet d’écrire $\sum_n f_{n0} = \frac{m_e}{q^2} \langle 0 | [[n_q, H], n_q^\dagger] | 0 \rangle$.
- La conservation du nombre de particules, $\dot{n}_q = -iq J_q$, prend la forme $[n_q, H] = q J_q$ où J_q est la composante de Fourier de l’opérateur courant.
- La relation³⁵ $[J_q, n_q^\dagger] = \frac{N}{m_e} q$ où N est le nombre de particules.

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

$$\sum_n f_{n0} = N \quad (90)$$

Règle de somme pour le facteur de structure à $T = 0$ K.– La règle de somme (90) conduit à un nouveau type de contrainte sur les fonctions de corrélation. Pour le voir, nous introduisons le facteur de structure : $S(q, t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{\text{Vol}} \frac{1}{2\pi} \langle 0 | n_q(t) n_{-q} | 0 \rangle$. Une transformée de Fourier sur le temps conduit à :

$$\tilde{S}(q, \omega) = \frac{1}{\text{Vol}} \sum_n |(n_q)_{0n}|^2 \delta(\omega - \omega_{n0}) \quad (91)$$

³⁴qui 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 $(n_{-q})_{0n} = (n_q)_{0m}$.

³⁵Pour prouver la relation on peut exprimer les deux opérateurs en seconde quantification : $n_q = \sum_k c_k^\dagger c_{k+q}$ et $J_q = \frac{1}{m_e} \sum_k (k + q/2) c_k^\dagger c_{k+q}$. Il est facile de vérifier que $[J_q, n_{-q}^\dagger] = \frac{q'}{m_e} n_{q-q'}$.

Si $n(r)$ correspond à la densité d'atomes dans un liquide ou un cristal, le facteur de structure $\tilde{S}(q, \omega)$ peut être mesuré directement par diffraction de neutrons. Notons que $\tilde{S}(q, \omega < 0) = 0$, conséquence de la relation de bilan détaillé à $T = 0$ K. La règle de somme (90) se réécrit

$$\int_0^\infty d\omega \omega \tilde{S}(q, \omega) = \frac{q^2}{2m_e} \frac{N}{\text{Vol}} \quad (92)$$

La relation se généralise au cas des températures $T > 0$ en étendant l'intégrale à \mathbb{R} [67].

Notons qu'il est possible de trouver d'autres règles de somme pour la fonction spectrale (par exemple la relation d'Ornstein-Zernike). On en trouvera une liste au §4.2 de la réf. [67]. 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.

☺ 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 excitations élémentaires) 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), sections 4.3 (p. 32) & 6.5 (p. 62).
 - 2) les magnons (ondes d'aimantation), problème de l'annexe B.
- Lorsque qu'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_q) , mais est une fonction régulière qui augmente dans le domaine du plan (q, ω_q) correspondant au continuum (je recommande la lecture du § 2.4 de l'ouvrage [67]).

Annexe : différents régimes de diffusion

Nous prenons un peu de recul et discutons les différents régimes de collision possibles. Considérons une cible constituée d'un ensemble de diffuseurs à des positions $\{\vec{r}_i\}$ (le système dont nous sondons la structure et/ou la dynamique). Nous notons $\mathcal{A}_i(\vec{k}', \vec{k})$ l'amplitude de diffusion sur le diffuseur en \vec{r}_i (supposé immobile pour simplifier la discussion).

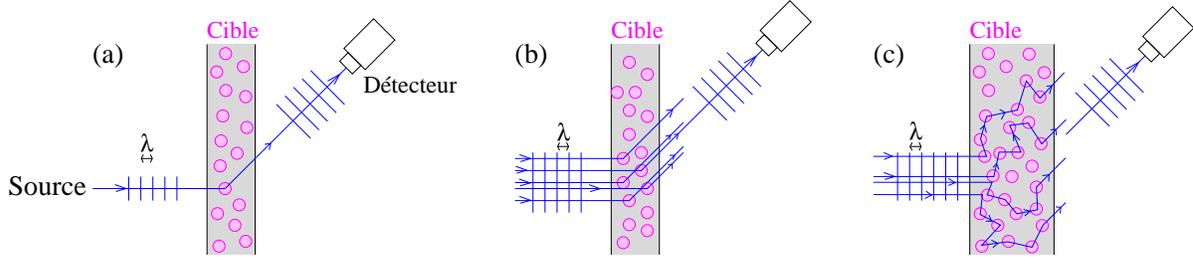


FIGURE 23 – Onde (lumière, électrons, neutrons, particules α ...) envoyée sur une cible. Les ronds représentent les centres diffuseurs de la cible (les atomes par exemple). Seule est représentée une direction de l'onde diffusée, celle sélectionnée par le détecteur (l'onde est bien entendu diffusée dans toutes les directions en général). (a) : Diffusion simple. (b) : Diffraction de Bragg. (c) : Diffusion multiple.

Diffusion simple.— La probabilité d'être diffusée dans la direction \vec{k}' est donnée par $|\mathcal{A}_i(\vec{k}', \vec{k})|^2$. Donc nous pourrions calculer l'intensité totale dans la direction \vec{k}' comme une somme des intensités associées à chaque diffuseur :

$$I_{\text{simple}}(\vec{k}') \propto \sum_{\text{diffuseur } i} |\mathcal{A}_i(\vec{k}', \vec{k})|^2. \quad (93)$$

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 : $I_{\text{simple}}(\vec{k}') \propto \mathcal{N}_{\text{diff}} |\mathcal{A}(\vec{k}', \vec{k})|^2 \propto \frac{\alpha^2}{\|\vec{k}' - \vec{k}\|^4} \propto \frac{\alpha^2}{E_c^2(1 - \cos\theta)^2}$ où $\alpha = e^2/\hbar c$ et θ l'angle de diffusion (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 :

$$I_{\text{Bragg}}(\vec{k}') \propto \left| \sum_{\text{diffuseur } i} \mathcal{A}_i(\vec{k}', \vec{k}) \right|^2. \quad (94)$$

Ce régime 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).

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 $\mathcal{C} = (r_{i_1}, r_{i_2}, \dots, r_{i_N})$, auquel nous associons une amplitude de diffusion. Nous pouvons considérer un régime de diffusion multiple *incohérent*, pour lequel l'intensité totale est donnée par

$$I_{\text{Mult.}}^{(\text{incoh.})}(\vec{k}') \propto \sum_{\text{chemin } \mathcal{C}} |\mathcal{A}_{\mathcal{C}}(\vec{k}', \vec{k})|^2, \quad (95)$$

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 [46, 4].

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 :

$$I_{\text{Mult.}}^{(\text{coh.})} \propto \left| \sum_{\text{chemin } \mathcal{C}} \mathcal{A}_{\mathcal{C}}(\vec{k}', \vec{k}) \right|^2. \quad (96)$$

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 6.7). 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 angulaire 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* (si la diffusion est élastique et l'onde décrite par un champ scalaire) l'intensité exactement à la rétrodiffusion : cette structure est appelée *l'albedo* cohérent (ou coherent backscattering) [4] (attention à ne pas confondre l'angle de diffusion, entre \vec{k}' et \vec{k} , en question ici, avec l'angle d'incidence sur la cible, qui ne joue aucun rôle dans la discussion). Elle est de même nature (mais pas strictement équivalente) que la correction de localisation faible dans un métal (section 6.7.5) et trouve son origine dans les interférences entre chemins de collision multiple renversés.

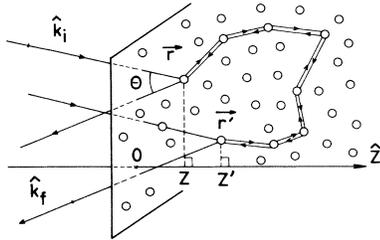


FIG. 1. Geometry used for the calculation of the coherent albedo, showing two interfering light paths.

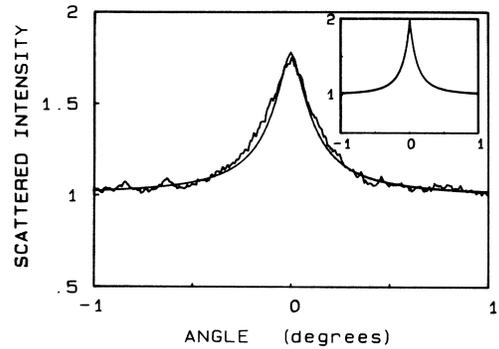


FIG. 2. Comparison between experimental and theoretical line shapes for the coherent backscattering. The experimental recording is taken from Ref. 8 [Fig. 3(a)]. The inset represents the bare theoretical curve taken from Eq. (5) with $\lambda = 0.515 \mu\text{m}$ and $l^* = 19 \mu\text{m}$. The full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

FIGURE 24 – *Pic d'albedo : comparaison entre la théorie et l'expérience (figures tirées de [6]). 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 $n_{\text{eau}} = 1.33$) [82].*

5 Dissipation quantique

Bien que nous ayons identifié une partie dissipative dans la fonction de réponse, nous n'avons pas encore discuté 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. Nous allons maintenant 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 [55, 26], pour l'étude du tunneling [22], et plus récemment en physique mésoscopique [44, 43, 70]. Citons également quelques références générales [23, 71, 81, 40]. 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 5.2 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 corrélations. 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.

5.1 Introduction : 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 [37].

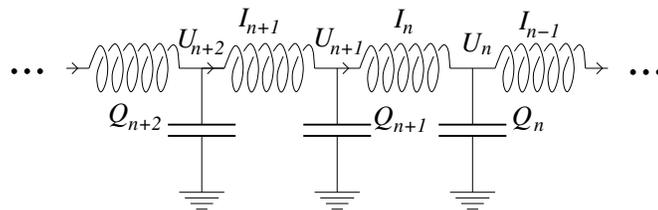


FIGURE 25 – Une ligne de transmission (un câble coaxial) possède une inductance et une capacité. Le ligne de transmission parfaite (sans élément résistif) peut être modélisée comme une série d'éléments (L, C) identiques.

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 $Z_L = -i\omega L$ et $Z_C = -1/i\omega C$. Autrement dit :

$$\tilde{I}_{n+1} - \left(2 + \frac{Z_L}{Z_C}\right) \tilde{I}_n + \tilde{I}_{n-1} = 0 \quad (97)$$

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

$$\omega(q) = \omega_0 |\sin(q/2)| \quad \text{pour } q \in]-\pi, \pi] \quad (98)$$

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

Modes évanescents.— Lorsque la fréquence excède $\omega_0 = 2/\sqrt{LC}$ la ligne ne transmet plus de signal sur de grandes distances. Les solutions de (97) 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

$$\omega(q) = \omega_0 \cosh(q/2) \quad \text{pour } q \in \mathbb{R} \quad (99)$$

Notons que lorsqu'un signal est injecté à fréquence légèrement supérieure au seuil, $\omega = \omega_0 + \delta\omega$, il se propage 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 :

$$Z_{n+1} = Z_L + Z_C \parallel Z_n \quad (100)$$

L'impédance de la ligne semi-infinie est solution de $Z_\infty = Z_L + \frac{1}{1/Z_C + 1/Z_\infty}$ (cf. [53] pour une discussion précise de l'existence d'une limite). Pour des fréquences appartenant au spectre des modes propagatifs nous obtenons :

$$Z(\omega) = R_{LC} \sqrt{1 - (\omega/\omega_0)^2} - i \frac{L\omega}{2} \quad \text{pour } 0 \leq \omega \leq \omega_0 \quad (101)$$

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

$$Z(\omega) = -i \frac{L\omega}{2} \sqrt{(\omega_0/\omega)^2 - 1} - i \frac{L\omega}{2} \quad \text{pour } \omega \geq \omega_0 \quad (102)$$

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.

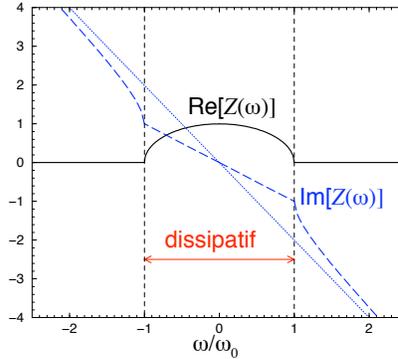


FIGURE 26 – Impédance de la ligne de transmission semi infinie.

Rq. : *Quantification du circuit L-C.* – D’un point de vue théorique, cette remarque suggère une façon de modéliser un composant dissipatif dans un cadre hamiltonien. Pour cela le point de départ est de construire l’hamiltonien d’un circuit L-C. L’énergie de la bobine (terme cinétique) est $E_L = LI^2/2$ et celle de la capacité (terme potentiel) est $E_C = Q^2/2C$. Le lagrangien est donc donné par : $L(Q, \dot{Q}) = \frac{L}{2}\dot{Q}^2 - \frac{1}{2C}Q^2$. Le moment conjugué $\frac{\partial L}{\partial \dot{Q}} = L\dot{Q} = \phi$ est le flux dans la bobine. L’hamiltonien est fonction des deux variables canoniquement conjuguées : $H(\phi, Q) = \frac{1}{2L}\phi^2 + \frac{1}{2C}Q^2$. On pourrait construire le hamiltonien d’un système plus complexe. Cette remarque peut également servir à quantifier le problème en imposant : $[Q, \phi] = i\hbar$. La ligne de transmission quantifiée est un modèle d’élément résistif couramment utilisé en physique mésoscopique [44, 81, 43].

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 posséder 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 5.3.

5.2 Bruit quantique : version quantique du théorème de Nyquist

En 1951, Callen & Welton [23] ont généralisé le théorème de Nyquist³⁶ au cas quantique en utilisant la règle d’or de Fermi et ont retrouvé la relation (55) 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

$$\hat{H}(t) = \hat{H}_0 + \hat{Q}V(t) \quad \text{avec } V(t) = V_\omega \cos \omega t \quad (103)$$

$\omega > 0$ 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 normalisés³⁷ 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 $\langle \dot{Q}^2 \rangle$.

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

³⁶Comme 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 : $S_V = 2k_B T R$ où $S_V = \int dt \langle V(t)V(0) \rangle$.

³⁷Ce 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 $\sum_{\sigma=\pm} \int dE |\psi_{E,\sigma}\rangle \langle \psi_{E,\sigma}| = 1$.

l'état $|E\rangle$ est donné par :

$$\Gamma_E = \frac{\pi}{2\hbar} V_\omega^2 \sum_{E'} |\langle E' | Q | E \rangle|^2 [\delta(E' - E - \hbar\omega) + \delta(E' - E + \hbar\omega)] = \Gamma_{E,\text{abs}} + \Gamma_{E,\text{em}} \quad (104)$$

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

$$\Gamma_{E,\text{abs}} = \frac{\pi}{2\hbar} V_\omega^2 |\langle E + \hbar\omega | Q | E \rangle|^2 \quad \text{et} \quad \Gamma_{E,\text{em}} = \frac{\pi}{2\hbar} V_\omega^2 |\langle E - \hbar\omega | Q | E \rangle|^2 \quad (105)$$

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 par³⁸ :

$$\mathcal{P}_\omega = \hbar\omega \int dE f(E) (\Gamma_{E,\text{abs}} - \Gamma_{E,\text{em}}) \quad (106)$$

$$= \frac{1}{2} \pi \omega V_\omega^2 (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \int dE f(E) |\langle E + \hbar\omega | Q | E \rangle|^2 \quad (107)$$

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 :

$$\text{Re} Y(\omega) = \pi \omega (1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \int dE f(E) |\langle E + \hbar\omega | Q | E \rangle|^2. \quad (108)$$

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

$$\langle \dot{Q}^2 \rangle = \hbar \int d\omega \omega^2 \int dE f(E) |\langle E + \hbar\omega | Q | E \rangle|^2 \quad (109)$$

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 (109). 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 symétrisée³⁹. Nous exprimons plutôt les fluctuations de tension $V_\omega = \dot{Q}_\omega / Y(\omega)$, caractérisées par

$$\tilde{S}_{VV}(\omega) = \frac{\tilde{S}_{\dot{Q}\dot{Q}}(\omega)}{|Y(\omega)|^2} = \frac{\pi \hbar \omega^2}{|Y(\omega)|^2} (1 + e^{-\beta\hbar\omega}) \int dE f(E) |\langle E + \hbar\omega | Q | E \rangle|^2 \quad (110)$$

³⁸On 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 $dE \hbar\omega(\Gamma_{E,\text{abs}} - \Gamma_{E,\text{em}})$.

³⁹Le 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.

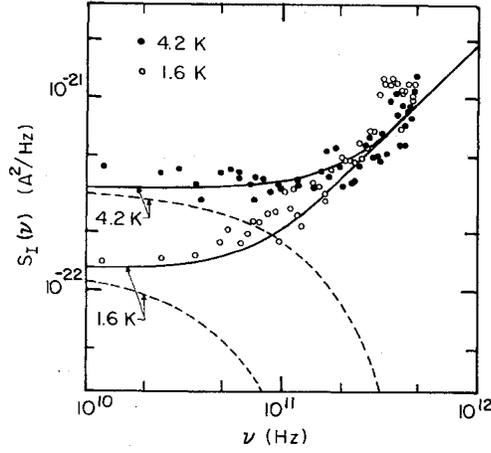


FIG. 3. Measured spectral density of current noise in shunt resistor vs the Josephson frequency $\nu = 2eV/h$ at 4.2 K (solid circles) and 1.6 K (open circles). Solid lines are predictions of Eq. (2), while dashed lines are $(4h\nu/R)|\exp(h\nu/k_B T) - 1|^{-1}$.

FIGURE 27 – 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 éq. (112). La ligne pointillée à la conjecture de Nyquist (1928) négligeant la contribution du vide.

Théorème fluctuation-dissipation

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

$$\langle |V_\omega|^2 \rangle \equiv \tilde{S}_{VV}(\omega) = \text{Re}[Z(\omega)] \hbar\omega \coth \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \quad (111)$$

qui est la relation trouvée par Callen & Welton⁴⁰. Nous récrivons ce résultat de façon plus suggestive :

$$\tilde{S}_{VV}(\omega) = 2 \overbrace{\text{Re}[Z(\omega)]}^{\text{couplage au champ}} \underbrace{\left(\frac{\hbar\omega}{2} + \frac{\hbar\omega}{e^{\beta\hbar\omega} - 1} \right)}_{\text{énergie du mode } \omega} \quad (112)$$

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 [66] 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 vide⁴¹.

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 température⁴² $T = 1$ K, la tran-

⁴⁰Cette équation est directement donnée par (55) 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 : $\tilde{\xi}_{II} = \text{Im} \tilde{\chi}_{II} = \text{Im}[i\omega \tilde{\chi}_{IQ}] = \omega \text{Re}[Y]$.

⁴¹Nous 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.

⁴²Dans 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).

sition classique/quantique se produit déjà pour de très hautes fréquences (du point de vue de l'électronique) $\omega = k_B T / \hbar \sim 140 \text{ GHz}$! 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 Josephson ⁴³ [50]. La mesure [51] a été effectuée 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 27).

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 $f(E) \propto e^{-\beta E}$, alors qu'en suivant les idées de la page 13 nous aurions préféré imposer l'équilibre thermodynamique au niveau du réservoir d'énergie.

5.3 Un modèle complètement quantique : couplage à un environnement

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 distribués 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 :

$$H = H_{\text{sys}}(p, q) - \underbrace{q \sum_k \tilde{g}_k \chi_k}_{\text{couplage}} + \underbrace{\sum_k \frac{1}{2} (\pi_k^2 + \Omega_k^2 \chi_k^2)}_{\text{environnement}} . \quad (113)$$

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 $(ap + bq) \sum_k (\alpha_k \pi_k + \beta_k \chi_k)$, où a, b, α_k et β_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. 13). Ce modèle est étudié dans l'annexe A, page 88.

Nous allons maintenant procéder à une simplification qui ne remet pas en cause le fond de la discussion mais simplifiera les calculs. Nous considérons le cas où le système est un oscillateur harmonique : $H_{\text{sys}}(p, q) = \frac{1}{2}(p^2 + \omega_0^2 q^2)$. Nous réécrivons l'hamiltonien en fonction des opérateurs de création/annihilation :

$$H = \underbrace{\omega_0 (a^\dagger a + 1/2)}_{H_0} + \underbrace{a^\dagger \sum_k g_k b_k}_{H_{\text{int}}} + \underbrace{h.c. + \sum_k \Omega_k (b_k^\dagger b_k + 1/2)}_{H_{\text{Bath}}} \quad (114)$$

⁴³Nous rappelons qu'une jonction Josephson est constituée par deux supraconducteurs séparés par une petite 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.

Ce modèle est standard et on peut en trouver de nombreuses études : par exemple dans [71, 43, 40]. Il est pertinent pour décrire diverses situations. Nous en énumérons quelques unes :

1. le problème de mouvement brownien quantique : on étudie le mouvement d'une particule couplée au bain (*cf.* annexe A) [43, 40].
2. Le modèle de Caldeira-Leggett pour étudier la compétition entre tunneling et fluctuations thermiques dans l'analyse de la sortie d'un état métastable (le modèle (113) pour un potentiel $V(q)$ présentant un état métastable) [22].
3. Le circuit RLC quantique : le circuit LC est l'oscillateur. Le bain d'oscillateurs décrit l'élément résistif (un article pédagogique est [83] ; le cas des circuits plus complexes dans [84]).

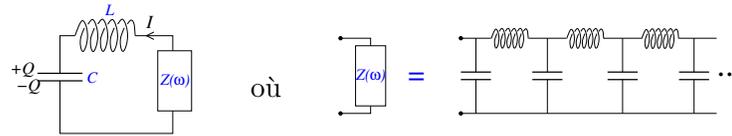


FIGURE 28 – Description hamiltonienne du circuit RLC.

4. Une variante du modèle (114) 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 non résonant (on parle d'équation pilote pour l'évolution de l'opérateur densité de l'atome, *cf.* le chapitre IV de [26]), un système mésoscopique à deux niveaux (Qbit) en présence d'un élément résistif [70], etc.

Objectif : Calculer une fonction de réponse $\tilde{\chi}_{xx}(\omega)$ de l'oscillateur dans le cadre de ce modèle quantique.

Remarquons que

$$\chi_{xx}(t) = i\theta(t)\langle [x(t), x] \rangle \quad (115)$$

$$= \frac{i\theta(t)}{2\omega_0} \left(\langle [a(t), a^\dagger] \rangle + \langle [a^\dagger(t), a] \rangle \right) = \frac{i\theta(t)}{2\omega_0} \left(\langle [a(t), a^\dagger] \rangle - \langle [a(t), a^\dagger]^* \rangle \right) \quad (116)$$

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

$$G^{\text{Ret}}(t) \stackrel{\text{def}}{=} -i\theta(t)\langle [a(t), a^\dagger] \rangle \quad (117)$$

🔗 **Exercice 5.2** : Fonction de Green avancée.– On introduit : $G^{\text{Adv}}(t) \stackrel{\text{def}}{=} i\theta(-t)\langle [a(t), a^\dagger] \rangle$. Montrer que

$$[G^{\text{Adv}}(t)]^* = G^{\text{Ret}}(-t) \quad (118)$$

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

$$\chi_{xx}(t) = -\frac{1}{\omega_0} \text{Re } G^{\text{Ret}}(t) \quad (119)$$

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 $t \rightarrow -i\tau$.

5.3.1 Formalisme de Matsubara

Le formalisme de Matsubara des fonctions de Green à température finie [59, 62, 21, 7] 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 51 que ce modèle peut être étudié par une méthode plus directe.

On définit

$$G(\tau, \tau') \stackrel{\text{def}}{=} -\langle T_\tau a_M(\tau) a_M^\dagger(\tau') \rangle \quad \text{pour } \tau, \tau' \in [-\beta, \beta] \quad (120)$$

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

$$T_\tau [A_M(\tau) B_M(\tau')] = A_M(\tau) B_M(\tau') \quad \text{si } \tau > \tau' \quad (121)$$

$$= B_M(\tau') A_M(\tau) \quad \text{si } \tau < \tau' \quad (122)$$

(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) ⁴⁴, 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 :

$$G(\tau) \stackrel{\text{def}}{=} -\langle T_\tau a_M(\tau) a_M^\dagger(0) \rangle \quad \text{pour } \tau \in [-\beta, \beta] \quad (123)$$

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

✎ **Exercice 5.3** : 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 :

$$G(\tau) = \frac{1}{\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \tilde{G}(i\omega_n) e^{-i\omega_n \tau} \quad (124)$$

$$\tilde{G}(i\omega_n) = \int_0^\beta d\tau G(\tau) e^{i\omega_n \tau} \quad (125)$$

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

✎ **Exercice 5.4** : 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 : $\tilde{G}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \omega_0}$.

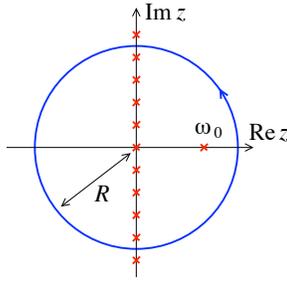


FIGURE 29 – Contour permettant de démontrer (127).

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

$$f(z) = \frac{1}{e^{\beta z} - 1} \quad (126)$$

Le contour est un cercle de rayon R (figure 29). 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 :

$$\frac{1}{\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \varphi(i\omega_n) = - \sum_{\ell} f(z_\ell) \text{Résidu}[\varphi(z); z_\ell] \quad (127)$$

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 cercles⁴⁵.

Exemple : Retrouvons l'expression de la fonction de Green aux temps négatifs dans le cas libre $G(\tau < 0) = \frac{1}{\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{e^{-i\omega_n \tau}}{i\omega_n - \omega_0}$. Nous devons choisir $\varphi(z) = \frac{e^{-z\tau}}{z - \omega_0}$. On vérifie que la fonction possède les bonnes propriétés⁴⁶. Finalement l'éq. (127) nous donne $G(\tau < 0) = -f(\omega_0)e^{-\omega_0\tau}$, qui est bien l'expression attendue.

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 :

$$\chi^{\text{Ret}}(t) \stackrel{\text{def}}{=} -i\theta(t) \langle [A_H(t), B_H(0)] \rangle \quad (128)$$

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

$$\tilde{\chi}^{\text{Ret}}(\omega) = \frac{1}{Z\beta} \sum_{n,m} A_{nm} B_{mn} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{\omega + E_n - E_m + i0^+} \quad (129)$$

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

⁴⁴Par 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 $\langle T_\tau a_M(\tau) [a_M(\tau')]^\dagger \rangle = \langle a a^\dagger \rangle e^{-\omega_0(\tau + \tau')}$

⁴⁵Lorsque $\varphi(z)$ possède une coupure sur \mathbb{R} mais pas de pôle, on montre que $\frac{1}{\beta} \sum_{n \in \mathbb{Z}^*} \varphi(i\omega_n) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dx f(x) \text{Im} \varphi(x + i0^+)$.

⁴⁶ $\oint dz f(z)\varphi(z) \rightarrow 0$ 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.

Définissons la fonction de Green en temps imaginaire correspondante :

$$\chi^{\text{Mat}}(\tau) \stackrel{\text{def}}{=} -\langle T_\tau A_M(\tau) B_M(0) \rangle \quad (130)$$

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

$$\tilde{\chi}^{\text{Mat}}(i\omega_p) = \frac{1}{Z_\beta} \sum_{n,m} A_{nm} B_{mn} \frac{e^{-\beta E_n} - e^{-\beta E_m}}{i\omega_p + E_n - E_m} \quad (131)$$

On voit donc que

$$\boxed{\tilde{\chi}^{\text{Ret}}(\omega) = \tilde{\chi}^{\text{Mat}}(i\omega_p \rightarrow \omega + i0^+)} \quad (132)$$

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'interaction⁴⁷ $\mathcal{U}(\tau) \stackrel{\text{def}}{=} e^{\tau H_0} e^{-\tau H}$ obéit à l'équation

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \mathcal{U}(\tau) = -H_I(\tau) \mathcal{U}(\tau) \quad (133)$$

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

$$\mathcal{U}(\beta) = T_\tau \exp - \int_0^\beta d\tau H_I(\tau) \quad (134)$$

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

$$G(\tau) = -\langle T_\tau a_M(\tau) a_M^\dagger(0) \rangle = -\frac{\langle T_\tau \mathcal{U}(\beta) a(\tau) a^\dagger \rangle_0}{\langle \mathcal{U}(\beta) \rangle_0} \quad (135)$$

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 :

$$\begin{aligned} & \langle T_\tau a(\tau_1) a^\dagger(\tau_2) \cdots a(\tau_{2n-1}) a^\dagger(\tau_{2n}) \rangle \\ &= \langle T_\tau a(\tau_1) a^\dagger(\tau_2) \rangle \times \cdots \times \langle T_\tau a(\tau_{2n-1}) a^\dagger(\tau_{2n}) \rangle + (\text{autres contractions}) \end{aligned} \quad (136)$$

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.

⁴⁷Si H_{int} dépend du temps on définit $U(t)$ par $\frac{\partial}{\partial \tau} U(\tau) = -H(\tau) U(\tau)$ et $U(\tau) \stackrel{\text{def}}{=} e^{\tau H_0} U(t)$.

5.3.2 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 :

$$\tilde{G}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \omega_0} \quad (137)$$

$$\tilde{D}_k(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \Omega_k} \quad (138)$$

▣ **Exercice 5.5** : Vérifier qu'à l'ordre 2 de la méthode des perturbations

$$\tilde{\mathcal{G}}(i\omega_n) = \tilde{G}(i\omega_n) + \tilde{G}(i\omega_n) \sum_k |g_k|^2 \tilde{D}_k(i\omega_n) \tilde{G}(i\omega_n) + \dots \quad (139)$$

En déduire les règles de Feynman.

On introduit la *self énergie* :

$$\Sigma(i\omega_n) \stackrel{\text{def}}{=} \sum_k |g_k|^2 \tilde{D}_k(i\omega_n) = \sum_k \frac{|g_k|^2}{i\omega_n - \Omega_k} \quad (140)$$

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.

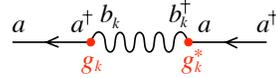


FIGURE 30 – Représentation diagrammatique de la correction perturbative d'ordre 2 calculée dans l'exercice 5.5. Les points représentent les interactions.

La fonction de Green est simplement donnée par une série géométrique⁴⁸ :

$$\tilde{\mathcal{G}}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \omega_0 - \Sigma(i\omega_n)} \quad (141)$$

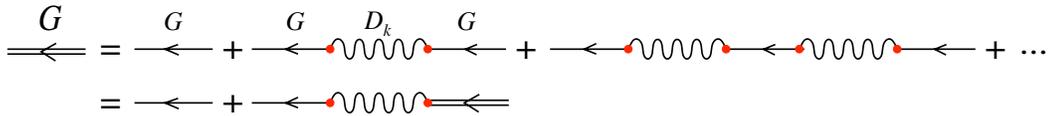


FIGURE 31 – Représentation diagrammatique de la série géométrique conduisant au résultat (141). La deuxième ligne représente l'équation de Dyson de la note de bas de page numéro 48.

▣ **Exercice 5.6** : Dans l'hamiltonien (114), 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.

⁴⁸ 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 $\tilde{\mathcal{G}}(i\omega_n) = \frac{1}{\tilde{G}(i\omega_n)^{-1} - \Sigma(i\omega_n)}$.

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

$$\Sigma^{\text{Ret}}(\omega) = \sum_k \frac{|g_k|^2}{\omega - \Omega_k + i0^+} \quad (142)$$

dont la partie imaginaire

$$-\text{Im} \Sigma^{\text{Ret}}(\omega) = \pi \sum_k |g_k|^2 \delta(\omega - \Omega_k) \quad (143)$$

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 :

$$\tilde{\mathcal{G}}^{\text{Ret}}(\omega) = \frac{1}{\omega - \omega_0 - \Sigma^{\text{Ret}}(\omega)} \simeq \frac{1}{\omega - \omega_0 - \delta\omega_0 + i/2\tau_0} \quad (144)$$

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

$$\tilde{\chi}_{xx}(\omega) = -\frac{1}{2\omega_0} \left[\tilde{\mathcal{G}}^{\text{Ret}}(\omega) + \tilde{\mathcal{G}}^{\text{Adv}}(-\omega) \right] \simeq \frac{1}{-\omega^2 + \omega_R^2 + \frac{1}{4\tau_0^2} - \frac{i}{2\tau_0}\omega} \quad (145)$$

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 :

$$\overline{\mathcal{P}}_{\text{diss}} \propto \omega \text{Im} \tilde{\chi}_{xx}(\omega) \propto \frac{\omega^2}{(\omega^2 - \omega_{\text{tot}}^2)^2 + \omega^2/4\tau_0^2} \quad (146)$$

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

▣ **Exercice 5.7** : Montrer que la fonction de Green des oscillateurs est donnée par :

$$\tilde{D}_{k,k'}(i\omega_n) = \delta_{k,k'} \tilde{D}_k(i\omega_n) + g_k^* g_{k'} \tilde{D}_k(i\omega_n) \tilde{\mathcal{G}}(i\omega_n) \tilde{D}_{k'}(i\omega_n) \quad (147)$$

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 initiaux⁴⁹.

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

$$\begin{cases} \dot{x} = p \\ \dot{p} = -\int dt' \gamma(t-t') p(t') - \omega_0^2 x + F(t) \end{cases} \quad (148)$$

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

$$\tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{\omega_0^2 - \omega^2 - i\omega\tilde{\gamma}(\omega)} \simeq -\frac{1}{2\omega_0} \frac{1}{\omega - \omega_0 + i\tilde{\gamma}(\omega_0)/2} \quad (149)$$

⁴⁹J'insiste : il n'était nul besoin du formalisme de Matsubara pour étudier le modèle (114). Celui-ci nous a servi d'alibi pour introduire une méthode populaire.

Les fonctions de Green peuvent être retrouvées plus simplement en reliant l'hamiltonien (114) à une matrice : $H = A^\dagger \mathcal{H} A$ où le vecteur colonne A regroupe tous les opérateurs d'annihilation $A^\dagger = (a \cdots b_k \cdots)$. 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.

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 couplage⁵⁰ $g_k a^\dagger b_k + g_k^* a b_k^\dagger$ le modèle décrit par (114) correspond à une version plus symétrique :

$$\begin{cases} \dot{x} &= -\frac{\gamma}{2}x + p + F_x(t) \\ \dot{p} &= -\frac{\gamma}{2}p - \omega_0^2 x + F_y(t) \end{cases} \quad (150)$$

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. (145).

5.3.3 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.

Idee générale. – Nous décrivons la stratégie présentée dans l'ouvrage [40] 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 .

La méthode permet l'analyse de l'hamiltonien (113).

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 (113) 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

⁵⁰Le terme de friction usuel apparaît pour un choix de couplage de la forme $(a + a^\dagger)(b_k + b_k^\dagger)$.

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 [56], § 9.3.3).

Mettons ce programme en œuvre pour l'hamiltonien (114). 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

$$\frac{d}{dt}\hat{a}(t) = -i\omega_0\hat{a}(t) - i\sum_k g_k\hat{b}_k(t) \quad (151)$$

$$\frac{d}{dt}\hat{b}_k(t) = -i\Omega_k\hat{b}_k(t) - ig_k^*\hat{a}(t) \quad (152)$$

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

$$\hat{b}_k(t) = \hat{b}_k(0)e^{-i\Omega_k t} - ig_k^* \int_0^t dt' \hat{a}(t') e^{-i\Omega_k(t-t')} \quad (153)$$

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

$$\boxed{\frac{d}{dt}\hat{a}(t) = -i\omega_0\hat{a}(t) - \int_0^t dt' \gamma(t-t')\hat{a}(t') + \hat{\xi}(t)} \quad (154)$$

où la *fonction* complexe

$$\gamma(t) \stackrel{\text{def}}{=} \theta(t) \sum_k |g_k|^2 e^{-i\Omega_k t} \quad (155)$$

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

$$\hat{\xi}(t) \stackrel{\text{def}}{=} -i \sum_k g_k \hat{b}_k e^{-i\Omega_k t} \quad (156)$$

exprimé comme une somme tous les degrés de liberté de l'environnement, joue le rôle de "bruit" pour l'oscillateur harmonique. Notons que

$$[\hat{\xi}(t), \hat{\xi}^\dagger(0)] = \gamma(t) \quad (\text{sans la fct } \theta(t)) \quad (157)$$

L'équation (154) a bien la structure d'une équation de Langevin, pour des opérateurs.

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. (155) 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. (154), l'intégrale $\int_0^t dt' \gamma(t')\hat{a}(t-t')$ 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 $\hat{a}(t-t') \rightarrow \hat{a}(t)e^{i\omega_0 t'}$. 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'infini. Ces remarques nous permettent de simplifier le terme de friction selon

$$\int_0^t dt' \gamma(t') \hat{a}(t-t') \simeq \hat{a}(t) \int_0^t dt' \gamma(t') e^{i\omega_0 t'} \simeq \hat{a}(t) \int_0^\infty d\tau \gamma(\tau) e^{i\omega_0 \tau} \quad (158)$$

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

$$\Gamma = 2\pi \sum_k |g_k|^2 \delta(\omega_0 - \Omega_k) \quad (159)$$

$$\delta\omega_0 = \sum_k \mathcal{P}\mathcal{P} \frac{|g_k|^2}{\omega_0 - \Omega_k} \quad (160)$$

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

$$\boxed{\frac{d}{dt} \hat{a}(t) \simeq -(i\omega_R + \Gamma/2) \hat{a}(t) + \hat{\xi}(t)} \quad (161)$$

où $\omega_R = \omega_0 + \delta\omega_0$. Le couplage introduit un terme de relaxation et renormalise la fréquence de l'oscillateur. On peut résoudre formellement cette équation

$$\hat{a}(t) = \hat{a}(0) e^{-(i\omega_R + \Gamma/2)t} + \int_0^t dt' \hat{\xi}(t') e^{-(i\omega_R + \Gamma/2)(t-t')} \quad (162)$$

Cette solution va nous permettre de calculer les différentes fonctions de corrélation.

Afin d'aller plus loin, nous faisons l'hypothèse supplémentaire que les oscillateurs sont à l'équilibre thermodynamique⁵¹ : $\langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle = \delta_{k,k'} \bar{n}_k$ 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 :

$$\langle \xi^\dagger(t) \xi(0) \rangle = \sum_k |g_k|^2 \bar{n}_k e^{i\Omega_k t} \quad \text{et} \quad \langle \xi(t) \xi^\dagger(0) \rangle = \sum_k |g_k|^2 (\bar{n}_k + 1) e^{-i\Omega_k t} \quad (163)$$

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

$$\sum_k |g_k|^2 \varpi(\Omega_k) \frac{e^{-i(\Omega_k - \omega_R)t}}{(\Omega_k - \omega_R)^2 + \Gamma^2/4} \simeq \varpi(\omega_R) e^{-\Gamma|t|/2} \quad (164)$$

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 $\varpi(\Omega_k)$ 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 $\sum_k \frac{|g_k|^2}{(\Omega_k - \omega_R)^2 + \Gamma^2/4} \approx \sum_k |g_k|^2 \frac{\pi}{\Gamma^2} \delta(\Omega_k - \omega_R) = 1$. CQFD.

Occupation moyenne. – Commençons par calculer l'occupation de l'oscillateur. La solution (162) nous donne

$$\langle a(t)^\dagger a(t) \rangle = \langle a(0)^\dagger a(0) \rangle e^{-\Gamma t} + \sum_k |g_k|^2 \bar{n}_k \frac{1 - 2e^{-\Gamma t/2} \cos(\Omega_k - \omega_R)t + e^{-\Gamma t}}{(\Omega_k - \omega_R)^2 + \Gamma^2/4} \quad (165)$$

⁵¹Autrement 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 (114). L'équation (147) suggère que $\langle b_k^\dagger b_{k'} \rangle = \delta_{k,k'} \bar{n}_k + O(g_k^* g_{k'})$.

En vertu du résultat (164) nous pouvons remplacer le $\cos(\Omega_k - \omega_R)t$ dans la somme par $e^{-\Gamma t/2}$

$$\langle a(t)^\dagger a(t) \rangle \simeq \langle a(0)^\dagger a(0) \rangle e^{-\Gamma t} + (1 - e^{-\Gamma t}) \sum_k |g_k|^2 \frac{1}{(\Omega_k - \omega_R)^2 + \Gamma^2/4} \bar{n}_k \quad (166)$$

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, (164) nous donne l'expression plus simple

$$\boxed{\langle a(t)^\dagger a(t) \rangle \simeq \langle a(0)^\dagger a(0) \rangle e^{-\Gamma t} + (1 - e^{-\Gamma t}) \bar{n}(\omega_R)} \quad (167)$$

où $\bar{n}(\omega_R) \equiv \frac{1}{e^{\beta\omega_R} - 1}$. On retrouve une idée vue page 13 : 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 :

$$\boxed{1 + \bar{n}(\omega_R) \ll k_B T / \Gamma} \quad (168)$$

Fonction de Green retardée. – On peut également calculer le commutateur :

$$[a(t), a^\dagger(t')] \simeq \sum_k |g_k|^2 \frac{e^{-i\Omega_k(t-t')}}{(\Omega_k - \omega_R)^2 + \Gamma^2/4} \simeq e^{-i\omega_R(t-t') - \Gamma|t-t'|/2} \quad (169)$$

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

$$\boxed{\mathcal{G}^{\text{Ret}}(t) \simeq -i\theta(t) e^{-(i\omega_R + \Gamma/2)t}} \quad (170)$$

qui est le résultat donné par l'approche diagrammatique, éq.(144).

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 :

$$C_{xx}(t) = \frac{1}{\omega_0} \sum_k \frac{|g_k|^2}{(\Omega_k - \omega_R)^2 + \Gamma^2/4} \left[\bar{n}_k \cos \Omega_k t + \frac{1}{2} e^{-i\Omega_k t} \right] \quad (171)$$

ou le $[\dots]$ correspond à la fonction de corrélation du mode Ω_k . En utilisant encore une fois (164), nous aboutissons à

$$C_{xx}(t) \simeq \frac{1}{\omega_0} \left[\bar{n}(\omega_R) \cos \omega_R t + \frac{1}{2} e^{-i\omega_R t} \right] e^{-\Gamma|t|/2} \quad (172)$$

que nous comparons à (59). 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 :

$$\chi_{xx}(t) = \frac{\theta(t)}{\omega_0} \sin(\omega_R t) e^{-\Gamma t/2} \quad (173)$$

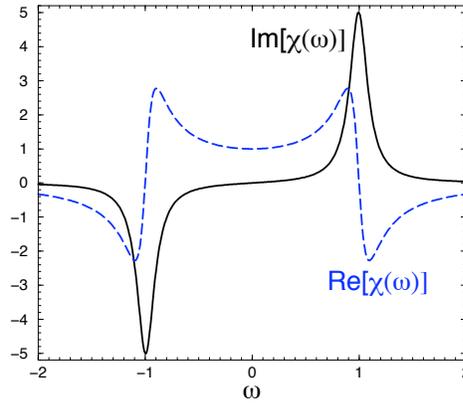


FIGURE 32 – Parties réelle (réactive) et imaginaire (dissipative) de la fonction de réponse de l'oscillateur harmonique amorti : $\tilde{\chi}(\omega) = \frac{1}{\omega_R^2 - (\omega + i\Gamma/2)^2} = \frac{A^2 - \omega^2 + i\Gamma\omega}{(A^2 - \omega^2)^2 + (\Gamma\omega)^2}$ où $A^2 = \omega_R^2 + \Gamma^2/4$. La puissance dissipée $\mathcal{P}_{\text{diss}} \propto \omega \tilde{\chi}(\omega)$ est positive.

dont la TF est

$$\tilde{\chi}_{xx}(\omega) \simeq \frac{1}{\omega_R^2 - (\omega + i\Gamma/2)^2} \quad (174)$$

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 5.8 : Le circuit RLC quantique.** – On considère un circuit LC (un oscillateur) dont l'énergie est : $H = \frac{L}{2}\dot{Q}^2 + \frac{1}{2C}Q^2$. Le moment conjugué de Q est $\phi = L\dot{Q}$. On impose la commutation canonique $[Q, \phi] = i\hbar$. On introduit une paire d'opérateurs de création/annihilation. Vérifier que $Q = (\frac{\hbar^2 C}{4L})^{1/4}(a + a^\dagger)$.

On introduit une résistance dans le circuit. Justifier qu'un modèle de résistance possible conduit à l'hamiltonien (114). Calculer l'admittance complexe $Y(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\chi}_{\dot{Q}Q}(\omega)$ (en utilisant les résultats du chapitre). Donner l'expression de $\text{Re}[Y(\omega)]$. Montrer que $\text{Re}[Y(\omega_R)] \simeq \sqrt{\frac{C}{L}} \frac{\omega_R}{\Gamma}$.

▣ **Exercice 5.9 : Modèle spin-bosons.** – On étudie le cas d'un spin couplé à un bain d'oscillateurs. Dans le modèle décrit par (114), 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 (161), déduire l'équation de Langevin quantique pour $a(t)$.

Un article de revue sur le sujet est [57].

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. (154) & (161). Notons qu'il n'est pas surprenant que les 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, éqs. (159) & (160). 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. (167). 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.

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,⁵² 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 libre⁵³. 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 $\epsilon_k = k^2/2m$, occupés jusqu'à l'énergie de Fermi ϵ_F ⁵⁴. 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 $C_{\text{electrons}} \sim T$.

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 $\rho_0 = \frac{nd}{2\epsilon_F}$, où d est la dimension. Dans le cas de l'argent, qui a une surface de Fermi quasiment sphérique (figure 33), on donne $k_F^{-1} = 0.83 \text{ \AA}$. Calculer ϵ_F , la vitesse de Fermi v_F , n puis ρ_0 en $\text{eV}^{-1}\text{nm}^{-3}$.

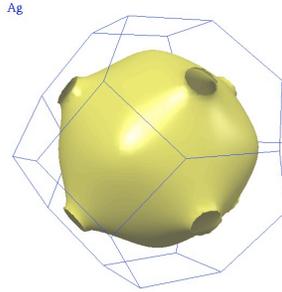


FIGURE 33 – Surface de Fermi de l'argent ; tiré de <http://www.phys.ufl.edu/fermisurface/>

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 structurels du cristal). L'interaction entre électrons est responsable du phénomène d'écrantage et de l'existence de modes collectifs de vibration du plasma

⁵²les excitations élémentaires des modes propres de vibrations quantifiés sont appelés les phonons.

⁵³Rappelons le résultat du théorème de Bloch : les états propres du hamiltonien d'un électron soumis à un potentiel périodique sont de la forme $\psi_{k,n}(x) = u_{k,n}(x)e^{ikx}$ où k est un indice continu, un vecteur de la première zone de Brillouin, et n un indice discret. La fonction $u_{k,n}(x)$ est une fonction ayant la périodicité du réseau. Le spectre des énergies $\epsilon_n(k)$ 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.

⁵⁴Dans 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.

électronique ⁵⁵ : 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 d'un gaz d'électrons libres pour $\mathbf{q} = \mathbf{0}$

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 (44) prend la forme :

$$\sigma_{ij}(t) = \frac{i}{\hbar}\theta(t)\frac{e^2}{V}\langle [v_i(t), r_j] \rangle \quad (175)$$

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

$$\sigma_{ij}(t) = \delta_{ij}\theta(t)\frac{ne^2}{m} \quad (176)$$

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 $\omega \rightarrow 0$:

$$\tilde{\sigma}_{ij}(\omega) = \delta_{ij}\frac{ne^2}{m}\frac{i}{\omega + i0^+} \quad (177)$$

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 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).

6.2 Le modèle semiclassique de Drude-Sommerfeld

Le modèle phénoménologique de Drude ⁵⁶ consiste à écrire une équation de Langevin pour la vitesse de l'électron. Après moyenne sur la force de Langevin : $\langle \dot{v} \rangle = -\frac{1}{\tau}\langle v \rangle + \frac{e}{m}\mathcal{E}$ où τ est un temps de relaxation de la vitesse dû aux collisions et \mathcal{E} le champ électrique⁵⁷. En écrivant la densité de courant comme $j = ne\langle v \rangle$ on montre que

$$\tilde{\sigma}_{\text{Drude}}(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{1}{1/\tau - i\omega} \quad (178)$$

⁵⁵L'interaction a d'autres effets dont la discussion approfondie [67, 62, 42] dépasse l'ambition de ces notes. Quelques idées ont déjà été introduites au § 4.3.

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 $E_{\text{Coul}} \sim e^2 k_F \propto n^{1/d}$. Nous obtenons finalement que $\frac{E_{\text{Coul}}}{E_{\text{cin}}} \propto n^{-1/d}$, i.e. l'interaction est faible dans la limite de *haute* densité.

⁵⁶Sommerfeld améliore le modèle classique de Drude en prenant en compte la nature fermionique des électrons dans les calculs [13].

⁵⁷Introduisons la notion de "mobilité", chère aux expérimentateurs : $\mu \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\langle v \rangle}{\mathcal{E}} = \frac{e\tau}{m}$.

qui correspond bien à la substitution $0^+ \rightarrow 1/\tau$ dans l'équation (177). 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 34 – Paul Karl Ludwig Drude (1863-1906) & Arnold Johannes Wilhelm Sommerfeld (1868-1951).

6.3 Une règle de somme pour la conductivité

L'expression (175) 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 utilisant⁵⁸ $\theta(0) = 1/2$ nous obtenons la règle de somme :

$$\int d\omega \tilde{\sigma}_{ij}(\omega) = \delta_{ij} \pi \frac{ne^2}{m} = \delta_{ij} \frac{\omega_p^2}{4} \quad (179)$$

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 [31].

6.4 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 4.1, p. 25 :

$$\chi_0(q, \omega) = \frac{1}{V} \sum_k \frac{f_k - f_{k+q}}{\omega + \epsilon_k - \epsilon_{k+q} + i0^+}. \quad (180)$$

Une discussion simplifiée, valable en $d = 3$ et pour $q \ll k_F$, est donnée dans l'annexe C. Nous donnons ici une analyse plus générale, qui suit le § 4.4 de l'ouvrage [42]. Tout d'abord, un

⁵⁸La 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 $\theta^\epsilon(0) = 1/2$.

changement de variable permet d'écrire

$$\chi_0(q, \omega) = \frac{1}{V} \sum_k f_k \left[\frac{1}{\omega - \epsilon_{k+q} + \epsilon_k + i0^+} + \frac{1}{-\omega - \epsilon_{k-q} + \epsilon_k - i0^+} \right]. \quad (181)$$

Dans le cadre du modèle des électrons libres $\epsilon_{-k} = \epsilon_k$ 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

$$\chi_0(q, \omega) = \int_0^{k_F} \frac{dk k^{d-1}}{(2\pi)^d} \int d\Omega_d \frac{1}{\omega - \frac{q^2}{2m} + i0^+ - \frac{kq}{m} \cos \theta} + (\omega + i0^+ \rightarrow -\omega - i0^+) \quad (182)$$

où $d\Omega_d$ 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

$$\chi_0(q, \omega) = \rho_0 \frac{k_F}{q} \left[\Psi_d \left(\frac{\omega + i0^+}{v_F q} - \frac{q}{2k_F} \right) - \Psi_d \left(\frac{\omega + i0^+}{v_F q} + \frac{q}{2k_F} \right) \right] \quad (183)$$

où

$$\Psi_d(z) \stackrel{\text{def}}{=} \int_0^1 d\kappa \kappa^{d-1} \int \frac{d\Omega_d}{S_d} \frac{1}{z - \kappa \cos \theta} \quad (184)$$

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

$$\Psi_2(z) = z - \sqrt{z^2 - 1}, \quad (185)$$

$$\Psi_3(z) = \frac{z}{2} + \frac{z^2 - 1}{4} [\ln(z-1) - \ln(z+1)]. \quad (186)$$

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

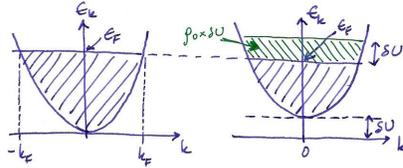


FIGURE 35 – Interprétation de $\chi_0(q \rightarrow 0, 0) \simeq -\rho_0$.

Le cas statique ($\omega = 0$) en $d = 3$: la fonction de Lindhard.– En utilisant le résultat (186) de l'exercice, nous pouvons nous placer à fréquence nulle. Nous obtenons facilement⁵⁹ [85, 42, 7]

$$\chi_0(q, 0) = -\rho_0 \left[\frac{1}{2} + \frac{4k_F^2 - q^2}{8k_F q} \ln \left| \frac{2k_F + q}{2k_F - q} \right| \right] = -\rho_0 [1 + O(q^2/k_F^2)] \quad (187)$$

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 $\delta n = -\rho_0 \delta U$

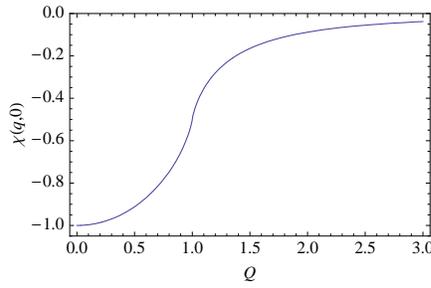


FIGURE 36 – Fonction de Lindhard $\chi_0(q, 0)/\rho_0$ en fonction de $Q = q/(2k_F)$.

(figure 35). La compressibilité statique est tracée sur la figure 36. Notons la divergence de la dérivée pour $q = 2k_F$, appelée **singularité de Kohn** (ou “Kohn anomaly”), sur laquelle nous reviendrons.

Développement à $q \rightarrow 0$ et ω finie.– Le résultat (186) nous permet d’obtenir sans peine le développement de la compressibilité aux petits q

$$\chi_0(q, \omega) = +\rho_0 \left[\frac{1}{3} \left(\frac{v_F q}{\omega} \right)^2 + \frac{1}{5} \left(\frac{v_F q}{\omega} \right)^4 + \dots \right] \quad (188)$$

ce qui illustre que les limites $q \rightarrow 0$ ou $\omega \rightarrow 0$ sont non commutantes : $\lim_{q \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \chi_0(q, \omega) = -\rho_0$ alors que $\lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \chi_0(q, \omega) = 0$.

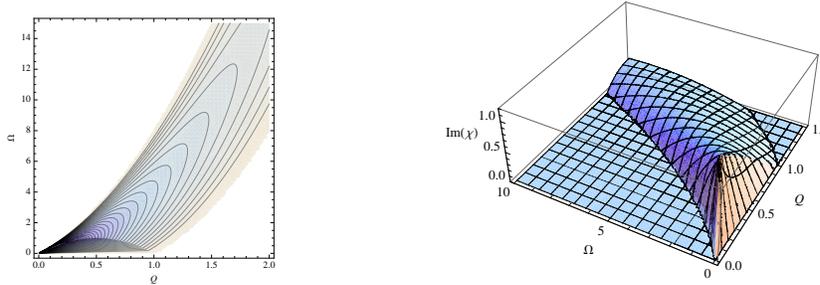


FIGURE 37 – Domaine du plan ($Q = q/(2k_F)$, $\Omega = \omega/\epsilon_F$) où $\text{Im } \chi_0(q, \omega) \neq 0$. Les deux paraboles délimitant la zone hachurée (excitations particule-trou) sont $\omega = q^2/(2m) + v_F q$ et $\omega = q^2/(2m) - v_F q$; cf. figure 21. À droite : plot 3d de $-\text{Im } \chi_0(q, \omega)$.

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 (183,186) 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 37). Sans surprise, ce domaine correspond précisément au continuum des excitations particule-trou (figure 21, p. 34).

Nous pouvons obtenir l’expression de la partie imaginaire de la susceptibilité (183). On vérifie

⁵⁹Rappelons que pour $x \in \mathbb{R}$, on a $\ln(x + i0^+) = \ln|x| + i\pi\theta(-x)$.

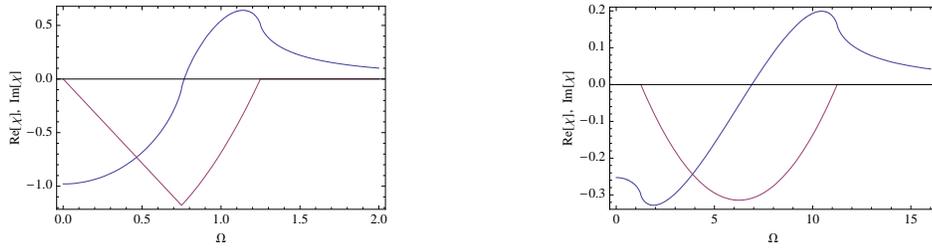


FIGURE 38 – Parties réelle et imaginaire de la compressibilité dynamique des fermions libres en fonction de la fréquence $\Omega = \omega/\epsilon_F$; à gauche pour $q/(2k_F) = 0.25$ et à droite pour $q/(2k_F) = 1.25$.

sans peine que⁶⁰

$$-\frac{1}{\rho_0} \text{Im} \chi_0(q, \omega) = \pi \frac{k_F}{4q} \left\{ \left[1 - \left(\frac{\omega}{v_F q} - \frac{q}{2k_F} \right)^2 \right] \theta \left(1 - \left| \frac{\omega}{v_F q} - \frac{q}{2k_F} \right| \right) \right. \quad (189)$$

$$\left. - \left[1 - \left(\frac{\omega}{v_F q} + \frac{q}{2k_F} \right)^2 \right] \theta \left(1 - \left| \frac{\omega}{v_F q} + \frac{q}{2k_F} \right| \right) \right\} \quad (190)$$

$\text{Im} \chi_0(q, \omega)$ est représentée sur la figure 37. Partie réelle et partie imaginaire sont tracées sur la figure 38 pour $q < 2k_F$ puis $q > 2k_F$.

6.5 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 $\phi_{\text{ext}}(q, \omega)$ le potentiel électrostatique que crée la charge dans le vide, le potentiel électrostatique prenant en compte l'effet de l'écrantage est réduit

$$\phi(q, \omega) = \frac{\phi_{\text{ext}}(q, \omega)}{\epsilon(q, \omega)} \quad (191)$$

Cette réduction est caractérisée par la *constante diélectrique* $\epsilon(q, \omega)$. 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

$$\rho = \rho_{\text{ext}} + \rho_{\text{ind}} \quad (192)$$

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 :

$$\rho_{\text{ind}}(q, \omega) = e^2 \chi(q, \omega) \phi_{\text{ext}}(q, \omega) \quad (193)$$

où χ est la fonction de réponse densité-densité.

⁶⁰À partir de cette expression, nous pouvons retrouver l'allure tracée schématiquement sur la figure 21 et plus précisément sur la figure 38. Écrivons $-\frac{1}{\rho_0} \text{Im} \chi_0(q, \omega) = \pi \frac{k_F}{4q} \Theta(\omega)$.

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.

3. La densité de charges totale obéit à l'équation de Poisson⁶¹ :

$$\Delta\phi + 4\pi\rho = 0 \quad (194)$$

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 (192,193,194) conduit à

$$\boxed{\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi(q, \omega)} \quad (195)$$

Pour discuter plus en avant le problème de l'écrantage, il nous faut maintenant préciser l'expression de $\chi(q, \omega)$.

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 4.1 p. 25 ou équation (187)) pour $q \ll k_F$

$$\chi_0(q, 0) \simeq -\rho_0 \quad (196)$$

où ρ_0 est la densité d'états par unité de volume. Si l'on introduit ce résultat dans (195) nous sommes immédiatement confronté à un problème qui est la divergence de $1/\epsilon$ et du potentiel écranté $\phi(q \rightarrow 0)$.

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.

6.5.1 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 [36, 62, 21, 42, 7] 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 RPA⁶²) peut être retrouvée par un raisonnement autocohérent que nous décrivons [85, 13].

Nous écrivons la réponse de la densité au potentiel extérieur comme :

$$\underbrace{\rho_{\text{ind}} = e^2 \chi_0 \phi_{\text{ext}}}_{\text{approximation 1}} \longrightarrow \rho_{\text{ind}} = e^2 \chi_0 \phi \quad (197)$$

Il s'agit bien d'un raisonnement autocohérent puisque le potentiel écranté ϕ dépend de la charge induite. Il est alors très facile de montrer que :

$$\boxed{\epsilon_{\text{RPA}}(q, \omega) = 1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi_0(q, \omega)} \quad (198)$$

Cette expression relie la constante diélectrique prenant en compte l'interaction entre électrons à la compressibilité du gaz sans interaction⁶³. D'après (195) la fonction de réponse densité-densité

⁶¹écrite 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.

⁶²RPA = Random Phase Approximation.

⁶³La 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 [67] ou [21, 7].

du gaz d'électrons en interaction, au même niveau d'approximation, *i.e.* $1/\epsilon_{\text{RPA}} = 1 + \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi_{\text{RPA}}$, est :

$$\boxed{\chi_{\text{RPA}}(q, \omega) = \frac{\chi_0(q, \omega)}{1 - \frac{4\pi e^2}{q^2} \chi_0(q, \omega)}} = \frac{\chi_0(q, \omega)}{\epsilon_{\text{RPA}}(q, \omega)} \quad (199)$$

qui relie 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 $\chi_{\text{RPA}}(q, 0) \propto q^2$ 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, $\chi_0(q, 0) \simeq -\rho_0$, nous obtenons :

$$\epsilon_{\text{RPA}}(q, 0) = 1 + \frac{\kappa^2}{q^2} \quad (200)$$

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. Cette remarque nous rappelle que l'écrantage n'est parfaitement efficace que dans un bon métal dans lequel les charges se déplacent librement.

Pour clarifier le sens de ce résultat, nous introduisons une charge $\rho_{\text{ext}}(r) = Q\delta(r)$ 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 $\phi = \frac{\phi_{\text{ext}}}{\epsilon_{\text{RPA}}(q, 0)} = \frac{4\pi Q}{q^2 + \kappa^2}$, *i.e.* :

$$\phi(r) = \frac{Q}{r} e^{-\kappa r} \quad (201)$$

La distribution de charges correspondante est donnée par :

$$\rho(r) = Q \left[\underbrace{\delta(r)}_{\rho_{\text{ext}}} - \underbrace{\frac{\kappa^2}{4\pi r} e^{-\kappa r}}_{\rho_{\text{ind}}} \right] \Rightarrow \int dr \rho_{\text{ind}}(r) = -Q \quad (202)$$

où le second terme correspond à la charge induite, globalement égale à la charge extérieure.

Il est instructif de comparer les dépendances spatiales de $\chi_0(r, \omega = 0) \simeq -\rho_0 \delta(r)$ et $\chi_{\text{RPA}}(r, \omega = 0) \simeq -\rho_0 \left[\delta(r) - \frac{\kappa^2}{4\pi r} e^{-\kappa r} \right]$: l'approximation 1 ne décrit que le comportement aux distances courtes ($r \ll 1/\kappa$) 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 35, 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.

Singularité de Kohn et oscillations de Friedel.– La discussion précédente repose sur l'approximation RPA, éq. (198), puis sur l'approximation de Thomas-Fermi $\chi_0(q, 0) \simeq -\rho_0$. Tout en restant dans le cadre de l'approximation RPA nous aurions aussi bien pu injecter dans l'éq. (198) l'expression de la compressibilité des fermions libres (187), 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 ⁶⁴ à $q = 2k_F$, est responsable de l'existence de petites modulations

⁶⁴Kohn a proposé d'exploiter la présence de cette "anomalie" (de Kohn) pour visualiser la surface de Fermi d'un métal [52].



FIGURE 39 – Walter Kohn (1923-), prix Nobel de chimie 1998, et Jacques Friedel (1921-).

spatiales de la densité autour de la charge écrantée, sur l'échelle $2k_F$. On parle d'*oscillations de Friedel* [67, 85].

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 (201). 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*

$$\mathcal{U}_{\text{eff}}(r) = \frac{e^2}{r} e^{-\kappa r} \approx \frac{1}{\rho_0} \delta(r). \quad (203)$$

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 : $\mathcal{U}_{\text{eff}}(q, \omega) = \frac{\mathcal{U}_{\text{Coul}}(q)}{\epsilon(q, \omega)}$ où $\mathcal{U}_{\text{Coul}}(q) = 4\pi e^2/q^2$ est l'interaction coulombienne. Dans l'approximation RPA, $\epsilon(q, \omega) \rightarrow \epsilon_{\text{RPA}}(q, \omega)$, on obtient

$$\mathcal{U}_{\text{eff}}(q, \omega) = \frac{1}{\mathcal{U}_{\text{Coul}}(q)^{-1} - \chi_0(q, \omega)}. \quad (204)$$

On parle d'*écrantage 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 conductivité.– La conductivité est définie comme la réponse du courant (induit) au champ électrique (écranté) $\mathcal{E} = -\nabla\phi$:

$$j_{\text{ind}} = \sigma \mathcal{E} \quad (205)$$

On trouvera également définie une conductivité [54] reliant courant induit au champ extérieur $\mathcal{D} = \epsilon \mathcal{E} = -\nabla\phi_{\text{ext}}$: $j_{\text{ind}} = \sigma^e \mathcal{D}$. Les deux conductivités sont reliées par $\sigma^e = \sigma/\epsilon$.

à cause de la conservation du courant, $\omega\rho_{\text{ind}} = qj_{\text{ind}}$, la conductivité est étroitement reliée à la fonction de réponse densité-densité :

$$\sigma(q, \omega) = \frac{i\omega}{q^2} e^2 \chi_0(q, \omega) \quad (206)$$

ou $\sigma^e = \frac{i\omega}{q^2} e^2 \chi$. Nous déduisons la relation entre constante diélectrique et conductivité⁶⁵ :

$$\epsilon(q, \omega) = 1 + \frac{4\pi i}{\omega} \sigma(q, \omega) \quad (207)$$

Nous vérifions également que $\frac{1}{\epsilon(q, \omega)} = 1 - \frac{4\pi i}{\omega} \sigma^e(q, \omega)$.

Nous avons vu que la partie réelle de la conductivité décrit la dissipation, sa partie imaginaire est donc reliée à l'indice du milieu et au phénomène de réfraction.

⁶⁵dans les unités CGS une conductivité a la dimension d'une fréquence en 3d (car $[e^2] = \text{énergie} \times \text{longueur}$).

6.5.2 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 $H_{\text{pert}}(t) = \int dx \rho_{\text{ind}}(x) \phi_{\text{ext}}(x, t) = \frac{1}{V} \sum_q \rho_{-q}^{\text{ind}} \phi_q^{\text{ext}}(t)$ (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 $\chi_q(t) = -\frac{i}{\hbar V} \theta(t) \langle [n_q(t), n_{-q}] \rangle$, reliée à la fonction spectrale $\xi_q(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{2\hbar V} \langle [n_q(t), n_{-q}] \rangle$ par : $\xi(q, \omega) = -\text{Im} \chi(q, \omega)$. On se convainc que cette dernière caractérise la dissipation en introduisant une perturbation sinusoïdale $\phi_q^{\text{ext}}(t) = \phi_{q, \omega}^{\text{ext}} \cos \omega t$. La puissance moyenne dissipée est

$$\overline{\mathcal{P}}_{\text{diss}} = \frac{e^2 \omega}{2} \frac{1}{V} \sum_q \text{Im} [\chi(q, \omega)] |\phi_{q, \omega}^{\text{ext}}|^2 \quad (208)$$

où a utilisé $\chi(q, \omega)^* = \chi(-q, -\omega)$.

La fonction de corrélation *non symétrisée* $C_q(t) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{1}{V} \langle n_q(t) n_{-q} \rangle$, caractérisant les fluctuations, est reliée à la fonction spectrale par la relation (54) et donc à la fonction de réponse

$$C(q, \omega) = \frac{2\hbar}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \text{Im} [-\chi(q, \omega)] \quad (209)$$

Ce résultat caractérise les fluctuations de la densité induite $e n_q \rightarrow \rho_q^{\text{ind}}$ (l'opérateur qui apparaît dans $H_{\text{pert}}(t)$); nous introduisons la notation plus suggestive $\langle |\rho_{q, \omega}^{\text{ind}}|^2 \rangle \equiv e^2 C(q, \omega)$. En utilisant la relation (195) et l'équation de Poisson nous obtenons l'expression pour les fluctuations de potentiel :

$$e^2 \langle |\phi_{q, \omega}^{\text{ind}}|^2 \rangle = \frac{2\hbar}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \frac{4\pi e^2}{q^2} \text{Im} \left[\frac{-1}{\epsilon(q, \omega)} \right] = \frac{2\hbar}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \text{Im} [-\mathcal{U}_{\text{eff}}(q, \omega)] \quad (210)$$

où $\mathcal{U}_{\text{eff}}(q, \omega)$ 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 $\phi_{q, \omega} = \phi_{q, \omega}^{\text{ind}} = \frac{4\pi}{q^2} \rho_{q, \omega}^{\text{ind}}$) au coefficient de réponse (ici la compressibilité ou la constante diélectrique).

✎ **Exercice 6.5** : Vérifier que $\langle |\phi_{q, \omega}^{\text{ind}}|^2 \rangle \simeq \frac{2k_B T}{\sigma_0 q^2}$ pour les basses fréquences (σ_0 est la conductivité de Drude). Discuter la condition “ ω petite”.

6.5.3 Les oscillations plasma et la non commutativité des limites $q \rightarrow 0$ & $\omega \rightarrow 0$

Nous avons déjà observé que $\lim_{q \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \chi(q, \omega) \neq \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \chi(q, \omega)$ (avec notamment un changement de signe de la compressibilité du gaz d'électrons sans interaction suivant l'ordre des limites : éq. (187) et éq. (188)). Cette propriété est également vraie pour la conductivité $\lim_{q \rightarrow 0} \lim_{\omega \rightarrow 0} \sigma(q, \omega) \neq \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \sigma(q, \omega)$. 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 $\sigma(q, \omega) \simeq -\frac{i\omega}{q^2} e^2 \rho_0$ 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 (188) dans le résultat (199) nous obtenons pour la compressibilité du gaz en interaction

$$\chi(q, \omega) \simeq \rho_0 \frac{\frac{1}{3} \left(\frac{v_F q}{\omega} \right)^2}{1 - \frac{\kappa^2}{q^2} \left[\frac{1}{3} \left(\frac{v_F q}{\omega} \right)^2 + \frac{1}{5} \left(\frac{v_F q}{\omega} \right)^4 \right]} \quad (211)$$

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

$$\omega_p \stackrel{\text{def}}{=} \frac{\kappa v_F}{\sqrt{3}} = \sqrt{4\pi \frac{ne^2}{m}} \quad (212)$$

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

$$\Omega_p(q) = \sqrt{\omega_p^2 + \frac{3}{5}(v_F q)^2} \simeq \omega_p + \frac{3k_F}{5\kappa} \frac{q^2}{2m}. \quad (213)$$

Ces modes ne peuvent être excités qu'en fournissant une énergie importante au système⁶⁶, d'ordre $\omega_p \sim \frac{\kappa}{k_F} \epsilon_F$. La compressibilité présente finalement un comportement divergent sur la relation de dispersion de ces excitations

$$\chi(q \ll k_F, \omega) \simeq \rho_0 \frac{\frac{1}{3}(v_F q)^2}{(\omega + i0^+)^2 - [\Omega_p(q)]^2} \quad (214)$$

(nous avons re-introduit le $+i0^+$ pour satisfaire le principe de causalité). Nous renvoyons à la discussion du § 4.3, p. 32.

Nous pouvons maintenant passer à l'analyse de la constante diélectrique. En utilisant (195) nous aboutissons à

$$\epsilon(q \ll k_F, \omega) \simeq 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2 - \frac{3}{5}(v_F q)^2}. \quad (215)$$

À $q = 0$ nous obtenons simplement

$$\epsilon(0, \omega) = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \quad (216)$$

Ce résultat simple est relié au comportement $\chi_0(q, \omega) \simeq \frac{nq^2}{m\omega^2}$ de la compressibilité nue⁶⁷ et au comportement $\sigma(0, \omega) \simeq \frac{ne^2}{m} \frac{i}{\omega}$ de la conductivité, obtenu dans le § 6.1 d'introduction.

Pour insister sur l'origine du phénomène de résonance, nous reformulons le problème d'une manière plus simple (négligeant la dépendance en q). Nous reprenons la résolution du système d'équations (192,197,194), 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 $-\omega^2 m x_\omega = e \mathcal{E}_\omega$ et donc $P_\omega = n e x_\omega = -\frac{ne^2}{m\omega^2} \mathcal{E}_\omega$. En utilisant $\rho_{\text{ind}} = -\nabla P$ on trouve finalement $\rho_{\text{ind}} = i \frac{ne^2 q}{m\omega^2} \mathcal{E}_\omega = \frac{ne^2 q^2}{m\omega^2} \phi_\omega$ ce qui nous donne bien la compressibilité nue $\chi_0(q, \omega) \simeq \frac{nq^2}{m\omega^2}$. Notons que l'aspect dynamique du problème est bien introduit dans l'éq. (197) à travers la réponse (retardée) $\chi_0(q, \omega)$.

Rappelons que les trois inconnues du système (192,197,194) sont ρ , ρ_{ind} et ϕ (ρ_{ext} est une "donnée" du problème). Commençons par éliminer ϕ en utilisant (194) : $\rho_{\text{ind}} = \frac{ne^2 q^2}{m\omega^2} \phi_\omega = \frac{\omega_p^2}{\omega^2} \rho$.

⁶⁶Comme nous l'avons déjà mentionné au § 4.3, 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 $\Omega(q \rightarrow 0) \simeq c_p q$ [67].

⁶⁷Si on ne s'intéresse pas à la structure à q fini, ce résultat s'obtient plus simplement directement à partir de l'éq. (181) en écrivant $\chi_0(q, \omega) = \frac{2}{V} \sum_k f_k \frac{\epsilon_{k+q} - \epsilon_k}{(\omega + i0^+)^2 - (\epsilon_{k+q} - \epsilon_k)^2}$. On injecte $\epsilon_{k+q} - \epsilon_k = v_k q + \frac{q^2}{2m}$ au numérateur tandis que la dépendance en q du dénominateur est négligée.

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

$$\left(\frac{d^2}{dt^2} + \omega_p^2 \right) \rho = \frac{d^2 \rho_{\text{ext}}}{dt^2} \quad (217)$$

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 $\chi(0, \omega)$ correspondent en effet à la résonance.

Ordres de grandeur.— L'équation (216) 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 $\lambda \simeq 140 \text{ nm}$).

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 $\omega \ll \omega_p$.

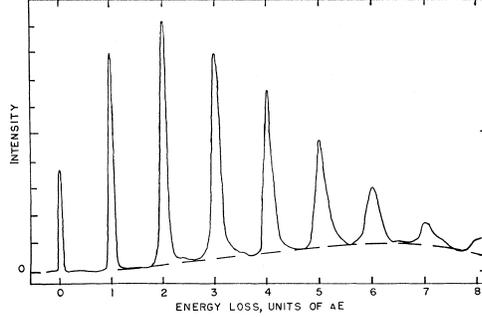


FIGURE 40 – Diffusion vers l'avant d'électrons de haute énergie (20 keV) sur une feuille d'Aluminium. Intensité du faisceau en fonction de l'énergie perdue par ces électrons ; L'écart entre pics $\Delta E = 14.8 \text{ eV}$ correspond à la fréquence plasma $\hbar\omega_p$ dans l'aluminium. Tiré de la référence [63].

Les modes plasmons ont été observés expérimentalement dans une célèbre expérience par Marton *et al* [63]. 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 40).

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

$$\chi(q, \omega) = \frac{\chi_0(q, \omega)}{1 - \frac{\kappa^2}{q^2} \frac{\chi_0(q, \omega)}{\rho_0}} = \frac{\chi_0(q, \omega)}{1 + \frac{4i\pi}{\omega} \sigma(q, \omega)}. \quad (218)$$

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 6.4 que la compressibilité du gaz d'électrons libres acquiert une partie imaginaire non nulle dans un domaine du plan (q, ω) correspondant au continuum des excitations particule-trou

(figure 21). Dans la région hachurée de la figure 21, $\text{Im } \chi_0(q, \omega) \neq 0$ (*i.e.* $\text{Re } \sigma(q, \omega) \neq 0$) et on obtient donc une structure

$$\chi(q, \omega) \sim \frac{1}{\omega - \Omega_p(q) + i/\tau(q)} \quad (219)$$

les oscillations du plasma s'amortissent à cause de la dissipation (l'excitation de paires particule-trou). On parle de "*Landau damping*" (figure 21).⁶⁸

6.6 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 $\lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{q \rightarrow 0} \sigma(q, \omega)$, aussi nous allons directement étudier la réponse du courant moyen ($q = 0$), à fréquence finie.

Choix de jauge.— Le calcul de la conductivité dans la section 6.1 a été fait pour un choix particulier de jauge : $\phi_{\text{ext}}(r, t) = -\mathcal{E}(t)r$ et $A_{\text{ext}}(r, t) = 0$. En appliquant les résultats généraux du cours nous avons abouti à la formule (175). Pour décrire la situation où le champ électrique est uniforme, nous aurions pu faire un autre choix de jauge : $\phi_{\text{ext}}(r, t) = 0$ et $A_{\text{ext}}(r, t) = -\int^t dt' \mathcal{E}(t')$. Nous faisons ce choix de jauge dans le paragraphe qui suit.

Le courant total est une moyenne de l'opérateur $mv_{\text{tot}} = p - eA - eA_{\text{ext}}$. La réponse linéaire du courant contient donc un terme directement proportionnel au potentiel vecteur extérieur, et la réponse linéaire de $v = (p - eA)/m$. Nous aboutissons alors à :

$$\tilde{\sigma}_{ij}(\omega) = \frac{1}{i\omega - 0^+} \frac{e^2}{V} \left(-\frac{1}{m} \delta_{ij} + i \int_0^\infty dt e^{(i\omega - 0^+)t} \langle [v_i(t), v_j] \rangle \right) \quad (220)$$

Cette expression montre clairement que la conductivité est reliée à une fonction de corrélation courant-courant.

✎ **Exercice 6.7** : Vérifier que (175) et (220) sont deux expressions équivalentes.

Nous pouvons écrire l'expression de la conductivité du gaz d'électrons sous la forme :

$$\tilde{\sigma}_{ij}(\omega) = \frac{i}{\omega + i0^+} \frac{e^2}{V} \left[\frac{1}{m} \delta_{ij} \sum_\alpha f_\alpha - \tilde{K}_{ij}(\omega) \right] \quad (221)$$

où

$$\tilde{K}_{ij}(\omega) = - \sum_{\alpha, \beta} (f_\alpha - f_\beta) \frac{(v_i)_{\alpha\beta} (v_j)_{\beta\alpha}}{\omega + \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta + i0^+} \quad (222)$$

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.

⁶⁸En écrivant (218) 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 $\sigma(0, \omega) = \frac{ne^2}{m} \frac{i}{\omega + i\tau}$ 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 $\ell_e \approx 30$ 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 $\omega_p \simeq 1.4 \cdot 10^{16} \text{ s}^{-1}$.

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 :

$$\frac{1}{m} \sum_{\alpha} f_{\alpha} + \sum_{\alpha, \beta} (f_{\alpha} - f_{\beta}) \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\epsilon_{\alpha} - \epsilon_{\beta}} = 0 \quad (223)$$

✎ **Exercice 6.9** : Dans le cas libre la fonction $\tilde{K}(\omega)$ est discontinue en $\omega = 0$.– On a

$$\tilde{K}(\omega) = - \sum_{\alpha, \beta} (f_{\alpha} - f_{\beta}) \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\omega + \epsilon_{\alpha} - \epsilon_{\beta} + i0^+} \quad (224)$$

Lorsque $\omega = 0$, le 0^+ au dénominateur devient inutile car le numérateur s'annule pour⁶⁹ $\epsilon_{\alpha} = \epsilon_{\beta}$. En déduire $\tilde{K}(\omega = 0)$. Dans le cas libre les éléments de matrice de la vitesse sont : $\langle k | v | k' \rangle = \frac{\hbar k}{m} \delta_{k, k'}$ ($|k\rangle$ 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

$$\tilde{\sigma}(\omega) = \frac{ie^2}{V} \frac{\tilde{K}(0) - \tilde{K}(\omega)}{\omega + i0^+} \quad (225)$$

Cette structure peut également se comprendre comme une conséquence de l'invariance de jauge⁷⁰ 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 (225) 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) :

$$\text{Re} \tilde{\sigma}(\omega) = \frac{\pi e^2}{V} \sum_{\alpha, \beta} \frac{f(\epsilon_{\alpha}) - f(\epsilon_{\alpha} + \hbar\omega)}{\omega} |v_{\alpha\beta}|^2 \delta(\hbar\omega + \epsilon_{\alpha} - \epsilon_{\beta}) \quad (226)$$

En introduisant $\int d\epsilon \delta(\epsilon - \epsilon_{\alpha}) = 1$ dans la somme, nous aboutissons à l'expression :

$$\boxed{\text{Re} \tilde{\sigma}(\omega) = \frac{\pi e^2}{V} \int d\epsilon \frac{f(\epsilon) - f(\epsilon + \hbar\omega)}{\omega} \text{Tr} \left\{ \hat{v}_x \delta(\epsilon + \hbar\omega - \hat{H}) \hat{v}_x \delta(\epsilon - \hat{H}) \right\}} \quad (227)$$

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 $\sigma \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\sigma}(\omega = 0)$:

$$\sigma = \frac{\pi e^2}{V} \int d\epsilon \left(-\frac{\partial f}{\partial \epsilon} \right) \text{Tr} \left\{ \hat{v}_x \delta(\epsilon - \hat{H}) \hat{v}_x \delta(\epsilon - \hat{H}) \right\} \xrightarrow{T \rightarrow 0} \frac{\pi e^2}{V} \text{Tr} \left\{ \hat{v}_x \delta(\epsilon_F - \hat{H}) \hat{v}_x \delta(\epsilon_F - \hat{H}) \right\} \quad (228)$$

⁶⁹si $f(0) = 0$ 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 $\mathcal{P} \frac{f(x)}{x} = \frac{f(x)}{x}$.

⁷⁰Rappelons 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.

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 [72, 73]). L'expression présente la structure d'un corrélateur de la vitesse (le courant moyen) pour les électrons à la surface de Fermi.

6.6.1 Conductivité d'un anneau mésoscopique

Nous allons voir que la règle de somme (223) 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 [77, 69].

✎ **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

$$\frac{1}{m} \sum_\alpha f_\alpha + \sum_{\alpha,\beta} (f_\alpha - f_\beta) \frac{|v_{\alpha\beta}|^2}{\epsilon_\alpha - \epsilon_\beta} = -\frac{L^2}{e^2} \sum_\alpha f'_\alpha \frac{\partial I_\alpha}{\partial \phi} \quad (229)$$

où $I_\alpha = -\partial_\phi \epsilon_\alpha$ désigne le courant permanent de l'état individuel.

Alors que l'expression (221) de la conductivité est générale, la relation (225) se trouve modifiée par la présence du nouveau terme dans la règle de somme :

$$\tilde{\sigma}_{\text{anneau}}(\omega) = \frac{e^2}{L} \frac{\tilde{K}(\omega) - \tilde{K}(0)}{i\omega} + \frac{L}{i\omega} \frac{\partial I_{\text{perm}}}{\partial \phi} + \frac{L}{i\omega} \sum_\alpha f'_\alpha I_\alpha^2 \quad (230)$$

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 dernier terme de (230) 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 (230) sont en pratique difficiles à observer car il s'agit d'effets *cohérents*, i.e. d'un effet d'interférences quantiques⁷¹. En pratique la cohérence de phase est limitée sur une échelle L_φ , que nous appellerons *longueur de cohérence de phase*, à cause des

⁷¹**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

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.



FIGURE 41 – *David Bohm (1917-1992) et Yakir Aharonov (1932-).*

Conductivité grand-canonique/canonique.– L'expression (230) 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 [69] : soit en 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 [77, 69].

6.7 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 structuraux 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 ⁷² $\mathcal{P}(\sigma)$? 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. ⁷³ Nous introduisons quelques échelles pour cela. Rappelons que le transport est une propriété de surface de Fermi, une première échelle

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.

⁷²Nous notons $\overline{\dots}$ la moyenne sur le désordre et gardons $\langle \dots \rangle$ pour la moyenne statistique/quantique.

⁷³Si 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.

d'énergie est l'énergie de Fermi ϵ_F . Il faudra lui comparer une échelle d'énergie liée au potentiel désordonné.⁷⁴ 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 adimensionnée⁷⁵ 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* [12]. 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” [45].

Le rôle de la dimensionnalité.— La dimensionnalité est un paramètre essentiel dans le problème de propagation d'un onde en milieu désordonné et l'effet du désordre est renforcé en allant vers les basses dimensions.⁷⁶ Dans un échantillon tridimensionnel, la transition de localisation se 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-unidimensionnel, de longueur L et de section W t.q. $N_c \sim (k_F W)^{d-1} \gg 1$ (le nombre de canaux⁷⁷). 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.⁷⁸ 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

⁷⁴Par exemple l'intégrale de la fonction de corrélation $w = \int dr \overline{\mathcal{V}(r)\mathcal{V}(0)}$ est une échelle pertinente.

⁷⁵Dans 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 ignorerons le spin qui ne joue aucun rôle dans la discussion). Le quantum de conductance vaut $e^2/h = 1/(25.8\text{k}\Omega)$.

⁷⁶Par exemple, en dimension 1, le régime diffusif de faible désordre n'existe pas et tout potentiel aléatoire à corrélations de portée finie conduit à la localisation de toutes les fonctions d'onde [60].

⁷⁷Un fil balistique se comporte comme un guide d'onde et est caractérisé par un certain nombre de modes transverses. On parle de “canaux”.

⁷⁸Ici nous avons introduit la longueur de localisation calculée dans le contexte de la théorie des matrices aléatoires [29, 64] $\ell_{\text{loc}} \sim N_c \ell_e$. On pourra se référer à l'article de revue très pédagogique de Carlo Beenakker [15].

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 [41]. Bien que l'étude du problème soit grandement compliquée par l'interaction électron-électron [34], 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

$$\text{Re } \tilde{\sigma}(\omega) = \frac{\pi e^2}{\text{Vol}} \sum_{\alpha, \beta} \frac{f(\epsilon_\alpha) - f(\epsilon_\alpha + \hbar\omega)}{\omega} |v_{\alpha\beta}|^2 \delta(\hbar\omega + \epsilon_\alpha - \epsilon_\beta) \quad (231)$$

où la somme porte sur le sepctre 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 au spectre des valeurs propres et les résidus aux fonctions d'onde. La conductivité peut en effet être reliée à la fonction de Green

$$\text{Re } \tilde{\sigma}(\omega) = \frac{\pi e^2}{\text{Vol}} \int d\epsilon \frac{f(\epsilon) - f(\epsilon + \hbar\omega)}{\omega} \text{Tr} \left\{ \hat{v}_x \delta(\epsilon + \hbar\omega - \hat{H}) \hat{v}_x \delta(\epsilon - \hat{H}) \right\} \quad (232)$$

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

$$G^{\text{R,A}}(k, k'; E) \stackrel{\text{def}}{=} \langle k | \frac{1}{E - H \pm i0^+} | k' \rangle \quad (233)$$

en terme de laquelle (232) devient :

$$\text{Re } \tilde{\sigma}(\omega) = -\frac{e^2}{4\pi m^2} \int d\epsilon \frac{f(\epsilon) - f(\epsilon + \omega)}{\omega} \frac{1}{\text{Vol}} \sum_{k, k'} k_x k'_x \Delta G(k, k'; \epsilon + \omega) \Delta G(k', k; \epsilon) \quad (234)$$

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 [47]⁷⁹ et la méthode supersymétrique [80, 33]. 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 moyenner 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 [16, 17]. En vérité ces techniques assez lourdes ne sont pas indispensables et peuvent être évitées au profit de méthodes non perturbatives probabilistes plus élégantes [60, 61] (au moins à mon goût, par exemple *cf.* [27]). 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 préciserons cette remarque par la suite.

6.7.1 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 $H = H_0 + \mathcal{V}$ 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

$$\langle k | \frac{1}{E-H_0} | k' \rangle = \delta_{k,k'} G_0(k) \quad \text{avec } G_0(k) = \frac{1}{E - \epsilon_k} \quad (235)$$

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 :

$$\mathcal{D}\mathcal{V} P[\mathcal{V}] = \mathcal{D}\mathcal{V} \exp -\frac{1}{2w} \int dr \mathcal{V}(r)^2 \quad (236)$$

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

⁷⁹ La méthode des répliques [32, 35] 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 : $\langle x | (H-E)^{-1} | x' \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \int \mathcal{D}\vec{\phi} \frac{\vec{\phi}(x) \cdot \vec{\phi}(x')}{n} e^{-S}$ 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 [47]). Si on considère un problème invariant par translation (au moins après moyenne sur le désordre) on peut encore simplifier le calcul en écrivant $\langle x | (H-E)^{-1} | x \rangle = \lim_{n \rightarrow 0} \frac{2}{n} \frac{\partial}{\partial E} \int \mathcal{D}\vec{\phi} e^{-S}$ de laquelle on peut extraire la DoS en faisant $E \rightarrow E + i0^+$.

le potentiel désordonné pour le calcul de quantités moyennées) :

$$\overline{\langle k_g | \mathcal{V} | k_d \rangle \langle k'_g | \mathcal{V} | k'_d \rangle} = \frac{w}{\text{Vol}} \delta_{k_g+k'_g, k_d+k'_d} \quad (237)$$

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.⁸⁰ 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 :

$$\overline{\langle k | G_0 \mathcal{V} G_0 \mathcal{V} G_0 | k' \rangle} = G_0(k) \sum_{k''} \frac{w}{\text{Vol}} \delta_{k, k''} G_0(k'') G_0(k') = \delta_{k, k'} G_0(k)^2 \frac{w}{\text{Vol}} \sum_q G_0(q) \quad (238)$$

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

$$\overline{\delta^2 G(k)} = G_0(k) \left[\frac{w}{\text{Vol}} \sum_q G_0(q) \right] G_0(k) = \begin{array}{c} \begin{array}{c} w \\ \diagup \quad \diagdown \\ k-q \quad k-q \end{array} \\ \begin{array}{c} \leftarrow k \quad \leftarrow q \quad \leftarrow k \end{array} \end{array} \quad (239)$$

La petite représentation graphique nous permet de déduire facilement les règles de Feynman.



FIGURE 42 – *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 .

⁸⁰Si 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 décorrélatées 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 $\overline{\mathcal{V}(r_1) \cdots \mathcal{V}(r_n)}^C = n_i v_0^n \delta(r_1-r_2) \cdots \delta(r_1-r_n)$ correspond à n interactions avec une impureté.

4. On somme sur toutes les impulsions libres selon $\frac{1}{\text{Vol}} \sum_q$.

Nous dessinons les trois diagrammes obtenus à l'ordre suivant :

$$\overline{\delta^4 G}(k) = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} \quad (240)$$

Self énergie.— Nous pouvons remarquer que le premier des diagrammes de (240) correspond à une répétition du bloc de la première correction (239), que nous notons :

$$\Sigma_2 = \text{diagram} = \frac{w}{\text{Vol}} \sum_q G_0(q) \quad (241)$$

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) :

$$\frac{1}{G_0(k)^{-1} - \Sigma_2} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \quad (242)$$

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 :

$$\overline{G}(k) = \frac{1}{E - \epsilon_k - \Sigma(E)} \quad (243)$$

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 (240) :

$$\Sigma_4 = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} \quad (244)$$

✎ **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 ⁸¹

$$\frac{1}{2\tau_e} = -\text{Im} \Sigma^R(E) \simeq -\text{Im} \Sigma_2^R(E) = -\frac{w}{\text{Vol}} \sum_q \text{Im} G_0^R(q) = \pi \rho_0 w \Rightarrow \boxed{\frac{1}{\tau_e} = 2\pi \rho_0 w} \quad (245)$$

⁸¹Nous 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 [48].

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

$$\overline{G}^R(k; \epsilon_F) = \frac{1}{\epsilon_F - \epsilon_k + \frac{i}{2\tau_e}} \quad (246)$$

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

$$\epsilon_F \tau_e \gg 1 \quad \text{ou} \quad k_F \ell_e \gg 1 \quad (247)$$

✎ **Exercice 6.13** : Montrer que, dans la limite de faible désordre, la fonction de Green dans l'espace réel présente la structure

$$\overline{G}^R(r, r') \simeq G_0^R(r, r') e^{-R/2\ell_e} \propto \frac{1}{R^{(d-1)/2}} e^{ik_F R - R/2\ell_e} \quad (248)$$

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 :

$$\Sigma_{\text{emp}} = \text{diagramme 1} + \text{diagramme 2} + \text{diagramme 3} + \text{diagramme 4} + \dots \quad (249)$$

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 $\epsilon_F \tau_e \gg 1$.

6.7.2 La conductivité à l'approximation de Drude

Nous commençons par plusieurs remarques permettant de simplifier (234). (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 ⁸² :

$$\overline{\sigma(\omega)} = \frac{e^2}{2\pi m^2 \text{Vol}} \sum_{k, k'} k_x k'_x \overline{G^R(k, k'; \epsilon_F + \omega) G^A(k', k; \epsilon_F)} \quad (250)$$

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 : $\overline{G^R G^A} \simeq \overline{G^R} \overline{G^A}$.

⁸²Notons 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 (250), sauf dans le cas $\omega = 0$.

En utilisant $\overline{G^R(k, k')} = \delta_{k, k'} \overline{G^R}(k)$, nous obtenons

$$\overline{\sigma(\omega)}^{\text{Drude}} = \frac{e^2}{2\pi m^2} \frac{1}{\text{Vol}} \sum_k k_x^2 \overline{G^R}(k; \epsilon_F + \omega) \overline{G^A}(k; \epsilon_F) \quad (251)$$

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 :

$$\overline{\sigma(\omega)}^{\text{Drude}} = \frac{e^2}{2\pi m^2} \frac{k_F^2}{d} 2\pi \rho_0 \tau_e \frac{1}{1 - i\omega\tau_e} = \frac{e^2 \tau_e}{m} \frac{2\epsilon_F \rho_0}{d} \frac{1}{1 - i\omega\tau_e} \quad (252)$$

Nous reconnaissons la densité électronique, $n = \frac{2\epsilon_F \rho_0}{d}$, et finalement

$$\overline{\sigma(\omega)}^{\text{Drude}} = \frac{\sigma_0}{1 - i\omega\tau_e} \quad \text{où} \quad \sigma_0 = \frac{ne^2\tau_e}{m} \quad (253)$$

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, ⁸³ 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 ?

Effet de la température : à $T \neq 0$, le résultat (253) doit être convolué par la dérivée d'une fonction de Fermi $-\partial f / \partial \epsilon$. Comme le résultat à $T = 0 \text{ K}$ 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 collision ⁸⁴ (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 relaxation ⁸⁵ selon la loi de Matthiesen

$$\frac{1}{\tau(T)} = \frac{1}{\tau_e} + \frac{1}{\tau_{e-\text{ph}}(T)} + \dots \quad (254)$$

⁸³elle 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.

⁸⁴autres que électron-électron qui conserve le courant total,

⁸⁵**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 [68, 4, 5] : $\sigma = \frac{ne^2\tau_{\text{tr}}}{m}$ (ceci est lié à la présence de $k_x k'_x$ dans les relations (234,250)) ; ce temps est appelé *temps de transport* $1/\tau_{\text{tr}} = 2\pi \rho_0 \langle C(\theta)(1 - \cos \theta) \rangle_\theta$. 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

Le calcul de la conductivité conduit à $\sigma_{\text{Drude}} = \frac{ne^2\tau(T)}{m}$.

6.7.3 Corrélations entre fonctions de Green

Nous avons retrouvé le résultat semi-classique en négligeant les corrélations entre les fonctions de Green dans l'équation (250). Nous souhaitons maintenant étudier l'effet des corrélations sur la conductivité moyenne. Cette discussion repose sur l'analyse des corrections perturbatives de (250), qui sera menée en analysant physiquement différents types de contributions. À cette fin nous commençons par donner la représentation diagrammatique de (250), que nous dessinons comme une bulle (figure 43) 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.

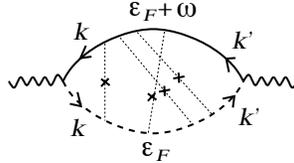


FIGURE 43 – Représentation diagrammatique d'une correction perturbative pour la conductivité moyenne donnée par l'équation (250). Les lignes continues (tirées) représentent des fonctions de Green retardées \overline{G}^R (avancées \overline{G}^A). Les lignes ondulées représentent l'opérateur de courant (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 (250).

Dans le cas du terme de Drude les lignes de fonctions de Green sont les fonctions de Green moyennes \overline{G}^R et \overline{G}^A . Les corrélations entre fonctions de Green sont représentées par des diagrammes dans lesquels les lignes de fonctions de Green retardée et avancée sont couplées par des lignes d'impureté (figure 43).

***** 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 :

$$G = \frac{e^2}{h} g \sim \frac{e^2}{h} \left| \sum_c \mathcal{A}_c \right|^2 \quad (255)$$

anisotrope (lorsque la fonction de corrélation de \mathcal{V} présente une structure), les deux temps peuvent toutefois différer notablement $\tau_{\text{tr}} > \tau$. Cette discussion s'applique au cas de la diffusion électron-phonon (chap. 26 de [13]) : le temps de collision électron-phonon est $\tau_{\text{e-ph}} \propto T^{-3}$ mais la diffusion est fortement anisotrope à basse température ($\ll \omega_D$, la coupure de Debye) et le temps de transport correspondant est $\tau_{\text{e-ph, tr}} \propto T^{-5}$ ce qui conduit à $\sigma(T) \sim 1/T^5$ pour $T \ll \omega_D$.

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 $G^{\text{R}}(\text{contact 1} \leftarrow \text{contact 2}; \epsilon_F) \sim \sum_{\mathcal{C}} \mathcal{A}_{\mathcal{C}}$) : cette expression de la conductance possède la structure $g \sim |G^{\text{R}}(\text{contact 1} \leftarrow \text{contact 2}; \epsilon_F)|^2 \sim G^{\text{R}} G^{\text{A}}$.

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 :

$$\bar{g} \sim \underbrace{\sum_{\mathcal{C}} |\mathcal{A}_{\mathcal{C}}|^2}_{\text{classique}} + \underbrace{\sum_{\mathcal{C} \neq \mathcal{C}'} \mathcal{A}_{\mathcal{C}} \mathcal{A}_{\mathcal{C}}^*}_{\text{quantique}} \quad (256)$$

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 44)). 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 44). 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 maximalement croisés* (figure 45) 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 [4, 5]).

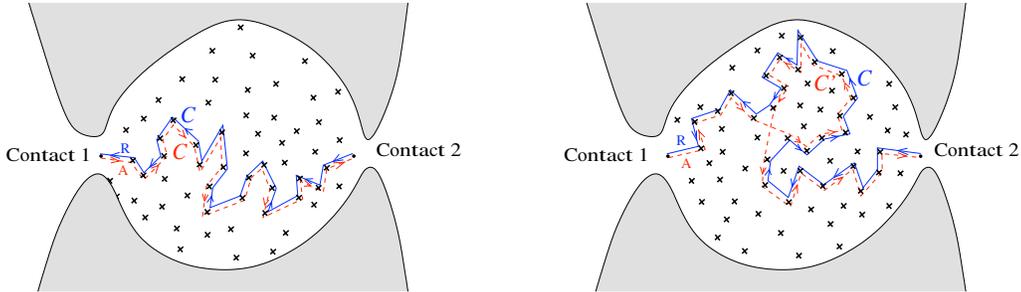


FIGURE 44 – À gauche : contribution au terme classique $\sum_{\mathcal{C}} |\mathcal{A}_{\mathcal{C}}|^2$. À droite : contribution au terme quantique $\sum_{\mathcal{C} \neq \mathcal{C}'} \mathcal{A}_{\mathcal{C}} \mathcal{A}_{\mathcal{C}'}^*$, qui minimise $\ell_{\mathcal{C}} - \ell_{\mathcal{C}'}$. La boucle décrit l'interférence quantique de trajectoires renversées.

6.7.4 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 maximalement croisés de la figure 45,

il est instructif de commencer par étudier les diagrammes en échelle :

$$\overline{\sigma(\omega)}^{\text{diff}} = \text{diagram 1} + \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \quad (257)$$

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 (257) en fonctions des \overline{G}^R et \overline{G}^A .

☞ **Exercice 6.18** : Nous introduisons la quantité

$$\Lambda(q, \omega) \stackrel{\text{def}}{=} \frac{w}{\text{Vol}} \sum_k \overline{G}^R(k+q; \epsilon_F + \omega) \overline{G}^A(k; \epsilon_F) = \text{diagram} \quad (258)$$

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

$$\Lambda(q, \omega) = 1 + i\omega\tau_e - q^2\ell_e^2/d + \dots \quad (259)$$

Ce résultat sera utilisé à plusieurs reprises.

Nous isolons la série apparaissant au milieu des corrections à la conductivité (257) :

$$\Gamma_d(q, \omega) = \text{diagram 1} = \text{diagram 2} + \text{diagram 3} + \dots \quad (260)$$

(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)

$$\Gamma_d(q, \omega) = w + \Lambda(q, \omega)\Gamma_d(q, \omega) \quad (261)$$

où $\Lambda(q, \omega)$ est la quantité introduite dans l'exercice précédent. Autrement dit, Γ_d correspond à une série géométrique que nous resomons :

$$\Gamma_d(q, \omega) = \frac{w}{1 - \Lambda(q, \omega)} \quad (262)$$

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 :

$$\Gamma_d(q, \omega) \simeq \frac{w}{\tau_e - i\omega + Dq^2} \quad (263)$$

Nous comprenons qu'il n'est pas possible de tronquer la série perturbative (260) 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 diffusives 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 $\chi_0(q, \omega) \simeq -\rho_0 \frac{Dq^2}{-i\omega + Dq^2}$ [9] ; cette remarque permet de relier le pôle de diffusion à la conservation du nombre de particules [79]).

Nous sommes en mesure de calculer la contribution des diagrammes en échelle à la conductivité

$$\overline{\sigma(\omega)}^{\text{diff}} = \frac{e^2}{2\pi m^2} \frac{1}{\text{Vol}^2} \sum_{k, k'} k_x k'_x |\overline{G}^{\text{R}}(k)|^2 \Gamma_d(0, \omega) |\overline{G}^{\text{R}}(k')|^2 \quad (264)$$

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

$$\overline{\sigma(\omega)}^{\text{diff}} = 0 \quad (265)$$

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 (250)). Le diffuson (260) décrit une séquence de collisions arbitrairement grande, après laquelle la mémoire de la direction initiale de la vitesse est perdue.⁸⁶

✎ **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 $\frac{w}{\text{Vol}} \sum_k k_x \overline{G}^{\text{R}}(k+q) \overline{G}^{\text{A}}(k) \simeq -i \frac{k_F \ell_e}{d} q_x$.

6.7.5 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 45). 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 44 et 45 suggèrent). Ces interférences conduisent à une augmentation *cohérente* de la rétrodiffusion des électrons, *i.e.* une diminution de la conductivité.

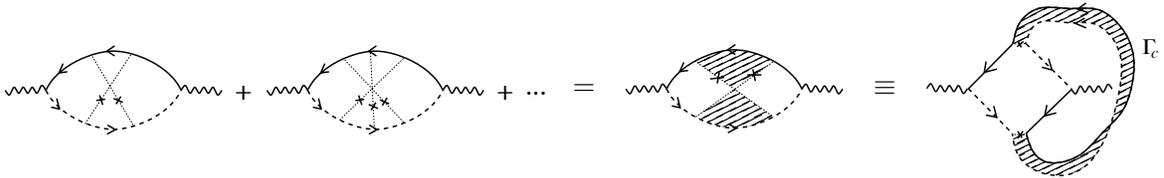


FIGURE 45 – Diagrammes maximales croisés : correction de localisation faible $\overline{\sigma(\omega)}^{\text{coop}}$.

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 (260) remplacé

⁸⁶Notons 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 [4, 5].

↳ **Exercice 6.20** : Montrer que $\frac{w}{\sqrt{\text{vol}}} \sum_k |\overline{G}^R(k)|^4 = 2\tau_e^2$.

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

$$\overline{\Delta\sigma} = -\frac{e^2}{\pi\hbar} \int_0^\infty dt \mathcal{P}_c(t) e^{-t/L_\varphi^2} \quad \text{où} \quad \mathcal{P}_c(t) = \langle r | e^{t\Delta} | r \rangle \quad (272)$$

$\mathcal{P}_c(t)$ 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 :

$$\overline{\Delta\sigma}_{\text{fil}} = -\frac{e^2}{h} \frac{L_\varphi}{s} \quad (273)$$

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*^{89,90} $\overline{\Delta g} = -\frac{1}{3}$.

Pour un film mince (un plan) l'intégrale de (272) 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).

$$\overline{\Delta\sigma}_{\text{plan}} = -\frac{e^2}{\pi\hbar b} \ln(L_\varphi/\ell_e) \quad (274)$$

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 (271). $L_\varphi \gg W, b$ correspond à la situation (quasi) unidimensionnelle. $W \gg L_\varphi \gg b$ correspond à la situation bidimensionnelle.

⁸⁹Nous partons de l'équation (271) : $\overline{\Delta g} = -\frac{2}{L^2} \sum_{n=1}^\infty \frac{1}{1/L_\varphi^2 + (n\pi/L)^2}$ 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. [4, 5]).

Le résultat peut être obtenu encore plus directement en utilisant le déterminant spectral [3, 74] $\overline{\Delta g} = \frac{1}{L} \Delta\tilde{\sigma}$ 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 $-L_\varphi/L$.

⁹⁰ 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 $\Delta\mathcal{R} \simeq -\mathcal{N} \overline{\Delta g}_{\text{coh}} / g_{\text{cl}}^2$, i.e. $\Delta g = -\Delta\mathcal{R} / \mathcal{R}^2 = \frac{1}{\mathcal{N}} \overline{\Delta g}_{\text{coh}} \sim -\frac{L_\varphi}{L}$. QED.

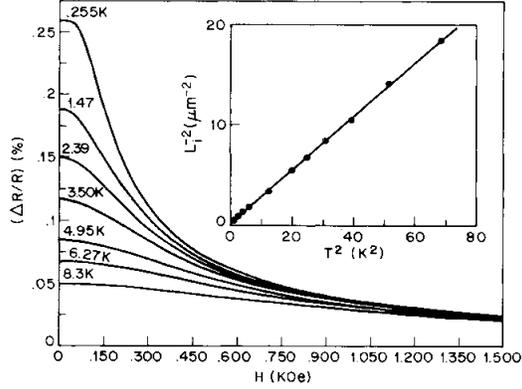


FIG. 3. Detailed fits of magnetoresistance data at various temperatures for $W = 0.074 \mu\text{m}$. Except for the elimination of noise, the fitted curves are indistinguishable from the data. Inset: Values for the quantity $L_T(T)^{-2}$ as a function of T^2 for part of our temperature range.

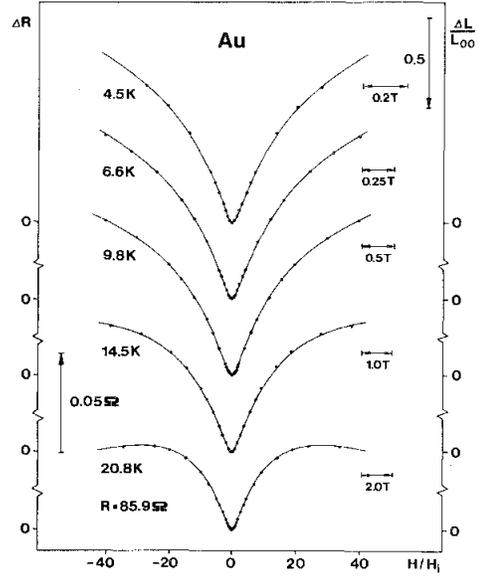


FIG. 4. Magnetoresistance (or $[L(H) - L(0)]/L_{00}$) of a Au film as a function of the field H measured in units of the inelastic field $H_i(T)$. The points represent the experimental results. The solid curves are calculated using the characteristic fields plotted in Fig. 5.

FIGURE 46 – à gauche : Magnétorésistance $\frac{\Delta R}{R} = -\frac{\overline{\Delta\sigma}}{\sigma}$ d'un fil quasi 1D de Lithium [58]. à droite : Magnétorésistance de film d'or (situation 2d) [18]. 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 46)? 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 $e^{ie\Phi_C/\hbar}$ 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 $e^{2ie\Phi_C/\hbar}$. 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 :

$$\mathcal{P}_c(t) = \int_{r(0)=r}^{r(t)=r} \mathcal{D}r(\tau) e^{-\int_0^t d\tau [\frac{\dot{r}^2}{4} + 2ieA(r)\cdot\dot{r}]} \quad (275)$$

On peut vérifier que la correction de localisation faible du fil de largeur W devient [8] :

$$\overline{\Delta\sigma}_{\text{fil}} = -\frac{e^2}{h} \frac{1}{s} \left[\frac{1}{L_\varphi^2} + \frac{1}{L_B^2} \right]^{-1/2} \quad \text{où} \quad \frac{1}{L_B} \stackrel{\text{def}}{=} \frac{eBW}{\sqrt{3}\hbar} \quad (276)$$

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 46 (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 (276) 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 46 et montre bien la dépendance logarithmique aux forts champs. Notons que le résultat expérimental de [18] présente une variation avec le signe opposé ($\frac{\Delta R}{R} = -\frac{\Delta\sigma}{\sigma} \propto \ln(B)$ 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.

Conseils de lecture : Il existe de nombreux articles de revue sur le sujet : un article introductif est celui de B. Al'tshuler & P. Lee [11]. Une revue classique est celle de G. Bergmann [19], avec de nombreux résultats expérimentaux. L'article de Chakravarty & Schmid [24] 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 [4], 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 :

$$\hat{H} = \hat{H}_S + \sum_n \left(\frac{\hat{p}_n^2}{2m_n} + \frac{1}{2} m_n \omega_n^2 \left(\hat{x}_n - \frac{c_n}{m_n \omega_n^2} \hat{q} \right)^2 \right) \quad (277)$$

$$\hat{H}_S = \frac{\hat{p}^2}{2M} + V(\hat{q}) \quad (278)$$

Le problème est inspiré de l'article [43] et du chapitre 3 de [40].

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

$$\hat{x}_n(t) = \hat{x}_n(0) \cos \omega_n t + \frac{\hat{p}_n(0)}{m_n \omega_n} \sin \omega_n t + \frac{c_n}{m_n \omega_n} \int_0^t dt' \sin \omega_n (t - t') \hat{q}(t') \quad (279)$$

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 :

$$\boxed{M \frac{d^2}{dt^2} \hat{q}(t) + M \int_0^t dt' \gamma(t - t') \hat{q}(t') = \hat{\xi}(t)} \quad (280)$$

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

$$\langle \zeta(t) \zeta(0) \rangle = \frac{\hbar}{2} \sum_n \frac{c_n^2}{m_n \omega_n} \left(\coth \frac{\hbar \omega_n}{2k_B T} \cos \omega_n t - i \sin \omega_n t \right) \quad (281)$$

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 définit⁹¹ :

$$J(\omega) \stackrel{\text{def}}{=} \pi \sum_n \frac{c_n^2}{2m_n \omega_n} \delta(\omega - \omega_n) \quad (282)$$

⁹¹Rq : 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

$$\gamma(t) = \frac{2}{M} \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \frac{J(\omega)}{\omega} \cos \omega t \quad (283)$$

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

$$\frac{d^2}{dt^2} \hat{q}(t) + \gamma \frac{d}{dt} \hat{q}(t) = \frac{1}{M} \hat{\xi}(t) \quad (284)$$

(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

$$\frac{1}{2} \langle \{\zeta(t), \zeta(0)\} \rangle = M\hbar\gamma \int_0^\infty \frac{d\omega}{\pi} \omega \coth \frac{\hbar\omega}{2k_B T} \cos \omega t \quad (285)$$

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

$$\left\langle [\hat{q}(t) - \hat{q}(t')]^2 \right\rangle = \frac{2\hbar}{M} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\gamma/\pi}{\omega^2 + \gamma^2} \omega \coth \left(\frac{\hbar\omega}{2k_B T} \right) \frac{\sin^2 \omega(t-t')/2}{\omega^2} \quad (286)$$

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 :

$$\left\langle [q(t) - q(t')]^2 \right\rangle \sim \frac{\hbar\gamma}{M} \ln \gamma |t - t'| \quad (287)$$

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 [43] :

(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 étudie⁹² 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 :

$$\hat{H}_0 = \frac{1}{2} \int d\vec{r} d\vec{r}' v(\vec{r} - \vec{r}') \hat{S}(\vec{r}) \cdot \hat{S}(\vec{r}') \quad (288)$$

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*" [21]; 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

$$[\hat{S}_i(\vec{r}), \hat{S}_j(\vec{r}')] = i\epsilon_{ijk} \delta(\vec{r} - \vec{r}') \hat{S}_k(\vec{r}) \quad (\text{on choisit } \hbar = 1) \quad (289)$$

(avec **sommation implicite sur les indices répétés**) où ϵ_{ijk} est le tenseur de Levi-Civita⁹³.

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

$$\frac{d}{dt} \hat{S}(\vec{r}, t) = \int d\vec{r}' v(\vec{r} - \vec{r}') \hat{S}(\vec{r}', t) \times \hat{S}(\vec{r}, t) - i v(0) \hat{S}(\vec{r}, t) \quad (290)$$

Vérifier l'hermiticité du résultat.

Indications : 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 :

$$\hat{H}_{\text{pert}}(t) = - \int d\vec{r} \hat{S}(\vec{r}) \cdot \vec{B}(\vec{r}, t) \quad (291)$$

⁹²Il s'agit du sujet d'examen du 19 décembre 2007, un peu augmenté.

⁹³ 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

$$\langle S_i(\vec{r}, t) \rangle_{\mathcal{B}} \stackrel{\text{def}}{=} \langle S_i(\vec{r}) \rangle + \int dt' d\vec{r}' \chi_{ij}(\vec{r} - \vec{r}', t - t') \mathcal{B}_j(\vec{r}', t') + O(\mathcal{B}^2) \quad (292)$$

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 ($\|\vec{m}\| \ll \|\vec{M}\|$) :

$$\vec{S}(\vec{r}) = \vec{M} + \vec{m}(\vec{r}) \quad (293)$$

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

$$\tilde{\chi}_{ij}(\vec{q}, \omega) = \int dt d\vec{r} \chi_{ij}(\vec{r}, t) e^{-i\vec{q}\cdot\vec{r} + i\omega t} \quad (294)$$

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 :

$$i[\omega - v(0)] \tilde{\chi}_{xx}(\vec{q}, \omega) = M_0 [\tilde{v}(\vec{q}) - \tilde{v}(0)] \tilde{\chi}_{xy}(\vec{q}, \omega) \quad (295)$$

$$i[\omega - v(0)] \tilde{\chi}_{xy}(\vec{q}, \omega) = -M_0 [\tilde{v}(\vec{q}) - \tilde{v}(0)] \tilde{\chi}_{xx}(\vec{q}, \omega) + M_0 \quad (296)$$

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)⁹⁴. L'origine de ce(s) mode(s) vient du fait que l'aimantation peut être tournée sans coût énergétique.

e/ Commenter la figure 47. L'expérience pour un alliage de cobalt avec 8% de fer trouve $\hbar\omega_q \simeq C + \frac{JS^2}{a} \vec{q}^2$ où $JS \simeq 14.7$ meV et $C \simeq 1.3$ 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.

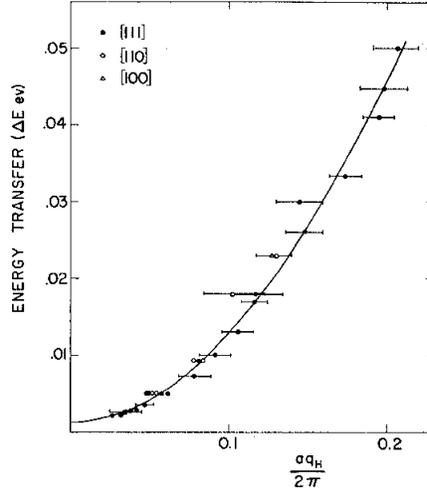


FIG. 2. The energy transfer ΔE as a function of the reduced vector of the spin waves. The error bars are about half of the full width at half maximum of the neutron groups. The solid line is the best fit to Eq. (3).

FIGURE 47 – 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)⁹⁵.

⁹⁴ 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 $\partial_t^2 \phi = (-\Delta + m^2)\phi$).

⁹⁵ 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 métal⁹⁶. 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

$$\hat{H}_{\text{pert}}(t) = + \int d\vec{r} \hat{n}(\vec{r}) U^{\text{pert}}(\vec{r}, t) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \hat{n}_{-\vec{q}} U_{\vec{q}}^{\text{pert}}(t). \quad (297)$$

La composante de Fourier de la compressibilité dynamique est définie comme

$$\langle \hat{n}_{\vec{q}}(t) \rangle_{U^{\text{pert}}} = n V \delta_{\vec{q},0} + \int dt' \chi_{\vec{q}}(t-t') U_{\vec{q}}^{\text{pert}}(t') + O[(U^{\text{pert}})^2], \quad (298)$$

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

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) = \frac{1}{V} \sum_{\vec{k}} \frac{f(\epsilon_{\vec{k}}) - f(\epsilon_{\vec{k}+\vec{q}})}{\omega + \epsilon_{\vec{k}} - \epsilon_{\vec{k}+\vec{q}} + i0^+}, \quad (299)$$

où $f(\epsilon_{\vec{k}})$ est la distribution de Fermi-Dirac. Interpréter physiquement la position des pôles.

Indications :

• 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. (299) :

(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

$$\chi_0(\vec{q}, \omega) \simeq \frac{\rho_0}{2v_F q} \int_{-v_F q}^{+v_F q} d\Omega \frac{\Omega}{\omega - \Omega + i0^+}, \quad (300)$$

⁹⁶Sujet 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

$$\chi_{\text{RPA}}(\vec{q}, \omega) = \frac{\chi_0(\vec{q}, \omega)}{1 - \frac{\kappa^2}{q^2} \frac{1}{\rho_0} \chi_0(\vec{q}, \omega)}, \quad (301)$$

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.

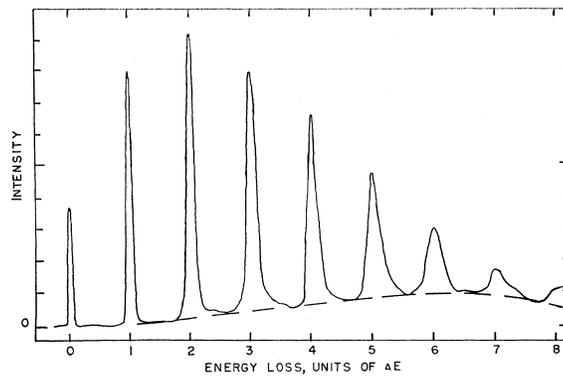


FIGURE 48 – Diffusion vers l'avant d'électrons de haute énergie (20 keV) sur une feuille d'Aluminium. Intensité du faisceau en fonction de l'énergie perdue par ces électrons ; $\Delta E = 14.8 \text{ eV}$. L. Marton, J. Arol Simpson, H. A. Fowler & N. Swanson, *Plural Scattering of 20-keV electrons in 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.⁹⁷ La phase condensée de Bose est décrite par l'équation (de champ moyen) de Gross-Pitaevskii pour la fonction d'onde du condensat⁹⁸ $\psi(x, t)$

$$i \frac{\partial}{\partial t} \psi(x, t) = -\frac{1}{2m} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi(x, t) + [U(x, t) + \epsilon(|\psi(x, t)|^2)] \psi(x, t) \quad (302)$$

où $\epsilon(|\psi|^2)$ décrit l'interaction entre bosons. ($\hbar = 1$). Nous traitons le problème en dimension $d = 1$ pour simplifier⁹⁹. 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

$$\tilde{\chi}(q, \omega) = \frac{n_0}{m} \frac{q^2}{\omega^2 - \omega_B^2(q)} \quad \text{où } \omega_B^2(q) = q^2 c^2 + \left(\frac{q^2}{2m}\right)^2 \quad (303)$$

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 :

$$i \partial_t \varphi = -\frac{1}{2m} \partial_x^2 \varphi + \lambda (\varphi + \varphi^*) + \sqrt{n_0} U \quad (304)$$

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 (303) (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 (303) 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 $\Phi = K * f$. Exprimer¹⁰⁰ $K(x)$ comme une intégrale.

⁹⁷La partie B était le premier exercice du sujet d'examen du 16 décembre 2009.

⁹⁸Normalisé selon $\int dx |\psi(x, t)|^2 = N$, où N est le nombre de bosons.

⁹⁹Rappelons toutefois que la condensation de Bose n'existe pas en $d = 1$. Considérer $d > 1$ ne changerait pas fondamentalement notre analyse.

¹⁰⁰En 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 ?

E Problème : Effet Hall

Nous étudions la conductivité d'un gaz d'électrons se mouvant dans un plan¹⁰¹ xOy soumis à un champ magnétique perpendiculaire homogène (figure 49).¹⁰²

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 :

$$\hat{H}_L = \frac{1}{2}m\hat{v}^2 = \frac{1}{2m} \left[\hat{p} - e\vec{A}(\vec{r}) \right]^2 \quad (305)$$

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 dimension¹⁰³ 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 :

$$\langle \hat{j}_a(t) \rangle_{\mathcal{E}} = \int dt' \sum_b \sigma_{ab}(t-t') \mathcal{E}_b(t') + O(\mathcal{E}^2) \quad (306)$$

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 $Z(t) = \frac{\hbar}{m}e^{-i\omega_c t}$. Dédurre 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 ? Dédurre 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. Dédurre la conductivité Hall du gaz $\sigma_H \stackrel{\text{def}}{=} \tilde{\sigma}_{xy}(\omega=0) = -\tilde{\sigma}_{yx}(\omega=0)$ (pour $B \neq 0$).

¹⁰¹Il s'agit des électrons piégés à une interface de semiconducteurs GaAs/GaAl_xAs_{1-x}, par exemple.

¹⁰²Second exercice du sujet d'examen du 16 décembre 2009.

¹⁰³Ne pas confondre "dimension" et "unité".

- On rappelle que le spectre de Landau de l'Hamiltonien (305) 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 49 à la conductivité Hall. Donner la valeur numérique de h/e^2 en $k\Omega$. Commenter la courbe expérimentale de la figure 49.

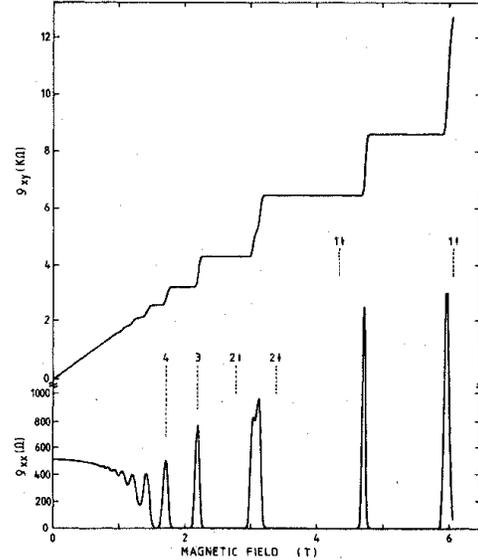
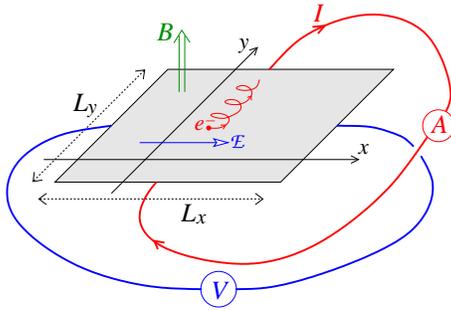


FIG. 14. Experimental curves for the Hall resistance $R_H = \rho_{xy}$ and the resistivity $\rho_{xx} \sim R_x$ of a heterostructure as a function of the magnetic field at a fixed carrier density corresponding to a gate voltage $V_g = 0$ V. The temperature is about 8 mK.

FIGURE 49 – À GAUCHE : Gaz d'électrons bidimensionnel soumis à un champ magnétique perpendiculaire homogène et à un champ électrique longitudinal. 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 la contribution des états d'un niveau de Landau à la conductivité 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 :

- Convention pour les transformations de Fourier :

$$\tilde{f}(q, \omega) = \int dt dx e^{i\omega t - iqx} f(x, t) \quad \text{et} \quad f(x, t) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{dq}{2\pi} \tilde{f}(q, \omega) e^{-i\omega t + iqx} \quad (307)$$

- 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 $m_e \simeq 0.9 \times 10^{-30}$ kg.

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] É. Akkermans and G. Montambaux, *Physique mésoscopique des électrons et des photons*, EDP Sciences, CNRS éditions (2004).
- [5] E. Akkermans and G. Montambaux, *Mesoscopic physics of electrons and photons*, Cambridge University Press (2007).
- [6] 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).
- [7] A. Altland and B. Simons, *Condensed matter field theory*, Cambridge University Press (2006).
- [8] 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).
- [9] 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).
- [10] B. L. Altshuler, A. G. Aronov and D. E. Khmelnitsky, Effects of electron-electron collisions with small energy transfers on quantum localisation, *J. Phys. C : Solid St. Phys.* **15**, 7367 (1982).
- [11] B. L. Al'tshuler and P. A. Lee, Disordered Electronic Systems, *Physics Today* **41**, 36 (december 1988).
- [12] P. W. Anderson, Absence of diffusion in certain random lattices, *Phys. Rev.* **109**, 1492 (1958).
- [13] N. W. Ashcroft and N. D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders College (1976).
- [14] R. Balian, *Du microscopique au macroscopique, cours de physique statistique de l'École polytechnique*, Ellipses, Paris (1990).
- [15] C. W. J. Beenakker, Random-Matrix theory of quantum transport, *Rev. Mod. Phys.* **69**(3), 731–808 (1997).
- [16] 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)].
- [17] 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).
- [18] G. Bergmann, Consistent temperature and field dependence in weak localization, *Phys. Rev. B* **28**(2), 515 (1983).

- [19] G. Bergmann, Weak localization in thin films, *Phys. Rep.* **107**, 1 (1984).
- [20] Ya. M. Blanter and M. Büttiker, Shot Noise in Mesoscopic Conductors, *Phys. Rep.* **336**, 1 (2000).
- [21] H. Bruus and K. Flensberg, *Many-body quantum theory in condensed matter physics*, Oxford University Press (2004).
- [22] A. O. Caldeira and A. J. Leggett, Quantum tunnelling in a dissipative system, *Ann. Phys. (N.Y.)* **149**, 374 (1983).
- [23] H. B. Callen and T. A. Welton, Irreversibility and Generalized noise, *Phys. Rev.* **83**(1), 34 (1951).
- [24] S. Chakravarty and A. Schmid, Weak localization : the quasiclassical theory of electrons in a random potential, *Phys. Rep.* **140**(4), 193 (1986).
- [25] C. Cohen-Tannoudji, *Cours de physique atomique et moléculaire*, Collège de France, Paris (1977-78).
- [26] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc and G. Grynberg, *Processus d'interaction entre photons et atomes*, Interéditions/Éditions du CNRS (1988).
- [27] 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).
- [28] B. Diu, C. Guthman, D. Lederer and B. Roulet, *Physique Statistique*, Hermann, Paris (1989).
- [29] O. N. Dorokhov, Solvable model of multichannel localization, *Phys. Rev. B* **37**(18), 10526–10541 (1988).
- [30] B. Douçot, *Une invitation à la supraconductivité*, CCSD : <http://ccsd.cnrs.fr/> (2001).
- [31] 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).
- [32] S. F. Edwards and P. W. Anderson, Theory of spin glasses, *J. Phys. F : Metal Phys.* **5**(5), 965–974 (1975).
- [33] K. Efetov, *Supersymmetry in disorder and chaos*, Cambridge University Press (1997).
- [34] A. L. Efros and M. Pollak (editors), *Electron-electron interactions in disordered systems*, North-Holland (1985).
- [35] V. J. Emery, Critical properties of many-component systems, *Phys. Rev. B* **11**(1), 239–247 (1975).
- [36] A. L. Fetter and J. D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems*, McGraw-Hill (1971).
- [37] R. P. Feynman, *Le Cours de physique de Feynman : Électromagnétisme, tome 2*, InterÉditions, Paris (1979), réédité par Dunod.
- [38] G. Gallavotti and E. Cohen, Dynamical ensembles in stationary states, *J. Stat. Phys.* **80**, 931 (1995).

- [39] C. W. Gardiner, *Handbook of stochastic methods for physics, chemistry and the natural sciences*, Springer (1989).
- [40] 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).
- [41] M. E. Gershenson, Yu. B. Khavin, A. Mikhalechuk, 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).
- [42] G. F. Giuliani and G. Vignale, *Quantum theory of the electron liquid*, Cambridge University Press (2005).
- [43] 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 cond-mat/0208026).
- [44] 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).
- [45] A. F. Ioffe and A. R. Regel, *Prog. Semicond.* **4**, 237 (1960).
- [46] A. Ishimaru, *Wave propagation and scattering in random media*, Academic Press, New York (1978).
- [47] C. Itzykson and J.-M. Drouffe, *Théorie statistique des champs*, Interéditions–CNRS, Paris (1989), Tomes 1 et 2.
- [48] 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).
- [49] J. B. Johnson, Thermal Agitation of Electricity in Conductors, *Phys. Rev.* **32**(1), 97–109 (1928).
- [50] 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).
- [51] 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).
- [52] W. Kohn, Image of the Fermi Surface in the Vibration Spectrum of a Metal, *Phys. Rev. Lett.* **2**(9), 393–394 (1959).
- [53] H. Krivine, *Exercices de mathématiques pour physiciens*, Cassini, Paris (2003).
- [54] R. Kubo, M. Toda and N. Hashitsume, *Statistical physics II : non-equilibrium statistical mechanics*, Springer-Verlag (1992).
- [55] M. Lax, Quantum noise. IV. Quantum theory of noise sources, *Phys. Rev.* **145**(1), 110 (1966).
- [56] M. Le Bellac, F. Mortessagne and G. G. Batrouni, *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics*, Cambridge University Press (2004).

- [57] 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).
- [58] 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).
- [59] 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).
- [60] I. M. Lifshits, S. A. Gredeskul and L. A. Pastur, *Introduction to the theory of disordered systems*, John Wiley & Sons (1988).
- [61] J.-M. Luck, *Systèmes désordonnés unidimensionnels*, CEA, collection Aléa Saclay, Saclay (1992).
- [62] G. D. Mahan, *Many-particle physics*, Plenum Press, New York (1990).
- [63] 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).
- [64] P. A. Mello, P. Pereyra and N. Kumar, Macroscopic approach to multichannel disordered conductors, *Ann. Phys. (N.Y.)* **181**, 290 (1988).
- [65] H. M. Nussenzveig, *Causality and dispersion relations*, Academic Press, New York (1972).
- [66] H. Nyquist, Thermal agitation of electric charge in conductors, *Phys. Rev.* **32**(1), 110–113 (1928).
- [67] D. Pines and P. Nozières, *The theory of quantum liquids, volume 1*, W. A. Benjamin (1966), reedited by Perseus Books Publishing in 1989.
- [68] N. Pottier, *Mécanique statistique hors équilibre : équation de Boltzmann, réponse linéaire* (1994), cours du DEA de physique des solides.
- [69] 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).
- [70] 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/0210247.
- [71] I. R. Senitzky, Dissipation in Quantum Mechanics. The Harmonic Oscillator, *Phys. Rev.* **119**(2), 670 (1960).
- [72] P. Středa, Theory of quantised Hall conductivity in two dimensions, *J. Phys. C : Solid St. Phys.* **15**, L717 (1982).
- [73] P. Středa and L. Smrčka, Transport coefficient in strong magnetic fields, *J. Phys. C : Solid St. Phys.* **16**, L895 (1983).
- [74] C. Texier, ζ -regularised spectral determinants for metric graphs, *J. Phys. A : Math. Theor.* **43**, 425203 (2010).
- [75] 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**(20), 205413 (2009).

- [76] M. Toda, R. Kubo and N. Saitô, *Statistical physics I : equilibrium statistical mechanics*, Springer-Verlag (1992).
- [77] N. Trivedi and D. A. Browne, Mesoscopic ring in a magnetic field : reactive and dissipative response, *Phys. Rev. B* **38**(14), 9581 (1988).
- [78] N. G. van Kampen, *Stochastic processes in physics and chemistry*, North-Holland, Amsterdam (1992).
- [79] 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).
- [80] F. Wegner, The mobility edge problem : continuous symmetry and a conjecture, *Z. Phys. B* **35**(3), 207 (1979).
- [81] U. Weiss, *Quantum dissipative systems*, World Scientific (1999).
- [82] P.-E. Wolf and G. Maret, Weak Localization and Coherent Backscattering of Photons in Disordered Media, *Phys. Rev. Lett.* **55**(24), 2696–2699 (1985).
- [83] B. Yurke, Quantizing the damped harmonic oscillator, *Am. J. Phys.* **54**(12), 1133 (1986).
- [84] B. Yurke and J. S. Denker, Quantum network theory, *Phys. Rev. A* **29**(3), 1419–1437 (1984).
- [85] J. M. Ziman, *Principles of the theory of solids*, Cambridge University Press (1972).

Index

A	
Albedo	38
Amittance	15
B	
Bilan détaillé (relation de)	11, 13, 26
Bragg (diffraction de)	29, 30
Bruit	
Johnson-Nyquist	5
opérateur de bruit	52
Shottky (bruit de grenaille)	5
spectre de bruit	7
C	
Cable coaxial	39
Callen & Welton	41
Causalité	15
Cohérence de phase	72, 73, 82
longueur de cohérence de phase	73, 85
Compressibilité	25
approximation RPA	64, 94
gaz de fermions chargés	62, 93
gaz de fermions libres	59
Conductivité	58, 65, 69
approximation de Drude	78
correction de localisation faible	82, 84
formule de Kubo-Greenwood	74
Constante diélectrique	63
Constante diélectrique RPA	63
Continuum particule-trou	33, 61
Cooperon	83
Courant permanent	71
D	
Décohérence	73, 83
Densité d'états	77
Désordonné (métal)	72
Diagrammes	
règles de Feynman	76
Diffraction (expérience de)	26
Diffuson	82
Dissipation	14, 21, 39
Drude-Sommerfeld (modèle de)	58
Duhamel (formule de)	18
Dyson (équation de)	49
E	
Écrantage	64
Environnement dissipatif	39, 44, 51
Équation de Langevin	8
Équation de Langevin quantique	51–53, 88
Équation de Langevin-Mori	51, 52
F	
Facteur de structure dynamique	26, 33
Facteur de structure statique	28
Ferromagnétisme	90
Feynman (règles de)	76
Fisher & Lee (relation de)	80
Fluctuation-dissipation (théorème) ..	4, 21, 43, 65
Fonction de corrélation	11
Fonction de corrélation canonique de Kubo	12
Fonction de corrélation de paires	28
Fonction de réponse dynamique	19
Fonction de réponse statique	18
Fonction spectrale	12
Fonctions de Green à T finie	46
Forces d'oscillateur	24
Friedel (oscillations de)	64
G	
Goldstone (théorème de)	92
Green (fonction de)	74
calcul perturbatif	75
corrélations entre fonctions de Green ..	79
fonction de Green moyenne	77
Grenaille (bruit de)	5
I	
Ioffe-Regel (critère de)	73
J	
Johnson-Nyquist (bruit de)	5
K	
Kohn (singularité de)	61, 64
Kramers-Kronig (relations de)	16
Kubo-Greenwood (formule de)	69
L	
Langevin (équation de)	8
Lehman (représentation de)	20
Ligne de transmission	39
Localisation	
localisation faible	72, 80, 82, 84
localisation faible dans un fil	84
localisation faible dans un plan	84

localisation forte.....	73	Théorème de Wiener-Khintchine	7
magnétoconductance anormale.....	85	Thomas-Reichl-Kuhn (règle de somme de) .	24
Longueur de cohérence de phase....	73, 83, 85		
M			
Magnétoconductance anormale.....	85		
Magnons	90, 91		
Matrice densité.....	9, 19		
Matrices aléatoires.....	73		
Matsubara (formalisme de)	46		
Mermin-Wagner (théorème de).....	32, 92		
Métal.....	57		
Métal désordonné.....	72		
Modes collectifs.....	33, 66, 91, 94		
Mori-Langevin (équations de)	51, 52		
Mouvement brownien	4		
Mouvement brownien quantique	88		
N			
Nyquist (théorème de).....	4, 41, 43		
O			
Ondes de spin	90		
Ornstein-Zernike (relation d')	29		
Oscillateur harmonique	11, 22, 44, 55		
Oscillations de Friedel	64		
P			
Plasma (oscillations de).....	66		
Plasmons	33, 66, 68, 93, 94		
Pôle de diffusion	82		
R			
Règle de somme de Thomas-Reichl-Kuhn ..	24		
Règle de somme f	35, 71		
Relation de Fisher & Lee	80		
Relaxation.....	21		
Répliques (méthode des).....	74		
Rétrodiffusion cohérente	38		
S			
Singularité de Kohn.....	61, 64		
Spectre de bruit	7		
Supersymétrie			
méthode supersymétrique.....	74		
Susceptibilité magnétique.....	90		
T			
Temps de libre parcours moyen élastique...	77		
Temps de transport.....	79		
Temps de vie	79		
Théorème de Mermin-Wagner	32, 92		