École normale supérieure de Lyon
Magistère des Sciences de la Matière

Méthodes théoriques d'intérêt général en physique

par Brice Goglin
d'après le cours d'Angel Alastuey
Prise de notes par Pierre Borgnat

Ce cours est dispensé au DEA de physique statistique et des phénomènes non-linéaires de l'École normale supérieure de Lyon. Les concepts mathématiques introduits sont difficiles mais pourront être assimilés par des étudiants de maîtrise se destinant à la recherche dans le domaine de la physique théorique.

Je tiens à remercier Hubert Hansen et Emmanuel Loyer pour les corrections qu'ils ont apportées à ce document.

Sommaire

Chapitre 1

Analycité et réponse

1.1 Réponse

1.1.1 Position du problème

On considère un système physique dans un état stationnaire ϕ_0. On applique une perturbation F dépendant du temps. En $t = -\infty$, le système est dans l'état ϕ_0 et la perturbation est nulle. On étudie une quantité physique $\mathcal{A}$. Lorsque le système est dans l'état ϕ_0 et y reste (perturbation toujours nulle), cette grandeur prend une valeur $\mathcal{A}_0$, indépendante du temps puisque l'état du système ne varie pas. On va étudier la valeur prise par cette grandeur lorsque la perturbation F n'est pas nulle et chercher à relier $\mathcal{A}(t)$ à $\mathrm{F}(t)$.

1.1.2 Forme générale de la réponse

Quitte à remplacer $\mathcal{A}$ par $\mathcal{A} - \mathcal{A}_0$, on peut poser $\mathcal{A}_0 = 0$. On s'intéresse ici à des systèmes vérifiant trois principes : **linéarité**, **causalité** et **stationnarité**.

Linéarité :

La linéarité de la réponse n'est qu'une approximation. Dans ce cas, la forme de la réponse est :

$$\mathcal{A}(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{K}_0(t, t')\mathrm{F}(t')\,\mathrm{d}t'$$

où K_0 ne dépend que de l'état initial ϕ_0 du système étudié.

Certains systèmes n'ont pas une fonction de réponse linéaire. La relation liant $\mathcal{A}$ à F est alors plus complexe que ci-dessus. C'est par exemple le cas des systèmes magnétiques au voisinage du point critique où la susceptibilité diverge.

Cependant, nous allons nous restreindre au cas où la réponse est linéaire.

Causalité :

En physique, un principe de causalité affirme que la cause précède toujours l'effet. $\mathcal{A}(t)$ ne peut donc dépendre que de $\mathrm{F}(t')$ si $t' \leq t$.

Cela se traduit par le fait que la fonction $\mathrm{K}_0(t, t')$ est nulle pour tout couple (t, t') vérifiant $t' > t$.

Stationnarité :

L'état ϕ_0 étant stationnaire, K_0 est invariant par translation temporelle des arguments t et t'. K_0 ne dépend donc en fait, que de $t - t'$.

D'où $\quad \mathcal{A}(t) = \int_{-\infty}^{t} K_0(t-t')F(t')\,dt' = \int_0^{\infty} K_0(\tau)F(t-\tau)\,d\tau$

1.1.3 Susceptibilité

On considère une force monochromatique (une seule fréquence) branchée à $t = -\infty$; on la définit avec une fréquence complexe $z = \omega + i\epsilon$.

La fréquence ω est réelle. ϵ est simplement là pour assurer la nullité de F au voisinage de $-\infty$.

On impose à cette force de vérifier :

$$\boxed{F(t) = \mathrm{Re}\,\left(F_z e^{-izt}\right)}$$

On peut avoir une perturbation réelle alors que F ne l'est pas forcément. On prendra alors la perturbation égale à la partie réelle de F.

On a alors : $\quad \mathcal{A}(t) = \int_0^{\infty} d\tau K_0(\tau)F_z e^{-iz(t-\tau)}$

Soit : $\quad \mathcal{A}(t) = \underbrace{\left(\int_0^{\infty} d\tau\, K_0(\tau)e^{iz\tau}\right)}_{\text{susceptibilité } \chi(z)} \underbrace{\left(F_z e^{-izt}\right)}_{F(t)}$

On constate donc que la réponse reste monochromatique. L'amplitude $\mathcal{A}_z$ est proportionnelle à F_z et le facteur de proportionnalité est la susceptibilité $\chi(z)$.

$$\boxed{\mathcal{A}_z = \chi(z)F_z}$$

La susceptibilité apparaît donc comme la transformée de Laplace de K_0 pour l'argument $s = -iz$:

$$\boxed{\hat{K_0}(s) = \int_0^{\infty} d\tau\, e^{-s\tau}K_0(\tau) \qquad \text{et} \qquad \chi(z) = \hat{K_0}(-iz)}$$

A la limite purement monochromatique, c'est à dire $\epsilon \to 0^+$, on obtient :

$$\chi(\omega) = \lim_{\epsilon \to 0^+} \int_0^{\infty} d\tau\, K_0(\tau)e^{i\omega\tau}e^{-\epsilon\tau}$$

où $e^{-\epsilon\tau}$ est nommé facteur de convergence.

Si F est une excitation quelconque, elle est une somme de composantes monochromatiques (décomposition de Fourier) et la réponse est alors la somme des réponses correspondant à chaque fréquence.

1.2 Propriétés analytiques

1.2.1 Analycité de $\chi(z)$

Nous allons montrer ici que la susceptibilité χ est analytique sur $\mathbb{C}_{sup}$, l'ensemble des nombres complexes de partie imaginaire strictement positive.

Argument physique :

Soit $\epsilon \geq 0$. On applique la force F pendant un temps fini ϵ^{-1}. On fournit donc une quantité finie d'énergie au système, et la réponse est nécessairement finie. Donc, la susceptibilité $\chi(z)$ sera finie (non divergente) pour tout nombre complexe z de partie imaginaire strictement positive. Comme par construction $\chi(z)$ ne dépend que de z, la physique impose à χ d'y être analytique (car régulière donc différentiable donc analytique).

Sur l'axe réel, $\epsilon = 0^+$ donc le temps de forçage est infini. Cependant, grâce à la dissipation, la réponse restera souvent finie. Il est tout de même possible de voir apparaître des singularités (notamment aux points critiques).

Preuve mathématique :

On a vu que $\chi(z) = \displaystyle\int_0^\infty \mathrm{K}_0(\tau) e^{iz\tau}\,\mathrm{d}\tau$.
Examinons plusieurs cas :

- Cas où K_0 décroît exponentiellement :

  Pour les grandes valeurs de τ, $\mathrm{K}_0\tau \simeq cste\, e^{-\lambda\tau}$

  On peut alors differencier sous le signe d'intégration pour z de partie imaginaire positive ou nulle, car toutes les intégrales à considérer sont bien définies.

  Donc χ' est bien définie et $\chi'(x) = \displaystyle\int_0^\infty \mathrm{K}_0(\tau)\tau e^{iz\tau}\,\mathrm{d}\tau$.

  χ étant différentiable sur $\mathbb{C}_{sup}$ fermé, elle y est analytique.

- Cas où K_0 décroît algébriquement :

  Pour τ grand, $\mathrm{K}_0(\tau) \simeq \dfrac{cste}{\tau^p}$.

  Si ϵ est strictement positif, le terme $e^{-\epsilon\tau}$ assure la convergence et donc la différentiabilité sous le signe d'intégration.

  Par contre, si ϵ est nul, une singularité apparaît en 0, d'ordre $p-1$ (éventuellement avec des $\ln z$ également).

  On a donc montré l'analycité de χ sur $\mathbb{C}_{sup}$ ouvert.

- Cas où K_0 tend vers une constante :

  L'analycité sur $\mathbb{C}_{sup}$ ouvert est également assurée par la différentiabilité sous le signe d'intégration, elle-même également assurée par le terme $e^{-\epsilon\tau}$.

  Pour ϵ nul, $z = 0$ constitue un pôle simple.

  χ est bien analytique sur $\mathbb{C}_{sup}$ ouvert.

1.2.2 Signes et comportements aux grandes fréquences

On se place sur l'axe réel et on considère χ analytique sur $\mathbb{C}_{sup}$ fermé.
Notons χ' et χ'' les parties réelle et imaginaire de χ.
On a alors :

$$\begin{aligned}\chi'(\omega) &= \int_0^\infty \mathrm{d}\tau\ \cos(\omega\tau)\mathrm{K}_0(\tau)\\ \chi''(\omega) &= \int_0^\infty \mathrm{d}\tau\ \sin(\omega\tau)\mathrm{K}_0(\tau)\end{aligned}$$

On peut remarquer que X' est paire tandis que X'' est impaire. Souvent, X'' sera reliée à la dissipation d'énergie et aura alors un signe bien défini pour $\omega > 0$.

Exemple :
Soit un système à l'équilibre thermodynamique et $\mathrm{H} = \mathrm{H}_0 - \mathrm{AF}$ où A ne dépend pas du temps.

Calculons la puissance fournie au système $\dfrac{d\mathrm{E}}{dt}$.

$$\frac{\mathrm{dE}}{\mathrm{d}t} = \left\langle \frac{\partial \mathrm{H}}{\partial t} \right\rangle_t = -\underbrace{\langle \mathrm{A} \rangle_t}_{\mathcal{A}(t)} \dot{\mathrm{F}}\ (t)$$

Dans le cas monochromatique :

$$\frac{\mathrm{dE}}{\mathrm{d}t} = -\mathrm{Re}\left(\chi(\omega)\mathrm{F}_\omega e^{-i\omega t}\right) \mathrm{Re}\left(-i\omega \mathrm{F}_\omega e^{-i\omega t}\right)$$

$$\frac{\mathrm{dE}}{\mathrm{d}t} = -\frac{1}{4}\left(\chi \mathrm{F} e^{-i\omega t} + \overline{\chi}\overline{\mathrm{F}} e^{i\omega t}\right)\left(-i\omega \mathrm{F} e^{-i\omega t} + i\omega \overline{\mathrm{F}} e^{i\omega t}\right)$$

En moyennant sur une période il vient :

$$\overline{\frac{\mathrm{dE}}{\mathrm{d}t}} = -i\frac{\omega}{4}\left|\mathrm{F}_\omega\right|^2 \left(\chi_\omega - \overline{\chi}_\omega\right) = \frac{\omega}{2}\chi''(\omega)\left|\mathrm{F}_\omega\right|^2$$

Comme on fournit de l'énergie en moyenne (qui est ensuite dissipée par le système, $\overline{\dfrac{\mathrm{dE}}{\mathrm{d}t}}$ est positif et donc, pour $\omega \geq 0$, $\boxed{\chi''(\omega) \geq 0}$.

Etudions maintenant le comportement pour les grandes valeurs de z. L'inertie d'un système étant finie, si on le force avec une grande fréquence, la réponse va tendre vers 0.

Prouvons ce résultat mathématiquement :

si K_0 est différentiable et si K_0' est absolument intégrable, alors une intégration par partie montre que χ décroît vers 0 au moins comme $\dfrac{1}{z}$:

$$\begin{aligned}\int_0^\infty \mathrm{d}\tau\ e^{iz\tau}\mathrm{K}_0\tau &= \left[\frac{e^{iz\tau}}{iz}\mathrm{K}_0\tau\right]_0^\infty - \int_0^\infty \mathrm{d}\tau\ \frac{e^{iz\tau}}{iz}\mathrm{K}_0'\tau\\ &= -\frac{\mathrm{K}_0(0)}{iz} - \frac{1}{iz}\underbrace{\int_0^\infty \mathrm{d}\tau\ e^{iz\tau}\mathrm{K}_0'(\tau)}_{\text{fini}}\end{aligned}$$

$$\boxed{\chi \text{ est bornée par } \frac{cste}{|z|} \text{ et tend vers } 0.}$$

Si K_0 est n-fois différentiable, on peut continuer les intégrations par parties, ce qui engendrera un développement asymptotique en les puissances inverses de z, dont les coefficients dépendent des dérivées de K_0 en 0.

Si K_0 est C^∞, on obtient les développements des parties réelle et imaginaire de χ pour ω grand :

$$\chi'(\omega) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\alpha_p}{w^{2p}} \qquad \text{et} \qquad \chi''(\omega) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{\gamma_p}{w^{2p+1}}$$

1.2.3 Relations de Kramers-Krönig

On se place dans le cas où où χ est analytique sur $\overline{\mathbb{C}_{sup}}$ ($\mathbb{C}_{sup}$ fermé). On suppose que χ décroît pour les grandes valeurs de z, et uniformément par rapport à l'argument de z.

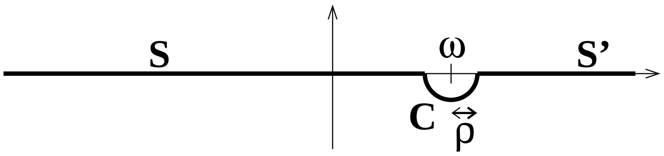
Soit z un complexe fixé. Soit la fonction $f(z') = \dfrac{\chi(z')}{z'-z}$.

Le théorème des résidus nous montre que l'intégrale sur l'axe réel de cette fonction f est égale à $2i\pi\chi(z)$. Pour cela, on utilise la décroissance uniforme de χ pour z grand et le lemme de Jordan.

D'où : $$\boxed{\chi(z) = \frac{1}{2i\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\chi(\omega')}{\omega'-z}}$$

Intéressons-nous maintenant au cas où z est réel. On considère donc un point réel ω où χ est analytique. Le membre de gauche de cette équation ne pose pas de problème, on obtient $\chi(\omega)$.

Pour que le membre de droite soit défini, il va nous falloir déformer le contour d'intégration.



On remplace donc le segment $[\omega-\rho, \omega+\rho]$, par le demi-cercle inférieur C de rayon ρ et de centre ω.

Il existe un voisinage de ω où χ est analytique et donc, pour ρ suffisamment petit, χ est analytique sur le demi-cercle.

Le pôle z de $\dfrac{\chi(\omega')}{\omega'-z}$ tend vers ω en restant en dehors du demi-cercle inférieur. L'intégrale sur l'union du petit segment et du petit demi-cercle inférieur est donc nulle, d'après le théorème de Cauchy.

On peut donc remplacer l'intégrale sur $\mathbb{R}$ par celle sur le demi-cercle C et celle sur $S \cup S'$, c'est à dire $\mathbb{R}$ privé du petit segment.

En faisant tendre ρ vers 0, on constate que les contributions divergentes des intégrales sur S et S′ se compensent exactement. On obtient donc la partie principale de l'intégrale.

En ce qui concerne l'intégrale sur le demi-cercle C, on développe $\chi(z')$ sous la forme $\chi(\omega) + O(\rho)$ où $z' = \omega + \rho e^{i\theta}$. L'intégration en polaires donne alors :

$\int_{\mathcal{C}_\rho} \mathrm{d}z' \, \frac{\chi(z')}{z'-\omega} = \int_{-\pi}^{0} \mathrm{d}\theta' \, i\rho e^{i\theta'} \frac{1}{\rho e^{i\theta'}} \left(\chi(\omega) + \mathrm{O}(\rho)\right)$. En faisant tendre ρ vers 0, il vient $i\pi\chi(\omega)$.

En résumé, on a :

$$\lim_{\epsilon \to 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega - i\epsilon} = \mathrm{PP} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega} + i\pi\chi(\omega)$$

C'est une conséquence de l'égalité au sens des distributions :

$$\lim_{\epsilon \to 0^+} \frac{1}{x - i\epsilon} = \mathrm{PP}\left(\frac{1}{x}\right) + i\pi\delta(x)$$

Alors :

$$\chi(\omega) = \frac{1}{2i\pi} \mathrm{PP} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\chi(\omega')}{\omega' - \omega} + \frac{1}{2}\chi(\omega)$$

On obtient alors les relations de Kramers-Krönig :

$$\boxed{\chi'(\omega) = \frac{1}{\pi} \mathrm{PP} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\chi''(\omega')}{\omega' - \omega}}$$

Et :

$$\boxed{\chi''(\omega) = -\frac{1}{\pi} \mathrm{PP} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\chi'(\omega')}{\omega' - \omega}}$$

Quelques Remarques :

- ⋆ Lorsque χ présente des singularités “faibles” en ω_i (typiquement, un terme singulier en $|\omega - \omega_i|^{\delta_i}$ avec $\delta_i > 0$ dans le développement de Taylor), alors on peut étendre ces formules à tout l'axe réel.
- ⋆ Si χ présente un pôle en ω_i, on peut généraliser les formules de Kramers-Krönig aux points $\omega \neq \omega_i$ en rajoutant au membre de droite une contribution du pôle.
- ⋆ On peut exprimer χ' et χ'' par les relations suivantes, lorsque $z = \omega + i\epsilon$:

$$\chi'(z) = \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\omega' - \omega}{(\omega' - \omega)^2 + \epsilon^2} \chi''(\omega')$$

$$\chi''(z) = -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}\omega' \, \frac{\omega' - \omega}{(\omega' - \omega)^2 + \epsilon^2} \chi'(\omega')$$

Sous certaines hypothèses supplémentaires, on peut montrer que l'inverse de χ est aussi analytique sur $\mathbb{C}_{sup}$ (il suffit que χ ne s'annule pas sur $\mathbb{C}_{sup}$).

1.2.4 Conséquences

Les relations de Kramers-Krönig sont très puissantes car elles permettent d'obtenir des règles de somme sur les fonctions de corrélation (ou mémoire) du système non perturbé. Si on connaît par des arguments physiques simples des comportements à grande ou basse fréquence, on peut en déduire des identités sur les moments de χ' et χ'' (voir le cas des diélectriques un peu plus loin).

Par ailleurs, on peut construire à la main des $\chi(\omega)$ qui soient raisonnables et simples. Quand χ'' (ou χ') a un signe bien défini (relié à la dissipation), il est intéressant de présupposer une forme de χ'' et de calculer χ' grâce aux relations de Kramers-Krönig.

1.2.5 Prolongement analytique dans $\mathbb{C}_{inf}$

En général, la susceptibilité χ admettra un prolongement analytique dans $\mathbb{C}_{inf}$ mais la représentation intégrale de χ ne sera plus nécessairement valable.

Les scénarios les plus communs sont :

- ▷ χ est analytique sur $\mathbb{C}_{inf}$ alors d'après le théorème de Liouville, elle doit diverger aux grandes valeurs de z dans $\mathbb{C}_{inf}$.
- ▷ χ présente des singularités dans $\mathbb{C}_{inf}$ en des points isolés. Ces pôles sont des modes propres du système et leur partie imaginaire est contrôlée par la dissipation.
- ▷ χ peut présenter des singularités sur $\mathbb{R}$: pôles, points de branchement (si singularité faible).

1.3 Exemples

1.3.1 Électrocinétique

Dans un circuit RLC série en régime forcé par une tension $\mathrm{U}_z e^{-iz\tau}$ (c'est la perturbation), on étudie l'intensité I.

L'inpédance du circuit est $\dfrac{\mathrm{U}}{\mathrm{I}} = \mathrm{Z}(z) = \mathrm{R} - i\left(\mathrm{L}z - \dfrac{1}{\mathrm{C}z}\right)$.

On a donc ici : $$\chi(z) = \frac{1}{\mathrm{Z}(z)}$$

L_z est le terme d'inertie puisqu'il provoque la coupure aux hautes fréquences.

$$\chi(z) = \frac{i\mathrm{C}z}{\mathrm{LC}z^2 + i\mathrm{RC}z - 1}$$

Les deux seuls pôles de χ sont situés dans $\mathbb{C}_{inf}$, ce sont les modes propres du circuit. Leur distance à l'axe réel est contrôlée par la dissipation.

1.3.2 Dispersion en fréquence pour les diélectriques

On soumet un échantillon diélectrique de taille finie à un champ électrique extérieur oscillant (selon z) et uniforme à l'échelle de l'échantillon.

La réponse du système est ici le vecteur polarisation $\vec{\mathrm{P}} = \epsilon_0 \left(\epsilon(z) - 1\right) \vec{\mathrm{E}} e^{-izt}$. La susceptibilité vaut donc $\chi(z) = \epsilon(z) - 1$.

Attention, $\vec{\mathrm{P}}$ est bien la réponse mais $\vec{\mathrm{E}}$ est la somme du champ extérieur et du champ créé par les charges de polarisation. Mais on regarde la réponse locale du petit élément de volume sur lequel on définit $\vec{\mathrm{E}}$. A cette échelle, $\vec{\mathrm{E}}$ est bien le champ extérieur et $\chi(z)$ la susceptibilité.

L'équation régissant le mouvement des charges q est :

$$m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} + 2m\lambda\frac{d\vec{r}}{dt} + m\omega_0^2\vec{r} = q\vec{\mathrm{E}}e^{-iz}$$

La solution forcée est de la forme $\vec{cste}\,e^{-izt}$.
On en déduit le vecteur polarisation d'une charge :

$$\vec{p} = q\vec{r} = \frac{q^2}{m\left(\omega_0^2 - 2i\lambda z - z^2\right)}\vec{\mathrm{E}}e^{-izt}$$

En multipliant par la densité numérique de charges par unité de volume,n, on obtient le vecteur polarisation $\vec{\mathrm{P}}$.

D'où : $$\boxed{\chi(z) = \epsilon(z) - 1 = \frac{nq^2}{\epsilon_0 m\left(\omega_0^2 - 2i\lambda z - z^2\right)}}$$

Soit : $$\epsilon'(\omega) - 1 = \frac{nq^2}{m\epsilon_0}\frac{\omega_0^2 - \omega^2}{\left(\omega_0^2 - \omega^2\right)^2 + 4\lambda^2\omega^2}$$

$$\epsilon''(\omega) = \frac{nq^2}{m\epsilon_0}\frac{2\lambda\omega}{\left(\omega_0^2 - \omega^2\right)^2 + 4\lambda^2\omega^2}$$

Lorsque $\omega = 0$ on obtient la constante diélectrique $\epsilon - 1 = \dfrac{nq^2}{m\epsilon_0\omega_0^2} > 0$

On peut montrer que ϵ'' est reliée à la dissipation d'énergie en calculant la puissance fournie par le champ extérieur.

On aurait pu bricoler nous-même ϵ'' en tenant compte des propriétés d'absorption du milieu (modélisation des raies d'absorption). On en aurait ensuite déduit $\epsilon' - 1$.

On peut remarquer les relations de Kramers-Krönig peuvent s'interpréter comme une équivalence entre l'absorption et la dispersion.

1.3.3 Ecoulement oscillant dans un capillaire

On considère un fluide visqueux dans une conduite cylindrique de longueur L, de rayon R et d'axe (Ox). On note $\vec{u}(r,x,t)$ le champ des vitesses dans ce fluide.

Initialement, le fluide est au repos. On applique une différence de pression $\delta\mathrm{P}e^{-izt}$. On prendra en fait $\mathrm{P}(x=0) = \mathrm{P}_0 + \delta\mathrm{P}e^{-izt}$ et $\mathrm{P}(\mathrm{L}) = \mathrm{P}_0$.

On supposera que la longueur d'onde des ondes accoustiques est très grande devant L. Le fluide est donc incompressible, en première approximation. On supposera par ailleurs que l'écoulement est laminaire (non turbulent).

L'équation de conservation de la masse donne $\mathrm{div}\,(\rho\vec{u}) + \dfrac{\partial\rho}{\partial t} = 0$. Cela permet d'affirmer que la vitesse est indépendante de x.

Ecrivons maintenant l'équation de Navier-Stokes :

$$\frac{\partial\vec{u}}{\partial t} + \left(\vec{u}\cdot\vec{\nabla}\right)\vec{u} = -\frac{1}{\rho}\vec{\nabla}\mathrm{P} + \nu\Delta\vec{u}$$

En projetant cette équation selon l'axe (Oy) ou (Oz), on montre que la pression ne dépend ni de y, ni de z. La pression ne dépend donc que de x et t.

En projetant sur $(\mathrm{O}x)$, on obtient $\dfrac{\partial u_x}{\partial t} - \nu \Delta u_x = -\dfrac{1}{\rho}\dfrac{\partial \mathrm{P}}{\partial x}$. Le premier terme ne dépend que de r et t tandis que le second ne dépend que de x et t. Ils ne dépendent donc en fait que de t.

La réponse étant linéaire, cette dépendance en t se traduit simplement par un facteur e^{-izt}. On peut donc écrire la pression sous la forme $\mathrm{P} - \mathrm{P}_0 = f(x)e^{-izt}$. La dérivée de f est reliée à la dérivée partielle en x de la pression, qui ne dépend pas de x, comme on vient de le voir au paragraphe précédent.

La dérivée de f est constante et f est donc linéaire. Les conditions aux limites permettent alors d'affirmer que $f(x) = \dfrac{\mathrm{L}-x}{\mathrm{L}}\delta\mathrm{P}$.

$$\mathrm{P} = \mathrm{P}_0 + \frac{\mathrm{L}-x}{\mathrm{L}}\delta\mathrm{P}e^{-izt}$$

Considérons maintenant u_x. Cette fonction ne dépend que de r et t. Là aussi, la dépendance en t se fait forcément par le biais d'un facteur e^{-izt}. En posant $u_x = \phi(r)e^{-izt}$, l'équation de Navier-Stokes projetée sur x donne :

$$\Delta\phi(r) + \frac{iz}{\nu}\phi = -\frac{\delta\mathrm{P}}{\nu\rho\mathrm{L}}$$

La condition limite en r=R s'écrit $\phi(\mathrm{R}) = 0$.

Une solution particulière de l'équation est $\phi_0(r) = \dfrac{i\delta\mathrm{P}}{\rho\mathrm{L}z}$. ϕ ne dépendant que de r, son laplacien s'écrit $\dfrac{d^2}{dr^2} + \dfrac{1}{r}\dfrac{d}{dr}$. En posant $\xi = r\left(\dfrac{iz}{\nu}\right)^{\frac{1}{2}}$, on obtient l'équation homogène :

$$\frac{d^2\phi}{d\xi^2} + \frac{1}{\xi}\frac{d\phi}{d\xi} + \phi = 0$$

La racine carrée d'un complexe z est définie par l'argument moitié de celui de z compris entre $\left[\frac{-\pi}{2}, \frac{3\pi}{2}\right]$. Cette coupure sur l'axe imaginaire pur négatif nous posera problème lors de l'étude de l'analycité de la susceptibilité.

Une solution de cette équation est la fonction de Bessel de première espèce et d'ordre 0 :

$$\mathrm{J}_0(\xi) = \frac{1}{2\pi}\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta\, e^{i\xi\cos\theta}$$

La constante multiplicative associée à cette constante dans la solution de l'équation générale, sera déterminée grâce aux conditions aux limites. On note $\xi_\mathrm{R} = \mathrm{R}\left(\dfrac{iz}{\nu}\right)^{1/2}$.

Finalement : $$\boxed{\phi(r) = \frac{i\delta\mathrm{P}}{z\rho\mathrm{L}}\left(1 - \frac{\mathrm{J}_0(\xi)}{\mathrm{J}_0(\xi_\mathrm{R})}\right)}$$

Considérons maintenant le débit induit Q :

$$\mathrm{Q} = \int_{x=0} \mathrm{d}\vec{\Sigma}\cdot\rho\vec{u} = 2\pi\rho\int_0^\mathrm{R} \mathrm{d}r\, r\frac{i\delta\mathrm{P}}{z\rho\mathrm{L}}\left(1 - \frac{\mathrm{J}_0(\xi)}{\mathrm{J}_0(\xi_\mathrm{R})}\right)e^{-izt}$$

En posant $\mathrm{Q} = \chi(z)\delta\mathrm{P}e^{-izt}$, il vient :

$$\chi(z) = \frac{2\pi i}{z\mathrm{L}} \int_0^{\mathrm{R}} \mathrm{d}r\, r \left(1 - \frac{\mathrm{J}_0(\xi)}{\mathrm{J}_0(\xi_{\mathrm{R}})}\right)$$

Or, $\displaystyle\int_0^{\xi_{\mathrm{R}}} \mathrm{d}\xi\, \xi \mathrm{J}_0(\xi) = \xi_{\mathrm{R}} \mathrm{J}_1(\xi_{\mathrm{R}})$

D'où : $$\boxed{\chi(z) = \frac{i\pi \mathrm{R}^2}{\mathrm{L}z} \left(1 - \frac{2\mathrm{J}_1(\xi_{\mathrm{R}})}{\xi_{\mathrm{R}} \mathrm{J}_0(\xi_{\mathrm{R}})}\right)} \qquad \text{avec } \xi_{\mathrm{R}} = \mathrm{R}\left(\frac{iz}{\nu}\right)^{\frac{1}{2}}$$

Rappels sur les Fonctions de Bessel :

- ◇ $\mathrm{J}_p(x) = e^{-ip\frac{\pi}{2}} \dfrac{1}{2\pi} \displaystyle\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta\, e^{ix\cos\theta} e^{ip\theta}$
- ◇ $x\mathrm{J}_{p-1} + x\mathrm{J}_{p+1} = 2p\mathrm{J}_p$
- ◇ $\mathrm{J}_{p-1} - \mathrm{J}_{p+1} = 2\mathrm{J}'_p$
- ◇ $\mathrm{J}_{-p} = (-)^p \mathrm{J}_p$

Etudions maintenant la susceptibilité χ :

La fonction de Bessel étant analytique sur $\mathbb{C}$ tout entier, les seuls problèmes d'analycité de χ apparaîtront lors du calcul de ξ_{R}, c'est à dire, lors de la prise de la racine carrée du complexe z, ou encore pour les zéros de la fonction de J_0 que l'on doit inverser.

En ce qui concerne la prise de la racine carrée, la parité de J_0 et l'imparité de J_1 permettent de supprimer les éventuels problèmes :

$$\mathrm{J}_0\left(\theta = \frac{3\pi^-}{2}\right) = \mathrm{J}_0\left(\theta = \frac{-\pi^+}{2}\right) \qquad \text{et} \qquad \mathrm{J}_1\left(\theta = \frac{3\pi^-}{2}\right) = -\mathrm{J}_1\left(\theta = \frac{-\pi^+}{2}\right)$$

La continuité de la racine carrée lorsqu'on traverse la coupure constituée par l'axe imaginaire pur négatif, n'empêche pas la continuité (et la différentiabilité) de χ au voisinage de cette coupure. En effet, $\mathrm{J}_1(\xi_{\mathrm{R}})$ et ξ_{R} changent de signe mais pas $\mathrm{J}_0(\xi_{\mathrm{R}})$ donc $\dfrac{\mathrm{J}_1(\xi_{\mathrm{R}})}{\xi_{\mathrm{R}} \mathrm{J}_0(\xi_{\mathrm{R}})}$ ne change pas signe et est donc continu.

χ est analytique sur $i\mathbb{R}_-^*$ privé des éventuels zéros de $\mathrm{J}_0(\xi_{\mathrm{R}})$.

Au voisinage de $z = 0$ un problème apparaît du fait de la non-dérivabilité de la fonction racine carrée. Cependant, un développement en série entière de J_0 et J_1 permet de régler le problème car ces développements convergent avec un rayon non nul (et donc sur un voisinage de 0).

La susceptibilité χ est analytique en 0.

Les zéros de J_0 sont sur l'axe réel. Les zéros de $\mathrm{J}_0(\xi_{\mathrm{R}})$ sont donc situés sur le demi-axe imaginaire pur négatif.

Les pôles de χ sont sur $i\mathbb{R}_-^*$.

Chapitre 2

Fonctions de Green

2.1 Systèmes infinis

2.1.1 Position du problème

On considère un système défini par la donnée d'une distribution de sources $\mathrm{S}\,(x_1 \in \mathbb{R}^n, ..., x_i \in \mathbb{R}^n)$. Ces sources créent un champ scalaire $\phi(x)$ relié aux sources par une équation linéaire de la forme :

$$\mathrm{O}\phi = \mathrm{S}$$

La spécification univoque de ϕ imposera souvent l'ajout de conditions aux limites, typiquement la nullité du champ à l'infini.

Lorsque l'opérateur O contient des dérivées partielles temporelles, la causalité peut être prise en compte dans ces conditions aux limites.

2.1.2 Définition de la fonction de Green

On introduit une distribution de source du type ponctuel centré en x' :

$$\mathrm{S} = \delta(x - x')$$

Soit $\phi_{x'}$ le champ créé par cette source. Par définition, la fonction de Green $\mathrm{G}(x,x') = \phi_{x'}(x)$. La fonction G dépend du point d'émission x' et du point d'absorption x.

On écrira donc : $\boxed{\mathrm{O}_x \mathrm{G}(x,x') = \delta(x - x')}$

Lorsque O est hermitien $(\mathrm{O} = \mathrm{O}^+)$ on a une propriété de symétrie supplémentaire sur G. Notons **(1)** et **(2)** les deux équations suivantes :

$$\mathrm{O}_x \mathrm{G}(x,x_a) = \delta(x - x_a) \quad \mathbf{(1)} \qquad\qquad \mathrm{O}_x \mathrm{G}(x,x_b) = \delta(x - x_b) \quad \mathbf{(2)}$$

Calculons $\displaystyle\int_{\mathbb{R}^n} \mathrm{d}x \ \left(\mathrm{G}^*(x,x_b).\mathbf{(1)} - \mathrm{G}(x,x_a).\mathbf{(2)}^*\right)$: En utilisant les seconds membres de **(1)** et **(2)**, on obtient :

$$\int \mathrm{d}x \ \left(\mathrm{G}^*(x,x_b)\delta(x - x_a) - \mathrm{G}(x,x_a)\delta(x - x_b)\right) = \mathrm{G}^*(x_a,x_b) - \mathrm{G}(x_b,x_a)$$

Par contre, en utilisant les premiers termes, il vient

$$\int \mathrm{d}x \; \left(\mathrm{G}^*(x,x_b)\mathrm{O}_x\mathrm{G}(x,x_a) - \mathrm{G}(x,x_a)\mathrm{O}_x^+\mathrm{G}^*(x,x_b)\right)$$

Cette dernière intégrale est nulle car, O_x étant supposé hermitien, l'intégrande est nulle.
D'où : $\boxed{\mathrm{G}(x_a,x_b) = \mathrm{G}^*(x_b,x_a)}$

De plus, si O est invariant par translation, $\mathrm{G}(x,x') = \mathrm{G}(x-x')$. L'invariance par rotation et translation conduit à $\mathrm{G}(x,x') = \mathrm{G}\left(|x-x'|\right)$.

2.1.3 Solution générale

Le champ créé est la superposition des champs créés par chacune des sources.

$$\phi(x) = \int \mathrm{d}x' \; \mathrm{G}(x,x')\mathrm{S}(x')$$

Pour prouver ce résultat, il suffit de prouver que le champ ϕ défini ainsi est solution de l'équation $\mathrm{O}\phi = \mathrm{S}$, ce qui est évident puisque O_x étant linéaire, on va pouvoir le rentrer dans l'intégrale.

2.1.4 Point de vue opératoriel

L'équation du système est en fait constituée de $\mathrm{O}\phi = \mathrm{S}$ et des conditions aux limites. Ce sont ces conditions aux limites qui vont permettre d'écrire $\phi = \mathrm{O}^{-1}\mathrm{S}$. $\mathrm{G}(x,x')$ se réduit en fait aux éléments de matrice de O^{-1} entre x et x'.

Considérons une base propre de O, $|\Psi_n\rangle$.

On a : $$\sum_n |\Psi_n\rangle\langle\Psi_n| = 1$$

et on obtient : $$\mathrm{G}(x,x') = \sum_n \frac{1}{\lambda_n}\Psi_n(x)\Psi_n^*(x')$$

Cette somme est bien définie puisque les valeurs propres de O sont non nulles étant donné que les conditions aux limites assurent leur inversibilité.

On peut remarquer qu'on retrouve le fait que si O est hermitien, $\mathrm{G}^*(x,x') = \mathrm{G}(x',x)$.

2.1.5 Domaines d'application

Ces fonctions de Green du système infini seront aussi utiles pour des géométries confinées. Par ailleurs, elles interviennent non seulement dans des problèmes avec des sources physiques bien définies (comme en électromagnétisme), mais également dans tout problème où une quantité se propage d'un point à un autre. Cela conduit à des applications en électromagnétisme mais aussi en hydrodynamique, en mécanique quantique, en théorie des champs, etc.

2.2 Exemples

2.2.1 Électrostatique : opérateur laplacien

En électrostatique, une distribution de charges de densité $\rho(\vec{r})$ crée un potentiel électrostatique solution de :

$$-\Delta\phi = \frac{\rho(\vec{r})}{\epsilon_0}$$

Les conditions aux limites affirment la nullité du potentiel à une distance infinie des charges. Donc, ici, $\mathrm{O} = -\Delta$ et $\mathrm{S} = \dfrac{\rho(\vec{r})}{\epsilon_0}$.

On s'intéresse ici à un cas en 3 dimensions. On va calculer $\mathrm{G}(\vec{r}, \vec{r}') = \mathrm{G}(|\vec{r} - \vec{r}'|)$ qui vérifie :

$$-\Delta_{\vec{r}}\mathrm{G} = \delta(\vec{r} - \vec{r}')$$

On passe en transformée de Fourier :

$$\widetilde{\mathrm{G}}\left(\vec{k}\right) = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\; e^{-i\vec{k}\,(\vec{r}-\vec{r}')}\mathrm{G}(\vec{r} - \vec{r}')$$

L'équation devient alors :

$$-\left(-i\vec{k}\right)^2 \widetilde{\mathrm{G}}\left(\vec{k}\right) = k^2\, \widetilde{\mathrm{G}}\left(\vec{k}\right) = 1$$

En résolvant cette équation au sens des distributions, il vient $\widetilde{\mathrm{G}}\left(\vec{k}\right) = \dfrac{1}{k^2} + \widetilde{\mathrm{D}}\left(\vec{k}\right)$ où $k^2\, \widetilde{\mathrm{D}}\left(\vec{k}\right) = 0$.

En fait $\widetilde{\mathrm{D}}$ est la transformée de Fourier d'une fonction harmonique. Les conditions aux limites imposent à ces fonctions de tendre vers 0 à l'infini. On peut donc prendre $\widetilde{\mathrm{D}} = 0$.

D'où :

$$\boxed{\widetilde{\mathrm{G}}\left(\vec{k}\right) = \frac{1}{k^2}}$$

$$\begin{aligned}
\mathrm{G}(|\vec{r} - \vec{r}'|) &= \frac{1}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3\vec{k}\, e^{-i\vec{k}\,(\vec{r}-\vec{r}')}\frac{1}{k^2} \\
&= \frac{1}{(2\pi)^3}\int_{k=0}^{\infty} \mathrm{d}k\, 4\pi k^2 \frac{1}{k^2}\frac{\sin(k\,|\vec{r} - \vec{r}'|)}{k\,|\vec{r} - \vec{r}'|} \\
&= \frac{1}{2\pi^2\,|\vec{r} - \vec{r}'|}\int_0^{\infty} \mathrm{d}k\, \frac{\sin(k\,|\vec{r} - \vec{r}'|)}{k} \\
&= \frac{1}{2\pi^2\,|\vec{r} - \vec{r}'|}\int_0^{\infty} \mathrm{d}\xi\, \frac{\sin\xi}{\xi} \\
&= \frac{1}{2\pi^2\,|\vec{r} - \vec{r}'|}\frac{\pi}{2}
\end{aligned}$$

Donc :

$$\boxed{\mathrm{G}(|\vec{r} - \vec{r}'|) = \frac{1}{4\pi\,|\vec{r} - \vec{r}'|}}$$

En remarquant que les valeurs propres des ondes planes (c'est-à-dire des kets $\left|\vec{k}\right\rangle$) sont égales à k^2, on peut, en se servant de l'expression de la fonction de Green donnée par le formalisme de Dirac, retrouver directement le résultat donné par la transformée de Fourier.

Si on travaille en 1 ou 3 dimensions, les transformées de Fourier donnent le même résultat. Cependant, une singularité apparaît à l'origine lors du retour aux fonctions non transformées, ce qui oblige à garder des distributions au lieu de revenir aux fonctions.

2.2.2 Électromagnétisme : opérateur d'Alembertien

En électromagnétisme, étant donné le quadrivecteur courant $\mathrm{J}^i = \left(c\rho, \vec{j}\right)$, en jauge de Lorentz, le quadrivecteur potentiel $\mathrm{A}^i = \left(\frac{\phi}{c}, \vec{\mathrm{A}}\right)$ est solution de l'équation de propagation avec sources :

$$-\Box \mathrm{A}^i = \mu_0 \mathrm{J}^i$$

On a noté le d'Alembertien $\Box = \Delta - \dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial^2}{\partial t^2}$.

Les conditions aux limites sont la nullité du quadrivecteur potentiel à l'infini ainsi que la causalité.

La fonction de Green G de $-\Box$ vérifie :

$$-\Box \mathrm{G}\left(\vec{r}-\vec{r}', t-t'\right) = \delta\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)\delta\left(t-t'\right)$$

Les conditions aux limites lui imposent sa nullité à l'infini, ainsi que lorsque $t < t'$. Comme elle respecte la causalité, cette fonction de Green sera notée $\mathrm{G}^{\mathrm{ret}}$ (pour "retardée").

Remarque : Si on prend $z = \omega - i\epsilon$, on obtient la fonction de Green anti-causale G^{av}.

Pour résoudre, on passe en transformée de Fourier en 4 dimensions, pour la fréquence $z = \omega + i\epsilon$ où ϵ positif mais proche de 0. Cela va garantir la convergence des intégrales et éviter les singularités dans l'espace de Fourier.

On obtient : $$-\left(k^2 + \frac{z^2}{c^2}\right)\widetilde{\mathrm{G}}^{\mathrm{ret}} = 1$$

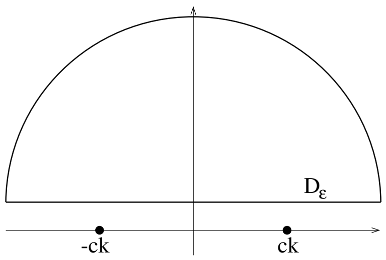
D'où : $$\boxed{\widetilde{\mathrm{G}}^{\mathrm{ret}}\left(\vec{k}, z\right) = \frac{c^2}{c^2k^2 - z^2}}$$

On constate que cette fonction ne peut pas s'annuler étant donné le facteur $i\epsilon$ présent dans z.

$$\mathrm{G}^{\mathrm{ret}}\left(\vec{r}-\vec{r}', t-t'\right) = \frac{1}{(2\pi)^4}\int \mathrm{d}^3\vec{k}\, e^{i\vec{k}\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)}\int_{\mathcal{D}_\epsilon} \mathrm{d}z\, e^{-iz(t-t')}\,\widetilde{\mathrm{G}}^{\mathrm{ret}}$$

$\mathcal{D}_\epsilon$ est la droite horizontale d'ordonnée ϵ. Il y a deux pôles, ck et $-ck$ situés sur l'axe réel.

◇ Pour $t < t'$, il est judicieux de compléter l'intégrale sur $\mathcal{D}_\epsilon$ par celle sur un demi-grand cercle supérieur. Ce contour ne contenant aucun pôle, le théorème des résidus permet d'affirmer la nullité de l'intégrale totale.



Cependant, l'intégrale sur le demi-grand cercle supérieur est également nulle d'après le lemme de Jordan.

L'intégrale sur $\mathcal{D}_\epsilon$ est donc nulle.

Pout $t < t'$, $\boxed{\mathrm{G}^{\mathrm{ret}} = 0}$

◇ Pour $t > t'$, on complète par un demi-cercle inférieur, sur lequel l'intégrale sera nulle d'après le lemme de Jordan. L'intégrale sur le contour est alors la somme des résidus en ck et en $-ck$, multiplié par $-2i\pi$ compte-tenu du sens de parcours du contour.

$$\int_{\mathcal{D}_\epsilon} \mathrm{d}z\, e^{-iz(t-t')}\, \widetilde{\mathrm{G}^{\mathrm{ret}}} = -2i\pi \left(\frac{e^{ick(t-t')}}{2ck} - \frac{e^{-ick(t-t')}}{2ck} \right) = \frac{2\pi c}{k} \sin(ck(t-t'))$$

$$\mathrm{G}^{\mathrm{ret}} = \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{k=0}^{\infty} \mathrm{d}k\, 4\pi k^2 \frac{\sin\left(k\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|\right)}{k\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|} \frac{\sin\left(ck(t-t')\right)}{k}$$
$$= \frac{c}{4\pi^2\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|} \int_0^{\infty} \mathrm{d}k\ \left(\cos\left(ck(t-t') - k\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|\right) - \cos\left(ck(t-t') + \left|\vec{r}-\vec{r}'\right|\right)\right)$$

Or, $\displaystyle\int_0^{\infty} \mathrm{d}\xi\ \cos(\xi\alpha) = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}\xi\ \cos(\xi\alpha) = \pi\delta(\alpha)$

$$\mathrm{G}^{\mathrm{ret}} = \frac{c}{4\pi^2\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|} \left(\delta\left(\left|\vec{r}-\vec{r}'\right| - c(t-t')\right) - \underbrace{\delta\left(\left|\vec{r}-\vec{r}'\right| + c(t-t')\right)}_{=0 \text{ car } t-t'>0} \right)$$

Donc, pour $t > t'$:

$$\boxed{\mathrm{G}^{\mathrm{ret}}\left(\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|, t-t'\right) = \frac{c}{4\pi\left|\vec{r}-\vec{r}'\right|}\delta\left(\left|\vec{r}-\vec{r}'\right| - c(t-t')\right)}$$

La fonction de Green $\mathrm{G}^{\mathrm{ret}}$ est une onde sphérique sortante, de type "pulse", et se propageant à la vitesse c. On peut en déduire la fameuse formule des potentiels retardés.

La condition limite spatiale est en fait une combinaison de la causalité et de la valeur finie de la vitesse de propagation c.

En dimension 2, on trouve :

$$\mathrm{G}_{2\mathrm{D}}^{\mathrm{ret}} = \begin{cases} \dfrac{c}{2\pi\sqrt{c^2(t-t')^2 - |\vec{r}-\vec{r'}|^2}} & \text{si } c(t-t') > |\vec{r}-\vec{r'}| \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

En dimension 1, on trouve :

$$\mathrm{G}_{1\mathrm{D}}^{\mathrm{ret}} = \begin{cases} \frac{c}{2} & \text{si } c(t-t') > |\vec{r}-\vec{r'}| \\ 0 & \text{sinon.} \end{cases}$$

Il est intéressant de remarquer que la formule des potentiels retardés n'est valable qu'en 3+1 dimension.

2.2.3 Diffusion

Dans les problèmes de diffusion, on a un champ ϕ (qui peut représenter une température, une densité, etc) qui satisfait l'équation de diffusion :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \mathrm{D}\Delta\phi$$

D est la constante de diffusion, toujours positive. En ce qui concerne les conditions aux limites, il suffit d'imposer la valeur de ϕ en tout point, au temps initial $t = 0$, c'est-à-dire $\phi(\vec{r}, t=0) = \phi_0(t)$.

A priori, il n'y a pas ici de sources physiques. On va transformer l'équation grâce à la transformée de Laplace.

$$\phi(\vec{r}, s) = \int_0^{\infty} \mathrm{d}t\, e^{-st} \phi(\vec{r}, t)$$

A priori, s est un réel strictement positif.

On prend la transformée de Laplace membre à membre, en utilisant le fait que pour $\dfrac{\partial \phi}{\partial t}$, elle vaut $\displaystyle\int_0^{\infty} \mathrm{d}t\, e^{-st} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \left[e^{-st}\phi\right]_0^{\infty} + s\,\mathrm{TL}(\phi) = -\phi_0(\vec{r}) + s\hat{\phi}$

D'où : $$(-\mathrm{D}\Delta + s)\hat{\phi}(\vec{r}, s) = \phi_0(\vec{r})$$

L'opérateur $\mathrm{O} = -\mathrm{D}\Delta + s$ est l'opérateur de Helmholtz tandis que $\phi_0(\vec{r})$ joue le rôle d'une source.

Introduisons la fonction de Green $\hat{\mathrm{G}}$ de cet opérateur O.

$$(-\mathrm{D}\Delta_{\vec{r}} + s)\hat{\mathrm{G}}(\vec{r}, \vec{r'}) = \delta(\vec{r} - \vec{r'})$$

On passe en transformée de Fourier :

$$\tilde{\hat{\mathrm{G}}}\left(\vec{k}\right) = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\, e^{-i\vec{k}\,(\vec{r}-\vec{r'})} \hat{\mathrm{G}}(\vec{r} - \vec{r'})$$

On trouve : $$\left(\mathrm{D}k^2 + s\right) \tilde{\hat{\mathrm{G}}}\left(\vec{k}\right) = 1$$

D'où : $$\boxed{\tilde{\hat{\mathrm{G}}} = \frac{1}{(\mathrm{D}k^2 + s)}}$$

Dans l'espace de Fourier, le champ $\tilde{\hat{\phi}}\left(\vec{k}, s\right)$ est le produit de $\tilde{\hat{\mathrm{G}}}\left(\vec{k}\right) = \dfrac{1}{(\mathrm{D}k^2 + s)}$ et du champ initial $\tilde{\phi}_0\left(\vec{k}\right)$.

Il est intéressant de revenir d'abord au temps t :

$$\tilde{\phi}\left(\vec{k}, t\right) = \tilde{\phi}_0\left(\vec{k}\right) e^{-\mathrm{D}k^2 t}$$

Pour revenir à $\vec{r}$, on utilise le Théorème de Convolution "à l'envers" : multiplier par la gaussienne $\dfrac{1}{(\mathrm{D}k^2 + s)}$ dans l'espace de Fourier revient à convoluer par $\dfrac{1}{(4\pi \mathrm{D}t)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(\vec{r}-\vec{r}\,')^2}{4\mathrm{D}t}}$ dans l'espace réel.

D'où : $$\boxed{\phi\left(\vec{r}, t\right) = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\,'\ \phi_0\left(\vec{r}\right) \frac{1}{(4\pi \mathrm{D}t)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{(\vec{r}-\vec{r}\,')^2}{4\mathrm{D}t}}}$$

2.2.4 Mécanique quantique

Généralités :

On considère une particule de masse m dans un potentiel $\mathrm{V}\left(\vec{r}\right)$, dont la fonction d'onde obéit à l'équation de Schrödinger :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \mathrm{H}\Psi$$

On note H l'hamiltonien de la particule, $\mathrm{H} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta + \mathrm{V}$.

La condition limite est la donnée de $\Psi\left(\vec{r}, t = 0\right) = \Psi_0\left(\vec{r}\right)$. On a donc $|\Psi\rangle = e^{-i\frac{\mathrm{H}t}{\hbar}} |\Psi_0\rangle$

$$\Psi\left(\vec{r}, t\right) = \left\langle \vec{r} \left| e^{-i\frac{\mathrm{H}t}{\hbar}} \right| \Psi_0 \right\rangle = \int \mathrm{d}^3\vec{r}\, \Psi_0\left(\vec{r}\,'\right) \left\langle \vec{r} \left| e^{-i\frac{\mathrm{H}t}{\hbar}} \right| \vec{r}\,' \right\rangle$$

$\Psi_0\left(\vec{r}\,'\right)$ joue alors le rôle d'une source fictive tandis que $\left\langle \vec{r} \left| e^{-i\frac{\mathrm{H}t}{\hbar}} \right| \vec{r}\,' \right\rangle$ représente l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution, qui décrit la propagation de $\vec{r}$ à $\vec{r}\,'$ en un temps t ("propagateur en temps réel").

Cas libre :

Dans le cas où le potentiel V est nul, on retrouve une équation de diffusion avec un coefficient imaginaire pur.

On a : $$\boxed{\left\langle \vec{r} \left| e^{-i\frac{\mathrm{H}t}{\hbar}} \right| \vec{r}\,' \right\rangle = \left(\frac{m}{2i\pi\hbar t}\right)^{\frac{3}{2}} e^{\frac{im(\vec{r}-\vec{r}\,')^2}{2\hbar t}}}$$

Temps imaginaire :

En mécanique statistique, la matrice densité obtenue comme les éléments de matrice du facteur de Gibbs $e^{-\beta \mathrm{H}}$, qui un rôle crucial. On appelle fonction de Green, ou propagateur thermique, ces éléments de matrics :

$$\mathrm{G}\left(\vec{r},\vec{r}',\beta\right) = \left\langle \vec{r}\left| e^{-\beta\mathrm{H}} \right| \vec{r}' \right\rangle$$

On note que ce G est en quelque sorte le prolongement analytique du G en temps réel $\left\langle \vec{r}\left| e^{-i\frac{\mathrm{H}t}{\hbar}} \right| \vec{r}' \right\rangle$, en substituant $-i\beta\hbar$ à t. Cette fonction de Green satisfait l'équation de Bloch :

$$\frac{\partial\mathrm{G}}{\partial\beta} + \mathrm{H}_{\vec{n}}\mathrm{G} = 0$$

La condition limite est alors $\mathrm{G}\left(\vec{r},\vec{r}',0\right) = \delta\left(\vec{r}-\vec{r}'\right)$.

Résolvante :

Il est utile, pour les problèmes spectraux en particulier, d'introduire la résolvante définie comme la transformée de Laplace sur β de G :

$$\hat{\mathrm{G}}\left(\vec{r},\vec{r}',z\right) = \int_0^{\infty} \mathrm{d}\beta\, e^{-\beta z} \left\langle \vec{r}\left| e^{-\beta\mathrm{H}} \right| \vec{r}' \right\rangle = \left\langle \vec{r}\left| \frac{1}{z+\mathrm{H}} \right| \vec{r}' \right\rangle$$

Pour que l'intégrale sur β soit bien définie, il faut que la partie réelle de z soit supérieure à $-\mathrm{E}_0$, où E_0 est l'énergie du fondamental de H. A cette condition $\hat{\mathrm{G}}\left(\vec{r},\vec{r}',z\right)$ est analytique.

Par contre $\hat{\mathrm{G}}$ peut avoir des singularités dans le demi-plan gauche (situé à gauche de $-\mathrm{E}_0$). Ces singularités sont sur l'axe réel car elles sont associées aux valeurs propres de H, qui est hermitien.

On pose $z = -\mathrm{E} + i\eta$ et on utilise la défintion :

$$\lim_{\eta\to 0^+} \frac{1}{\mathrm{H}-\mathrm{E}+i\eta} = \mathrm{PP}\left(\frac{1}{\mathrm{H}-\mathrm{E}}\right) - i\pi\delta(\mathrm{H}-\mathrm{E})$$

Alors : $$\boxed{g(\mathrm{E}) = -\frac{1}{\pi}\lim_{\eta\to 0^+} \int \mathrm{d}^3\vec{r}\,\hat{\mathrm{G}}\left(\vec{r},\vec{r}',-\mathrm{E}+i\eta\right)}$$

On a noté $g(\mathrm{E})$ la trace de la matrice densité d'état $\delta(\mathrm{H}-\mathrm{E})$. Cette formule est intéressante dans les problèmes où le potentiel V est aléatoire (situation avec du désordre).

Formule d'inversion :

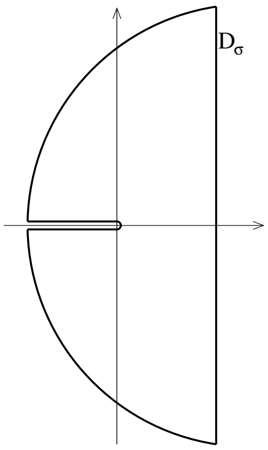
Au delà de l'intérêt de $\hat{\mathrm{G}}$ pour les problèmes spectraux, on peut revenir à G comme transformée de Laplace inverse, suivant la formule d'inversion :

$$\boxed{\mathrm{G}\left(\vec{r},\vec{r}',\beta\right) = \frac{1}{2i\pi}\int_{-i\infty+\sigma}^{+i\infty+\sigma} \mathrm{d}z\, e^{\beta z}\hat{\mathrm{G}}\left(\vec{r},\vec{r}',z\right)}$$

Pour prouver ce résultat, on applique le théorème des résidus.

Notons D_σ la droite d'intégration. On va créer un contour d'intégration fermé contenant D_σ.

Tout d'abord, on part du haut de cette droite et on prolonge par un quart de cercle vers $-\infty$ sur l'axe réel. Au lieu de traverser l'axe réel, on le longe jusqu'en 0, on le traverse en 0^+ puis on repart en ∞ en longeant à nouveau l'axe réel mais cette fois, par en dessous. Enfin, on rejoint le bas de la droite D_σ par un quart de grand cercle.



Les intégrales sur les deux grands quarts de cercle sont nulles d'après le Lemme de Jordan. Celles sur les trajets longeant l'axe réel négatif se compensent du fait du sens de parcours opposé. L'intégrale sur le contour vaut donc l'intégrale sur notre droite.

On peut prendre σ arbitrairement grand, supérieur à tous les opposés des niveaux d'énergie. La somme des résidus correspondra alors à une somme sur ces niveaux d'énergie.

2.2.5 Problème à N corps et théorie des champs

En mécanique quantique ordinaire, on peut écrire le hamiltonien H_N de N particules en interaction en termes d'opérateur de création $\Psi^+(\vec{r})$ et d'annihilation $\Psi(\vec{r})$ d'une particule au point $\vec{r}$ (seconde quantification).

On introduit alors les fonctions de Green en temps réel ou imaginaire à partir des opérateurs en représentation de Heisenberg (ou dépendant du temps).

$$\Psi_t(\vec{r}) = e^{+i\frac{H_N t}{\hbar}}\Psi(\vec{r})\, e^{-i\frac{H_N t}{\hbar}}$$

ou :

$$\Psi_\tau(\vec{r}) = e^{\tau H_N}\Psi(\vec{r})\, e^{-\tau H_N}$$

En posant,

$$G(\vec{r},\vec{r}',\tau) = \left\langle \Psi_\tau^+(\vec{r})\, \Psi_0(\vec{r}')\right\rangle$$

on décrit la propagation d'une particule du système entre les temps 0 et τ.

On considère que $\Psi_\tau^+(\vec{r})$ correspond à la création d'une particule au point $\vec{r}$ au temps τ tandis que $\Psi_0(\vec{r}')$ correspond à la disparition d'une particule au point $\vec{r}'$ au temps $t = 0$.

Les opérateurs d'Heisenberg en temps imaginaire apparaissent naturellement dans les développements perturbatifs. C'est la formule de Dyson :

$$e^{-\beta(H_0+V)} = e^{-\beta H_0} - \int_0^\beta d\tau\, e^{-(\beta-\tau)H_0} V e^{-\tau H_0} + ...$$

En théorie des champs, les objets fondamentaux sont des champs qui créent une particule et annihilent une antiparticule au même point. Ici, les fonctions de Green sont à nouveau de la forme $\left\langle \Psi_{t,\tau}^+(\vec{r})\, \Psi_0(\vec{r}')\right\rangle$.

Ces objets sont des scalaires (plus simples que les opérateurs eux-mêmes) et ils satisfont à des équations d'évolution, qui sont en général de type hiérarchie.

Les fonctions de Green "libres" (calculées avec les hamiltoniens sans interaction) interviennent dans les calculs perturbatifs et sont intimement reliées aux fonctions de Green "classiques" habituelles. Par exemple, le propagateur libre de photons correspond à la fonction de Green du d'Alembertien $\Box$.

2.3 Opérateur laplacien avec conditions de bord

2.3.1 Position du problème

On s'intéresse désormais à un système confiné dans une boîte Λ délimitée par une surface fermée Σ. Dans cette boîte, on a des sources S et un champ ϕ résultant satisfaisant à $-\Delta\phi = \mathrm{S}$ avec les conditions limites $\phi(\vec{r}) = \mathrm{D}_\Sigma(\vec{r})$ pour tout $\vec{r}$ sur la surface Σ.

La solution est univoquement déterminée par la condition de Dirichlet. Une démonstration en est donnée en annexe, à la fin de ce chapitre.

A noter qu'une partie de Σ peut être rejetée à l'infini, comme dans le cas du demi-espace.

2.3.2 Fonctions de Green

Dans ce problème, on peut introduire plusieurs fonctions de Green, toutes solutions de $-\Delta_{\vec{r}}\mathrm{G}(\vec{r},\vec{r}') = \delta(\vec{r}-\vec{r}')$ mais avec des conditions aux limites différentes.

Si on impose que G soit nulle à l'infini, on retrouve une fonction citée plus haut, $\mathrm{G}_\infty(|\vec{r}-\vec{r}'|) = \dfrac{1}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}'|}$.

On note G_D la fonction de Green qui s'annule partout sur le bord Σ. Ces deux fonctions jouent un rôle important dans la résolution du problème.

2.3.3 Solution générale

On écrit $-\Delta_{\vec{r}}\phi(\vec{r}) = \mathrm{S}(\vec{r})$ **(1)** et $-\Delta_{\vec{r}}\mathrm{G}(\vec{r},\vec{r}') = \mathrm{S}\delta(\vec{r},\vec{r}')$ **(2)** On effectue membre à membre de : $\int_\Lambda \mathrm{d}^3\vec{r}\,\left((\mathbf{1})\,\mathrm{G}(\vec{r}-\vec{r}') - (\mathbf{2})\,\phi(\vec{r})\right)$ Il vient :

$$\int_\Lambda \mathrm{d}^3\vec{r}\,\underbrace{\left(\phi(\vec{r})\,\Delta_{\vec{r}}\mathrm{G}(\vec{r},\vec{r}') - \mathrm{G}(\vec{r},\vec{r}')\,\Delta_{\vec{r}}\phi(\vec{r})\right)}_{\vec{\nabla}(\phi\vec{\nabla}\mathrm{G}-\mathrm{G}\vec{\nabla}\phi)} = \int_\Lambda \mathrm{d}^3\vec{r}\,\mathrm{S}(\vec{r})\,\mathrm{G}(\vec{r},\vec{r}') \quad - \ \phi(\vec{r}')$$

Par le théorème de Green-Ostrogradsky, le premier membre devient :

$$\int_\Sigma \mathrm{d}\vec{\Sigma}\ \left(\phi\vec{\nabla}\mathrm{G} - \mathrm{G}\vec{\nabla}\phi\right)$$

D'où :

$$\phi\left(\vec{r}'\right) = \int_\Lambda \mathrm{d}^3\vec{r}\,\mathrm{S}(\vec{r})\,\mathrm{G}(\vec{r},\vec{r}') + \int_\Sigma \left(\mathrm{d}\vec{\Sigma}\cdot\vec{\nabla}\phi\right)\mathrm{G}(\vec{r},\vec{r}') - \int_\Sigma \left(\mathrm{d}\vec{\Sigma}\cdot\vec{\nabla}_{\vec{r}}\mathrm{G}\right)\phi(\vec{r},\vec{r}')$$

Le 1^{er} terme est un champ de type G créé par les sources S (on peut permuter l'ordre des arguments de G car $-\Delta$ est auto-adjoint). Le second est créé par une distribution surfacique de densité. $\vec{n}.\vec{\nabla}\phi$. Enfin, le troisième est de type dipolaire avec distribution des dipôles en $\phi\vec{n}$.

Un choix judicieux de G est G_D, fonction de Green nulle sur Σ. Alors

$$\boxed{\phi(\vec{r}_0) = \int_\Lambda \mathrm{d}^3\vec{r}\,\mathrm{S}(\vec{r})\,\mathrm{G}_\mathrm{D}(\vec{r},\vec{r}_0) - \int_\Sigma \left(\mathrm{d}\vec{\Sigma}\cdot\vec{\nabla}_{\vec{r}}\mathrm{G}_\mathrm{D}(\vec{r},\vec{r}_0)\right)\mathrm{D}_\Sigma(\vec{r})}$$

On a ainsi la solution explicite.

Si de plus on impose la condition $\mathrm{D}_\Sigma = 0$ (paroi conductrice en électrostatique) alors, le membre de droite disparaît.

2.3.4 Électrostatique

On va s'intéresser ici à la méthode des images.

Soit une particule chargée placée au point $\mathrm{M}_0 = (x, 0, 0)$. L'espace $x < 0$ est constitué d'un conducteur parfait.

On va montrer que le potentiel créé par cette charge est égal à celui créé dans le cas où le conducteur est remplacé par une charge opposée placée en $(-x, 0, 0)$.

On cherche alors la fonction de Green $\mathrm{G_D}$ qui s'annule sur $x = 0$ et à l'infini. En passant dans l'espace de Fourier de x, on trouve :

$$\boxed{\widetilde{\mathrm{G}}_{\mathrm{D}} = \frac{1}{2k}\left(e^{-k(x-x_0)} - e^{-k(x+x_0)}\right)}$$

$$\mathrm{G_D} = \frac{1}{2\pi}\int_0^\infty \mathrm{d}k\, k\, \mathrm{J}_0\left(k\, r_{//}\right)\frac{1}{2k}\left(e^{-k(x-x_0)} - e^{-k(x+x_0)}\right)$$

On note $r_{//}^2 = r^2 - (x - x_0)^2$.

Il reste à montrer $\displaystyle\int_0^\infty \mathrm{d}k\ \mathrm{J}_0(\alpha k) e^{-\beta k} = \frac{1}{\sqrt{\alpha^2+\beta^2}}$. Cela se prouve en développant la fonction de Bessel en série entière puis en intégrant membre à membre.

D'où : $$\boxed{\mathrm{G_D}\left(\vec{r}, \vec{r}_0\right) = \frac{1}{4\pi\left|\vec{r}-\vec{r}_0\right|} - \frac{1}{4\pi\left|\vec{r}+\vec{r}_0\right|}}$$

2.3.5 Hydrodynamique

En hydrodynamique à 2 dimensions, lorsqu'on un a écoulement irrotationnel d'un fluide parfait incompressible, le champ des vitesses dérive alors d'un potentiel ϕ dont le laplacien est nul.

On a des conditions limites de type Von Neumann, c'est à dire que la dérivée normale du potentiel est nulle. C'est la condition de non-perméabilité de la paroi : $\vec{n}\cdot\vec{\nabla}\phi = \vec{n}\cdot\vec{\mathrm{V}}_\epsilon = 0$ avec $\vec{\mathrm{V}}_\epsilon$ la vitesse de la particule de fluide touchant la paroi.

Si on s'intéresse à $\mathrm{N}_\epsilon = \vec{n}\cdot\vec{\nabla}\phi$ en général, on remarque qu'on ne peut pas lui fixer une valeur quelconque puiqu'en vertu du théorème de Gauss, le flux à travers la paroi est nul. Il n'existe donc pas de fonction de Green $\mathrm{G_N}$ (équivalent de $\mathrm{G_D}$ pour des conditions de Von Neumann) et on doit avoir recours à d'autres méthodes.

2.3.6 Cas particulier de la dimension 2 : les transformations conformes

Définition :

Soit f une application de $\mathbb{R}^2$ dans lui-même :

$$(x, y) \longmapsto (\mathrm{X} = \mathrm{P}(x, y), \mathrm{Y} = \mathrm{Q}(x, y))$$

On dit que f est conforme au point $\mathrm{M}_0(x_0, y_0)$ si f est différentiable en ce point et si localement, f se réduit à une similitude directe (composée d'une rotation et d'une homothétie).

Donc, si on pose $\left\{ \begin{array}{l} \delta x = x - x_0 \\ \delta y = y - y_0 \end{array} \right.$ alors $\left\{ \begin{array}{l} \mathrm{X} - \mathrm{X}_0 = \frac{\partial \mathrm{P}}{\partial x}\delta x + \frac{\partial \mathrm{P}}{\partial y}\delta y \\ \mathrm{Y} - \mathrm{Y}_0 = \frac{\partial \mathrm{Q}}{\partial x}\delta x + \frac{\partial \mathrm{Q}}{\partial y}\delta y \end{array} \right.$

Et localement, on impose $\begin{pmatrix} \mathrm{X} - \mathrm{X}_0 \\ \mathrm{Y} - \mathrm{Y}_0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \lambda\cos\theta & \lambda\sin\theta \\ -\lambda\sin\theta & \lambda\cos\theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \end{pmatrix}$

On en déduit des contraintes sur les dérivées partielles de P et Q qui ne sont autres que les conditions de Cauchy d'analycité de f au point $z = x + iy$.

$$\frac{\partial \mathrm{P}}{\partial x} - \frac{\partial \mathrm{Q}}{\partial y} = 0 \qquad \text{et} \qquad \frac{\partial \mathrm{P}}{\partial y} + \frac{\partial \mathrm{Q}}{\partial x} = 0$$

En fait, f est conforme en (x, y) si et seulement si elle est analytique en $z = x + iy$ et de dérivée $f'(z)$ non nulle. Par ailleurs, f conserve les angles. On dit que f est une représentation conforme d'un ouvert Ω de $\mathbb{C}$ sur $f(\Omega)$ si et seulement si f est analytique sur Ω et est injective.

Comportement en un point de branchement :

Etudions le comportement de f en un point de branchement z_0. Typiquement, il s'agira d'une coupure partant de z_0 et $f(z) - f(z_0) = (z - z_0)^\alpha g(z)$ avec α un réel non entier et g analytique.

Une droite passant par z_0 sera alors transformée en une ligne brisée de sommet $f(z_0)$.

Transformation du laplacien :

On considère $\phi\left(\vec{r}\right)$ et $\Phi\left(\vec{\mathrm{R}}\right)$ deux champs et f une transformation conforme vérifiant $\vec{\mathrm{R}} = f\left(\vec{r}\right)$.

On définit $\Phi\left(\vec{\mathrm{R}}\right)$ comme étant égal à $\phi\left(\vec{r}\right)$. On a $\mathrm{X} = \mathrm{P}(x, y)$ et $\mathrm{Y} = \mathrm{Q}(x, y)$. En calculant les dérivées une à une, on trouve :

$$\boxed{\Delta_{\vec{r}}\phi = \left|f'(z)\right|^2 \Delta_{\vec{\mathrm{R}}}\Phi}$$

Cela peut s'interpréter de la manière suivante : Les laplaciens sont les carrés des gradients par rapport à $\vec{r}$ et $\vec{\mathrm{R}}$ qui se déduisent l'un de l'autre par une similitude. Le rapport de leur carré est donc le carré du rapport de similitude.

Transformation du δ de Dirac :

La transformation f étant conforme, elle est localement inversible.

On a donc : $\delta\left(f\left(\vec{r}\right) - f\left(\vec{r}_0\right)\right) = \delta\left(\mathbb{J}\begin{pmatrix} \delta x \\ \delta y \end{pmatrix}\right)$

On note $\mathbb{J}$ la jacobienne de f : $\mathbb{J} = \begin{pmatrix} \frac{\partial \mathrm{P}}{\partial x} & \frac{\partial \mathrm{P}}{\partial y} \\ \frac{\partial \mathrm{Q}}{\partial x} & \frac{\partial \mathrm{Q}}{\partial y} \end{pmatrix}$

En écrivant l'intégrale sur $\vec{\mathrm{R}}$ puis en changeant de variable, on obtient :

$$\delta\left(\vec{\mathrm{R}}-\vec{\mathrm{R}}_0\right) = \frac{1}{|\text{Dét } \mathbb{J}|}\delta\left(\vec{r}-\vec{r}_0\right)$$

D'où :

$$\boxed{\delta\left(\vec{\mathrm{R}}-\vec{\mathrm{R}}_0\right) = \frac{1}{|f'(z)|^2}\delta\left(\vec{r}-\vec{r}_0\right)}$$

Applications :

L'avantage de ces transformations est qu'elles permettent de changer le domaine de résolution.

On a souvent des domaines de travail si complexes que trouver une solution avec des bonnes valeurs sur la surface limite relève de l'impossible. En appliquant une transformation conforme, on peut souvent ramener le domaine à un cas simple (boule, demi-espace, ...) tout en conservant une équation du type

$$\Delta_{\vec{r}}\Phi = 0$$

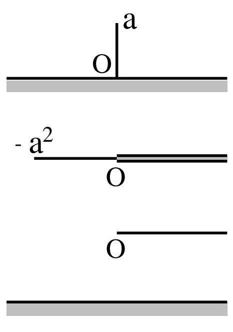
(on peut simplifier par le $|f'(z)|^2$).

Dans le cas de la recherche d'une fonction de Green, on peut remarquer qu'un δ de Dirac sera transformé de la même façon qu'un opérateur laplacien. L'équation régissant la fonction de Green sera donc la même (après simplification du facteur $|f'(z)|^2$).

Un exemple en hydrodynamique :

Un exemple classique est l'étude du mouvement d'un fluide qui se heurte à un mur. On considère (en deux dimensions), un plan horizontal infini, sur lequel s'élève un mur vertical de hauteur a. Moyennant quelques hypothèses sur le fluide, on parvient à l'équation régissant le potentiel ϕ : son laplacien est nul. Les conditions limites imposent la nullité de la dérivée normale du potentiel sur le plan horizontal et sur le mur.

On cherche donc une transformation conforme qui va transformer le système en un cas plus simple. L'origine est placée en bas du mur.



On considère tout d'abord la transformation $z \longmapsto z^2$ qui va briser le plan horizontal en rabattant sa partie gauche sous celle de droite, tandis que le mur atteint la longueur a^2 et se place horizontalement à gauche de l'origine. Ensuite, on translate de a^2. Enfin, on prend la racine du résultat pour obtenir un simple plan horizontal.

La transformation est donc $\mathrm{Z} = f(z) = \sqrt{z^2+a^2}$. Elle est analytique sur le domaine privé des frontières, ce qui nous est suffisant. L'équation $\Delta\Phi = 0$ est donc conservée.

La résolution dans le nouvel espace ("sans mur") est triviale : le potentiel est proportionnel à Z.

Il suffit alors de prendre la transformation inverse pour conclure sur les vitesses u_x et u_y du fluide, en fonction de sa vitesse u_0 horizontale, en $x = -\infty$:

Finalement : $\boxed{\begin{cases} u_x = u_0 \mathrm{Re}\, \dfrac{z}{\left(z^2+a^2\right)^{\frac{3}{2}}} \\ u_y = -u_0 \mathrm{Im}\, \dfrac{z}{\left(z^2+a^2\right)^{\frac{3}{2}}} \end{cases}}$

2.4 Opérateur d'Alembertien avec conditions de bord

2.4.1 Position du problème

On considère un champ $\phi(\vec{r}, t)$ créé par une distribution de sources $\mathrm{S}(\vec{r}, t)$, solution de l'équation de propagation :

$$-\Box \vec{\mathrm{A}} = \mathrm{S}$$

On considère le cas où le domaine de validité de cette équation est un volume Λ limité par une surface fermée Σ. On aura deux types de conditions limites :

- Le champ et sa dérivée temporelle sont spécifiés partout dans l'espace, au temps initial t_i.
- Une condition de type Dirichlet ou Von Neumann est fixée (sur la bordure Σ) à tout temps t.

2.4.2 Fonctions de Green

La fonction de Green G est fixée par la relation :

$$-\Box \mathrm{G}\left(\vec{r}, \vec{r}', t, t'\right) = \delta\left(\vec{r} - \vec{r}'\right) \delta\left(t - t'\right)$$

La causalité impose une première condition limite : $\mathrm{G} = 0$ lorsque $t < t'$. Les conditions aux limites spatiales sont la nullité de G ou de sa dérivée normale sur la surface Σ. Si V est infini, égal à l'espace tout entier, on obtient la fonction :

$$\mathrm{G}_\infty = \frac{c}{4\pi\left|\vec{r} - \vec{r}'\right|} \delta\left(\left|\vec{r} - \vec{r}'\right| - c(t - t')\right)$$

Sinon, on obtient une fonction $\mathrm{G_D}$ ou $\mathrm{G_N}$ suivant le type de condition limite spatiale (Dirichlet ou Von Neumann).

Pour calculer $\mathrm{G_D}$ ou $\mathrm{G_N}$, il est utile de passer en transformée de Fourier sur le temps, avec $z = \omega + i\epsilon$, avec $\epsilon > 0$.

$$\widetilde{\mathrm{G}} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}t\, e^{iz(t - t_0)} \mathrm{G}$$

On obtient alors : $\left(-\Delta - \dfrac{z^2}{c^2}\right) \widetilde{\mathrm{G}} = \delta\left(\vec{r} - \vec{r}'\right)$

L'opérateur $-\Delta - \dfrac{z^2}{c^2}$ est appelé opérateur d'Helmholtz.

On résoud alors cette équation par décomposition ou autres méthodes diverses.

2.4.3 Solution générale

On introduit un sous-volume Λ_0 de Λ, délimité par une surface fermée Σ_0. On prend $\vec{r}_0$ dans Λ_0. On introduit le point d'observation $(\vec{r}, t)$ et deux temps t_i et $t_f > t_i$.

On utilise une propriété générale de réciprocité des fonctions de Green, $\mathrm{G}(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0) = \mathrm{G}(\vec{r}, \vec{r}_0, -t_0, -t)$, qui se déduit du fait que $\Box$ est autoadjoint et de la causalité.

On écrit ensuite :

$$\begin{array}{rcll} -\Box_0 \phi(\vec{r}_0, t_0) & = & \mathrm{S}(\vec{r}_0, t_0) & \qquad (\mathbf{1}) \\ -\Box_0 \mathrm{G}(\vec{r}, t, \vec{r}_0, t_0) & = & \delta(\vec{r} - \vec{r}_0)\, \delta(t - t_0) & \qquad (\mathbf{2}) \end{array}$$

On intègre à $\vec{r}$ et t fixés :

$$\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t_0 \int_{\Lambda_0} \mathrm{d}^3\vec{r}_0 \ \left((\mathbf{1})\mathrm{G} - (\mathbf{2})\phi\right)$$

Cela donne :

$$\begin{array}{cl} & \displaystyle\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t_0 \int_{\Lambda_0} \mathrm{d}^3\vec{r}_0 \ \left(\phi(\vec{r}_0, t_0)\, \Delta_0 \mathrm{G}(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0) - \mathrm{G}(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0)\, \Delta_0 \phi(\vec{r}_0, t_0)\right) \\ + & \displaystyle\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t_0 \int_{\Lambda_0} \mathrm{d}^3\vec{r}_0 \ \left(\frac{1}{c^2}\mathrm{G}(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0)\, \frac{\partial^2 \phi}{\partial t_0^2}(\vec{r}_0, t_0) - \frac{1}{c^2}\phi(\vec{r}_0, t_0)\, \frac{\partial^2}{\partial t_0^2}\mathrm{G}(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0)\right) \\ = & \displaystyle\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t_0 \int_{\Lambda_0} \mathrm{d}^3\vec{r}_0 \, \mathrm{S}(\vec{r}_0, t_0)\, \mathrm{G}(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0) \quad - \phi(\vec{r}, t) \end{array}$$

L'intégrande du premier terme est $\nabla_0\left(\phi \nabla_0 \mathrm{G} - \mathrm{G} \nabla_0 \phi\right)$. Cette intégrale se transforme donc par le théorème de Green-Ostrograsky.

L'intégrande du second terme est $\dfrac{1}{c^2}\dfrac{\partial}{\partial t_0}\left(\mathrm{G}\dfrac{\partial \phi}{\partial t_0} - \phi \dfrac{\partial \mathrm{G}}{\partial t_0}\right)$. L'intégrale sur le temps peut donc être calculée, ce qui la transforme en une condition initiale.

On obtient :

$$\begin{array}{rcl} \phi(\vec{r}, t) & = & \displaystyle\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t_0 \int_{\Lambda_0} \mathrm{d}^3\vec{r}_0 \, \mathrm{S}(\vec{r}_0, t_0)\, \mathrm{G}(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0) \\ & + & \displaystyle\int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t_0 \int_{\Sigma_0} \mathrm{d}\vec{\Sigma}_0 \ \left(\mathrm{G}(\vec{r}, \vec{r}_0, t, t_0)\, \vec{\nabla}_0 \phi(\vec{r}_0, t_0) - \phi(\vec{r}_0, t_0)\, \vec{\nabla}_0 \mathrm{G}(\vec{r}, t, \vec{r}_0, t_0)\right) \\ & + & \displaystyle\frac{1}{c^2}\int_{\Lambda_0} \mathrm{d}^3\vec{r}_0 \ \left(\mathrm{G}(\vec{r}, t, \vec{r}_0, t_0)\, \frac{\partial \phi}{\partial t_0}(\vec{r}_0, t_i) - \phi(\vec{r}_0, t_i)\, \left.\frac{\partial \mathrm{G}}{\partial t_0}\right|_{t_0 = t_i}\right) \end{array}$$

Le premier terme est le champ volumique de type “G”. Le second est le champ surfacique de type G et $\vec{\nabla}\mathrm{G}$ (dipolaire). Enfin, le troisième terme est la condition initiale. Le terme similaire en t_f est nul par causalité.

Ce résultat est valable pour Λ_0 inclu dans Λ, pour toute fonction de Green G et pour toutes conditions limites.

2.4.4 Utilisation de $\mathrm{G_D}$ et $\mathrm{G_N}$

Si on connaît $\mathrm{G_D}$ et en supposant de plus que ϕ et ses dérivées s'annulent à $t_i = -\infty$ (on branche les sources à t_0 fini). Alors il est intéressant d'utiliser la formule précédente avec $\Lambda_0 = \Lambda$ et $\Sigma_0 = \Sigma$. On obtient :

$$\begin{aligned}\phi(\vec{r},t) &= \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t_0 \int_\Lambda \mathrm{d}^3\vec{r}_0\, \mathrm{S}(\vec{r}_0,t_0)\, \mathrm{G_D}(\vec{r},\vec{r}_0,t,t_0) \\ &- \int_{t_i}^{t_f} \mathrm{d}t_0 \int_\Sigma \mathrm{d}\vec{\Sigma}_0\, \vec{\nabla}_0 \mathrm{G_D}(\vec{r},t,\vec{r}_0,t_0)\, \mathrm{D}_\Sigma(\vec{r}_0,t_0)\end{aligned}$$

Le champ s'exprime alors sous la forme d'un champ volumique auquel vient se soustraire un terme surfacique dipolaire.

2.4.5 Régions sans sources : principe d'Huyghens-Fresnel

Énoncé du principe :

On considère une région Λ_0 où $\mathrm{S} = 0$. Il ne reste plus que les termes de surface et si on utilise G_∞, on trouve :

$$\begin{aligned}\phi(\vec{r},t) &= \int_\Sigma \mathrm{d}\vec{\Sigma}_0 \cdot \vec{\nabla}_0 \phi\left(\vec{r}_0, t - \frac{|\vec{r}-\vec{r}_0|}{c}\right) \frac{1}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}_0|} \\ &+ \vec{\nabla} \int_\Sigma \mathrm{d}\vec{\Sigma}_0\, \phi\left(\vec{r}_0, t - \frac{|\vec{r}-\vec{r}_0|}{c}\right) \frac{1}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}_0|}\end{aligned}$$

On a utilisé le fait que $\vec{\nabla}_0 \mathrm{G}_\infty = -\vec{\nabla}\mathrm{G}_\infty$.

Étude à grande distance :

Un système limité par une surface Σ de largeur caractéristique l contient des sources. Un vecteur $\vec{r}_0$ décrit ce système. En dehors, aucune source n'est présente.

Un observateur est placé en $\vec{r}$. On note $\mathrm{R} = |\vec{r}|$, sa distance, supposée très grande devant l et donc devant $|\vec{r}_0|$.

On a $|\vec{r}-\vec{r}_0| = \mathrm{R} - \vec{n}\,\vec{r}_0 + \mathrm{O}\left(\frac{1}{\mathrm{R}^2}\right)$ et $\frac{1}{4\pi|\vec{r}-\vec{r}_0|} = \frac{1}{4\pi\mathrm{R}} + \mathrm{O}\left(\frac{1}{\mathrm{R}^2}\right)$.

$$\begin{aligned}\phi(\vec{r},t) &= \frac{1}{4\pi\mathrm{R}} \int_\Sigma \mathrm{d}\vec{\Sigma} \cdot \vec{\nabla}_0 \phi\left(\vec{r}_0, t - \frac{\mathrm{R}}{c} + \frac{\vec{n}\cdot\vec{r}_0}{c}\right) \\ &+ \frac{1}{4\pi\mathrm{R}} \int_\Sigma \mathrm{d}\vec{\Sigma} \cdot \vec{\nabla} \phi\left(\vec{r}_0, t - \frac{\mathrm{R}}{c} + \frac{\vec{n}\cdot\vec{r}_0}{c}\right) + \mathrm{O}\left(\frac{1}{\mathrm{R}^2}\right)\end{aligned}$$

On a :

$$\phi\left(\vec{r}_0, t - \frac{\mathrm{R}}{c} + \frac{\vec{n}\cdot\vec{r}_0}{c}\right) \simeq \phi\left(\vec{r}_0, t - \frac{\mathrm{R}}{c}\right) + \frac{\vec{n}\cdot\vec{r}_0}{c}\frac{\partial\phi}{\partial t}\left(\vec{r}_0, t - \frac{\mathrm{R}}{c}\right)$$

En considérant que les variations temporelles de ϕ sont constantes, on retrouve les expressions habituellement utilisées en optique.

2.5 Annexe : unicité des solutions

On s'intéresse ici au cas où les conditions aux limites fixent la valeur de la solution recherchée (ou de ses dérivées) sur une surface fermée (qui peut-être finie ou infinie). On ne s'intéresse pas à l'extérieur de cette surface.

Dans le cas où c'est la valeur des dérivées qui est fixée aux limites, la fonction est définie à une constante près. On défini alors cette constante en fixant la valeur de la fonction en un point. Ce type de conditions aux limites est appelé conditions de Von Neumann, tandis que les conditions portant directement sur la fonction sont celles de Dirichlet.

Les quatre équations que nous allons considérer ici sont linéaires. Soient deux solutions du problème. Leur différence est également solution de l'équation mais la valeur prise sur la surface est cette fois-ci, forcément nulle.

Il convient donc de montrer que les solutions correspondant à des conditions aux limites nulles, sont nulles.

2.5.1 Opérateur laplacien

Dans le cas du laplacien, les conditions aux limites sont imposées à la fonction ou à sa dérivée normale sur la surface.

Montrons que si la fonction u est nulle sur la surface Σ (ou encore, si sa dérivée normale est nulle sur Σ tandis que la fonction est nulle en un point) et de laplacien nul dans le volume V délimité par Σ, alors la fonction est nulle.

On a : $u\Delta u = 0$

Utilisons maintenant une formule d'analyse vectorielle : soient f et $\vec{v}$ des fonctions respectivements scalaires et vectorielles.

Alors : $div\,(f\vec{v}) = f\,\mathrm{div}\,(\vec{v})+\vec{v}\cdot\vec{\nabla}f$

En intégrant sur le volume V et en appliquant la formule de Green-Ostrogradsky au premier membre, on obtient :

$$\int_\Sigma \mathrm{d}\vec{\mathrm{S}}\cdot f\,\vec{v} = \int_\mathrm{V} \mathrm{dV}\, f\,\mathrm{div}\,(\vec{v}) + \int_\mathrm{V} \mathrm{dV}\,\vec{v}\cdot\vec{\nabla}f$$

Appliquons ce résultat avec $f = u$ et $\vec{v} = \vec{\nabla}u$.

On a : $\displaystyle\int_\Sigma \mathrm{d}\vec{\mathrm{S}}\cdot u\,\vec{\nabla}u = \int_\mathrm{V} \mathrm{dV}\,u\Delta u + \int_\mathrm{V} \mathrm{dV}\,\left(\vec{\nabla}u\right)^2$

Par définition de la dérivée normale de f sur la surface Σ, on a :

$$d\vec{\mathrm{S}}\cdot\vec{\nabla}u = d\mathrm{S}\,\frac{\partial u}{\partial n}$$

D'où : $\displaystyle\underbrace{\int_\Sigma \mathrm{dS}\,\frac{\partial u}{\partial n}u}_{=0\text{ par les C.L.}} = \underbrace{\int_\mathrm{V} \mathrm{dV}\,u\Delta u}_{=0\text{ par hypothèse}} + \int_\mathrm{V} \mathrm{dV}\,\left(\vec{\nabla}u\right)^2$

Donc : $\vec{\nabla}u$ est nul sur V.

Et : u est constant sur V.

Comme les conditions limites imposent la nullité de la fonction en au moins un point de V,

$$\boxed{u = 0}$$

2.5.2 Opérateur d'Alembertien

Dans le cas du d'Alembertien, les conditions aux limites sont imposées à la fonction et à sa dérivée normale. Sur la surface, elles sont données à tout instant t. Au temps initial t_i elles sont données partout dans l'espace.

On note u une solution de l'équation homogène $\Box u = 0$.

On a : $$\frac{1}{c^2}\frac{\partial u}{\partial t}\frac{\partial^2 u}{\partial t^2} = \frac{\partial u}{\partial t}\Delta u$$

Soit : $$\frac{1}{2c^2}\frac{\partial}{\partial t}\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2 = \frac{\partial u}{\partial t}\Delta u$$

On intègre de t_i à t et sur le volume V. On applique, comme dans le cas du laplacien, le théorème de Green-Ostrogradksy pour se ramener à une intégrale volumique à une surfacique :

$$\frac{1}{2c^2}\int_{\mathrm{V}} \mathrm{dV}\left(\left.\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2\right|_t - \left.\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2\right|_{t=t_i}\right)$$
$$= \int_{t_i}^{t}\int_{\mathrm{V}} \frac{\partial u}{\partial t}\frac{\partial u}{\partial n}\,\mathrm{d}\Sigma \mathrm{d}t - \int_{t_0}^{t}\int_{\mathrm{V}} \frac{\partial}{\partial t}\left(\vec{\nabla} u\right)\cdot\vec{\nabla} u\,\mathrm{dV}\mathrm{d}t$$

Le terme en t_i est nul d'après les conditions initiales. L'intégrale de surface est nulle par les conditions de bords.

L'intégration du dernier terme par rapport au temps donne une intégrale nulle en t_i et une non nulle en t.

Donc : $$\frac{1}{2c^2}\int_{\mathrm{V}} \mathrm{dV}\left(\left.\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2\right|_t\right) = -\frac{1}{2}\int_{\mathrm{V}} \mathrm{dV}\left(\vec{\nabla} u\right)^2$$

Le terme de gauche est positif tandis que le terme de droite est négatif. Ils sont donc tous les deux nuls. Les dérivées par rapport au temps et à l'espace de u sont donc nulles partout. La fonction u est donc constante sur l'espace et le temps. Les conditions limites imposent sa nullité en au moins un point, donc :

$$\boxed{u = 0}$$

2.5.3 Equation de diffusion

Soit l'équation $\frac{\partial u}{\partial t} = \mathrm{D}\Delta u$ avec $\mathrm{D} > 0$.

On multiplie par u et on intègre ensuite entre t_i et t et sur tout l'espace.

Le terme de gauche va s'intégrer par rapport au temps et donner, compte-tenu de la nullité de u à t_i, $\frac{1}{2}\int_{\mathrm{V}} \mathrm{dV}\; u^2(t)$.

Le terme de droite se transforme de la même façon que dans les exemples précédent, en une intégrale surfacique et temporelle moins une intégrale temporelle et volumique sur le carré du gradient.

On a : $$\frac{1}{2}\int_{\mathrm{V}} \mathrm{dV}\, u^2(t) - \mathrm{D}\int_{t_i}^{t}\int_{\mathrm{V}} u\frac{\partial u}{\partial n}\,\mathrm{d}t\mathrm{d}\Sigma = -\mathrm{D}\int_{t_i}^{t}\int_{\mathrm{V}}\left(\vec{\nabla} u\right)^2 \mathrm{dV}\mathrm{d}t$$

Les conditions aux limites imposent la nullité du second terme. Le premier est positif tandis que le second est négatif.

$$\boxed{u = 0}$$

2.5.4 Mécanique quantique

Considérons l'équation de Schrödinger : $i\hbar\dfrac{\partial u}{\partial t} = -\dfrac{\hbar^2}{2m}\Delta u + \mathrm{V}.u$

On forme u^* fois cette équation moins u fois sa conjuguée, puis on intègre par rapport au temps et à l'espace :

$$i\hbar \int_{t_i}^{t} \int_{\mathrm{V}} \frac{\partial}{\partial t} |u|^2 \ \mathrm{dV}\mathrm{d}t = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{t_i}^{t} \int_{\mathrm{V}} (u^* \Delta u - u \Delta u*) \ \mathrm{dV}\mathrm{d}t$$

L'intégration sur le temps à gauche conduit à un terme nul en t_i et un autre non nul en t. Le membre de droite se transforme par le théorème de Green-Ostrogradsky (les termes en produits de $\vec{\nabla}$ se simplifient).

$$i\hbar \int_{\mathrm{V}} \frac{\partial}{\partial t} |u|^2 \Big|_t \ \mathrm{dV} = -\frac{\hbar^2}{2m} \int_{t_i}^{t} \int_{\Sigma} \left(u^* \frac{\partial u}{\partial n} - u \frac{\partial u^*}{\partial n} \right) \ \mathrm{d}\Sigma\mathrm{d}t$$

Les conditions limitent annulent le terme de droite ce qui permet d'affirmer la nullité de u en tout point. Le temps t étant quelconque, on a :

$$\boxed{u = 0}$$

Chapitre 3

Méthode du col

3.1 Principe de la méthode

3.1.1 Position du problème

Soient λ un réel et une intégrale de la forme :

$$\mathrm{I}(\lambda) = \int_{\mathcal{D}} \mathrm{d}x \; e^{-f(x,\lambda)}$$

En fait, il peut s'agir de :

- □ une variable réelle et d'un segment $\mathcal{D}$ de $\mathbb{R}$;
- □ un élément de $\mathcal{D}$, sous ensemble de $\mathbb{R}^n$;
- □ un chemin dans la formulation de Feynman de la mécanique quantique ;
- □ un champ, ...

On se propose de calculer $\mathrm{I}(\lambda)$ dans la limite où $\lambda \to +\infty$. Le réel λ peut représenter une température, $\frac{1}{\hbar}$, un couplage, ...

On va supposer que f admet un ou plusieurs minima en des points $x_i(\lambda)$ où $i \in \{0, 1, ..., p\}$ tels que, dans cette limite, f varie très vite au voisinage des x_i. Cela correspond donc en fait, à avoir des pics très étroits dans e^{-f}.

Supposons pour simplifier que f a un seul minimum en $x_0(\lambda)$. On va approximer localement e^{-f} par une gaussienne, c'est à dire on va faire un développement de Taylor de f en x_0, en puissances de $\delta x = x - x_0$, à l'ordre 2.

3.1.2 Terme dominant et fluctuations

Le terme dominant va être obtenu en prenant uniquement les contributions des x voisins de $x_0(\lambda)$ pour lesquelles on remplace f par son développement de Taylor à l'ordre 2.

$$f(x) = \underbrace{f(x_0(\lambda), \lambda)}_{\text{noté } \mathrm{F}_0(\lambda)} + \underbrace{\frac{1}{2!} \left.\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right|_{x=x_0(\lambda)}}_{\mathrm{A}_0(\lambda)} (\delta x)^2$$

D'où : $$\boxed{\mathrm{I}(\lambda) \simeq e^{-\mathrm{F}_0(\lambda)} \int_{\mathbb{R}} \mathrm{d}(\delta x)\, e^{-\frac{1}{2}\mathrm{A}_0(\lambda)(\delta x)^2}}$$

On justifiera plus loin le remplacement de $\mathcal{D}$ par $\mathbb{R}$ au lieu de $\mathbb{R}^n$.

$$\boxed{\mathrm{I}(\lambda) \simeq e^{-\mathrm{F}_0(\lambda)} \begin{cases} \sqrt{\dfrac{2\pi}{\mathrm{A}_0(\lambda)}} & \text{si } x \in \mathbb{R} \\ \dfrac{(2\pi)^{\frac{n}{2}}}{\sqrt{\text{Dét } \mathrm{A}_0(\lambda)}} & \text{si } x \in \mathbb{R}^n \\ \text{autres} & \text{si } x = \text{chemin ou champ} \end{cases}}$$

Le terme $e^{-\mathrm{F}_0(\lambda)}$ représente donc le terme dominant, c'est à dire la contribution de $x_0(\lambda)$ tandis que le terme dans l'accolade est la contribution des fluctuations, c'est à dire du voisinage de $x_0(\lambda)$.

Condition nécessaire de validité :

Comme on désire que le développement à l'ordre 2 soit pertinent, on doit supposer que le terme d'ordre p, c'est à dire $\left.\dfrac{1}{p!}\dfrac{\partial^p f}{\partial x^p}\right|_{x=x_0(\lambda)} (\delta x)^p$, évalué pour $\delta x \simeq \dfrac{1}{\sqrt{\mathrm{A}_0(\lambda)}}$ doit être petit devant 1.

On écrira : $$\boxed{\left.\frac{1}{p!}\frac{\partial^p f}{\partial x^p}\right|_{x=x_0(\lambda)} \frac{1}{(\mathrm{A}_0(\lambda))^{\frac{p}{2}}} \ll 1 \qquad \text{quand } \lambda \to \infty}$$

Et ensuite, il faut que la taille L du domaine $\mathcal{D}$ soit grande devant la largeur du pic $\dfrac{1}{\sqrt{\mathrm{A}_0(\lambda)}}$.

On pourra alors écrire : $\mathrm{I}(\lambda) = \sqrt{\dfrac{2\pi}{\mathrm{A}_0(\lambda)}} e^{-\mathrm{F}_0(\lambda)}\,(1 + o(1))$. Le petit o correspond à la correction à l'approximation gaussienne obtenue en développant l'exponentielle en puissance de δx et en évaluant les moments d'ordre p de la gaussienne par le théorème de Wick.

Si plusieurs minima sont présents, il faut ajouter les contributions de chaque minimum, à condition que les pics ne se coupent pas.

Donc : $$|x_i(\lambda) - x_j(\lambda)| \gg \frac{1}{\sqrt{\mathrm{A}_i(\lambda)}}, \frac{1}{\sqrt{\mathrm{A}_j(\lambda)}} \qquad \forall i \neq j$$

Il arrive souvent qu'on ait un minimum $\mathrm{F}_j(\lambda) \ll \mathrm{F}_i(\lambda)$. La contribution de i sera alors dominante.

3.1.3 Phase stationnaire

Un problème analogue se pose lors de l'étude de :

$$\mathrm{I}(\lambda) = \int_{\mathcal{D}} \mathrm{d}x\, e^{i\phi(x,\lambda)}$$

ϕ est une phase, réelle.

Supposons que ϕ varie très vite quand $\lambda \to \infty$ (typiquement, $\phi = \lambda g(x)$), alors si on développe ϕ au voisinage d'un point x_0 arbitraire, c'est-à-dire :

$$\phi(x,\lambda) = \phi(x_0,\lambda) + \delta x \underbrace{\left.\frac{\partial \phi}{\partial x}\right|_{x=x_0}}_{\text{noté } k_0} + \ldots$$

On doit intégrer localement $e^{i\phi_0} \int \mathrm{d}(\delta x)\, e^{ik_0\delta x}$.

Cela correspond à intégrer des oscillations très rapprochées d'amplitude constante. Cette intégrale est donc nulle du moment que k_0 est non nul (interférences destructrices entre les différentes oscillations).

Par contre, si $k_0 = 0$, c'est-à-dire ϕ stationnaire localement, on a :

$$\phi(x,\lambda) = \phi(x_0(\lambda),\lambda) + \frac{1}{2!}\,(\delta x)^2 \left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{x=x_0(\lambda)} + \ldots$$

(sous les mêmes conditions que dans la méthode du col ordinaire)

D'où :

$$\boxed{\mathrm{I}(\lambda) \simeq e^{i\phi(x_0(\lambda),\lambda)} \sqrt{\frac{2\pi i}{\left.\frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}\right|_{x=x_0(\lambda)}}}}$$

On a $\sqrt{\dfrac{2i\pi}{z}} = \sqrt{\dfrac{2\pi}{|z|}} e^{-i\frac{\mathrm{Arg}(z)}{2}+i\frac{\pi}{4}}$ avec $\mathrm{Arg}\, z \in \left]-\dfrac{\pi}{2}, \dfrac{3\pi}{2}\right[$.

On a donc une coupure sur le demi-axe imaginaire négatif.

Les conditions de validité sur les dérivées d'ordre supérieur s'énoncent de la même façon que précédemment avec A_0 valant $\dfrac{\partial^2 \phi}{\partial x^2}$.

3.1.4 Autres cas

Il existe des intégrales dépendant d'un paramètre, qui ne sont pas de la forme précédente. Il faut alors utiliser des variantes de la méthode du col. Par exemple, on décompose en produit d'une fonction "lente" par une fonction rapide. On peut également faire des changements de variable, notamment en prenant le logarithme de la fonction intégrée, qui peut alors parfois satisfaire les hypothèses de la méthode du col.

3.2 Intégrales ordinaires

3.2.1 La formule de Stirling

La fonction Γ est définie par :

$$\Gamma(z) = \int_0^{+\infty} \mathrm{d}x\, e^{-x} x^{z-1} \qquad \text{avec} \qquad \mathrm{Re}(z) > 0$$

Cela dit, on peut prolonger analytiquement Γ dans le demi-plan $\mathbb{C}$ gauche. On se propose d'évaluer $\Gamma(\lambda+1)$ pour λ réel tendant vers l'infini.

Ici, on a : $\Gamma(\lambda+1) = \displaystyle\int_0^{+\infty} \mathrm{d}x\, e^{-(x-\lambda \ln x)}$ On pose $f(x,\lambda) = x - \lambda \ln x$.

Cherchons les extremas de f : $\dfrac{\partial f}{\partial x} = 1 - \dfrac{\lambda}{x}$ donc $x = \lambda = x_0(\lambda)$.

Ensuite, $\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2} = \dfrac{\lambda}{x^2}$. D'où $\mathrm{A}_0(\lambda) = \left.\dfrac{\partial^2 f}{\partial x^2}\right|_{x_0} = \dfrac{1}{\lambda} > 0$. On a bien un minimum de f en x_0. $\mathrm{F}_0(\lambda) = f(x_0, \lambda) = \lambda - \lambda \ln \lambda$ et donc $e^{-\mathrm{F}_0} = \lambda^\lambda e^{-\lambda}$.

On approxime donc en fait $e^{-x} x^\lambda$ par une gaussienne de hauteur $\lambda^\lambda e^{-\lambda}$ de largeur $\sqrt{\lambda}$. La formule du col donne alors :

$$\boxed{\Gamma(\lambda+1) \simeq e^{-\lambda}\lambda^\lambda\sqrt{2\pi\lambda}}$$

On a bien retrouvé la formule de Stirling. L'approximation par une gaussienne est légitime car :

$$\left.\frac{\partial^p f}{\partial x^p}\right|_{x=x_0} = (-1)^p \frac{(p-1)!}{\lambda^{p-1}}$$

Donc : $$\left.\frac{\partial^p f}{\partial x^p}\right|_{x=x_0} \frac{1}{(\mathrm{A}_0(\lambda))^{\frac{p}{2}}} \simeq cste \frac{1}{\lambda^{\frac{p}{2}-1}} \to 0 \text{ quand } \lambda \to \infty$$

3.2.2 Comportement asymtotique de $\mathrm{J}_0(z)$

On rappelle que $\mathrm{J}_0(z) = \dfrac{1}{2\pi}\displaystyle\int_0^{2\pi} \mathrm{d}\theta\, e^{iz\cos\theta}$. On va l'étudier en l'écrivant $\mathrm{J}_0(\lambda) = \dfrac{1}{\pi}\mathrm{Re}\displaystyle\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} \mathrm{d}\theta\, e^{i\lambda\cos\theta}$ On se ramène donc à une intégrale de type phase stationnaire.

Ici, $\mathcal{D} = \left[-\dfrac{\pi}{2}, f\pi 2\right]$ et $\phi = \lambda\cos\theta$. Appliquons la méthode de la phase stationnaire :

$\dfrac{\partial\phi}{\partial\theta} = -\lambda\sin\theta$ est nul sur $\mathcal{D}$ si $\theta = 0$.

$\dfrac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2} = -\lambda\cos\theta$ vaut $-\lambda$ quand $\theta = 0$.

D'où : $$\mathrm{J}_0(\lambda) \simeq \mathrm{Re}\left(e^{i\lambda}\sqrt{\frac{2i\pi}{-\lambda}}\right) \simeq \mathrm{Re}\left(\sqrt{\frac{2\pi}{\lambda}} e^{i\lambda} e^{i\frac{\pi}{4} - i\frac{\pi}{2}}\right)$$

Donc : $$\boxed{\mathrm{J}_0(\lambda) \simeq \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda}}\cos\left(\lambda - \frac{\pi}{4}\right)}$$

Effectivement, les termes d'ordre supérieur donnent des corrections $o(1)$, car :

$$\left.\frac{\partial^p\phi}{\partial\theta^p}\right|_{\theta=0} \frac{1}{\left(\left.\dfrac{\partial^2\phi}{\partial\theta^2}\right|_{\theta=0}\right)^{\frac{p}{2}}} \simeq \frac{cste}{\lambda^{\frac{p}{2}-1}} \to 0$$

On peut remarquer que c'est toujours valables pour ϕ de la forme $\lambda g(x)$. On peut estimer les zéros de J_0, x_n aux grands n, en utilisant la formule asymptotique de $\mathrm{J}_0(x)$ et on trouve :

$x_n - \frac{\pi}{4} \equiv \frac{\pi}{2} \quad [\pi]$ donc $x_n = n\pi - \frac{\pi}{4}$ avec $n \in \mathbb{N}^*$.

En cherchant les corrections à l'approximation gaussienne, on peut déterminer les corrections en $\frac{1}{n}$ à cette formule.

3.2.3 Cas d'un paramètre complexe

Si on considère une intégrale I dépendant d'un complexe z, alors on peut estimer $\mathrm{I}(z)$ aux grands $|z|$ an allant chercher le col dans le plan complexe $x+iy$.

Considérons $\mathrm{I}(z) = \int_a^b \mathrm{d}x\, e^{-f(x,z)}$ avec f complexe.

Supposons que $f(\xi, z)$ avec $\xi = x+iy$ soit analytique au voisinage de $[a,b]$.

En vertu du théorème de Cauchy, on peut remplacer l'intégrale sur $[a,b]$ par l'intégrale sur le contour $\mathcal{C}_{ab}$ passant par le plan $\mathbb{C}$ et restant dans le domaine d'analycité de f.

$$\mathrm{I}(z) = \int_{\mathcal{C}_{ab}} \mathrm{d}\xi\, e^{-f(\xi,z)}$$

L'idée consiste alors à choisir le contour contenant un ou plusieurs points ξ_i tel que $\frac{\partial f}{\partial \xi}(\xi_i, z) = 0$. Si ensuite e^{-f} varie rapidement au voisinage de ξ_0, on peut espérer calculer I en développant f au second ordre en $(\xi - \xi_0)$.

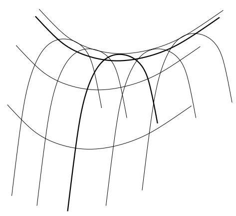
Comme f est analytique en ξ, on a $f = \mathrm{P} + i\mathrm{Q}$. En ξ_0, $\frac{\partial \mathrm{P}}{\partial x} = \frac{\partial \mathrm{P}}{\partial y} = \frac{\partial \mathrm{Q}}{\partial x} = \frac{\partial \mathrm{Q}}{\partial y} = 0$. Au voisinage de ξ_0, en posant $\xi - \xi_0 = \delta x + i\delta y$, on a les différentielles secondes de P et Q:

$$\begin{aligned} \delta^2\mathrm{P} &= \alpha\,(\delta x)^2 + 2\,\beta\,\delta x\,\delta y - \alpha\,(\delta y)^2 \\ \delta^2\mathrm{Q} &= -\beta\,(\delta x)^2 + 2\,\alpha\,\delta x\,\delta y + \beta\,(\delta y)^2 \end{aligned}$$

α et β sont deux réels dépendant de x_{i_0}. On a seulement deux coefficients différents du fait des relations de Cauchy.

Ces deux formes quadratiques ne sont pas définies positives. Dans le plan complexe, avec l'origine en x_{i_0}, il existe 2 droites orthogonales entre elles sur lesquelles $\delta^2\mathrm{P} = 0$. Il en va bien-sûr de même pour $\delta^2\mathrm{Q}$.

En fait, on a un col autour de ξ_0. Les deux droites correspondent aux droites diagonalisant la forme quadratique. Elles délimitent 4 quarts de plan. Dans deux quarts, la forme est $\delta^2\mathrm{P}$ est positive. Dans deux autres, elle est négative.



On choisit donc de faire passer le contour dans les deux quarts où $\delta^2\mathrm{P} > 0$. Et on choisit la tangente au contour $\mathcal{C}_{ab}$ qui coïncide avec une des deux droites sur lesquelles $\delta^2\mathrm{Q} = 0$.

Alors la phase est constante au voisinage de ξ_0 et on a pour $\delta y = \mu \delta x$ (μ est fixé, c'est la pente de la droite $\delta^2\mathrm{Q} = 0$).

$\delta^2\mathrm{P} = \mathrm{C}t^2$ si $\delta x = t$, avec $\mathrm{C} > 0$.

On peut remarquer que μ et C sont entièrement définis par α et β.

D'où :
$$\mathrm{I}(z) \simeq e^{-f(\xi_0(z),z)} \int_{-\infty}^{+\infty} \underbrace{\mathrm{d}t\,(1+i\mu)}_{d\xi}\, e^{-\frac{1}{2}\mathrm{C}t^2}$$

Soit :
$$\mathrm{I}(z) \simeq e^{-f(\xi_0(z),z)}(1+i\mu)\sqrt{\frac{2\pi}{c}}$$

On peut montrer que $(1+i\mu)\sqrt{\frac{2\pi}{c}} = \sqrt{\frac{2\pi}{\left.\frac{\partial^2 f}{\partial \xi^2}\right|_{\xi=\xi_0}}}$ avec la détermination $\sqrt{\frac{2\pi}{z}} = \sqrt{\frac{2\pi}{|z|}}e^{-\frac{i}{2}\mathrm{Arg}\ z}$ avec $\mathrm{Arg}\ z \in\ ]-\pi,\pi[$ (coupure sur le demi-axe réel négatif).

Les conditions de validité sont analogues à celles du col ordinaire.

Résumé :

La méthode du col permet de grandes simplifications des calcules d'intégrales. Cependant, toutes les fonctions n'ont pas toujours de minimum bien prononcé sur le domaine d'intégration. On change donc le contour en vertu du principe de Cauchy de façon à passer sur un minimum. Ainsi on va pouvoir négliger les contributions du reste au profit des contributions au voisinage de ces minimums, en appliquant la méthode du col. La direction de passage du contour au voisinage de ce minimum est donnée par l'étude des zones $\delta^2\mathrm{P} > 0$ et des droites $\delta^2\mathrm{Q} = 0$.

Application :

Comportement asymptotique de $\Gamma(z+1)$ avec $z \in \mathbb{C}$.

$$\Gamma(z+1) = \int_0^\infty e^{-(x - z\ln x)}\mathrm{d}x$$

On a donc ici, $a = 0$, $b = \infty$ et $f(\xi, z) = -(\xi - z\ln\xi)$. On cherche le point col dans le plan complexe : $\frac{\partial f}{\partial \xi} = 1 - \frac{z}{\xi}$ donc $\xi_0 = z$. Par ailleurs, $\frac{\partial^2 f}{\partial \xi^2} = \frac{z}{\xi^2}$ donc $\left.\frac{\partial^2 f}{\partial \xi^2}\right|_{\xi=\xi_0} = \frac{1}{z}$.

D'où :

$$\boxed{\Gamma(z+1) \simeq e^{-z}e^{z\ln z}\sqrt{2\pi z}}$$

3.3 Intégrale de chemin et approximation semi-classique

3.3.1 L'idée de Feynman

On considère une particule de masse m dans un potentiel $\mathrm{V}(\vec{r})$. En mécanique quantique, il faut abandonner la notion de trajectoire bien définie et introduire des amplitudes de probabilités. Pour chaque trajectoire et par analogie avec l'optique, Feynman postule qu'il apparaît un poids $e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{S}\{\vec{r}(t)\}}$ à l'amplitude de probabilité totale, où $\mathrm{S}\{\vec{r}(t)\}$ est l'action classique :

$$\boxed{\mathrm{S}\{\vec{r}(t)\} = \int_0^{t_0}\left(\frac{m}{2}\left(\frac{d\vec{r}}{dt}\right)^2 - \mathrm{V}(\vec{r}(t))\right)}$$

On définit le kernel, comme la somme sur toutes les trajectoires possibles, vérifiant $\vec{r}(0) = \vec{r}_a$ et $\vec{r}(t_0) = \vec{r}_b$.

$$\boxed{\mathrm{K}\left(\vec{r}_a, 0, \vec{r}_b, t_0\right) = \sum e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{S}\{\vec{r}(t)\}}}$$

Il s'agit ici d'une intégrale fonctionnelle.

A priori, il n'est pas évident que cette formulation de la mécanique quantique soit équivalente à celle de Schrödinger, c'est-à-dire en particulier que le Kernel précédent se réduise bien à $\left\langle \vec{r}_b \left| e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{H}t_0} \right| \vec{r}_a \right\rangle$ avec $\mathrm{H} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \mathrm{V}$.

3.3.2 L'intégrale de chemin

Temps réel :

On part de l'expression de K donnée ci-dessous et on va montrer qu'elle est bien égale à celle donnée au paragraphe précédent.

$$\mathrm{K}\left(\vec{r}_a, 0, \vec{r}_b, t_0\right) = \left\langle \vec{r}_b \left| e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{H}t_0} \right| \vec{r}_a \right\rangle$$

Ensuite, on découpe t_0 en N intervalles de longueurs ϵ et on sépare les N exponentielles. On introduit $\mathrm{N}-1$ relations de fermeture :

$$\mathrm{K}\left(\vec{r}_a, 0, \vec{r}_b, t_0\right) = \int \prod_{i=1}^{\mathrm{N}-1} \mathrm{d}^3\vec{r}_i \left\langle \vec{r}_b \left| e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{H}t_0} \right| \vec{r}_{\mathrm{N}-1} \right\rangle \dots \left\langle \vec{r}_1 \left| e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{H}t_0} \right| \vec{r}_a \right\rangle$$

On ne peut pas à priori séparer les exponentielles des laplaciens et potentiels car ils ne commutent pas forcément. Cependant, la différence entre $e^{\mathrm{A}}e^{\mathrm{B}}$ et $e^{\mathrm{A}+\mathrm{B}}$ est un polynôme en le commutateur de A et B. Ici, A et B sont de l'ordre de ϵ tandis que le commutateur est d'ordre 2 en ϵ. On peut négliger les termes correctifs. On note $\mathrm{P} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$.

$$\begin{aligned}
\left\langle \vec{r}' \left| e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{H}\epsilon} \right| \vec{r} \right\rangle &\simeq \left\langle \vec{r}' \left| e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{P}\epsilon} e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{V}\epsilon} \right| \vec{r} \right\rangle && (3.1) \\
&\simeq e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{V}(\vec{r})\epsilon} \left\langle \vec{r}' \left| e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{P}\epsilon} \right| \vec{r} \right\rangle && (3.2) \\
&\simeq \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon}\right)^{\frac{3}{2}} e^{i\frac{m(\vec{r}-\vec{r}')^2}{2\hbar\epsilon}} e^{-i\frac{\epsilon}{\hbar}\mathrm{V}(\vec{r})} && (3.3)
\end{aligned}$$

On a alors :

$$\mathrm{K} = \lim_{\mathrm{N}\to\infty} \left(\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon}\right)^{\frac{3\mathrm{N}}{2}} \int \prod_{i=1}^{\mathrm{N}-1} \mathrm{d}^3\vec{r}_i \exp\left(\frac{i\epsilon}{\hbar}\sum_{i=0}^{\mathrm{N}-1}\left(\frac{m}{2}\left(\frac{\vec{r}_i - \vec{r}_{i+1}}{\epsilon}\right)^2 - \mathrm{V}\left(\vec{r}_i\right)\right)\right)$$

où $\frac{\vec{r}_i - \vec{r}_{i+1}}{\epsilon}$ est la vitesse locale de la particule. On voir donc apparaître le lagrangien de la particule :

$$\mathrm{K}\left(\vec{r}_a, 0, \vec{r}_b, t_0\right) = \lim_{\mathrm{N}\to\infty}\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon}\right)^{\frac{3\mathrm{N}}{2}} \int \prod_{i=1}^{\mathrm{N}-1} \mathrm{d}^3\vec{r}_i \exp\left(\frac{i\epsilon}{\hbar}\sum_{i=0}^{\mathrm{N}-1} \epsilon\mathrm{L}\left(\vec{r}_i, \vec{v}_i\right)\right)$$

D'où : $$\boxed{\left\langle \vec{r}_b \left| e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{H}t_0} \right| \vec{r}_a \right\rangle = \int_{\vec{r}_a,0}^{\vec{r}_b,t_0} \mathcal{D}\left(\vec{r}\right)\ e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{S}\{\vec{r}\}}}$$

Avec : $$\boxed{\mathcal{D}\left(\vec{r}\right) = \lim_{\mathrm{N}\to\infty}\left(\frac{m}{2i\pi\hbar\epsilon}\right)^{\frac{3\mathrm{N}}{2}} \prod_{i=1}^{\mathrm{N}-1} d^3\vec{r}_i}$$

Il faut tout de même signaler que la majorité des trajectoires considérées est non-différentiable. Il faudra donc interpréter $\frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}t}$ comme une notation symbolique.

Temps imaginaire :

En mécanique statistique, on étudie la matrice densité $\left\langle \vec{r}_b \left| e^{-\beta\mathrm{H}} \right| \vec{r}_a \right\rangle$.

On obtient : $$\boxed{\left\langle \vec{r}_b \left| e^{-\beta\mathrm{H}} \right| \vec{r}_a \right\rangle = \int_{\vec{r}_a,0}^{\vec{r}_b,\beta\hbar} \mathcal{D}\left(\vec{r}(s)\right)\ e^{\frac{1}{\hbar}\mathrm{S}\{\vec{r}(s)\}}}$$

L'action est alors définie par :

$$\boxed{\mathrm{S}\left\{\vec{r}\right\} = \int_0^{\beta\hbar}\left(\frac{m}{2}\left(\frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}s}\right)^2 - \mathrm{V}\left(\vec{r}(s)\right)\right)\mathrm{d}s}$$

L'intégrale fonctionnelle est ici en général, bien définie car on somme des quantités réelles.

Il apparaît naturellement la quantité $\mathcal{D}\left(\vec{r}(s)\right) e^{-\frac{\hbar}{2m}\int_0^{\beta\hbar}\left(\frac{\mathrm{d}\vec{r}}{\mathrm{d}s}\right)^2}$ qui est la mesure de Wiener du mouvement Brownien.

3.3.3 Limite classique

La limite classique revient à faire tendre $\hbar$ vers 0. La phase (ou l'exposant) $\frac{\mathrm{S}}{\hbar}$ varient alors très vite, ce qui autorise l'utilisation de la méthode la phase stationnaire (ou du col). L'extrémum local de l'action est pour la trajectoire classique S_0.

On obtient la formule de Van Vleck :

$$\boxed{\left\langle \vec{r}_b \left| e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{H}t_0} \right| \vec{r}_a \right\rangle = \frac{1}{(2i\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{\frac{i}{\hbar}\mathrm{S}_0} \sqrt{\mathrm{Dét}\left(-\frac{\partial^2\mathrm{S}_0}{\partial r_a^i \partial r_b^j}\right)}}$$

Ou encore :

$$\boxed{\left\langle \vec{r}_b \left| e^{-\beta\mathrm{H}} \right| \vec{r}_a \right\rangle = \frac{1}{(2\pi\hbar)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{1}{\hbar}\mathrm{S}_0} \sqrt{\mathrm{Dét}\left(-\frac{\partial^2\mathrm{S}_0}{\partial r_a^i \partial r_b^j}\right)}}$$

Dans le cas où H est harmonique (champ magnétique constant, particule libre, potentiel harmonique, ...), l'approximation semi-classique devient exacte (l'intégrale fonctionnelle est rigoureusement gaussienne).

3.4 Le modèle d'Ising en champ moyen par l'intégrale fonctionnelle

3.4.1 Le modèle d'Ising

On considère un système de spins $s_i = \pm 1$ situés sur les istes d'un réseau cristallin. On suppose que le hamiltonien s'écrit :

$$\mathrm{H} = -\frac{1}{2}\sum_{i\neq j} s_i \mathrm{J}_{ij} s_j$$

On peut étendre la somme à i et j quelconque en plaçant des 0 sur la diagonale de la matrice J. On va supposer que la matrice de couplage J est définie positive (couplage ferromagnétique). On veut calculer $\mathrm{Z} = \sum_{\{\sigma_i\}}^{e} {}^{-\frac{\beta}{2}\sum_{i,j}\sigma_i \mathrm{J}_{ij}\sigma_j}$

3.4.2 Le champ auxiliaire ϕ

L'idée consiste à remarquer que :

$$e^{\frac{1}{2}\lambda x^2} = \frac{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-\frac{y^2}{2\lambda}} e^{xy}}{\displaystyle\int_{-\infty}^{\infty} \mathrm{d}y\, e^{-\frac{y^2}{2\lambda}}} = \langle e^{xy}\rangle_{\mathrm{G}}$$

Ici, x et y seront $[\sigma_i]$ et $[\phi_i]$, des vecteurs-colonne à N composantes. On écrit alors :

$$e^{\frac{\beta}{2}\sigma\,\mathrm{J}\,\sigma} = \left\langle e^{\sigma\,\mathrm{J}}\right\rangle_{\mathrm{G}} = \frac{\displaystyle\int \prod_{i=1}^{\mathrm{N}} \mathrm{d}\phi_i\, e^{-\frac{1}{2\beta}\sum_{i,j}\phi_i\left(\mathrm{J}^{-1}\right)_{ij}\phi_j} e^{\sum_{i=1}^{\mathrm{N}}\sigma_i\phi_i}}{\displaystyle\int \prod_{i=1}^{\mathrm{N}} \mathrm{d}\phi_i\, e^{-\frac{1}{2\beta}\sum_{i,j}\phi_i\left(\mathrm{J}^{-1}\right)_{ij}\phi_j}}$$

On en déduit :

$$\mathrm{Z} = (2\pi)^{-\frac{\mathrm{N}}{2}}\left(\mathrm{Dét}\,(\beta \mathrm{J}_{ij})\right)^{-f12} \int \prod_{i=1}^{\mathrm{N}} phi_i\, e^{-\frac{1}{2\beta}\phi\,\mathrm{J}^{-1}\,\phi} \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\sigma\,\phi}$$

Or, $\displaystyle\sum_{\{\sigma_i\}} e^{\sigma\,\phi} = \prod_{i=1}^{\mathrm{N}}\left(\sum_{\sigma_i=-1}^{\sigma_i=+1} e^{\sigma_i\,\phi_i}\right) = 2^{\mathrm{N}}\prod_{i=1}^{\mathrm{N}} \mathrm{ch}\phi_i.$

La sommation sur les spins est immédiate car ils sont complétement découplés dans cette transformation.

Donc : $\displaystyle\sum_{\{\sigma_i\}} e^{\sigma\,\phi} = e^{-\mathrm{U}(\phi)}$ avec $\displaystyle\mathrm{U}(\phi) = -\mathrm{N}\ln 2 - \sum_{i=1}^{\mathrm{N}} \ln \mathrm{ch}\phi_i.$

D'où : $$\boxed{\mathrm{Z} = (2\pi)^{-\frac{\mathrm{N}}{2}}\left(\mathrm{Dét}\,(\beta \mathrm{J}_{ij})\right)^{-\frac{1}{2}} \int \prod_{i=1}^{\mathrm{N}} \mathrm{d}\phi_i\, e^{-\frac{1}{2\beta}\phi\,\mathrm{J}^{-1}\,\phi} e^{-\mathrm{U}(\phi)}}$$

C'est la formule de Hubbard-Stratanovitch. Il faut noter que cette formule est exacte.

3.4.3 Passage au continu et action de Ginzburg-Landau

On considère une limite où la distance caractéristique de variation de J ainsi que le pas du réseau a, sont petits devant la longueur de corrélation ξ du système (bien observé près du point critique où ξ diverge). On va alors remplacer les sommes discrètes par des intégrales.

On suppose aussi que J_{ij} ne dépend que de $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$. On va remplacer $\sum\limits_i$ par $\dfrac{1}{a^d}\displaystyle\int \mathrm{d}^d\vec{r}$ et δ_{ij} par $a^d\delta\left(\vec{r}_i - \vec{r}_j\right)$. L'équation qui définit J^{-1} s'écrit :

$\sum\limits_l \mathrm{J}_{il}\mathrm{J}^{-1}_{lj} = \delta_{ij}$ ce qui donne $\dfrac{1}{a^d}\displaystyle\int \mathrm{d}^d\vec{r}\mathrm{J}\left(|\vec{r} - \vec{r}_i|\right)\mathrm{J}^{-1}\left(|\vec{r} - \vec{r}_j|\right) = a^d\delta\left(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|\right)$.

En introduisant les transformées de Fourier, il vient :

$$\boxed{\widetilde{\mathrm{J}^{-1}}\,(k) = \frac{a^{2d}}{\widetilde{\mathrm{J}}\,(k)}}$$

De la même façon, on peut obtenir, en utilisant une généralisation du théorème de Plancherel-Parseval, le remplacement de $\sum\limits_{i,j}\phi_i\mathrm{J}^{-1}_{ij}\phi_j$ par :

$$\frac{1}{a^{2d}}\int \mathrm{d}^d\vec{r}\mathrm{d}^d\vec{r}'\,\phi\left(\vec{r}\right)\mathrm{J}^{-1}\left(|\vec{r} - \vec{r}'|\right)\phi\left(\vec{r}'\right) = \frac{1}{a^{2d}(2\pi)^d}\int \mathrm{d}^d\vec{k}\,\left|\widetilde{\phi}\left(\vec{k}\right)\right|^2\widetilde{\mathrm{J}^{-1}}\left(\vec{k}\right)$$

Soit :

$$\frac{1}{(2\pi)^d}\int \mathrm{d}^d\vec{k}\frac{\left|\widetilde{\phi}\left(\vec{k}\right)\right|^2}{\widetilde{\mathrm{J}}\left(\vec{k}\right)}$$

De manière analogue, $\sum\limits_{i=1}^{\mathrm{N}}\ln\mathrm{ch}\phi_i$ va être remplacé par $\dfrac{1}{a^d}\displaystyle\int d^d\vec{r}\,\ln\mathrm{ch}\phi\left(\vec{r}\right)$. Dans le régime considéré (près du point critique), les valeurs significatives de $\widetilde{\phi}\left(\vec{k}\right)$ qui contrbuent à l'intégrale, varient sur une échelle ξ^{-1} qui est beaucoup plus petite que a^{-1} et que l'inverse de la longueur caractéristique de variation de J.

On peut donc développer $\widetilde{\phi}\left(\vec{k}\right)$ comme suit :

$\widetilde{\phi}\,(k) = \widetilde{\phi}\,(0)(1 - l^2k^2 + ...)$ avec $l^2 = \dfrac{1}{2d}\dfrac{\displaystyle\int \mathrm{d}^d\vec{r}\,r^2\mathrm{J}(r)}{\displaystyle\int \mathrm{d}^d\vec{r}\,\mathrm{J}(r)} > 0.$

D'où : $\dfrac{1}{2\beta}\phi\,\mathrm{J}^{-1}\,\phi = \dfrac{1}{2\beta\;\widetilde{\mathrm{J}}\;(0)}\displaystyle\int \mathrm{d}^d\vec{r}\phi^2\left(\vec{r}\right) + \dfrac{l^2}{2\beta\;\widetilde{\mathrm{J}}\;(0)}\displaystyle\int \mathrm{d}^d\vec{r}\,\left(\vec{\nabla}\phi\right)^2 + ...$

Comme les valeurs significatives de ϕ sont petites, on peut développer :

$$\ln\mathrm{ch}\phi = \ln\left(1 + \frac{\phi^2}{2!} + \frac{\phi^4}{4!} + ...\right) = \frac{\phi^2}{2} - \frac{\phi^4}{12} + ...$$

D'où :

$$\mathrm{Z} \simeq \int \mathcal{D}(\phi)e^{-\mathrm{S}(\phi)}$$

avec $\mathcal{D}(\phi) = \lim_{\mathrm{N}\to\infty}(2\pi)^{-\frac{\mathrm{N}}{2}}\left(\mathrm{Dét}\left(\beta \mathrm{J}_{ij}\right)\right)^{-\frac{1}{2}} 2^{\mathrm{N}} \prod_{i=1} \mathrm{N} d\phi_i$
et $\mathrm{S}(\phi) = \displaystyle\int \mathrm{d}^d\vec{r}\left(\frac{\alpha}{2}\left(\vec{\nabla}\phi\right)^2 + \frac{b}{2}\phi^2 + \frac{c}{4}\phi^4\right)$.

On a : $\alpha = \dfrac{l^2}{\beta\,\widetilde{\mathrm{J}}\,(0)}$, $b = \dfrac{k_{\mathrm{B}}\mathrm{T}}{\widetilde{\mathrm{J}}\,(0)} - \dfrac{1}{a^d}$ et $c = \dfrac{1}{3a^d}$. C'est l'action de Ginzburg-Landau qui apparaît.

3.4.4 Théorie de champ moyen et méthode du col

On peut montrer qu'en présence d'un champ magnétique extérieur B, la valeur moyenne de ϕ (pondérée par $e^{-\mathrm{S}(\phi)}$) est l'aimantation du système (quand le champ tend vers 0).

En l'absence de champ extérieur, on peut chercher les extrémums de $\mathrm{S}(\phi)$. On utilisera alors la méthode du col en prenant $x = \phi$, $f = \mathrm{S}$, $\mathrm{I} = \mathrm{Z}$ et $\lambda = \frac{1}{\mathrm{T}-\mathrm{T_C}}$ (ou $\frac{1}{b}$).

On admet que ces extrémums correpsondent à des ϕ homogènes. On a alors $b\phi + c\phi^3 = 0$, ce qui nous ramène à la discussion habituelle (voir dans la théorie de Landau).

- ⋆ Si $b > 0$ ($\mathrm{T} > \mathrm{T_C}$), il existe un seul minimum. C'est la phase paramagnétique.
- ⋆ Si $b < 0$, alors la champ nul correspond à un maximum de l'action S, donc à un minimum de $e^{-\mathrm{S}}$. La maximum est obtenu pour $\phi = \pm\sqrt{-\frac{b}{c}}$. Il y a aimantation spontanée. C'est la phase ferromagnétique.

Table des matières