LABORATOIRE DE PHYSIQUE THÉORIQUE
ULP-CNRS / UMR n° 7085

THÈSE

présentée pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ LOUIS PASTEUR DE STRASBOURG

Spécialité : Physique Théorique

par

Sebastião CORREIA

DIFFUSION MULTIPLE DANS LES SYSTÈMES DÉSORDONNÉS COMPOSÉS DE DIFFUSEURS DE TAILLE FINIE ET APPROCHE DU GROUPE DE RENORMALISATION POUR LA DESCRIPTION DES SYSTÈMES D'ÉLECTRONS EN INTERACTION

THÈSE

présentée pour obtenir le grade de

DOCTEUR DE L'UNIVERSITÉ LOUIS PASTEUR DE STRASBOURG

Spécialité : Physique Théorique

par

Sebastião CORREIA

DIFFUSION MULTIPLE DANS LES SYSTÈMES DÉSORDONNÉS COMPOSÉS DE DIFFUSEURS DE TAILLE FINIE
ET
APPROCHE DU GROUPE DE RENORMALISATION POUR LA DESCRIPTION DES SYSTÈMES D'ÉLECTRONS EN INTERACTION

soutenue le 20 novembre 2000 devant la commission d'examen

MM.	J.-F. JOANNY	*Président et rapporteur interne*
	A. COMTET	*Rapporteur externe*
	V. RIVASSEAU	*Rapporteur externe*
	J.-M. LUCK	*Membre du jury*
	J. RICHERT	*Directeur de thèse*
	D. BOOSÉ	*Membre invité*
	J. POLONYI	*Membre invité*

Remerciements

Mes remerciements s'adressent en premier lieu à mon directeur de thèse, Jean Richert, qui a su encadrer et diriger mes premiers pas dans la recherche durant ces trois années de thèse. La patience, la disponibilité et la volonté d'aboutir sont quelques unes des qualités, indispensables à tout bon chercheur, que possède Jean Richert. Un grand merci aussi pour les nombreuses lectures et relectures de mon manuscrit durant ces derniers mois.

J'exprime ma profonde reconnaissance envers Monsieur Jean-François Joanny qui m'a permis d'effectuer ma thèse en physique théorique en décrochant une allocation de recherche pour ce sujet pluridisciplinaire, et je le remercie pour avoir accepté de présider le jury et d'être rapporteur.

Mes remerciements s'adressent également à Janos Polonyi sans qui la deuxième partie de la thèse n'aurait pas vu le jour. Je lui suis reconnaissant pour sa disponibilité, son enthousiasme lors de nos nombreuses discussions, l'apport de ses connaissances en théorie des champs et son intérêt profond pour ce travail. Je le remercie d'avoir accepté d'être membre invité du jury.

Je remercie Jean-Marc Luck pour son accueil chaleureux lors de mes trop courts séjours à Saclay. Sa disponibilité et sa connaissance profonde des phénomènes de diffusion m'ont beaucoup apporté. Sa présence dans le jury m'honore.

J'exprime toute ma gratitude à Messieurs Alain Comtet et Vincent Rivasseau pour l'intérêt qu'ils portent à mon travail. Leur présence dans le jury est pour moi un immense honneur.

Je suis redevable envers Dominique Boosé pour les nombreuses discussions que nous avons eues concernant la première partie de la thèse. Sa grande précision et sa rigueur pour le calcul m'ont été très bénéfiques. Merci également pour les nombreuses suggestions de rédaction.

Je remercie Monsieur Andras Patkós pour les discussions enrichissantes sur la théorie des champs et en particulier sur le modèle présenté au chapitre 6.

Un grand merci aussi à Jean Alexandre pour ses conseils et ses explications à propos du groupe de renormalisation.

Je remercie Véronique Bernard, Vincenzo Branchina, Jean-Luc Jacquot et Asher Perez pour les diverses discussions tant sur la physique que sur d'autres sujets.

Je remercie aussi Frédéric Nowacki et Benoît Speckel pour l'aide informatique qu'ils m'ont apportée à diverses occasions.

Sans oublier Nicole Stenger pour sa bonne humeur et son inestimable présence au laboratoire.

Également merci à mes parents qui m'ont toujours encouragé à suivre ma voie.

Enfin, un merci infini à Neriman qui doit bientôt me délivrer le grade de Papa. Sa présence, sa patience et ses encouragements ont grandement contribué à l'aboutissement de ce travail.

Table des matières

Table des figures

Introduction

Les ondes sont omniprésentes et leur propagation est un des phénomènes les plus courants de la nature. Le jet d'une pierre dans une eau calme produit la propagation d'ondes circulaires à la surface de l'eau. Les tremblements de terre envoient des ondes sismiques. Les sons et la lumière sont des phénomènes ondulatoires. Les ondes sont utilisées dans la vie de tous les jours pour communiquer (radio, téléphone ...), sonder différents milieux et récupérer des informations (radar, sonar, radiographie ...). Elles n'apparaissent pas seulement à notre échelle, elles sont aussi présentes en astronomie (divers rayonnements provenant d'étoiles, de galaxies, et autres objets) ou dans le domaine mésoscopique et microscopique (ondes quantiques). En outre, elles sont supposées exister également en cosmologie (ondes gravitationnelles). La mécanique quantique traite les particules comme des ondes ; ainsi les électrons dans les métaux sont décrits par des ondes et la conductivité résulte de la propagation de ces ondes. Mais les ondes se propagent rarement librement. La plupart des milieux qu'elles traversent comportent des obstacles, des inhomogénéités. Alors, le phénomène de diffusion [1] prend place. Une onde peut être diffusée soit de façon élastique, soit de façon inélastique. Lors d'une diffusion élastique, l'énergie (la fréquence) de l'onde est conservée, seule sa direction de propagation est changée, alors qu'une onde diffusée inélastiquement verra son énergie et son impulsion altérées.

Dans la suite de ce travail, nous nous intéresserons uniquement à la diffusion élastique. Nous laisserons de côté la diffusion inélastique bien qu'elle soit toujours présente dans les systèmes physiques réels et contribue à la destruction de la cohérence de l'onde, empêchant ainsi l'apparition d'interférences. Différents phénomènes surviennent si l'onde diffuse faiblement ou fortement, rarement ou souvent, sur un ensemble d'obstacles réguliers ou non. Si le milieu que traverse l'onde est peu dense, celle-ci subira peu de collisions et sera légèrement perturbée. Au contraire, une forte densité de potentiels engendrera la diffusion multiple. L'onde subit alors plusieurs collisions avant de sortir du milieu. Définissons tout de suite un paramètre important pour caractériser les différents régimes de propagation possibles : le libre parcours moyen élastique, noté l. Le libre parcours moyen représente la distance moyenne entre deux collisions successives. L'adjectif élastique signifie que seule la diffusion élastique est considérée. Cette distance caractéristique du système permet de séparer différents régimes dans lesquels l'onde ne se comporte pas du tout de la même façon.

Lorsque la taille du système est inférieure au libre parcours moyen et que la longueur d'onde de

1. Remarque sur le vocabulaire : Cette thèse porte en partie sur la diffusion des ondes. Malheureusement, en français, le mot *diffusion* renvoie à deux concepts bien différents. Le premier concept est celui de la diffusion sur un potentiel (*scattering* en anglais). La diffusion est le fait que la particule voit son impulsion changée à cause de son interaction avec un potentiel. La particule subit *une* collision qui est décrite par l'équation de Schrödinger dans le cas quantique. Le deuxième concept (*diffusion* en anglais) renvoie à l'équation de diffusion d'une particule. La particule se propage dans un milieu contenant un très grand nombre de diffuseurs. Elle subit *un grand nombre* de collisions qui rendent son mouvement diffusif, c.-à-d. décrit macroscopiquement par une équation de diffusion. Les deux phénomènes de diffusion étant très différents, il ne devrait pas y avoir de confusion possible.

la particule est très petite devant celui-ci, le régime de propagation est dit balistique. Les particules traversent le système en subissant au plus une collision. L'expérience de Rutherford, qui consistait à bombarder une feuille d'or à l'aide de protons pour mesurer la section efficace des atomes d'or, se situait dans ce régime [67]. Ce régime permet de bien étudier la diffusion sur un seul centre diffuseur, puisque chaque particule traversant le système ne rencontre essentiellement qu'un seul centre.

Lorsque la taille L du système devient supérieure au libre parcours moyen l, il est indispensable de tenir compte de la possibilité qu'a la particule de diffuser plusieurs fois. Le régime de propagation est dit diffusif quand la longueur d'onde λ est très inférieure au libre parcours moyen élastique,

$$\lambda \ll l \ll L \ll L_{abs}, L_{coh}.$$

L_{abs} est la longueur d'absorption (pour la lumière), et L_{coh} est la longueur de cohérence (pour l'électron). Ces deux longueurs représentent la distance sur laquelle on peut considérer que la diffusion est toujours élastique (la longueur de cohérence de l'électron étant la longueur sur laquelle la phase de la fonction d'onde n'est pas affectée par le milieu). Dans ce régime, le type de système considéré (ordonné ou désordonné) devient alors important. Lorsque les centres diffuseurs forment un réseau ordonné infini, il apparaît des bandes d'énergie pour lesquelles la propagation des ondes est permise, et d'autres bandes pour lesquelles elle est interdite. Seules les ondes décrites par les fonctions de Bloch (ondes planes modulées de façon périodique ayant leur énergie dans la bande permise [50]) peuvent se propager. Lorsque l'ensemble des centres diffuseurs ne présente aucun ordre particulier, la description macroscopique de la diffusion des ondes se fait à l'aide de l'équation de diffusion

$$\partial_t I(\mathbf{r},t) = D\Delta I(\mathbf{r},t).$$

D est le coefficient de diffusion. Cette équation de diffusion, décrivant l'évolution de l'intensité diffusée, a l'inconvénient de ne décrire que la propagation d'une intensité moyenne. Elle ne permet pas de rendre compte des tavelures observées lors de la diffusion d'une onde dans un système désordonné. Ces tavelures sont un ensemble de taches brillantes et sombres dues aux interférences constructives et destructives de l'onde, donnant la distribution spatiale de l'intensité transmise pour un système désordonné particulier. Pour les réseaux ordonnés, ces tavelures sont régulières et leur étude par la cristallographie permet de connaître les caractéristiques du cristal.

Le problème de diffusion d'ondes dans les milieux désordonnés se posait déjà aux astrophysiciens du début du vingtième siècle (voir [18]) qui cherchaient à décrire la propagation de la lumière en provenance des étoiles lointaines à travers les nuages de poussières interstellaires. La description de cette propagation est donnée par la théorie du transfert radiatif. Cette théorie est basée sur l'équation de Schwarzchild-Milne, qui est une équation du type équation de Boltzmann pour l'intensité diffusée [89]. Cette théorie décrit correctement le régime diffusif, qui est évidemment le régime le plus intéressant pour les astrophysiciens puisque la longueur d'onde de la lumière est très inférieure au libre parcours moyen, celui-ci étant inversement proportionnel à la densité d'obstacles dans l'approximation de Boltzmann. Cette approche néglige les interférences puisque les équations n'utilisent pas l'amplitude de l'onde, mais son intensité.

Le calcul de la conductivité des métaux par l'équation de Boltzmann utilise une approche du même type (voir [75]). La théorie des bandes donne une conductivité infinie dans les métaux parfaits décrits par des réseaux parfaitement ordonnés. La valeur finie de la conductivité des métaux réels est retrouvée si l'on tient compte de la diffusion des électrons sur des impuretés. La description de la diffusion des ondes de Bloch sur ces impuretés par une équation de transport de

Boltzmann conduit à l'expression de la conductivité

$$\sigma = \frac{ne^2\tau^*}{m},$$

où n est la densité d'électrons, e la charge de l'électron, m sa masse et τ^* le temps moyen entre deux changements de direction de l'onde. Le temps de relaxation de transport τ^* est en général plus grand que le temps τ entre deux collisions (une collision peut ne pas changer la direction de l'onde). Le temps de collision τ est relié au *libre parcours moyen élastique* par $\tau = ml/\hbar K$, K étant le nombre d'onde. La distance caractéristique l^* associée à τ^* est le *libre parcours moyen de transport*. Dans le cas de la diffusion isotrope, les deux types de libre parcours moyen sont identiques. L'approche par l'équation de Boltzmann suppose une densité de diffuseurs très faible (pour conserver les ondes de Bloch) et la description de l'électron, entre les collisions, par une particule classique. Bien que les collisions puissent être traitées par un calcul quantique, la description classique de l'électron revient à décrire la propagation de l'intensité de la fonction d'onde et non de son amplitude. Une approche complètement microscopique de la théorie de la diffusion contenant tous les effets d'interférence restait à élaborer. La revue de van Rossum et Nieuwenhuizen [91] résume et compare ces différentes approches avec l'approche microscopique utilisant des diffuseurs ponctuels.

Une des premières approches théoriques pour étudier la diffusion multiple quantique de façon microscopique remonte aux travaux de Foldy [36] qui tente d'évaluer l'intensité moyenne de la fonction d'onde à partir de l'équation de Schrödinger. Vient ensuite une série de papiers pour retrouver la conductivité à partir des équations microscopiques [51, 27]. À partir de l'équation de Schrödinger, Edwards retrouve l'expression de la conductivité obtenue classiquement par l'équation de Boltzmann. Il montre en particulier qu'il est nécessaire de resommer une certaine classe de diagrammes, appelés diagrammes en échelle (*ladder diagrams*), pour y arriver.

Une approche plus formelle est donnée par le développement de la matrice de diffusion $\mathcal{T}$ du système sous la forme d'une série infinie d'opérateurs de diffusion, également appelés matrices $\mathbf{t}$ [98]. Nous verrons plus tard que cette matrice $\mathcal{T}$ décrit toute la diffusion multiple. Il existe également une autre matrice, notée $\mathbf{S}$, décrivant la diffusion et vérifiant la relation

$$\mathbf{S} = \mathbf{1} - i\mathcal{T}.$$

$\mathbf{S}$ est unitaire et analytique dans l'énergie. La différence entre $\mathbf{S}$ et $\mathcal{T}$ est que la matrice $\mathbf{S}$ prend en compte la possibilité que l'onde traverse le milieu sans interagir. La matrice $\mathcal{T}$, au contraire, ne contient que la partie diffusée de l'onde. L'utilisation de la série de Watson pour les systèmes désordonnés a conduit à l'Approximation du Potentiel Cohérent (CPA), introduite par Lax [58, 59], reprise par Soven et Taylor [82, 84], puis généralisée par Velický [93]. Cette approximation est une approximation de milieu effectif revenant à dire qu'en moyenne il n'y a pas de diffusion : le propagateur de l'électron est remplacé par un propagateur renormalisé décrivant la propagation dans un milieu effectif homogène sans diffuseur. Ce milieu effectif représente le milieu obtenu après avoir fait la moyenne sur le désordre du système. Alors que dans un système désordonné l'onde subit des collisions sur les diffuseurs individuels qui font décroître son amplitude de façon exponentielle, elle ne subit aucune collision dans le milieu effectif mais son amplitude possède toujours la décroissance exponentielle pour rendre compte de l'existence de diffusions. Autrement dit, la matrice de diffusion $\mathcal{T}$ est calculée relativement à ce milieu effectif. En moyenne, elle est nulle car le propagateur renormalisé contient déjà la diffusion. La fonction de corrélation moyenne à deux points est donc triviale. Mais les fonctions de corrélation d'ordres supérieurs ne le sont pas car la moyenne d'un produit de matrice $\mathcal{T}$ n'est pas nul. L'insertion du propagateur renormalisé dans l'équation de Bethe-Salpeter permet de retrouver la conductivité. (Cette équation est l'équivalent de l'équation de Dyson pour le produit de propagateurs — voir [65]. Elle permet le calcul des fonctions de corrélation à 4 points par une série de perturbation). Cependant, cette approche n'est plus suffisante lorsque la longueur d'onde s'approche de la taille des diffuseurs. De plus, elle ignore les corrélations spatiales entre les diffuseurs, mais utilise néanmoins la matrice $\mathbf{t}$ qui est par définition associée à un potentiel de taille finie.

L'utilisation de potentiels ponctuels permet d'éviter ce genre d'incohérence et simplifie grandement les calculs. De plus, le choix du potentiel ponctuel s'impose si l'on veut un potentiel qui soit en même temps local (*i.e.* une simple fonction de la position) et séparable. Malheureusement, cette approximation ne peut être valable que si la longueur d'onde de la particule incidente est très grande devant la portée du potentiel, c.-à-d. si la particule ne voit pas les détails du potentiel. La diffusion est par conséquent essentiellement isotrope. Le potentiel ponctuel est de plus très singulier et engendre d'autres problèmes comme l'utilisation d'opérateurs n'appartenant pas à l'espace de Hilbert [21, 92] et la nécessité d'introduire des coupures pour éviter l'apparition de divergences (comme par exemple dans le cas des interactions à deux corps). Par ailleurs, bien qu'il vérifie l'unitarité de la matrice $\mathbf{S}$, le modèle de potentiels ponctuels ne vérifie pas la relation de dispersion de Kramers-Kronig [71] et, par conséquent, viole la causalité. Cette relation de dispersion relie la partie réelle de la matrice $\mathbf{t}$ à sa partie imaginaire [46]. Elle découle de l'analyticité de la matrice $\mathbf{S}$ qui, elle-même, découle du principe de causalité [72]. Enfin, la comparaison avec des potentiels de type sphères dures montre que l'interprétation physique de ces potentiels ponctuels n'est pas si aisée : partant d'un hamiltonien décrivant une interaction ponctuelle

$$H = -\Delta + \sum_{i=1}^{N} \alpha\delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i),$$

il apparaît que la « constante de couplage » α correspondant à une sphère dure s'écrit

$$\alpha = -\frac{1}{4\pi a} \text{ à 3 dimensions et } \quad \alpha = \frac{\ln a}{2\pi} \text{ à 2 dimensions.}$$

Le signe positif (négatif) de α ne permet pas nécessairement de dire si le potentiel est répulsif (attractif) [31]. Seule la comparaison avec un potentiel résonnant conduit à une valeur positive de α. Cela signifie que les modèles avec une constante $\alpha > 0$ décrivent des potentiels résonants.

L'application de la méthode des déphasages à la série de Watson permet de retrouver par ailleurs la théorie des bandes [64] et de faire le lien avec l'approche KKR [53, 52] des systèmes réguliers. Cette approche décrit de façon rigoureuse la diffusion dans les systèmes composés de potentiels de taille finie. Les centres diffuseurs de taille finie sont pris en compte par le déphasage qu'ils produisent sur l'onde diffusée. La matrice de diffusion du système $\mathbf{S}$ peut être directement reliée à la série de Watson $\mathcal{T}$ par la relation $\mathbf{S} = \mathbf{1} - i\mathcal{T}$. Cette approche a été ensuite largement employée dans le domaine du chaos pour les systèmes à deux dimensions (voir [103]) et plus récemment à trois dimensions [41]. Dans ce contexte, la méthode KKR a été étendue à la diffusion sur N disques pour différentes conditions au bord des disques [22]. Mais cette approche s'est essentiellement concentrée sur les résonances de diffusion dans des systèmes avec quelques centres diffuseurs ayant une configuration bien précise [37, 23].

D'un autre côté, en 1958, Anderson [8] introduit un modèle dans lequel les électrons sont situés sur des orbitales atomiques. Les atomes du système sont placés sur les sites d'un réseau régulier ou non et l'électron peut se déplacer de site en site en « sautant » d'un atome à un autre.

Le désordre n'est pas nécessairement spatial, mais énergétique : chaque fonction d'onde électronique est localisée sur un site et possède une énergie aléatoire. Lorsque cette énergie est suffisante, l'électron peut sauter sur un autre site. Anderson étudie la convergence d'une série de perturbation pour l'énergie propre des électrons localisés sur des sites. Tant que la série converge, les états électroniques restent localisés, mais pour certains intervalles d'énergie, la série diverge indiquant la possibilité d'états électroniques étendus (*i.e.* pouvant se propager). À partir de ce modèle, Anderson montre qu'il existe une transition entre les états étendus (métal) et les états localisés (isolant) engendrée par la présence de désordre. L'approche est ici différente de l'approche par la diffusion d'Edwards pour deux raisons. La première est que le système possède un désordre dans les niveaux d'énergie et pas seulement spatial. La deuxième différence réside dans le fait qu'Anderson décrit le transport des électrons en partant d'états localisés (orbitales) et non des états étendus (ondes planes) de la théorie de la diffusion. Cependant Anderson s'inspire du formalisme de Watson pour éliminer les divergences dues à des diffusions interdites (retour de l'onde sur un même diffuseur). Cet article servira de référence pour parler de transition métal-isolant ou de transition localisation-délocalisation engendrée par le désordre, d'ailleurs appelée transition d'Anderson. Ce modèle est repris de façon plus détaillée dans un séminaire des Houches par Shalgi et Imry [79].

Poursuivant les travaux d'Edwards, Langer et Neal [57] montrent qu'un développement perturbatif en fonction de la densité d'impuretés (*i.e.* de potentiels diffuseurs) des quantités de transport aboutit à des problèmes de divergences logarithmiques pour la classe des diagrammes maximalement croisés (*maximally crossed diagrams*), indiquant l'échec du développement du viriel.

En 1973, la théorie d'Anderson est reprise et développée par Abou-Chacra et al. [1] pour conduire à une théorie auto-cohérente. Dans cette approche qui diffère un peu de l'approche originale d'Anderson, le développement de l'énergie propre est arrêté au premier ordre, mais est traité de façon cohérente. La théorie est d'ailleurs développée de façon exacte pour un réseau de Bethe (aussi connu sous le nom d'arbre de Cayley). Dans un tel réseau, chaque site possède un nombre K de voisins sur lesquels peut se déplacer l'électron, mais la trajectoire d'un électron ne peut jamais faire de boucle. Une revue de Thouless [85] reprend les différentes approches pour décrire les systèmes électroniques désordonnés à cette époque.

L'année 1979 est, après 1958, une deuxième date importante dans la théorie de la localisation. Abrahams et al. [2] étudient la conductance comme une fonction de la taille du système. Utilisant les expressions données par les développements perturbatifs dans les régimes localisé et métallique, ils montrent à l'aide d'une théorie d'échelle à un paramètre (la conductance) que tous les états électroniques sont localisés lorsque la dimension d'espace est inférieure ou égale à deux. Ceci se traduit par l'absence de zéro de la fonction β dont nous reparlerons au chapitre 7. Cette approche phénoménologique s'inspire d'une idée de Thouless [62, 26] qui note que la conductance est le seul paramètre dépendant de la taille du système.

Toujours à l'aide d'un développement diagrammatique, Vollhardt et Wölfle [95, 96] développent, dans l'esprit du travail d'Edwards, une approche auto-cohérente du calcul de la fonction de corrélation à quatre points, directement reliée au coefficient de diffusion. Le calcul des diagrammes maximalement croisés de Langer et Neal fait apparaître des divergences infrarouges en dimension $d \leq 2$ au niveau de la fonction de vertex irréductible et non au niveau de l'énergie propre, comme c'était le cas dans le modèle d'Anderson. Ces divergences sont ici le signe de la localisation alors que les divergences dans la série d'Anderson sont l'indication d'états étendus. Un traitement auto-cohérent de ces divergences a permis de calculer une longueur de localisation finie en dimension $d \leq 2$.

Les corrections à la théorie de Boltzmann engendrées par les effets d'interférence ont fait l'objet de nombreuses expériences [15], en particulier à deux dimensions (les corrections à la résistance sont plus facilement mesurables dans les systèmes bidimensionnels). Ces expériences de *localisation faible*, appelées ainsi car le désordre tend à localiser l'électron, se sont longtemps concentrées sur les systèmes électroniques jusqu'à ce qu'on réalise que ce phénomène n'est pas purement quantique, mais ondulatoire. Ainsi, tous les types d'ondes sont sensibles à la localisation faible. Un des effets les plus remarquables est celui de rétrodiffusion cohérente (*coherent back-scattering*). La rétrodiffusion cohérente est comme son nom l'indique une diffusion dans le sens opposé à la direction incidente. En pratique, on observe un pic d'intensité dont la largeur est reliée au libre parcours moyen [5]. L'étude de ce pic est donc un moyen de mesurer le libre parcours moyen. Ce phénomène de rétrodiffusion s'explique par le fait que la partie de l'onde diffusant sur plusieurs impuretés interfère de façon constructive avec la partie de l'onde ayant diffusé sur les mêmes impuretés mais dans le sens inverse. Les deux chemins parcourus par cette onde sont symétriques par rapport au renversement du temps (leur contribution est donnée en théorie par les diagrammes maximalement croisés). La brisure de cette symétrie (en appliquant un champ magnétique par exemple) empêche les interférences et diminue ou détruit ainsi la localisation faible.

Autour de 1985, des expériences sur l'effet de rétrodiffusion cohérente de la lumière ont été menées de façon approfondie et ont confirmé l'existence de ces corrections à la diffusion classique [87, 88, 104]. Ces expériences ont été stimulées par l'effet de localisation faible dans les métaux désordonnés, mais il semble que les deux effets ne soient pas complètement identiques [40] ; d'autres diagrammes sans analogues semi-classiques jouent un rôle important dans la localisation faible des systèmes quantiques.

Au-delà de ces corrections de localisation faible, il existe une transition entre le régime conducteur et le régime isolant comme l'a montré Anderson. Cette transition localisation-délocalisation fut mise en évidence pour la première fois pour la lumière par Wiersma et al. [101].

Plus récemment, l'étude dynamique de la rétrodiffusion cohérente a été faite pour des ondes acoustiques dans un système désordonné à deux dimensions [86].

En ce qui concerne les électrons, la diffusion sur les impuretés est le phénomène le plus important à basse température, l'interaction avec les phonons dépendant de la température. En général, la densité d'électrons est suffisamment élevée pour écranter l'interaction de Coulomb et permettre de la négliger.

Les différentes théories de perturbation élaborées [61] ne pouvant pas décrire correctement la transition métal-isolant, il a fallu développer une nouvelle approche. Cette transition métal-isolant a suscité beaucoup de travaux, notamment avec des techniques de théorie des champs au début des années 80. Les électrons sans interaction y sont décrits par une théorie effective sous la forme d'un modèle sigma non linéaire [99, 76]. La moyenne sur le désordre *gelé*[2] (donné par une distribution gaussienne) nécessite l'introduction de répliques représentant plusieurs configurations possibles du système. L'intégration gaussienne sur le désordre se fait simplement et conduit à une théorie effective où les états électroniques individuels sont remplacés par des champs composites matriciels. La théorie proposée par Wegner [99] traite les électrons sans interaction par des champs bosoniques et retrouve l'absence de conductivité à deux dimensions prédite par Abrahams et al. [2]. Cependant, l'introduction des répliques nécessite un prolongement analytique assez contre-intuitif. Pour obtenir la moyenne d'ensemble de l'énergie libre $F = \ln \mathcal{Z}$ à partir de la fonction de partition $\mathcal{Z}$ du système, le logarithme de $\mathcal{Z}$ est remplacé par

$$\ln \mathcal{Z} = \lim_{n\to 0} \frac{\mathcal{Z}^n - 1}{n}.$$

2. Le désordre est dit gelé (*quenched disorder*) si les impuretés sont statiques.

L'évaluation de la moyenne de l'énergie libre consiste à calculer la moyenne de $\mathcal{Z}^n$, où l'exposant n représente n copies du système. La moyenne de $\mathcal{Z}^n$ induit un couplage entre les différentes copies du système, via des termes d'interaction dans l'action du type

$$\psi^{*\alpha}(\mathbf{x},t)\psi^{\alpha}(\mathbf{x},t)\psi^{*\beta}(\mathbf{x},t')\psi^{\beta}(\mathbf{x},t'),$$

où ψ est le champ associé à l'électron et α et β sont les indices de réplique (*i.e.* des numéros de copie). Physiquement, la moyenne sur le désordre introduit une interaction entre électrons spatialement ponctuelle, mais non locale en temps : l'électron qui interagit avec un potentiel peut influencer un autre électron qui interagit sur le même potentiel (même position) à un instant différent. Cependant, le prolongement analytique $n \to 0$ n'a pas d'interprétation physique. De plus, il n'est pas toujours possible de démontrer la validité de cette procédure [94, 106]. Cette description de théorie des champs a été reformulée en terme de champs fermioniques (variables de Grassmann) à l'aide d'une approche supersymétrique permettant d'éviter la méthode des répliques [30, 29]). L'interaction de Coulomb prise en compte dans un formalisme généralisant l'approche de Wegner et l'utilisation du groupe de renormalisation conduisent à l'obtention d'une résistance finie pour les systèmes désordonnés à deux dimensions [33, 34, 35]. Cependant, ce régime apparemment métallique à deux dimensions n'a pas été très reconnu car il apparaît dans une région où la validité de la théorie peut être remise en question, et surtout il est en contradiction avec la plupart des expériences de l'époque et la théorie de la localisation [2]. Le modèle développé par Finkel'shteĭn est repris par Belitz et Kirkpatrick [10, 11]. Ces modèles σ non linéaires sont basés sur l'apparition de modes de Goldstone due à une brisure spontanée de symétrie. Ces modes de Goldstone correspondent aux modes de propagation (modes à longue portée) et n'apparaissent qu'en dimension $d > 2$ (sauf dans le cas de Finkel'shteĭn où l'interaction de Coulomb provoque une brisure de symétrie).

En 1994, une expérience sur des systèmes électroniques de silicium à deux dimensions a montré un comportement métallique inattendu [54], confirmé plusieurs fois par la suite [55, 74] (voir également les références dans [3]). Cette délocalisation des états électroniques est interprétée comme étant une *transition de phase quantique* (transition de phase à température nulle), mais n'a pas encore trouvé de justification théorique bien définie. Il semble que l'interaction de Coulomb joue un grand rôle dans cette transition, puisque celle-ci dépend de la densité d'électrons. Pour des valeurs de la densité d'électrons supérieures à la densité critique $n_{cr} \approx 10^{11}$ cm^{-2}, il apparaît un régime dans lequel les électrons ont une forte mobilité. À de telles densités, l'énergie d'interaction entre électrons est très grande devant l'énergie cinétique.

$$E_C \gg E_F.$$

Si la densité augmente encore, le régime isolant réapparaît : l'interaction de Coulomb est écrantée et l'énergie cinétique redevient dominante. La théorie de la localisation pour des électrons sans interaction reprend alors ses droits. À des densités plus faibles que n_{cr}, le système est isolant. L'interaction entre électrons est si forte qu'ils forment un cristal appelé cristal de Wigner [12]. Une nouvelle théorie d'échelle prenant en compte les interactions entre électrons est apparue [24] et prédit que les métaux désordonnés à deux dimensions sont des *métaux parfaits*, mais certainement pas décrits par la théorie des liquides de Fermi. D'autres scénarii ont été proposés privilégiant plutôt une transition supraconducteur-isolant [73, 38]. Enfin, d'autres auteurs pensent que les données expérimentales actuelles ne suffisent pas à prouver l'existence d'une véritable transition de phase quantique, mais qu'elles indiquent plutôt un crossover entre deux comportements différents apparaissant à une température non nulle [7].

Le travail présent se décompose en deux parties pouvant se lire indépendamment. La première partie traite des systèmes désordonnés sans interaction dans le régime diffusif. La deuxième partie présente de nouveaux outils pour traiter le désordre et les interactions entre électrons. Elle constitue une première étape en direction de la transition d'Anderson avec interaction (transition d'Anderson-Mott [48]).

La première partie a pour but de décrire la diffusion multiple d'ondes planes dans un système composé de sphères dures de taille finie réparties de façon aléatoire. Le formalisme utilisé est celui de la série de Watson [98] à deux ou trois dimensions. Il est tout à fait général et permet de décrire, sous certaines conditions, aussi bien les ondes acoustiques, électromagnétiques, hydrodynamiques, quantiques (électrons, phonons, …).

Nous choisissons ici un modèle physique aussi simple que possible pour décrire la diffusion multiple tout en conservant une taille finie pour les potentiels. La description par une onde scalaire est choisie pour sa simplicité : les autres types d'ondes (vectorielles, spinorielles …) apportent des complications supplémentaires qui ne seront pas abordées ici. Le potentiel de type sphère dure est choisi pour son interprétation physique simple. Ce type de potentiel possède une taille finie qui permet d'éviter les problèmes posés par l'approximation des potentiels ponctuels. De plus, la matrice $\mathbf{s}$ associée à une sphère dure est analytique et unitaire. La matrice $\mathbf{t}$ vérifie donc le principe de causalité, conséquence de l'analyticité de $\mathbf{s}$, et le théorème optique, conséquence de l'unitarité de $\mathbf{s}$. L'étude est faite pour les sphères dures, c'est-à-dire pour un potentiel infini, mais la généralisation aux potentiels de type puits ou barrières de taille finie est immédiate. Une sphère dure est également un potentiel singulier en ce sens que sa valeur est infinie à l'intérieur de la sphère. Cet infini ôte toute structure interne au diffuseur : la fonction d'onde ne peut pas pénétrer dans le potentiel.

Dans la fonction de corrélation à une particule (propagateur), l'ingrédient de base est la matrice $\mathbf{t}$. Dans le cas des sphères dures, il n'est pas possible de travailler directement avec le potentiel qui est infini. Cette matrice $\mathbf{t}$ est bien connue dans la littérature traitant de la diffusion [67] et est également utilisée dans le cadre de la diffusion dans les systèmes désordonnés [65]. Elle entre dans l'énergie propre du propagateur dès le premier ordre en densité de diffuseurs. Cependant, comme nous pourrons le voir, cette matrice $\mathbf{t}$ n'est pas simplement donnée par l'expression habituellement obtenue pour la diffusion sur un seul potentiel [67, 25] mais possède une dépendance et en énergie et en impulsion. Cette matrice $\mathbf{t}$ est en effet hors couche d'énergie (*off-shell*). Lorsque l'énergie propre possède une dépendance en impulsion, cela signifie que l'électron « voit » les détails du potentiel qu'il rencontre [81, p. 67]. Un potentiel ponctuel n'a pas d'extension spatiale par définition et par conséquent, l'énergie propre trouvée pour ce type de potentiel ne possède pas de dépendance en impulsion. Hormis les autres problèmes d'interprétation et de réalité du potentiel ponctuel, cette caractéristique de la matrice $\mathbf{t}$ montre que la connaissance de la matrice $\mathbf{t}$ hors couche permet d'avoir une connaissance plus profonde sur le système. Nous verrons que l'existence d'une matrice $\mathbf{t}$ hors couche est intimement liée au fait que la taille des diffuseurs est non nulle.

La première partie de cette thèse contient donc une approche nouvelle de la diffusion multiple en ce sens qu'elle traite de façon aussi rigoureuse que possible les matrices de transition hors couche d'énergie. À notre connaissance, cet aspect n'a jamais été traité dans le contexte de la diffusion multiple. Différents auteurs [64, 105, 9] ont constaté l'apparition de matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie lorsque l'approche est perturbative, mais leur choix a été de contourner le problème par la méthode des déphasages et des potentiels de type « *muffin-tin* » (potentiels à symétrie sphérique) ou de négliger ces effets.

Nous commençons dans un premier chapitre par rappeler quelques notions de théorie de la diffusion et redérivons rapidement la fonction de corrélation moyenne à une particule du système de sphères dures. Le libre parcours moyen élastique est ensuite extrait de cette fonction de corrélation. Nous montrons cependant que cette procédure néglige l'existence de matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie et néglige également l'existence de corrélations spatiales entre les diffuseurs due à leur taille finie. Le chapitre 2 est concerné par l'évaluation de la matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie. Il y est montré que l'utilisation de cette matrice $\mathbf{t}$ ne peut pas avoir lieu sans tenir compte du volume exclu (engendré par le fait que les centres diffuseurs ne se recouvrent pas). Il est alors préférable de calculer la fonction de corrélation à une particule pour une configuration du système donnée et de ne prendre la moyenne qu'ensuite. Cette fonction de corrélation est évaluée à l'aide des matrices $\mathbf{t}$ hors couche dans le chapitre 3. La moyenne sur le désordre est faite dans le chapitre 4 et permet d'évaluer des corrections du 2^{e} ordre en densité à l'énergie propre du propagateur, conduisant à des corrections au libre parcours moyen élastique. Ces corrections contiennent les effets de la matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie, du volume exclu et des diffusions répétées sur deux potentiels (diffusions multiple à deux corps). Le résultat est nouveau pour des potentiels de taille finie. Il existe un résultat concernant les corrections à deux corps obtenu par l'approche des diffuseurs ponctuels [92]. Mais dans ce cas particulier, ni effets hors couche, ni volume exclu ne sont pris en compte. Il est montré d'ailleurs dans ce chapitre que les effets hors couche et les effets de volume exclu sont intrinsèquement reliés. Les effets hors couche sont d'autant plus importants que la densité de diffuseurs est forte [9], mais l'approche perturbative ne nous permet pas de considérer le cas d'une forte densité.

Comme nous l'avons vu lors de la présentation de la matrice $\mathcal{T}$, la série de Watson mène à deux domaines de la physique assez distincts, à savoir la physique des systèmes désordonnés et celle du chaos avec les billards quantiques. Dans le premier cas, la taille des potentiels est négligée et conduit à l'utilisation des potentiels ponctuels. Dans le deuxième cas, la taille des potentiels est importante puisque grande devant la longueur d'onde, mais les études se concentrent sur des configurations bien particulières de billards. Faisant le lien entre notre approche et la formulation KKR à deux dimensions au chapitre 5, nous utilisons les expressions exactes de diffusion sur des disques durs pour calculer numériquement diverses quantités physiques. La forme matricielle de l'approche KKR se prête bien à cette étude numérique. Plutôt que de nous intéresser aux résonances de diffusion de quelques diffuseurs répartis selon une géométrie donnée, nous choisissons d'utiliser cette approche pour étudier la diffusion multiple dans les systèmes désordonnés contenant un grand nombre de centres diffuseurs. L'avantage de cette approche numérique est de contenir les expressions exactes de toute la diffusion multiple et de permettre ainsi de compenser les faiblesses de l'approche perturbative. Étant donné que le programme calcule la matrice de diffusion exacte du système, il permet d'étudier toutes les quantités physiques intéressantes. Après avoir vérifié la validité du programme numérique, nous l'appliquons au calcul de la fonction d'onde et de la section efficace de diffusion d'un électron dans les systèmes désordonnés de disques durs.

La deuxième partie de cette thèse est consacrée au développement de nouvelles approches pour la description des systèmes désordonnés et des interactions entre électrons en termes de théories des champs effectives. Jusqu'ici, les seuls modèles de théorie des champs décrivant la propagation des électrons dans les systèmes désordonnés sont des modèles σ non linéaires. Il y a deux inconvénients intrinsèques à ces modèles que nous souhaitons éliminer. Le premier est l'utilisation des répliques et le second est l'utilisation de champs composites bi-locaux. La volonté d'éviter le formalisme des répliques est rattachée à la volonté d'utiliser une procédure plus naturelle pour effectuer la moyenne d'ensemble. Il existe déjà quelques alternatives comme l'approche supersymétrique [29] et le formalisme de Keldysh [44, 17, 47] pour éviter l'emploi des répliques, mais celles-ci utilisent toujours une formulation de champs composites bi-locaux. Une théorie effective ne contenant que des champs locaux est préférable car les techniques de théorie des champs y sont spécialement adaptées, alors qu'il n'existe pas de théorie des champs non locale rigoureuse. Une approche phénoménologique a récemment été développée [20], dans laquelle l'interaction non locale en temps engendrée par le désordre conduit à une solution du col non triviale. Cette solution brise la symétrie de translation selon l'axe du temps imaginaire et une conductivité est générée par les modes de Goldstone associés à cette brisure de symétrie. Cette approche effective fournit un mécanisme pour générer une conductivité dans les systèmes fortement désordonnés. L'existence de la transition repose sur certaines relations entre les différentes constantes de couplage qui dépendent de paramètres physiques (énergie de Fermi des électrons, densité d'impuretés,etc). Il convient de vérifier, à l'aide d'une théorie microscopique décrivant la dépendance des constantes de couplage dans les paramètres physiques, que ces relations sont possibles et pour quelles valeurs des paramètres physiques elles le sont.

Le chapitre 6 est consacré à l'élaboration d'une nouvelle façon d'obtenir des moyennes d'ensemble sur le désordre. Nous y modélisons les impuretés par des particules fermioniques statiques et non par un potentiel aléatoire ayant une distribution gaussienne. Ces impuretés sont réparties de façon aléatoire sur les sites d'un réseau et la moyenne d'ensemble est faite par intégration fonctionnelle sur les champs d'impuretés en imposant la contrainte d'une densité d'impuretés constante. La statistique de Fermi élimine naturellement les configurations où deux impuretés sont sur le même site. Elle joue un peu le même rôle que les potentiels de taille finie dont nous parlons dans la première partie de la thèse. Les impuretés sont choisies avec une masse infinie pour les rendre statiques. Ce choix élimine l'énergie cinétique de la particule, mais rend également la surface de Fermi très singulière. Pour cette raison, nous travaillons dans l'ensemble canonique plutôt que dans l'ensemble grand-canonique. Nous montrons par un développement perturbatif que ce modèle peut être rapproché de celui d'Edwards [27] et qu'il permet par conséquent de décrire la localisation d'Anderson [96]. Ce chapitre s'arrête sur cette correspondance et remet à plus tard une description non perturbative du phénomène de localisation.

Cette approche en termes de champs d'impuretés remplit le double rôle d'éviter l'utilisation des répliques et d'être une théorie locale aussi bien en espace qu'en temps. Elle ouvre la voie à une utilisation de méthodes non perturbatives comme le groupe de renormalisation. En particulier, elle devrait s'intégrer dans l'implémentation du groupe de renormalisation tel qu'il est décrit dans le chapitre suivant pour aboutir à une théorie décrivant les électrons en interaction en présence de désordre.

Le chapitre 7 applique une nouvelle approche du groupe de renormalisation aux systèmes fermioniques non relativistes. Cette approche n'a été utilisée jusqu'ici que dans le cadre d'une théorie à un champ scalaire relativiste [6]. D'une façon générale, le groupe de renormalisation constitue un cadre général pour l'étude des transitions et son utilisation sous cette nouvelle forme devrait permettre de mieux comprendre la transition métal-isolant à 2 dimensions décrite précédemment. Cependant, avant de l'appliquer aux électrons en interaction dans les systèmes désordonnés, il est préférable de voir son application à un système plus simple. Le système choisi est celui d'un gaz d'électrons en interaction en l'absence d'impuretés ; le désordre présente en effet une difficulté supplémentaire due à la nécessité de faire une moyenne d'ensemble sur toutes les configurations. Ce chapitre laisse donc de côté le désordre et ne traite que des interactions entre électrons.

La particularité de la statistique des fermions est d'interdire la possibilité de trouver deux fermions dans le même état. Dans l'espace des impulsions, elle conduit à donner une impulsion différente pour chaque électron. Il apparaît ainsi la notion de *surface de Fermi* qui décrit la surface dans l'espace des impulsions sous laquelle chaque état d'impulsion donnée correspond à un électron. Cette surface peut avoir diverses formes [50] selon les contraintes extérieures (imposées par ex. par un réseau d'atomes). En général, cette surface est choisie sphérique (cas des électrons libres), mais elle soulève néanmoins quelques difficultés dans le traitement de l'interaction de Coulomb par le groupe de renormalisation [13, 80]. En effet, l'approche par le groupe de renormalisation consiste à éliminer successivement les modes d'impulsion élevée (modes ultraviolets) pour ne retenir que les modes proches de faibles impulsion ($p \to 0$) décrivant le comportement à longue distance du système [102]. Dans le cas des systèmes à densité finie d'électrons, les modes de longue portée sont ceux proches de la surface de Fermi (la conductivité est effectivement engendrée par les électrons ayant leur impulsion au-dessus et proche de la surface de Fermi). Ce sont ces modes qui doivent être conservés lors de l'implémentation du groupe de renormalisation. La difficulté réside dans le fait que ces modes sont encore infiniment nombreux puisqu'ils forment une surface et non un point.

L'originalité de l'approche consiste à dériver des équations du groupe de renormalisation pour les électrons en interaction en fonction d'un paramètre M indépendant de la coupure sur l'impulsion. L'élimination des modes n'est plus effectuée dans l'espace des impulsions, mais est contrôlée par ce paramètre M qui est choisi de façon à éliminer les fluctuations quantiques lorsque $M = \infty$. La variation infinitésimale de M vers 0 permet de renormaliser le hamiltonien du système. Lorsque $M = 0$, on obtient un hamiltonien effectif décrivant le système. Le potentiel de Coulomb est modélisé par un champ de photons, permettant d'avoir des interactions locales. Cette méthode de renormalisation permet d'obtenir un ensemble d'équations différentielles couplées décrivant l'évolution des différentes constantes de couplage présentes dans le hamiltonien en fonction du paramètre M. L'approximation à une boucle [60] permet de retrouver les équations bien connues de la théorie des perturbations (*Random Phase Approximation*) [32]. La résolution numérique de ces équations différentielles couplées et la recherche de points fixes sort du cadre de cette thèse. Cependant, les résultats trouvés sont encourageants et offrent une nouvelle approche du groupe de renormalisation pour l'étude des systèmes de fermions corrélés.

Première partie

Diffusion multiple dans les systèmes désordonnés

Notations et conventions

Notations

Les opérateurs et les vecteurs sont notés à l'aide de caractères gras. Par exemple, $\mathbf{r}$ est un vecteur à deux ou à trois dimensions et son module est noté $r \equiv |\mathbf{r}|$. Les notations de Dirac en bras et kets sont utilisées pour la description des états quantiques.

Conventions

Les différentes normalisations sont choisies par convention de la façon suivante.

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{r}|\mathbf{k}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}}, \\
\langle \mathbf{r}|\mathbf{r}'\rangle &= \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}'), \\
\langle \mathbf{k}|\mathbf{k}'\rangle &= \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \equiv \frac{(2\pi)^d}{V}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}'),
\end{aligned} \tag{1}$$

où $V \equiv L^d$ est le volume spatial en dimension d et $\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}$ est le symbole de Kronecker, sans dimension, alors que $\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ est la distribution de Dirac qui est dimensionnée. De temps à autre, le symbole de Kronecker sera employé pour alléger les écritures.

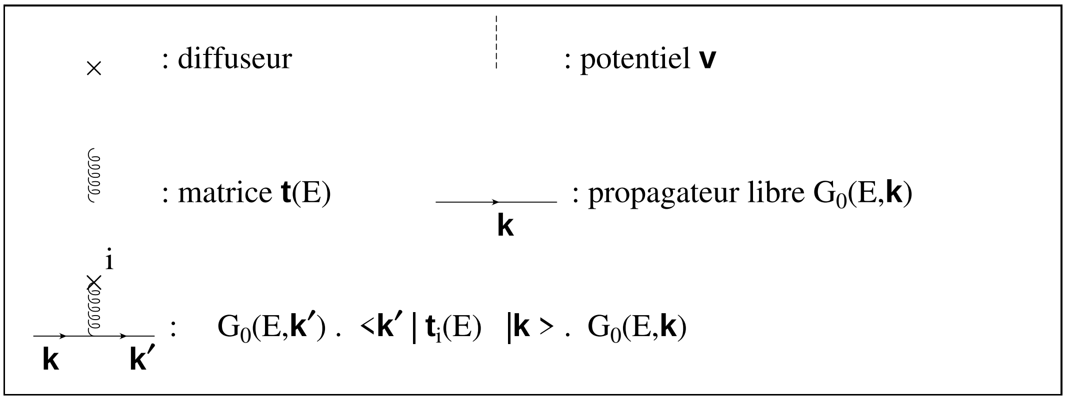


FIG. 1 – *Correspondance de la diagrammatique.*

Les relations de fermeture sont alors

$$\int d\mathbf{r}|\mathbf{r}\rangle\langle\mathbf{r}| = 1,$$
$$\frac{V}{(2\pi)^d}\int d\mathbf{k}|\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| = 1 \equiv \sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|. \tag{2}$$

Le signe $\sum_{\mathbf{k}}$ est habituellement utilisé pour des sommations discrètes mais sera utilisé ici dans le cas du continuum afin de simplifier les expressions. Il aura bien sûr le sens d'une intégration sur un continuum d'états de vecteur d'onde $\mathbf{k}$.

Règles diagrammatiques

Nous présentons dans la figure 1 les quelques règles essentielles pour comprendre la diagrammatique que nous utilisons dans cette première partie de la thèse.

Le propagateur libre est diagonal dans la base des ondes planes et est donné par

$$\langle\mathbf{k}|\mathbf{G}_0^{(+)}(E)|\mathbf{k}'\rangle = \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\frac{1}{E - E_k + i\epsilon} \equiv \frac{(2\pi)^d}{V}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\frac{1}{E - E_k + i\epsilon}. \tag{3}$$

L'énergie physique sera toujours notée $E = \hbar^2 K^2/2m$.

Chapitre 1

Rappels sur la théorie de la diffusion

Introduction

Dans ce chapitre introductif, nous rappelons brièvement quelques notions élémentaires concernant la diffusion quantique. Nous présentons en premier lieu la diffusion sur un centre, cas dans lequel l'opérateur de diffusion $\mathbf{t}$ s'introduit de façon naturelle. L'opérateur $\mathbf{t}$, appelé aussi *matrice* $\mathbf{t}$ par abus de langage, est une quantité essentielle de la diffusion puisqu'il entre dans le calcul de la section efficace. Il constitue également l'ingrédient de base dans la description de la diffusion multiple qui est abordée par la méthode de la série de Watson. Cette série fait intervenir toutes les séquences de diffusion possibles en termes de produits d'éléments de matrice $\mathbf{t}$. Nous rappelons la façon dont la moyenne d'ensemble du propagateur de l'électron est prise dans le cas de potentiels considérés ponctuels, sans corrélations. Cette moyenne d'ensemble du propagateur fait intervenir la moyenne de la série de Watson, dont une certaine classe de séquences de diffusion est resommé de façon géométrique. L'écriture du propagateur moyen dans l'espace réel montre une décroissance exponentielle de celui-ci et permet d'obtenir le libre parcours moyen élastique du système. Nous discutons ensuite la façon d'aller plus loin en incluant les expressions exactes des éléments de matrice $\mathbf{t}$ pour des potentiels de taille finie.

1.1 Diffusion sur un potentiel

1.1.1 Diffusion quantique

Matrice de diffusion

La diffusion d'une onde scalaire par un potentiel $\mathbf{v}$ est décrite par l'équation de Schrödinger stationnaire [67].

$$\mathbf{H}|\psi_{\mathbf{K}}\rangle \equiv \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \mathbf{v}\right]|\psi\rangle = E|\psi_{\mathbf{K}}\rangle. \tag{1.1}$$

Dans le cas de la diffusion multiple qui nous concernera plus loin, le choix d'un potentiel de type sphère dure présente l'avantage, par rapport aux autres types de potentiels, d'être sans structure interne. Le potentiel de sphère dure est décrit par l'opérateur $\mathbf{v}$ local (*i.e.* $\langle \mathbf{r}'|\mathbf{v}|\mathbf{r}\rangle = v(\mathbf{r})\delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')$) avec

$$v(\mathbf{r}) = \begin{cases} +\infty & \text{si} \quad |\mathbf{r}| \leq a \\ 0 & \text{si} \quad |\mathbf{r}| > a. \end{cases} \tag{1.2}$$

Le fait que $v(\mathbf{r})$ prenne une valeur infinie dans le potentiel contraint la fonction d'onde à être nulle dans ce potentiel (une valeur non nulle de la fonction d'onde ferait apparaître des divergences dans toutes les quantités physiques car $\mathbf{v}|\psi\rangle$ serait infini). L'onde ne pénètre pas dans le potentiel et n'est donc pas concernée par sa structure interne.

La fonction d'onde en dimension d, s'écrit comme la somme d'une onde plane (solution libre) et d'une onde diffusée sortante (sphérique en $d = 3$ et cylindrique en $d = 2$).

$$\sqrt{V}\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \xrightarrow[r\to\infty]{} e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} + f(\mathbf{K}',\mathbf{K})\frac{e^{iKr}}{r^{(d-1)/2}}, \tag{1.3}$$

où $\mathbf{K}'$ est le vecteur d'onde diffusé dans la direction $\mathbf{r}$ [81, p. 97]. La racine du volume sert à normaliser la fonction d'onde et vient de la convention choisie en (1). L'approximation la plus simple est l'approximation de Born qui ne considère que le premier terme du développement perturbatif de l'amplitude de diffusion $f(\mathbf{K}',\mathbf{K})$ [67, chap. XIX]. Celle-ci est alors donnée par la transformée de Fourier $\tilde{v}$ du potentiel.

$$f(\mathbf{K}',\mathbf{K}) \approx \frac{-mV}{2\pi\hbar^2}\tilde{v}(\mathbf{K}' - \mathbf{K}). \tag{1.4}$$

Cette approximation ne peut être valable que si la contribution du potentiel d'interaction $\mathbf{v}$ est très faible devant l'énergie cinétique. Nous verrons plus tard que cette approximation n'est absolument pas suffisante pour obtenir le libre parcours moyen élastique d'un système comportant un nombre arbitrairement grand de diffuseurs. Une telle approximation n'est évidemment pas applicable au cas d'une sphère dure, puisque le potentiel est infini.

Le problème de diffusion sur un potentiel à symétrie sphérique est exactement soluble. À trois dimensions, l'écriture du laplacien en coordonnées sphériques permet de résoudre l'équation (1.1) en séparant la partie radiale et la partie angulaire. Les fonctions de Bessel sphériques j_l et de Hankel sphériques $h_l^{(+)}$, solutions de l'équation de Schrödinger radiale, permettent l'écriture de la fonction d'onde en une série d'ondes partielles (ondes de moment angulaire défini).

$$\sqrt{V}\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)P_l(\cos(\widehat{\mathbf{K},\mathbf{r}}))i^l\Big(j_l(Kr) - A_l h_l^{(+)}(Kr)\Big),$$

où $\mathbf{K}$ est le vecteur d'onde incident d'énergie $E = \frac{\hbar^2}{2m}K^2$. Les fonctions j_l et $h_l^{(+)}$ sont définies dans l'annexe A, ainsi que la décomposition du polynôme de Legendre P_l en harmoniques sphériques. La fonction $h_l^{(+)}$ est la solution de l'équation de Schrödinger radiale correspondant à une onde sphérique sortante. La condition au bord (annulation de la fonction d'onde sur le bord du potentiel de sphère dure - condition de Dirichlet) permet de déterminer les coefficients A_l. La solution de l'équation (1.1) dans le cas d'une sphère dure s'écrit

$$\sqrt{V}\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)P_l(\cos(\widehat{\mathbf{K},\mathbf{r}}))i^l\Big(j_l(Kr) - \frac{j_l(Ka)}{h_l^{(+)}(Ka)}h_l^{(+)}(Kr)\Big). \tag{1.5}$$

Pour la fonction d'onde à deux dimensions, une expression similaire est obtenue faisant intervenir les fonctions de Bessel ordinaires J_m et de Hankel $H_m^{(1)}$ (cf. annexe A).

$$\sqrt{V}\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} i^m e^{im(\theta_r-\theta_K)}\Big(J_m(Kr) - \frac{J_m(Ka)}{H_m^{(1)}(Ka)}H_m^{(1)}(Kr)\Big). \tag{1.6}$$

L'expression de l'amplitude de diffusion f à trois et à deux dimensions de la formule (1.3) s'obtient en prenant les expressions asymptotiques (A.10) et(A.30) des fonctions de Hankel dans les expressions (1.5) et (1.6). Cette expression est donnée explicitement un peu plus loin en rapport avec la matrice $\mathbf{t}$.

La matrice $\mathbf{t}$ est introduite au moyen de l'équation de Lippmann-Schwinger [63]

$$|\psi_{\mathbf{K}}\rangle = |\mathbf{K}\rangle + \mathbf{G}_0^{(+)}\mathbf{v}|\psi_{\mathbf{K}}\rangle = |\mathbf{K}\rangle + \mathbf{G}_0^{(+)}\mathbf{t}|\mathbf{K}\rangle, \tag{1.7}$$

où $\mathbf{G}_0^{(+)} \equiv (E - \mathbf{H}_0 + i\epsilon)^{-1}$ est le propagateur libre retardé. À partir de cette équation, la matrice $\mathbf{t}$ peut être identifiée à

$$\begin{aligned} \mathbf{t}(E) =& \mathbf{v} + \mathbf{v}\mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{v} + \mathbf{v}\mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{v}\mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{v} + \cdots \\ =& \mathbf{v} + \mathbf{v}\mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{t}(E) = \mathbf{v} + \mathbf{t}(E)\mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{v}. \end{aligned} \tag{1.8}$$

Il apparaît clairement que l'équation précédente est inutilisable dans le cas des sphères dures car le potentiel $\mathbf{v}$ est infini. L'approximation de Born (1.4), qui consiste à ne considérer que le premier terme du développement de la matrice de diffusion, est d'ailleurs incorrecte pour les sphères dures. L'utilisation de matrices $\mathbf{t}$ est donc nécessaire si l'on veut étudier la diffusion multiple d'un électron sur un ensemble de sphères dures.

L'expression de la matrice $\mathbf{t}$ s'obtient en écrivant l'équation (1.7) en représentation position. À deux dimensions, la fonction d'onde s'écrit

$$\begin{aligned} \sqrt{V}\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) =& e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} + \sum_{\mathbf{k_1}} \int d\mathbf{r}' \langle \mathbf{r}|\mathbf{G}_0^{(+)}(E)|\mathbf{r}'\rangle e^{i\mathbf{k_1}\mathbf{r}'}\langle \mathbf{k_1}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{K}\rangle \\ =& e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} - \frac{im}{2\hbar^2}\sum_{\mathbf{k_1}} \int d\mathbf{r}' H_0^{(1)}(K|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|) e^{i\mathbf{k_1}\mathbf{r}'}\langle \mathbf{k_1}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{K}\rangle. \end{aligned}$$

Lorsque $r \to \infty$, $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \approx r - r'\cos\theta + \mathcal{O}(1/r)$ où θ est l'angle entre $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$. L'expression asymptotique de la fonction d'onde est

$$\sqrt{V}\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \approx e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} - \frac{im}{\hbar^2\sqrt{2\pi K r}}\sum_{\mathbf{k_1}} \int d\mathbf{r}' e^{i(Kr - \mathbf{K}'\mathbf{r}' - \pi/4)} e^{i\mathbf{k_1}\mathbf{r}'}\langle \mathbf{k_1}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{K}\rangle,$$

où $\mathbf{K}'$ est le vecteur de module K et de direction $\mathbf{r}$ ($\mathbf{K}'\mathbf{r}' = Kr'\cos\theta$). Les deux intégrales sont triviales et donnent

$$\sqrt{V}\psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) \approx e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}} - \frac{imVe^{-i\pi/4}}{\hbar^2\sqrt{2\pi K}}\langle \mathbf{K}'|\mathbf{t}(E)|\mathbf{K}\rangle \frac{e^{iKr}}{\sqrt{r}}.$$

Par comparaison avec l'équation (1.3), la matrice $\mathbf{t}$ est directement reliée à l'amplitude de diffusion f par la relation

$$f(\mathbf{K}',\mathbf{K}) = -i\frac{mV}{\hbar^2}\frac{e^{-i\pi/4}}{\sqrt{2\pi K}}\langle \mathbf{K}'|\mathbf{t}(E)|\mathbf{K}\rangle. \tag{1.9a}$$

Le même raisonnement peut être fait à trois dimensions et conduit à la relation

$$f(\mathbf{K}',\mathbf{K}) = -\frac{mV}{2\pi\hbar^2}\langle \mathbf{K}'|\mathbf{t}(E)|\mathbf{K}\rangle. \tag{1.9b}$$

Les expressions des éléments de matrice $\mathbf{t}$ pour $K = K'$ à trois et deux dimensions sont obtenues à partir de l'amplitude de diffusion f dérivée des équations (1.5) et (1.6).

$$\langle \mathbf{K}'|\mathbf{t}(E)|\mathbf{K}\rangle = \frac{4\pi}{K}\frac{\hbar^2}{2mV}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)P_l(\cos(\widehat{\mathbf{K}',\mathbf{K}}))\frac{j_l(Ka)}{h_l^{(+)}(Ka)}, \tag{1.10a}$$

à 3 dimensions et

$$\langle \mathbf{K}'|\mathbf{t}(E)|\mathbf{K}\rangle = -4i\frac{\hbar^2}{2mV}\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta_{K'}-\theta_K)}\frac{J_m(Ka)}{H_m^{(1)}(Ka)} \tag{1.10b}$$

à 2 dimensions. La diffusion sur une sphère dure ou un disque dur est entièrement décrite par cette matrice $\mathbf{t}$.

Section efficace

La description corpusculaire du phénomène de diffusion est plus commode que la description ondulatoire pour définir la section efficace. L'onde incidente est décrite par un faisceau de particules se propageant dans la direction $\mathbf{K}$ et une partie de ce faisceau entre en collision avec le potentiel de sphère dure. La *section efficace totale* d'un processus de collision représente la surface, perpendiculaire à la direction du faisceau incident, au travers de laquelle le passage de toute particule se traduit par une collision. La *section efficace différentielle* d'un processus de collision, notée $\sigma_{\mathbf{K}\to\mathbf{K}'}$, se définit comme la surface, perpendiculaire à la direction du faisceau incident, au travers de laquelle le passage de toute particule se traduit par une diffusion de la particule dans l'élément d'angle solide $d\Omega$ autour de la direction $\mathbf{K}'$. Autrement dit, le nombre de particules diffusées dans l'élément d'angle solide $d\Omega$ autour de la direction $\mathbf{K}'$ par unité de temps est égal au nombre de particules du faisceau incident traversant la surface $\sigma_{\mathbf{K}\to\mathbf{K}'}d\Omega$ par unité de temps. La section efficace est reliée aux expressions (1.9a) et (1.9b). La section efficace différentielle est donnée par

$$\sigma_{\mathbf{K}\to\mathbf{K}'} = |f(\mathbf{K}',\mathbf{K})|^2. \tag{1.11}$$

Lorsque l'onde incidente a une longueur d'onde très grande devant la taille du diffuseur, $Ka \ll 1$, le rapport des fonctions de Bessel et Hankel devient d'autant plus petit que l (ou $|m|$) devient plus grand devant Ka. De ce fait, la contribution essentielle à la matrice $\mathbf{t}$ est l'onde s ($l = 0$ ou $m = 0$). Dans ce régime, la diffusion de l'onde est isotrope puisque la dépendance angulaire disparaît. Pour une valeur de Ka donnée, la série sur les ondes partielles peut être tronquée à $l \sim Ka$ [67, p. 335].

Lorsqu'au contraire la particule incidente est ponctuelle face au diffuseur, $Ka \gg 1$, la diffusion consiste en un pic de diffraction vers l'avant (de largeur proportionnelle à $1/Ka$) et une contribution isotrope [68, p. 1484].

La section efficace totale est donnée par l'intégration angulaire de la section efficace différentielle. Elle peut également être écrite en fonction la partie imaginaire de l'amplitude de diffusion vers l'avant grâce au *théorème optique* [67]. Nous redérivons rapidement les expressions de celle-ci à deux dimensions.

$$\sigma_{2\mathrm{D}}(\mathbf{K}) = \int_0^{2\pi} d\theta |f(\mathbf{K}',\mathbf{K})|^2, \tag{1.12}$$

θ étant l'angle entre les vecteurs d'onde entrant $\mathbf{K}$ et sortant $\mathbf{K}'$.

$$\begin{aligned}\sigma_{2\mathrm{D}}(\mathbf{K}) =& \frac{2mV}{\hbar^2}\frac{1}{8\pi K}\int_0^{2\pi} d\theta |\langle \mathbf{K}'|\mathbf{t}(E)|\mathbf{K}\rangle|^2 \\ =& \frac{4}{K}\sum_{m=-\infty}^{+\infty}\left|\frac{J_m(Ka)}{H_m^{(1)}(Ka)}\right|^2 = -\frac{2mV}{\hbar^2}\frac{1}{K}\mathfrak{Im}\langle \mathbf{K}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{K}\rangle.\end{aligned} \tag{1.13}$$

À trois dimensions, nous obtenons de la même façon

$$\sigma_{3\mathrm{D}}(\mathbf{K}) = \frac{4}{K}\sum_{l=0}^{\infty}(2l+1)\left|\frac{j_l(Ka)}{h_l^{(+)}(Ka)}\right|^2 = -\frac{2mV}{\hbar^2}\frac{1}{K}\mathfrak{Im}\langle \mathbf{K}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{K}\rangle. \tag{1.14}$$

Le théorème optique est une conséquence de la conservation du nombre de particules lors de la diffusion. En effet, l'onde plane incidente étant normalisée, la probabilité de trouver une particule dans l'espace libre est de 1. La probabilité de trouver la particule subissant une collision dans tout l'espace doit être également 1, ce qui se traduit par

$$1 = \int_V d\mathbf{r}\, |\langle \mathbf{r}|\mathbf{K}\rangle|^2 = \int_V d\mathbf{r}\, |\langle \mathbf{r}|\Psi_{\mathbf{K}}\rangle|^2 .$$

En remplaçant la fonction d'onde par l'expression de Lippmann-Schwinger (1.7), il apparaît que la matrice $\mathbf{t}$ doit vérifier la relation

$$\mathfrak{Im}\langle \mathbf{K}|\mathbf{t}_K|\mathbf{K}\rangle = -\pi V \int \frac{\mathbf{dp}'}{(2\pi)^3}\left|\langle \mathbf{p}'|\mathbf{t}_K|\mathbf{K}\rangle\right|^2 \delta(E_{p'} - E_K). \tag{1.15}$$

Lorsque $Ka \ll 1$, le développement des fonctions de Bessel et Hankel (A.29) donne le résultat généralement bien connu pour la section efficace totale à trois dimensions.

$$\sigma_{3\mathrm{D}}(\mathbf{K}) \approx 4\pi a^2. \tag{1.16}$$

La section efficace totale quantique à basse énergie est quatre fois supérieure à la section efficace géométrique. Lorsque $Ka \to \infty$, elle tend vers deux fois la section efficace géométrique, $\sigma_{3\mathrm{D}}(\mathbf{K}) \to 2\pi a^2$. Cette limite semi-classique ne redonne pas la section efficace géométrique à cause de l'existence du phénomène de diffraction. Le pic de diffraction a en effet une section efficace de πa^2 à lui seul.

À deux dimensions et lorsque $Ka \ll 1$, la section efficace totale diverge quand $K \to 0$ [78].

$$\sigma_{2\mathrm{D}} \approx \frac{1}{K}\frac{4}{1 + \frac{4}{\pi^2}\ln^2\frac{Kae^{\gamma}}{2}} \approx \frac{\pi^2}{K\ln^2 Ka}. \tag{1.17}$$

Ce résultat est très loin de la valeur géométrique de la section efficace totale à deux dimensions $\sigma_{\text{géo}} = 2a$ et cette dépendance singulière en K rend la diffusion à deux dimensions très particulière : plus la longueur d'onde est grande devant la taille du diffuseur, plus l'onde incidente est sensible à la présence du potentiel.

1.1.2 Diffusion classique

Il existe une correspondance remarquable entre l'équation d'onde quantique et l'équation d'onde classique [81]. Toutes les deux se ramènent à la même équation en régime stationnaire. L'équation de Schrödinger (1.1) se met sous la forme

$$(\Delta + k^2)\psi(\mathbf{r}) = 0 \tag{1.18}$$

où $k^2 = \frac{2m}{\hbar^2}(E - V(\mathbf{r})) \equiv K^2 - U(\mathbf{r})$.
Une onde classique scalaire vérifie la même équation avec

$$k^2 = \omega^2/c^2 = K^2 - \zeta(\mathbf{r}),$$

ω étant la fréquence de l'onde et c sa vitesse. La fonction $\zeta(\mathbf{r})$ est l'équivalent classique du potentiel $U(\mathbf{r})$ et les endroits de l'espace où ζ est non nul paramétrisent des zones où l'indice de réfraction n est différent de celui du vide. Dans le vide, l'onde se propage avec le vecteur d'onde $k = K = \omega/c_0$ et la vitesse c_0. Dans le potentiel, sa vitesse est modifiée, $c = c_0/\sqrt{\epsilon}$, où $\epsilon = n^2$ est la constante diélectrique du milieu. Ainsi,

$$k^2 = K^2 - \zeta \text{ avec } \zeta = (1-\epsilon)K^2.$$

En dehors de ces équivalences formelles entre les ondes quantiques et les ondes classiques, il existe quelques différences fondamentales. En premier lieu, les équations d'évolution temporelle s'écrivent

$$\frac{\partial^2\psi}{\partial t^2} = c^2\Delta\psi$$

pour l'onde classique et

$$i\hbar\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta\psi$$

pour l'onde quantique. Les solutions classique et quantique ont un comportement temporel très différent. Les relations de dispersion dans le vide sont alors $\omega = cK$ pour l'onde classique et $E = \frac{\hbar^2}{2m}K^2$ pour l'onde quantique. L'une est linéaire, l'autre est quadratique dans le nombre d'onde. Une autre différence est que k^2 peut devenir négatif dans le cas quantique, alors qu'il reste toujours positif pour l'onde classique. L'onde quantique n'a d'équivalent classique que si $k^2 > 0$, *i.e.* $E > V$. Le cas du potentiel quantique de hauteur infinie, $k^2 \to -\infty$, semble donc ne pas avoir d'équivalent pour l'onde classique. Nous verrons cependant au paragraphe 2.3.3 que le potentiel de type sphère dure conduit à la même expression de la matrice $\mathbf{t}$ que celle associée au potentiel de profondeur infinie ($k^2 \to \infty$), sous certaines conditions. Le potentiel de profondeur infinie correspond au cas d'une sphère parfaitement métallique, $n = \infty$, pour laquelle il faut résoudre l'équation (1.18) avec des conditions de Dirichlet au bord de la sphère [46]. Bien que $k^2 \to -\infty$ pour ce type de potentiel, la sphère dure permet donc de décrire également la diffusion d'une onde classique par une sphère parfaitement métallique.

Dans le cas général, le « potentiel » ζ dépend de la fréquence ω de l'onde classique, alors que le potentiel quantique V est indépendant de l'énergie de l'onde quantique. En conséquence, les interactions deviennent faibles aux basses fréquences. En effet, si $\omega \to 0$, alors $\zeta \to 0$ aussi, sauf dans le cas d'une sphère parfaitement métallique. Ce cas d'une sphère parfaitement métallique ($n = \infty$) est incompatible avec une diffusion de Rayleigh classique [90], qui donne la diffusion d'onde classique à basse fréquence.

1.2 Diffusion multiple

La diffusion d'une onde scalaire en régime stationnaire dans un système désordonné composé de N sphères dures de rayon a est décrite par l'équation de Schrödinger stationnaire

$$\mathbf{H}|\psi\rangle = E|\psi\rangle$$

ayant pour hamiltonien

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_0 + \mathbf{V} = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \sum_{i=1}^{N} \mathbf{v}_i.$$

Le potentiel $\mathbf{v}_i$ représente une sphère dure à la position $\mathbf{R}_i$.

$$v_i(\mathbf{r}) = v(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) = \begin{cases} +\infty & \text{si} \quad |\mathbf{r} - \mathbf{R}_i| \leq a \\ 0 & \text{si} \quad |\mathbf{r} - \mathbf{R}_i| > a. \end{cases}$$

Le propagateur de l'électron associé à ce hamiltonien est

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(E) \equiv & \frac{1}{E - \mathbf{H} + i\epsilon} = \frac{1}{E - \mathbf{H}_0 + i\epsilon} + \frac{1}{E - \mathbf{H}_0 + i\epsilon}\mathbf{V}\frac{1}{E - \mathbf{H} + i\epsilon} \\ = & \mathbf{G}_0^{(+)}(E) + \mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{V}\mathbf{G}(E). \end{aligned}$$

L'opérateur $\mathbf{V}$ contient les diffusions sur chaque centre diffuseur individuel. Si $\mathbf{G}(E)$ et $\mathbf{V}$ sont explicités en terme de diffusions individuelles, le propagateur devient

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(E) = & \mathbf{G}_0^{(+)}(E) + \mathbf{G}_0^{(+)}(E)\Big[\sum_{i=1}^{N} \mathbf{v}_i + \sum_{i,j=1}^{N} \mathbf{v}_i \mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{v}_j + \cdots\Big]\mathbf{G}_0^{(+)}(E) \\ = & \mathbf{G}_0^{(+)}(E) + \mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathcal{T}(E)\mathbf{G}_0^{(+)}(E). \end{aligned} \tag{1.19}$$

Cette équation permet de définir une matrice de diffusion $\mathcal{T}$ pour l'ensemble du système qui s'écrit

$$\mathcal{T}(E) = \sum_{i=1}^{N} \mathbf{v}_i + \sum_{i,j=1}^{N} \mathbf{v}_i \mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{v}_j + \sum_{i,j,k=1}^{N} \mathbf{v}_i \mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{v}_j \mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{v}_k + \cdots . \tag{1.20}$$

Cette expression ne peut pas être d'une grande utilité pour le cas des sphères dures car les différents termes de la série ne sont alors pas définis. La réécriture de cette matrice $\mathcal{T}(E)$ en fonction de chaque matrice $\mathbf{t}$ de diffusion individuelle [81, p. 112] conduit à la série de Watson [98], à savoir

$$\boxed{\begin{aligned} \mathcal{T}(E) = & \sum_{i=1}^{N} \mathbf{t}_i(E) + \sum_{i,j\neq i} \mathbf{t}_i(E)\mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E) \\ & + \sum_{\substack{i,j \neq i, \\ k \neq j}} \mathbf{t}_i(E)\mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)\mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_k(E) + \cdots . \end{aligned}} \tag{1.21}$$

Les indices de somme courent de 1 à N en évitant la répétition de deux indices consécutifs.

Une autre façon plus intuitive de retrouver la série de Watson est d'écrire la fonction d'onde comme une somme de l'onde incidente et des ondes diffusées par tous les potentiels.

$$|\Psi_{\mathbf{K}}\rangle = |\Phi_0\rangle + \sum_{i=1}^{N} \mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_i|\Phi_i\rangle, \tag{1.22}$$

où $|\Phi_0\rangle$ est l'onde incidente (onde plane en général, mais peut aussi être une onde plus particulière) et $|\Phi_i\rangle$ est l'onde arrivant sur le centre diffuseur i. Cette onde résulte de la diffusion de l'onde incidente sur le centre diffuseur i, et de la diffusion de toutes les ondes secondaires émises par les autres centres diffuseurs Elle s'écrit

$$|\Phi_i\rangle = |\Phi_0\rangle + \sum_{j\neq i} \mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j|\Phi_j\rangle. \tag{1.23}$$

On obtient ainsi un système d'équations couplées. La série de Watson de l'équation (1.21) se met en place lorsque l'équation précédente est replacée dans l'équation (1.22) et que chaque onde diffusée $|\Phi_i\rangle$ est remplacée par l'expression (1.23). La combinaison des deux équations (1.22) et (1.23) permet également d'écrire la fonction d'onde sous la forme

$$|\Psi_{\mathbf{K}}\rangle = |\Phi_i\rangle + \mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_i|\Phi_i\rangle, \tag{1.24}$$

quelque soit le centre diffuseur i. Malgré son apparente simplicité, cette équation est d'une utilité limitée puisque toute l'information sur la diffusion multiple se cache dans la fonction Φ_i.

De temps à autre, la notation symbolique suivante sera employée pour décrire les séquences de diffusion apparaissant dans la série de Watson (1.21).

$$\mathcal{T} \equiv \sum_i (i) + \sum_{i,j\neq i}(ij) + \sum_{\substack{i,j\neq i,\\ k\neq j}} (ijk) + \cdots . \tag{1.25}$$

Par construction, la série de Watson contient toutes les séquences de diffusion possibles à l'exception de celles contenant deux diffuseurs successifs identiques. Par exemple, la séquence $(ijkkl)$ n'est pas possible, mais $(ijklk)$ existe. La matrice $\mathbf{t}$ prend déjà en compte les possibilités de retour de l'onde sur un même centre diffuseur ($\mathbf{t}_i = \mathbf{v}_i + \mathbf{v}_i\mathbf{G}_0^{(+)}\mathbf{t}_i$), alors on comprend qu'écrire $\mathbf{t}_i\mathbf{G}_0^{(+)}\mathbf{t}_i$ conduirait à un double comptage. L'avantage de cette série est l'utilisation des matrices $\mathbf{t}$ individuelles qui resomment déjà une série infinie contenant le potentiel $\mathbf{v}$ de sphère dure. Une partie du travail de resommation est donc déjà fait dès le départ.

1.3 Moyenne sur le désordre

Le propagateur obtenu précédemment de façon formelle dépend du système en considération puisqu'il dépend de la position de chaque centre diffuseur. Cependant, il n'est pas toujours possible de connaître la configuration exacte de l'échantillon à étudier. Lors de mesures de quantités physiques (conductivité, coefficient de transmission ...) sur plusieurs échantillons contenant des impuretés, la position de chaque impureté pour chaque échantillon n'est pas connue en général. Il est donc nécessaire de calculer des quantités moyennes indépendantes de la configuration de l'échantillon. Pour cela, il faut évaluer des moyennes d'ensemble. en intégrant sur la position de tous les centres diffuseurs du système [51, Appendice B]. Cette intégration peut être vue comme la somme sur un ensemble infini de systèmes ayant tous des configurations différentes. Elle correspond à une moyenne statistique sur toutes les configurations possibles du système, chaque configuration ayant la même probabilité d'exister.

Deux ingrédients sont essentiels pour faire cette moyenne. Le premier est la relation de fermeture sur les vecteurs d'onde donnée par l'équation (1) ; le deuxième est la translation d'un élément de matrice $\mathbf{t}$. Cette translation s'écrit

$$\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)|\mathbf{k}\rangle = e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\mathbf{R}_i}\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k}\rangle. \tag{1.26}$$

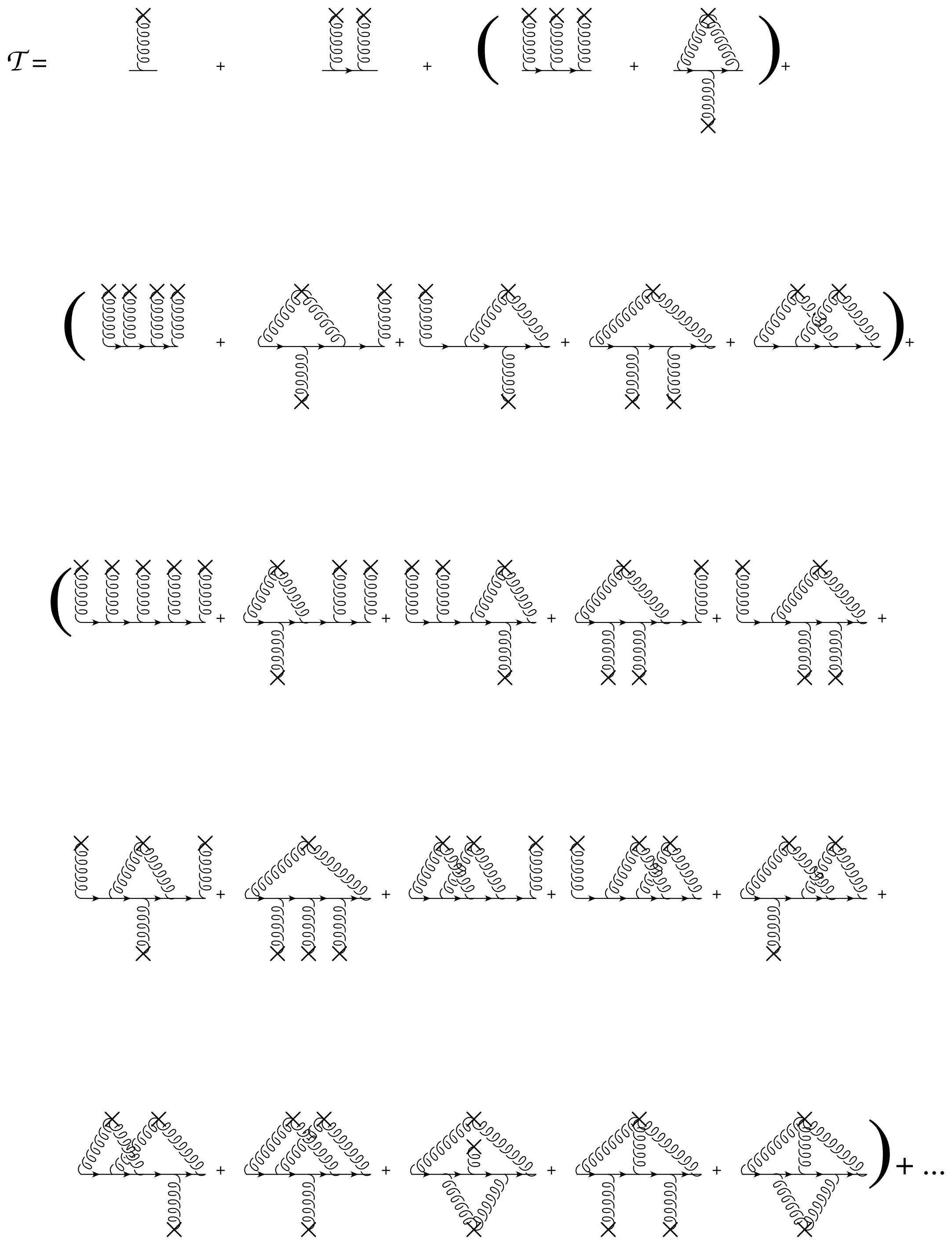


FIG. 1.1 – *Expression diagrammatique de la série de Watson.*

A partir de ces relations et des équations (1.19, 1.21), le propagateur moyen s'écrit

$$\overline{\langle \mathbf{k}'|G(E)|\mathbf{k}\rangle} = \langle \mathbf{k}'|\mathbf{G}_0^{(+)}(E)|\mathbf{k}\rangle + \langle \mathbf{k}'|\mathbf{G}_0^{(+)}(E)|\mathbf{k}'\rangle \overline{\langle \mathbf{k}'|\mathcal{T}(E)|\mathbf{k}\rangle} \langle \mathbf{k}|\mathbf{G}_0^{(+)}(E)|\mathbf{k}\rangle, \tag{1.27}$$

avec

$$\begin{aligned}\overline{\langle \mathbf{k}'|\mathcal{T}(E)|\mathbf{k}\rangle} =& \frac{1}{V^N}\int \prod_{i=1}^{N} d\mathbf{R}_i \Bigg\{ \sum_{i=1}^{N} \langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)|\mathbf{k}\rangle + \sum_{i,j\neq i} \langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)\mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k}\rangle \\ &+ \sum_{\substack{i,j\neq i,\\ k\neq j}} \langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)\mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)\mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_k(E)|\mathbf{k}\rangle + \cdots \Bigg\}. \end{aligned}\tag{1.28}$$

En insérant les relations de fermeture sur les vecteurs d'onde entre chaque opérateur $\mathbf{t}_i(E)$ et $\mathbf{G}_0^{(+)}(E)$ de la série de Watson, puis en effectuant les intégrations sur les positions des centres diffuseurs, on obtient

$$\begin{aligned}\overline{\langle \mathbf{k}'|\mathcal{T}(E)|\mathbf{k}\rangle} =& \Bigg\{ \sum_{i=1}^{N} \langle \mathbf{k}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k}\rangle + \sum_{i,j\neq i} \frac{\langle \mathbf{k}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k}\rangle^2}{E-E_k+i\epsilon} + \sum_{\substack{i,j\neq i\\ k\neq j,k\neq i}} \frac{\langle \mathbf{k}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k}\rangle^3}{(E-E_k+i\epsilon)^2} \\ &+ \sum_{i,j\neq i}\sum_{\mathbf{k_1}} \frac{\langle \mathbf{k}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k_1}\rangle\langle \mathbf{k_1}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k_1}\rangle\langle \mathbf{k_1}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k}\rangle}{(E-E_k+i\epsilon)^2} + \cdots \Bigg\} \delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}. \end{aligned}\tag{1.29}$$

Deux types de termes sont présents dans la série de Watson : les termes sans répétition d'indices de diffuseur et les termes contenant au moins deux indices identiques. Nous appellerons les termes du premier type « séquences ou chaînes directes » et les termes du second type « séquences ou chaînes indirectes ». Nous définissons également la longueur d'une chaîne par le nombre de diffusions subies par la particule incidente. Les chaînes directes représentent des séquences de diffusion où la particule ne rencontre jamais deux fois le même diffuseur (par exemple $(ijklmn)$) et les chaînes indirectes des séquences de diffusion où la particule peut toucher plusieurs fois un même diffuseur durant son trajet (ex. $(ijiklk)$). Devant une chaîne directe de longueur n apparaît un coefficient combinatoire $\frac{N!}{(N-n)!}$ dû à la somme sur les indices des centres diffuseurs : par ex., dans la première ligne de l'équation (1.29), il apparaît les coefficients N, $N(N-1)$ et $N(N-1)(N-2)$. Le coefficient combinatoire d'une chaîne indirecte sera donné par $\frac{N!}{(N-n)!}N_n(s)$ où $N_n(s)$ est fonction du nombre de centres diffuseurs distincts n et du nombre de répétitions s de centres diffuseurs (voir annexe B).

Pour évaluer le propagateur moyen, trois approximations sont couramment utilisées :

- la première consiste à remplacer $\frac{N!}{(N-n)!}$ par N^n dans la limite thermodynamique $N \to \infty$, $V \to \infty$, $N/V = \rho = const$. Souvenons-nous que la matrice $\mathbf{t}$ possède un facteur de normalisation $1/V$ selon nos conventions. Par conséquent, pour chaque chaîne directe , on aura $\frac{N!}{(N-n)!V^n} = \frac{N^n+\mathcal{O}(N^{n-1})}{V^n} = \rho^n + \mathcal{O}(\rho/V)$. Cette approximation surestime le nombre de chaînes faisant intervenir un grand nombre n de diffuseurs ;
- La deuxième approximation consiste à négliger les chaînes indirectes. Nous verrons plus loin que cette approximation exige $Kl \gg 1$, où l est le libre parcours moyen élastique ;
- La troisième est le fait de ne pas tenir compte des corrélations spatiales entre diffuseurs. Ceci n'est valable que si les diffuseurs sont ponctuels.

Avec ces conditions, la série de Watson devient une simple série géométrique (voir la 1re ligne de (1.29)) qui se resomme pour aboutir à l'expression suivante du propagateur

$$\overline{G}_{dir}(E,\mathbf{k}) \approx \frac{1}{E - E_k - N\langle \mathbf{k}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k}\rangle}. \tag{1.30}$$

La notation $\overline{G}_{dir}$ indique que seules les chaînes directes ont été prises en compte pour la moyenne. Le propagateur peut aussi être écrit sous une forme plus souvent usitée [65] qui est celle de l'équation de Dyson :

$$\begin{aligned}\overline{G}_{dir}(E,\mathbf{k}) =& G_0^{(+)}(E,\mathbf{k}) + G_0^{(+)}(E,\mathbf{k})\Sigma(E,\mathbf{k})\overline{G}_{dir}(E,\mathbf{k}) \\ =& \frac{1}{E - E_k - \Sigma(E,\mathbf{k})},\end{aligned} \tag{1.31}$$

où Σ est l'énergie propre. Ici, elle est proportionnelle à la matrice $\mathbf{t}$: $\Sigma \approx N\langle \mathbf{k}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k}\rangle$. La matrice $\mathbf{t}$ étant complexe, ce propagateur possède un pôle en $k = \tilde{K}$ dans le plan complexe.

$$\tilde{K}^2 = K^2 - \Sigma \Rightarrow \tilde{K} \approx K - \Sigma/2K, \tag{1.32}$$

si $|\Sigma/K^2| \ll 1$. La transformée de Fourier inverse de ce propagateur se calcule en prenant comme contour d'intégration le demi-cercle de rayon infini dans le demi-plan supérieur entourant ce pôle. Le théorème des résidus donne, pour un système à trois dimensions,

$$\overline{G}_{dir}(E,\mathbf{r}-\mathbf{r}') \approx -\frac{mV}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i\tilde{K}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \approx -\frac{mV}{2\pi\hbar^2}\frac{e^{i\Re\mathfrak{e}\tilde{K}|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}e^{\frac{-|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}{2l}}, \tag{1.33}$$

où l'on a écrit $\Im\mathfrak{m}\tilde{K} = 1/2l$. La décroissance exponentielle du propagateur indique seulement que l'amplitude de l'onde décroît dans la direction de propagation de l'onde incidente. Elle n'a rien à voir avec la décroissance exponentielle d'un état localisé. Elle est simplement due au fait que la particule incidente change de direction à chaque collision, diminuant ainsi la probabilité de se propager en ligne droite. Cette atténuation exponentielle de l'onde incidente permet de définir l comme le libre parcours moyen élastique . La distance caractéristique l est la distance moyenne entre deux collisions successives et est reliée à la partie imaginaire du pôle. La condition suivant l'équation (1.32) est la condition de milieu diffusif, $Kl \gg 1$. Ces résultats peuvent être retrouvés dans [65, chap. 4].

Nous allons voir que d'autres approximations ont été nécessaires pour arriver à ce résultat :

- la première concerne les éléments de matrice $\mathbf{t}$ eux-mêmes. Si l'on examine en détail l'équation (1.30), on peut remarquer que l'élément de matrice $\mathbf{t}$ apparaissant au dénominateur n'est pas le même que celui apparaissant dans l'expression (1.14) de la section efficace. L'élément de matrice $\mathbf{t}$ du propagateur est *hors couche d'énergie* en ce sens que le vecteur $\mathbf{k}$ peut et doit être de module $k \neq K \equiv \sqrt{2mE}/\hbar$ lorsque l'on calcule la transformée de Fourier inverse de l'expression (1.30). Le pôle du propagateur est déplacé et, par conséquent, le libre parcours moyen est modifié. Une question qui semble souvent contournée dans la littérature [64, 105] est de savoir comment traiter rigoureusement ces effets hors couche d'énergie (*off-the-energy-shell*), qui sont purement quantiques. Le chapitre suivant concerne cette matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie ;
- une autre approximation consiste à ne pas tenir compte du volume exclu (c.-à-d. du fait que les sphères dures ne peuvent pas s'interpénétrer) lors de la prise de moyenne. Nous reviendrons aussi sur cette approximation plus loin et nous verrons dans quelles limites ces différentes approximations peuvent se justifier.

Chapitre 2

Matrice de diffusion hors couche d'énergie

Introduction

Nous avons vu dans le chapitre précédent que la matrice $\mathbf{t}$ apparaît hors couche d'énergie lorsque les relations de fermeture sur les vecteurs d'onde sont insérées dans la série de Watson. La moyenne d'ensemble ne modifie pas ce problème, les matrices $\mathbf{t}$ sont toujours hors couche d'énergie (équation (1.29)). Pourtant, nous savons que nous considérons un processus de diffusion élastique ; l'énergie associée au vecteur d'onde entrant est identique à celle du vecteur d'onde sortant du potentiel et cette énergie est l'énergie physique considérée E. Cet apparent paradoxe survient régulièrement en mécanique quantique car les relations de fermeture impliquent une sommation sur tous les états intermédiaires de l'électron. Lorsque ces états intermédiaires ne peuvent pas être pris physiquement par l'électron, ils sont appelés *états virtuels*. Dans le cas qui nous concerne, les états physiques de l'électron sont tous les états de vecteur d'onde $\mathbf{K}$ avec $|\mathbf{K}| = \sqrt{2mE}/\hbar$ et les états pour lesquels le vecteur d'onde est $\mathbf{p}$ tel que $|\mathbf{p}| \neq |\mathbf{K}|$ sont virtuels. S'il fallait considérer de la diffusion inélastique, alors les états tels que $|\mathbf{p}| \neq |\mathbf{K}|$ seraient également des états physiques. Une solution pour éviter ces problèmes de sommation sur les états virtuels est de choisir une base ne contenant que des états physiques, mais cela n'est pas toujours possible, ni forcément plus simple. En ce qui concerne la diffusion élastique, une base dans laquelle le module du vecteur d'onde est conservé et où seule sa direction peut varier est la base des ondes partielles. L'utilisation de cette base, qui permet d'éviter la manipulation de matrices $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie, fait appel à la méthode des déphasages [67]. Un autre avantage de cette approche est que la matrice $\mathbf{t}$ est diagonale dans cette base, mais le propagateur ne l'est pas. Une revue concernant cette approche est celle de Lloyd [64], dans laquelle les potentiels utilisés sont des potentiels à symétrie sphérique de type « *muffin-tin* ».
Le fait d'avoir une matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie dans le propagateur de l'équation (1.30) déplace le pôle par rapport à la position du pôle du propagateur faisant intervenir une matrice $\mathbf{t}$ sur couche [9].

La matrice $\mathbf{t}(E)$ que nous noterons également $\mathbf{t}_K$ est un opérateur dépendant de l'énergie $E = \hbar^2 K^2/2m$ comme on peut le voir dans l'équation (1.8). Cet opérateur, écrit dans la base des ondes planes, $\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{q}\rangle$, peut être évalué pour des vecteurs d'onde $\mathbf{p}$ et $\mathbf{q}$ absolument quelconques. Lorsque $|\mathbf{p}| \neq |\mathbf{q}| \neq K$, la matrice $\mathbf{t}$ est dite hors couche d'énergie.

Ce chapitre est consacré au calcul de ces éléments de matrice $\mathbf{t}$ hors couche. Nous dériverons dans un premier temps les expressions pour des potentiels de type barrière de hauteur finie à trois dimensions. Le cas du potentiel infini de sphère dure viendra ensuite naturellement en faisant tendre la hauteur de la barrière vers l'infini. Puis nous donnerons les expressions à deux dimensions et également les expressions des matrices $\mathbf{t}$ associées aux potentiel de type puits de profondeur finie et infinie. Enfin, nous terminerons ce chapitre en utilisant les expressions obtenues dans le calcul du propagateur moyen.

2.1 Matrice de diffusion sur un potentiel de hauteur finie

De l'expression formelle du propagateur[1] associé à la diffusion sur un diffuseur, noté g,

$$\mathbf{g} = \mathbf{G}_0^{(+)} + \mathbf{G}_0^{(+)}\mathbf{v}\mathbf{g} = \mathbf{G}_0^{(+)} + \mathbf{G}_0^{(+)}\mathbf{t}\mathbf{G}_0^{(+)},$$

nous obtenons la relation $\mathbf{t}\mathbf{G}_0^{(+)} = \mathbf{v}\mathbf{g}$ et à l'aide de l'expression (1.8), il vient

$$\mathbf{t}_K = \mathbf{v} + \mathbf{v}\,\mathbf{g}_K\,\mathbf{v},$$

où $\mathbf{g}_K$ est une notation simplifiée pour la fonction de Green exacte vérifiant l'équation de Schrödinger pour un seul potentiel sphérique du paragraphe 1.1. L'indice K indique que $\mathbf{t}_K$ et $\mathbf{g}_K$ sont pris à l'énergie physique $E \equiv \hbar^2 K^2/2m$. Dans la base des ondes planes, l'élément de matrice $\mathbf{t}$ se décompose en deux parties [77].

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{q}\rangle &= \frac{1}{V}\left[\mathcal{I}_1 + \mathcal{I}_2\right] \\
&= \frac{1}{V}\int d\mathbf{r} e^{-i\mathbf{p}.\mathbf{r}} v(r) e^{i\mathbf{q}.\mathbf{r}} \\
&+ \frac{1}{V}\int d\mathbf{r}\int d\mathbf{r}' e^{-i\mathbf{p}.\mathbf{r}} v(r) g_K(\mathbf{r},\mathbf{r}') v(r') e^{i\mathbf{q}.\mathbf{r}'}.
\end{aligned} \tag{2.1}$$

La particule d'énergie E diffuse sur la barrière de potentiel $v(r)$ définie par

$$v(r) = \frac{\hbar^2}{2m} U(r) = \begin{cases} v_0 = \frac{\hbar^2}{2m} U_0 & \text{si } r \leq a \\ 0 & \text{si } r > a. \end{cases}$$

Le premier terme $\mathcal{I}_1$ de l'équation (2.1) est évalué en décomposant les ondes planes en ondes partielles (voir l'équation (A.34)). Pour $|\mathbf{p}| \neq |\mathbf{q}|$, il s'écrit

$$\mathcal{I}_1 = \frac{2\pi\hbar^2}{m} U_0 \frac{a^2}{p^2 - q^2} \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) P_l(\cos(\widehat{\mathbf{p},\mathbf{q}})) \Big[q j_l(pa) j_{l-1}(qa) - p j_{l-1}(pa) j_l(qa) \Big]. \tag{2.2}$$

Le calcul du deuxième terme $\mathcal{I}_2$ utilise le développement du propagateur g_K en ondes partielles [68].

$$g_K(\mathbf{r},\mathbf{r}') = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1) P_l(\cos(\widehat{\mathbf{r},\mathbf{r}'})) g_K^{(l)}(r,r'), \tag{2.3a}$$

avec

$$g_K^{(l)}(r,r') = \frac{\chi_{1K}^l(r_<)\chi_{2K}^l(r_>)}{r'^2\Delta} \tag{2.3b}$$

1. Nous utilisons la lettre minuscule g pour différencier ce propagateur du propagateur G décrivant la propagation dans un système de N potentiels.

où $r_< = min(r,r')$, $r >= max(r,r')$, ${\chi_{1K}}^l$ et ${\chi_{2K}}^l$ sont deux solutions de l'équation Schrödinger radiale à trois dimensions

$$\Big[\frac{1}{r^2}\frac{d}{dr}(r^2\frac{d}{dr}) - \frac{l(l+1)}{r^2} + K^2 - U(r)\Big]\chi^l_K(r) = 0$$

correspondant à différentes conditions aux limites. En effet,

$$\chi^l_{1K}(r) = \begin{cases} A_l i_l(kr) & r \leq a \\ B_l j_l(Kr) + C_l n_l(Kr) & r > a \end{cases} \tag{2.3c}$$

avec $k = \sqrt{U_0 - K^2}$ et $U_0 > K^2$, correspond à une solution régulière en $r = 0$ et

$$\chi^l_{2K}(r) = \begin{cases} D_l i_l(kr) + E_l k_l(kr) & r \leq a \\ F_l h^{(1)}_l(Kr) & r > a \end{cases} \tag{2.3d}$$

à une solution régulière pour $r \to \infty$.
Les coefficients A_l,B_l,C_l,D_l,E_l,F_l sont fixés par les conditions de continuité en $r = a$. Les fonctions j_l,n_l,i_l,k_l et ${h_l}^{(1)}$ sont respectivement les fonctions de Bessel, Neumann, Bessel modifiée du premier type, Bessel modifiée du second type et Hankel sphériques [67, 97]. Dans l'équation (2.3b), Δ représente le wronskien pris en r'

$$\begin{aligned} \Delta &= \chi^l_{1K}(r')\frac{d}{dr'}\chi^l_{2K}(r') - \chi^l_{2K}(r')\frac{d}{dr'}\chi^l_{1K}(r') \\ &= -A_l E_l / k{r'}^2. \end{aligned}$$

L'onde l de la fonction de Green devient alors

$$g^{(l)}_K(r,r') = -\frac{k}{A_l E_l}\chi^l_{1K}(r_<)\chi^l_{2K}(r_>). \tag{2.3e}$$

Le second terme $\mathcal{I}_2$ de l'équation (2.1) peut maintenant être évalué explicitement en décomposant encore une fois les ondes planes et le propagateur g_K en ondes partielles.

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_2 &= (\frac{\hbar^2}{2m})^2 \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}\,' e^{-i\mathbf{p}.\mathbf{r}} U(r) g_K(\mathbf{r},\mathbf{r}') U(r') e^{i\mathbf{q}.\mathbf{r}} \\ &= (\frac{\hbar^2}{2m})^2 \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}' \; [4\pi \sum_{l_1=0}^{+\infty} \sum_{m_1=-l_1}^{+l_1} (-i)^{l_1} j_{l_1}(pr) Y^{m_1 *}_{l_1}(\widehat{\mathbf{p}}) Y^{m_1}_{l_1}(\widehat{\mathbf{r}})] \\ &\quad \times U(r)\Big[\frac{2m}{\hbar^2} \sum_{l_2=0}^{+\infty} \sum_{m_2=-l_2}^{+l_2} g^{(l_2)}_K(r,r') Y^{m_2 *}_{l_2}(\widehat{\mathbf{r}}) Y^{m_2}_{l_2}(\widehat{\mathbf{r}'})\Big] \\ &\quad \times U(r')\Big[4\pi \sum_{l_3=0}^{+\infty} \sum_{m_3=-l_3}^{+l_3} i^{l_3} j_{l_3}(qr') Y^{m_3}_{l_3}(\widehat{\mathbf{q}}) Y^{m_3 *}_{l_3}(\widehat{\mathbf{r}'})\Big]. \end{aligned}$$

Au moyen des relations d'orthonormalisation des harmoniques sphériques (A.37), l'expression se simplifie pour donner

$$\mathcal{I}_2 = 4\pi\frac{\hbar^2}{2m}{U_0}^2 \sum_{l=0}^{+\infty} (2l+1) P_l(\cos(\widehat{\mathbf{p},\mathbf{q}})) \times I,$$

avec

$$I = \int_0^a r^2 dr \int_0^a r'^2 dr' j_l(pr) g_K^{(l)}(r,r') j_l(qr').$$

Soit, en utilisant les équations (2.3),

$$I = \frac{-k}{A_l E_l} \int_0^a r^2 dr j_l(pr) \Big\{ \chi_{1K}^l(r) \int_r^a r'^2 dr' \chi_{2K}^l(r') j_l(qr') \\ + \chi_{2K}^l(r) \int_0^r r'^2 dr' \chi_{1K}^l(r') j_l(qr') \Big\}.$$

Les différentes intégrales sont évaluées à l'aide des équations (A.35) puis simplifiées par la relation du wronskien (A.32). La quantité I se met sous la forme

$$I = -\frac{ka^2}{(q^2+k^2)} \Big\{ \frac{a^2}{(p^2+k^2)} \big(pj_{l-1}(pa) i_l(ka) - kj_l(pa) i_{l-1}(ka) \big) \\ \times \Big[\big(kj_l(qa) k_{l-1}(ka) + qj_{l-1}(qa) k_l(ka) \big) + \frac{D_l}{E_l} \big(qj_{l-1}(qa) i_l(ka) - kj_l(qa) i_{l-1}(ka) \big) \Big] \\ + \frac{1}{k(p^2-q^2)} \big(qj_{l-1}(qa) j_l(pa) - pj_l(qa) j_{l-1}(pa) \big) \Big\}.$$

Le rapport D_l/E_l s'obtient grâce à la continuité de la fonction $\chi_{2K}^l(r)$ et de sa dérivée en $r = a$.

$$\begin{cases} D_l i_l(ka) + E_l k_l(ka) &= F_l h_l^{(1)}(Ka) \\ k(D_l i_l(ka)' + E_l k_l(ka)') &= K F_l h_l^{(1)}(Ka)', \end{cases}$$

où le symbole $'$ représente la dérivation par rapport à l'argument de la fonction. Il est donné par

$$\frac{D_l}{E_l} = -\frac{k h_l^{(1)}(Ka) k_{l-1}(ka) + K h_{l-1}^{(1)}(Ka) k_l(ka)}{K h_{l-1}^{(1)}(Ka) i_l(ka) - k i_{l-1}(ka) h_l^{(1)}(Ka)}.$$

Après quelques manipulations faisant intervenir les wronskiens des différentes fonctions de Bessel, I se met finalement sous la forme

$$\begin{aligned} I &= \frac{a^2}{(q^2+k^2)(p^2+k^2)} \left[\frac{kj_l(pa) i_{l-1}(ka) - pj_{l-1}(pa) i_l(ka)}{K h_{l-1}^{(1)}(Ka) i_l(ka) - k i_{l-1}(ka) h_l^{(1)}(Ka)} \right] \\ &\quad \times \left[K j_l(qa) h_{l-1}^{(1)}(Ka) - q j_{l-1}(qa) h_l^{(1)}(Ka) \right] \\ &\quad - \frac{a^2}{(q^2+k^2)(p^2-q^2)} \left[q j_l(pa) j_{l-1}(qa) - p j_{l-1}(pa) j_l(qa) \right]. \end{aligned}$$

L'élément de matrice $\mathbf{t}$ pour une barrière de hauteur U_0 s'écrit

$$\boxed{\begin{aligned}\langle\mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{q}\rangle &= \frac{2\pi\hbar^2}{mV}\frac{U_0a^2}{q^2+U_0-K^2}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)P_l(\cos(\widehat{\mathbf{p},\mathbf{q}}))\\ &\times\left\{\frac{q^2-K^2}{p^2-q^2}\Big[qj_l(pa)j_{l-1}(qa)-pj_{l-1}(pa)j_l(qa)\Big]\right.\\ &+\frac{U_0}{p^2+U_0-K^2}\left[\frac{kj_l(pa)i_{l-1}(ka)-pj_{l-1}(pa)i_l(ka)}{kh_l^{(1)}(Ka)i_{l-1}(ka)-Kh_{l-1}^{(1)}(Ka)i_l(ka)}\right]\\ &\left.\times\Big[qh_l^{(1)}(Ka)j_{l-1}(qa)-Kh_{l-1}^{(1)}(Ka)j_l(qa)\Big]\right\},\end{aligned}} \tag{2.4}$$

avec $k=\sqrt{U_0-K^2}$. L'expression de la matrice $\mathbf{t}$ sur couche est retrouvée lorsque $p=q=K$ dans l'équation (2.4).

$$\langle\mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{q}\rangle = \frac{2\pi\hbar^2}{mKV}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)P_l(\cos(\widehat{\mathbf{p},\mathbf{q}}))\times\left[\frac{kj_l(Ka)i_{l-1}(ka)-Kj_{l-1}(Ka)i_l(ka)}{ki_{l-1}(ka)h_l^{(1)}(Ka)-Kh_{l-1}^{(1)}(Ka)i_l(ka)}\right].$$

Cette expression est celle de la diffusion élastique sur une barrière de hauteur finie [81]. Les fonctions de Bessel sphériques modifiées $i_l(ka)$ apparaissent parce que nous avons considéré la diffusion d'une particule d'énergie cinétique inférieure à l'énergie potentielle, *i.e.* $k>0$. Elles atténuent l'onde qui pénètre dans le potentiel. Lorsque l'énergie cinétique de la particule est plus grande que l'énergie potentielle, les fonctions de Bessel modifiées peuvent se mettre sous la forme de fonctions de Bessel sphériques normales. En effet, si $K^2>U_0$, alors k est purement imaginaire et peut s'écrire $k=ik'$; la fonction de Bessel sphérique modifiée $i_l(ka)$ devient $i^lj_l(k'a)$ d'après les relations (A.23) et (A.28). Alors l'onde à l'intérieur du potentiel n'est plus atténuée mais se propage avec une vitesse différente. Ce potentiel est susceptible de représenter un milieu d'indice de réfraction différent de l'indice du milieu environnant (choisi comme étant le vide dans notre cas).

2.2 Matrice de diffusion sur une sphère dure

2.2.1 Expression générale

La diffusion sur une sphère dure correspond à un potentiel U_0 infini. La fonction d'onde ne peut pas pénétrer à l'intérieur du potentiel. Pour obtenir l'expression d'un élément de matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie d'une sphère dure, il suffit de reprendre les expressions précédentes et de faire tendre U_0 vers l'infini. Remarquons que les limites $U_0\to\infty$ et $a\to 0$ ne commutent pas. L'étude portant sur les potentiels de taille finie, a est gardé non nul avant tout. Ainsi, $k=\sqrt{U_0-K^2}\to+\infty$ et $i_l(ka)\to e^{ka}/2ka\to\infty$, ce qui conduit à

$$\frac{kj_l(pa)i_{l-1}(ka)-pj_{l-1}(pa)i_l(ka)}{ki_{l-1}(ka)h_l^{(1)}(Ka)-Kh_{l-1}^{(1)}(Ka)i_l(ka)}\to\frac{j_l(pa)}{h_l^{(1)}(Ka)}$$

dans l'expression (2.4). L'élément de matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie décrivant la diffusion sur une sphère dure s'écrit alors

$$\boxed{\begin{aligned}\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{q}\rangle = & \frac{2\pi\hbar^2}{mV}a^2\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)P_l(\cos(\widehat{\mathbf{p},\mathbf{q}})) \\ & \times\left\{\frac{q^2-K^2}{p^2-q^2}\Big[qj_l(pa)j_{l-1}(qa)-pj_{l-1}(pa)j_l(qa)\Big]\right. \\ & \left.+qj_l(pa)j_{l-1}(qa)-Kj_l(pa)j_l(qa)\frac{h_{l-1}^{(+)}(Ka)}{h_l^{(+)}(Ka)}\right\}.\end{aligned}} \tag{2.5}$$

Il dépend de l'énergie $E = \hbar^2K^2/2m$ et des vecteurs d'onde $\mathbf{p}$, $\mathbf{q}$. Nous avons utilisé la notation $h_l^{(+)}(Ka) \equiv ih_l^{(1)}(Ka)$ qui est plus couramment employée que $h_l^{(1)}(Ka)$ dans les problèmes de diffusion [67]. L'apparente singularité en $p = q$ dans l'équation (2.5) n'en est pas une. On peut s'en persuader en calculant la limite de l'élément de matrice lorsque p tend vers q, ou bien on peut utiliser la forme intégrale (A.35a) puis poser $p = q$ pour obtenir l'intégrale (A.35b). C'est ce qui a été fait pour dériver les expressions du prochain paragraphe.

2.2.2 Cas particuliers

Éléments de matrice de diffusion élastique

Nous avons vu dans le chapitre précédent que les éléments de matrice $\mathbf{t}$ diagonaux apparaissent dans le propagateur moyen resommé. Le fait de prendre la moyenne efface la dépendance dans la position des diffuseurs et rend le milieu homogène. Cette homogénéité implique une invariance par translation du système. Et c'est cette invariance par translation qui conduit aux éléments de matrice $\mathbf{t}$ hors couche diagonaux. Nous donnons ici l'expression des éléments de matrice de diffusion élastiques pour lesquels $|\mathbf{p}| = |\mathbf{q}|$. Les éléments de matrice $\mathbf{t}$ diagonaux sont obtenus pour un angle nul entre les deux vecteurs d'onde. Lorsque $|\mathbf{p}| = |\mathbf{q}|$ et K quelconque, l'expression (2.5) s'écrit

$$\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{q}\rangle = \frac{\hbar^2}{2mV}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)P_l(\cos(\widehat{\mathbf{p},\mathbf{q}}))\langle p|\mathbf{t}_K|p\rangle_l, \tag{2.6a}$$

avec

$$\begin{aligned}\langle p|\mathbf{t}_K|p\rangle_l = & 4\pi a^2\left\{\frac{a}{2}(p^2-K^2)\left[(j_l(pa))^2-j_{l-1}(pa)j_{l+1}(pa)\right]\right. \\ & \left.+pj_l(pa)j_{l-1}(pa)-K(j_l(pa))^2\frac{h_{l-1}^{(+)}(Ka)}{h_l^{(+)}(Ka)}\right\}.\end{aligned} \tag{2.6b}$$

Éléments de matrice semi hors couche d'énergie

Nous définissons l'élément de matrice semi hors couche d'énergie par le fait que le bra ou le ket de l'élément de matrice $\mathbf{t}$ est sur couche, *i.e.* possède l'énergie E associée à l'opérateur $\mathbf{t}(E)$. Il y a donc deux types de matrice $\mathbf{t}$ semi hors couche. Partant de l'équation (2.5) et posant $\mathbf{q} = \mathbf{K}$, nous avons, grâce aux relations du wronskien (A.32),

$$\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{K}\rangle = \frac{\hbar^2}{2mV}\frac{4\pi}{K}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)P_l(\cos(\widehat{\mathbf{p},\mathbf{K}}))\frac{j_l(pa)}{h_l^{(+)}(Ka)}. \tag{2.7}$$

Pour $\mathbf{p} = \mathbf{K}$, et après quelques manipulations de wronskiens, nous obtenons la même forme pour l'autre élément de matrice semi hors couche.

$$\langle \mathbf{K}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{q}\rangle = \frac{\hbar^2}{2mV}\frac{4\pi}{K}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)P_l(\cos(\widehat{\mathbf{K},\mathbf{q}}))\frac{j_l(qa)}{h_l^{(+)}(Ka)}.$$

Ce type d'éléments de matrice sera utile par la suite.

Éléments de matrice sur couche

L'élément de matrice $\mathbf{t}$ sur couche est directement obtenu en mettant l'équation (2.7) sur couche, *i.e.* en posant $p = K$.

$$\langle \mathbf{K}'|\mathbf{t}(E)|\mathbf{K}\rangle = \frac{\hbar^2}{2mV}\frac{4\pi}{K}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)P_l(\cos(\widehat{\mathbf{p},\mathbf{K}}))\frac{j_l(Ka)}{h_l^{(+)}(Ka)}. \tag{2.8}$$

Ici, les vecteurs d'onde entrant et sortant sont à la même énergie $K' = K$. Cette expression est identique à l'expression (1.10) évaluée à l'aide de la forme asymptotique de la fonction d'onde.

Théorème optique

Nous montrons ci-après que la relation (1.15) se généralise pour la matrice $\mathbf{t}$ hors couche.

$$\begin{aligned}
&V\int\frac{\mathbf{dp}'}{(2\pi)^3}\left|\langle\mathbf{p}'|\mathbf{t}_K|\mathbf{p}\rangle\right|^2\delta(E_{p'}-E_K)\\
&\quad=\frac{\hbar^2}{2mV}\frac{1}{(2\pi)^2}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)\int_0^{\infty}p'\,d(p'^2)\left|\langle p'|\mathbf{t}_K|p\rangle_l\right|^2\delta(p'^2-K^2)\\
&\quad=\frac{\hbar^2}{2mV}\frac{1}{(2\pi)^2}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)\,K\,\left|\langle K|\mathbf{t}_K|p\rangle_l\right|^2\\
&\quad=\frac{\hbar^2}{2mV}\frac{4}{K}\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)\frac{j_l(pa)^2}{n_l(Ka)^2+j_l(Ka)^2}=-\frac{1}{\pi}\mathfrak{Im}\langle\mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{p}\rangle.
\end{aligned}$$

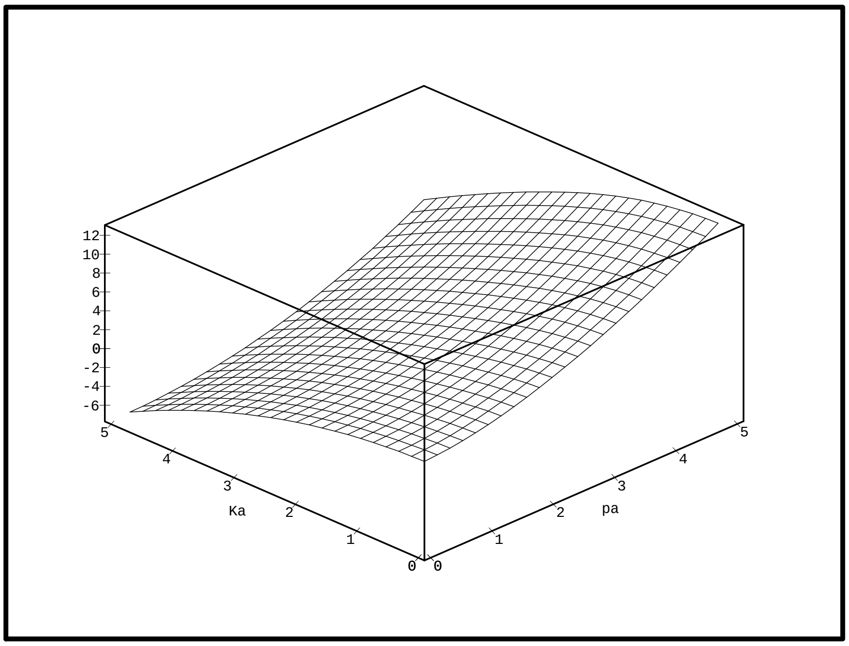
D'où, finalement, la relation

$$\boxed{-\frac{1}{\pi}\mathfrak{Im}\langle\mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{p}\rangle = V\int\frac{\mathbf{dp}'}{(2\pi)^3}\left|\langle\mathbf{p}'|\mathbf{t}_K|\mathbf{p}\rangle\right|^2\delta(E_{p'}-E_K)} \tag{2.9}$$

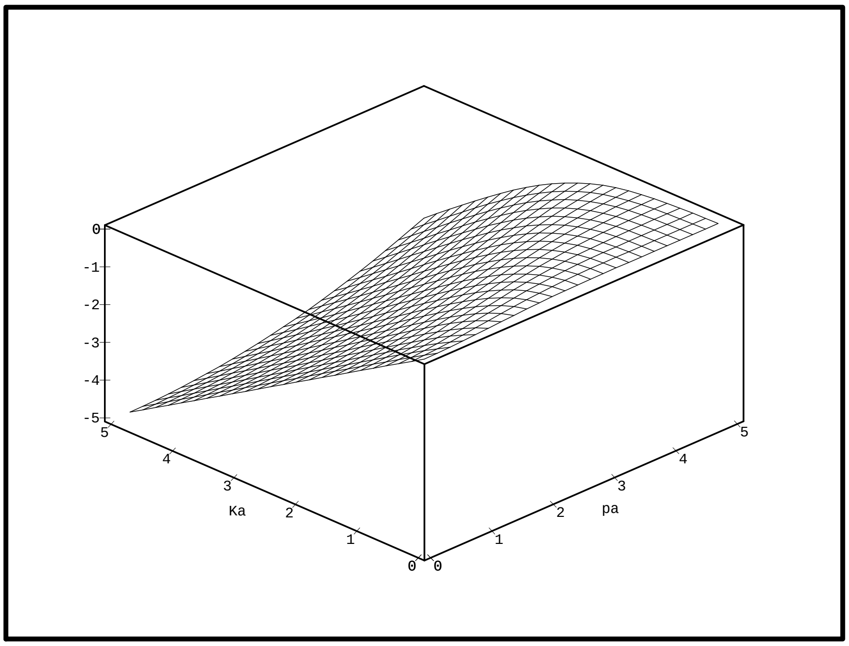
qui vérifie le théorème optique pour la matrice $\mathbf{t}$ hors couche.

2.2.3 Comportement des éléments de matrice diagonaux

Sachant que ce type d'élément de matrice apparaît dans le propagateur, il est intéressant d'étudier son comportement dans les régimes des faibles impulsions, de basse énergie ou autour de sa valeur sur couche. Nous avons tracé à l'aide du logiciel MAPLE les parties réelle et imaginaire de ces éléments de matrice $\mathbf{t}$ sur un domaine $pa, Ka \in [0,5]$ dans les figures 2.1.



Partie réelle.



Partie imaginaire.

Fig. 2.1 – *Élément de matrice diagonal* $\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{p}\rangle$ *à trois dimensions.*

Comportement à basse impulsion

Ce régime est important dans le cas des gaz de Bose [32], où les impulsions sont faibles. La matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie à impulsion nulle permet de calculer la densité d'énergie de l'état fondamental E_0 d'un gaz de Bose et son potentiel chimique μ par les relations [19]

$$E_0 \approx \frac{1}{2}\frac{N^2}{V}|\langle \mathbf{0}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{0}\rangle| \qquad \text{et} \qquad \mu \approx N|\langle \mathbf{0}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{0}\rangle|.$$

Un développement en puissances de pa donne

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{p}\rangle &= \frac{2\pi\hbar^2}{mV}a\Bigg[1-\frac{(Ka)^2}{3}-iKa \\ &+ \frac{(pa)^2}{3}\left(3-\frac{(Ka)^2}{5}-\frac{(Ka)^2}{1+(Ka)^2}-i\frac{(Ka)^3}{1+(Ka)^2}\right)+\mathcal{O}((pa)^4)\Bigg]. \quad (2.10)\end{aligned}$$

Les figures 2.1 confirment le comportement quadratique de la partie réelle et linéaire de la partie imaginaire à basse impulsion. On peut voir ici que les effets hors couche d'énergie apparaissent à l'ordre a^3 (au même ordre que le volume de la sphère dure).

Comportement autour de la valeur sur couche et à basse énergie

Un développement de Taylor autour de $p = K$ conduit à

$$\langle p|\mathbf{t}_K|p\rangle_l = \frac{4\pi}{K}\frac{j_l(Ka)}{h_l^{(+)}(Ka)} + (p-K)\frac{8\pi a}{Kh_l^{(+)}(Ka)}\frac{\partial j_l(pa)}{\partial(pa)}\bigg|_{pa=Ka} + \mathcal{O}((p-K)^2). \quad (2.11)$$

Ce développement est utile pour le calcul des corrections au libre parcours moyen dues à la matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie.

Puisque la partie réelle de la matrice $\mathbf{t}$ contient des termes ne dépendant que de p, il n'y a pas de simplification pour $Ka \to 0$. Par contre, la partie imaginaire donne

$$\mathfrak{Im}\langle p|\mathbf{t}_K|p\rangle = -\frac{\hbar^2}{2mV}4\pi a(Kaj_0^2(pa)+\mathcal{O}((Ka)^3)). \quad (2.12)$$

Pour tracer les figures 2.1, nous avons dû tronquer la série sur les ondes partielles. Pour cela, nous avons implémenté un programme nous donnant le nombre minimum d'ondes partielles nécessaires pour obtenir une valeur de l'élément de matrice à la précision souhaitée en fonction de l'énergie Ka et de l'impulsion pa. Nous avons introduit deux coupures, l^r_{max} et l^i_{max}, l'une pour la partie réelle de la matrice $\mathbf{t}$ et l'autre pour sa partie imaginaire. Pour que la partie réelle

$$\mathfrak{Re}\langle p|\mathbf{t}_K|p\rangle_l \simeq \sum_{l=0}^{l^r_{max}}(2l+1)\langle p|\mathbf{t}_K|p\rangle_l$$

soit une bonne approximation (la prise en compte d'une onde partielle supplémentaire ne change la valeur que de 1% environ), il faut que $l^r_{max} \approx pa$. Ce critère est du même type que celui donné par Messiah [67, p. 335] permettant de tronquer la série (2.8) à $l \approx Ka$. Le fait que l^r_{max} ne dépende pas de Ka nous incite à penser qu'il sera nécessaire de tenir compte de toutes les ondes partielles dans l'expression de la matrice $\mathbf{t}$ si l'on doit intégrer sur l'impulsion p. Ceci vient du fait que la partie réelle de $\mathbf{t}$ ne s'annule pas avec Ka. Nous verrons plus loin comment contourner ce problème. Pour la partie imaginaire, nous trouvons $l^i_{max} \approx min(pa,Ka)$, montrant ainsi qu'à basse énergie ($Ka \ll 1$), la partie imaginaire de la matrice $\mathbf{t}$ sera bien prise en compte par l'onde s ($l = 0$) seule. Cette remarque est importante car cette partie imaginaire est reliée au libre parcours moyen élastique.

2.3 Matrice de diffusion sur un disque

2.3.1 Expression générale

La matrice $\mathbf{t}$ hors couche à deux dimensions est dérivée de la même façon que celle à trois dimensions. Nous commençons par considérer un potentiel de hauteur finie U_0, et nous répétons pas à pas la dérivation faite au paragraphe 2.1. Les fonctions de Bessel sphériques sont remplacées par des fonctions de Bessel ordinaires notées à l'aide de majuscules. La partie radiale de l'équation de Schrödinger à deux dimensions s'écrit

$$[\frac{1}{r}\frac{d}{dr}(r\frac{d}{dr}) + (K^2 - U_0) - \frac{m^2}{r^2}]\chi^m_K(r) = 0.$$

Elle a deux solutions, l'une régulière en $r = 0$:

$$\chi^m_{1K}(r) = \begin{cases} A_m I_m(kr) & r \leq a \\ B_m J_m(Kr) + C_m N_m(Kr) & r > a \end{cases}, \tag{2.13}$$

(avec $k = \sqrt{U_0 - K^2}$) et l'autre régulière pour $r \to +\infty$:

$$\chi^m_{2K}(r) = \begin{cases} D_m I_m(kr) + E_m K_m(kr) & r \leq a \\ F_m H^{(1)}_m(Kr) & r > a \end{cases}. \tag{2.14}$$

${H_m}^{(1)}$ est la fonction de Hankel du premier type (${H_m}^{(1)} = J_m + iN_m$). La fonction de Green est [68]

$$\begin{aligned} g_K(\mathbf{r},\mathbf{r}') &= \frac{m}{\pi\hbar^2}\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta-\theta')} g^{(m)}_K(r,r'), \\ &\text{avec} \\ g^{(m)}_K(r,r') &= -\frac{\chi^m_{1K}(r_<)\chi^m_{2K}(r_>)}{A_m E_m}. \end{aligned} \tag{2.15}$$

Répétant la même procédure qui, partant de la définition (2.1), a conduit à l'expression finale de l'élément de matrice $\mathbf{t}$ (2.4), nous arrivons à

$$\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{q}\rangle = \frac{\hbar^2}{2mV}\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta_p-\theta_q)}\langle p|\mathbf{t}_K|q\rangle_m \tag{2.16}$$

où

$$\begin{aligned} \langle p|\mathbf{t}_K|q\rangle_m = &\frac{2\pi a U_0}{q^2 + U_0 - K^2}\Bigg\{\frac{q^2 - K^2}{p^2 - q^2}\Big[qJ_m(pa)J_{m-1}(qa) - pJ_{m-1}(pa)J_m(qa)\Big] \\ &+ \frac{U_0}{p^2 + U_0 - K^2}\Big[\frac{kJ_m(pa)I_{m-1}(ka) - pJ_{m-1}(pa)I_m(ka)}{kI_{m-1}(ka)H^{(1)}_m(Ka) - KI_m(ka)H^{(1)}_{m-1}(Ka)}\Big] \\ &\times\Big[qJ_{m-1}(qa)H^{(1)}_m(Ka) - KJ_m(qa)H^{(1)}_{m-1}(Ka)\Big]\Bigg\}. \end{aligned}$$

2.3.2 Matrice de diffusion sur un disque dur

Expression générale

La matrice de diffusion sur un disque dur est obtenue pour $U_0 \to +\infty$.

$$\boxed{\begin{aligned}\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{q}\rangle = {} & \frac{\hbar^2}{2mV}2\pi a \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta_p-\theta_q)} \\ & \left\{ \frac{q^2-K^2}{(p^2-q^2)}(qJ_m(pa)J_{m-1}(qa) - pJ_{m-1}(pa)J_m(qa)) \right. \\ & \left. +qJ_m(pa)J_{m-1}(qa) - KJ_m(qa)J_m(pa)\frac{H^{(1)}_{m-1}(Ka)}{H^{(1)}_m(Ka)} \right\}.\end{aligned}} \tag{2.17}$$

Le premier terme de cette expression peut être en partie resommé pour donner (cf. annexe D)

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{q}\rangle = {} & -\frac{\hbar^2}{2mV}2\pi a \left[\frac{J_1(|\mathbf{p}-\mathbf{q}|a)}{|\mathbf{p}-\mathbf{q}|}(K^2 - pqe^{i(\theta_p-\theta_q)}) \right. \\ & \left. + K\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta_p-\theta_q)} J_m(pa)J_m(qa)\frac{H^{(1)}_{m-1}(Ka)}{H^{(1)}_m(Ka)} \right].\end{aligned} \tag{2.18}$$

Bien que plus simple que (2.17), cette expression ne sera pas d'une grande utilité par la suite, puisque l'intégration sur une impulsion ne peut se faire simplement qu'avec l'expression (2.17).

Éléments de matrice semi hors couche

Comme dans le cas à trois dimensions, les éléments de matrice $\mathbf{t}$ semi hors couche sont

$$\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{q}\rangle = -\frac{2i\hbar^2}{mV}\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta_p-\theta_q)}\frac{J_m(pa)}{H^{(1)}_m(Ka)},$$

si $q = K$ et

$$\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{q}\rangle = -\frac{2i\hbar^2}{mV}\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta_p-\theta_q)}\frac{J_m(qa)}{H^{(1)}_m(Ka)},$$

si $p = K$.

Éléments de matrice diagonaux

En utilisant les équations (A.12) et en posant $\mathbf{p} = \mathbf{q}$ dans l'expression (2.18), on obtient

$$\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{p}\rangle = -\frac{\hbar^2}{2mV}2\pi a\left[\frac{a}{2}(K^2-p^2) + K\sum_{m=-\infty}^{+\infty}(J_m(pa))^2\frac{H^{(1)}_{m-1}(Ka)}{H^{(1)}_m(Ka)}\right]. \tag{2.19}$$

Éléments de matrice sur couche

Il suffit de poser $p = q = K$ dans l'expression précédente et d'utiliser la relation du wronskien (A.11).

$$\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{q}\rangle = -\frac{2i\hbar^2}{mV}\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta_p-\theta_q)}\frac{J_m(Ka)}{H_m^{(1)}(Ka)}, \tag{2.20}$$

θ étant l'angle entre les vecteurs d'onde $\mathbf{p}$ et $\mathbf{q}$.

Comportement dans la limite du diffuseur ponctuel

À la limite où le rayon du potentiel $a \to 0$, c.-à-d. à la limite où le diffuseur devient ponctuel, la matrice $\mathbf{t}$ s'écrit

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{p}\rangle = \frac{\hbar^2}{2mV}\Bigg\{ & \frac{-4i}{1+\frac{2i}{\pi}(\ln\frac{Ka}{2}+\gamma)} \\ & + \left(2\pi p^2 - \frac{2i(K^2-p^2)}{1+\frac{2i}{\pi}(\ln\frac{Ka}{2}+\gamma)} - \frac{2K^2}{\pi[1+\frac{2i}{\pi}(\ln\frac{Ka}{2}+\gamma)]^2}\right)a^2 + \mathcal{O}(a^3)\Bigg\}.\end{aligned} \tag{2.21}$$

Ce développement montre que les corrections hors couche d'énergie (*i.e.* la dépendance en p) n'apparaissent qu'à l'ordre 2 en a. Pour des diffuseurs supposés ponctuels, les effets hors couche sont négligeables. Ces effets hors couche sont intrinsèquement liés au volume du diffuseur et il paraît évident que ceux-ci devront jouer un rôle dans tout calcul désirant tenir compte du volume exclu. Dans cette limite de diffuseurs ponctuels, le terme dominant de la matrice $\mathbf{t}$ devient indépendant des impulsions et les calculs en sont considérablement simplifiés [96]. Cette simplification est le reflet du manque d'information sur la taille du diffuseur. Celle-ci ne peut pas être résolue par la particule incidente.

2.3.3 Matrice t pour un puits de profondeur finie

Expression générale

Nous donnons ici les expressions des éléments de matrice $\mathbf{t}$ pour des puits de profondeur finie. Ces types de potentiels sont également intéressants car ils comportent des effets physiques supplémentaires, à savoir des résonances. Ces résonances « retiennent » la particule dans le potentiel durant un certain temps (appelé temps de délai de Wigner). Ce temps s'ajoute au temps de collision et a pour conséquence directe d'augmenter le libre parcours moyen élastique ($l = v\tau$). Selon [56, p. 167], le temps de délai peut être extrait à partir de la fonction d'onde stationnaire à condition de connaître celle-ci dans tout l'espace. La matrice $\mathbf{t}$ hors couche permet justement de connaître la fonction d'onde de façon exacte en tout point.

Le puits de potentiel est défini par

$$\frac{2m}{\hbar^2}V(\mathbf{r}) = U(\mathbf{r}) = \begin{cases} -U_0 < 0 & \text{pour} \quad |\,\mathbf{r}\,| \leq a \\ 0 & \text{pour} \quad |\,\mathbf{r}\,| \geq a \end{cases}. \tag{2.22}$$

La matrice $\mathbf{t}$ hors couche pour ce potentiel est

$$\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{q}\rangle = \frac{\hbar^2}{2mV}\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\theta_p-\theta_q)}\langle p|\mathbf{t}_K|q\rangle_m, \tag{2.23a}$$

avec

$$\begin{aligned}\langle p|\mathbf{t}_K|q\rangle_m =& 2\pi a\frac{U_0}{q^2-U_0-K^2}\left\{\frac{q^2-K^2}{q^2-p^2}\left[qJ_m(pa)J_{m-1}(qa)-pJ_{m-1}(pa)J_m(qa)\right]\right.\\ &+\frac{U_0}{p^2-U_0-K^2}\frac{qH_m^{(1)}(Ka)J_{m-1}(qa)-KH_{m-1}^{(1)}(Ka)J_m(qa)}{kH_m^{(1)}(Ka)J_{m-1}(ka)-KH_{m-1}^{(1)}(Ka)J_m(ka)}\\ &\left.\times\left(kJ_m(pa)J_{m-1}(ka)-pJ_{m-1}(pa)J_m(ka)\right)\right\},\end{aligned} \tag{2.23b}$$

où $k=\sqrt{K^2+U_0}$. Les résonances sont données par les valeurs de K pour lesquelles le dénominateur intervenant dans la matrice $\mathbf{t}$ devient proche de 0, augmentant ainsi considérablement l'amplitude de diffusion. Nous n'aurons cependant pas l'occasion d'approfondir l'influence de ces résonances en présence de désordre. Les effets engendrés par les résonances sont discutés de façon pédagogique dans [56] pour le cas de la diffusion de la lumière dans les systèmes désordonnés.

Puits de profondeur infinie

De la même façon que nous avons évalué la matrice $\mathbf{t}$ pour un disque dur, nous pouvons prendre la limite d'un potentiel infiniment profond $U_0\to\infty\Rightarrow ka\to\infty$. L'expression asymptotique (A.10) des fonctions de Bessel permet d'obtenir la matrice $\mathbf{t}$ pour ce potentiel.

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{q}\rangle &= \frac{\hbar^2}{2mV}2\pi a\sum_{m=-\infty}^{+\infty}e^{im(\theta_p-\theta_q)}\\ &\left\{\frac{q^2-K^2}{(p^2-q^2)}\left(qJ_m(pa)J_{m-1}(qa)-pJ_{m-1}(pa)J_m(qa)\right)\right.\\ &\left.+qJ_m(pa)J_{m-1}(qa)-KJ_m(qa)J_m(pa)\frac{H_{m-1}^{(1)}(Ka)}{H_m^{(1)}(Ka)}\right\}.\end{aligned}$$

Cette matrice $\mathbf{t}$ est la même que dans le cas des disques durs — équ. (2.17). Cependant, cette expression n'est valable que si la condition $J_{m-1}(ka)\neq 0$ est vérifiée. Le développement asymptotique (A.10) de la fonction de Bessel $J_{m-1}(ka)$ conduit à la condition $ka\neq(2n+m+\frac{1}{2})\frac{\pi}{2}$, n étant un entier quelconque. Ces valeurs de ka correspondent aux résonances de diffusion du potentiel lorsque celui-ci a une profondeur finie, mais grande devant l'énergie de la particule. Si la particule incidente possède une énergie qui annule $J_{m-1}(ka)$, alors l'onde partielle m acquiert une forte amplitude de diffusion, alors que la diffusion des autres ondes partielles reste une diffusion de type disque dur d'amplitude plus faible.

En dehors des résonances, la même forme que pour les disques durs est retrouvée car la fonction d'onde vérifie ici aussi les conditions de Dirichlet au bord du potentiel (elle doit s'annuler sur le bord du puits). Par conséquent, le problème de diffusion d'une onde classique sur des potentiels d'indice de réfraction infini, discuté au § 1.1.2, est identique à la diffusion d'une onde quantique sur un disque dur, les conditions au bord étant des conditions de Dirichlet dans les deux cas.

2.4 Influence de la matrice t hors couche d'énergie sur le libre parcours moyen

2.4.1 Dépendance en énergie du propagateur

Nous pouvons maintenant utiliser la connaissance de la matrice $\mathbf{t}$ hors couche pour étudier le propagateur moyenné donné par l'équation (1.30). Les effets hors couche sont bien connus en théorie de perturbation. Ces effets étant d'origine purement quantiques, nous nous attendons à ce qu'ils deviennent de plus en plus faibles lorsque l'énergie augmente, c.-à-d. lorsque la physique semi-classique commence à être capable de décrire les phénomènes. Par contre, dans le régime très quantique, à très basse énergie, ces effets peuvent avoir de l'importance. Les courbes de la figure 2.2 le confirment. Elles montrent la partie imaginaire du propagateur moyenné

$$\overline{G}_{\text{dir}}(E,\mathbf{p}) = \frac{2m}{\hbar^2}\frac{1}{K^2 - p^2 - N\langle\mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{p}\rangle} \qquad (1.30)$$

dans l'espace de Fourier pour différents régimes d'énergie Ka. (Le même comportement est obtenu pour sa partie réelle). Ces figures ont été réalisées avec les quantités suivantes fixées $\rho = 0.1$, $a = 1$ et $\frac{\hbar^2}{2m} = 1$. Nous pouvons voir que lorsque l'énergie (Ka) augmente, le pic devient plus centré en $p = K$ et plus étroit. Au contraire, à basse énergie, la largeur du pic devient grande comparée à la valeur de p et le centre du pic se déplace vers les basses impulsions. Cela a une importance sur le propagateur évalué dans l'espace réel. Lors de l'intégration sur les modes de Fourier, seules les impulsions p proches de K seront à considérer si Ka est grand. Cela signifie que la matrice sur couche est une bonne approximation à haute énergie et cela nous conforte dans le sentiment que ces effets purement quantiques ne doivent pas être importants dans ce régime d'énergie. Par contre, à basse énergie, il est plus prudent de faire attention aux éléments de matrice $\mathbf{t}$ hors couche.

2.4.2 Régime de basse énergie

Nous nous plaçons maintenant dans le régime $Ka \ll 1$, puisqu'il introduit des effets non triviaux. Une étude de l'influence de la densité de sphères dures $\rho \equiv N/V$ montre qu'elle joue évidemment un rôle essentiel. Lorsqu'elle est très faible, les parties réelle et imaginaire du propagateur $\overline{G}_{\text{dir}}(E,\mathbf{p})$ sont très piquées autour de $p = K$, indiquant que les effets hors couche peuvent être négligés et que la matrice $\mathbf{t}$ peut être prise sur couche. Pour un milieu très dilué, les effets quantiques dûs à la taille finie des potentiels d'interaction ne sont pas importants si la distance entre ces potentiels est très grande. Nous avons vu au paragraphe 1.1 que la matrice $\mathbf{t}$ sur couche est obtenue facilement à l'aide de l'expression asymptotique de la fonction d'onde. Pour un milieu très dilué, il est donc normal de retrouver la matrice $\mathbf{t}$ sur couche.

L'augmentation de la densité produit un élargissement et un déplacement du pic montrant la nécessité de prendre la matrice $\mathbf{t}$ hors couche. Lorsque le milieu devient dense, l'expression sur couche de la matrice $\mathbf{t}$ obtenue de façon asymptotique ne peut plus rester valable puisque la distance moyenne séparant deux centres diffuseurs n'est plus suffisamment grande pour permettre l'utilisation d'expressions asymptotiques. Les figures 2.3 montrent cette dépendance dans la densité. La matrice $\mathbf{t}$ utilisée dans ces calculs numériques a été tronquée selon la procédure décrite dans le paragraphe 2.2.3. Tout ceci reste qualitatif puisque l'expression (1.30) du propagateur n'est valable que pour une densité très faible.

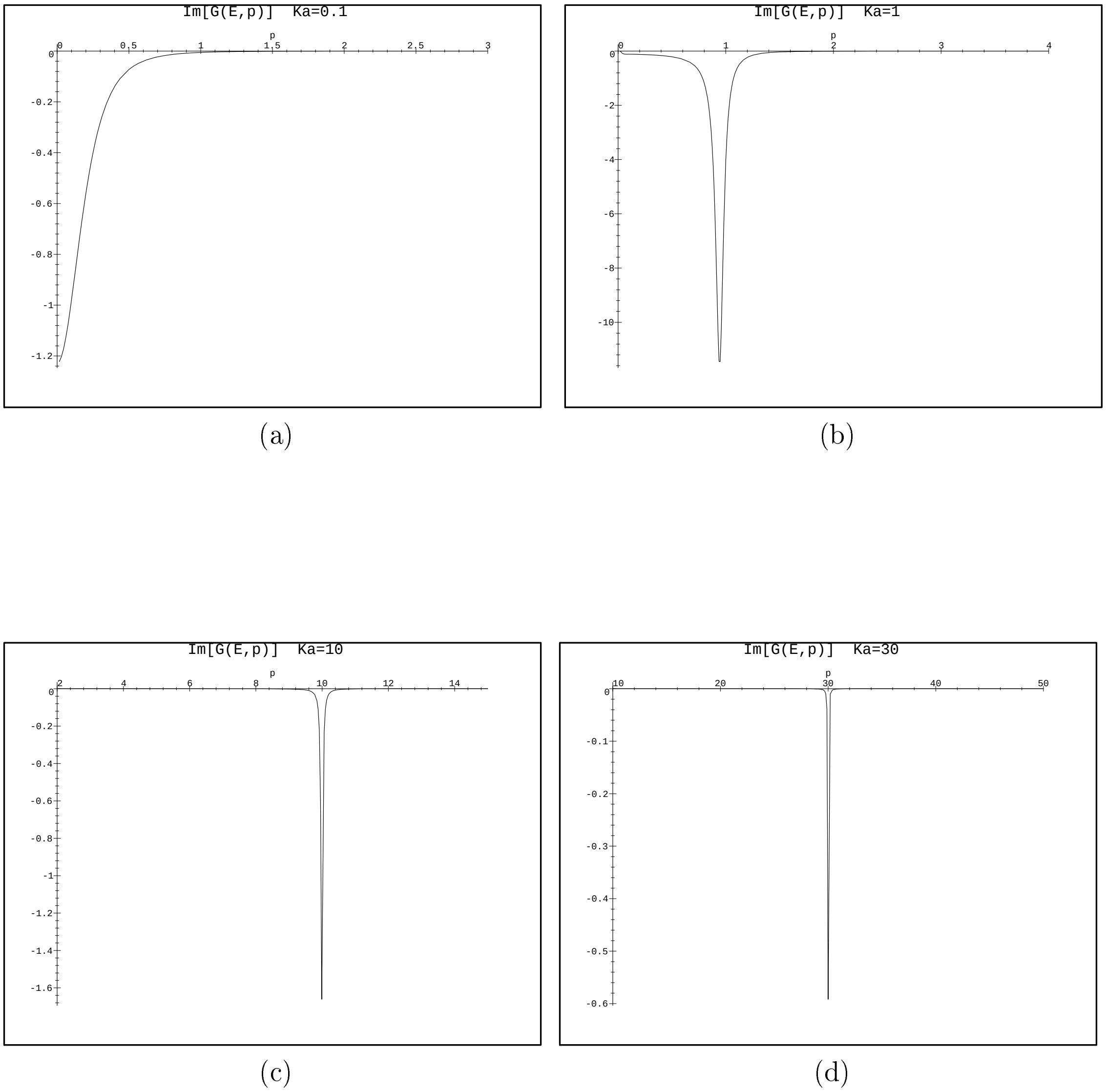


FIG. 2.2 – *Partie imaginaire de* $G_{dir}(E,p)$*. Dépendance en énergie.*

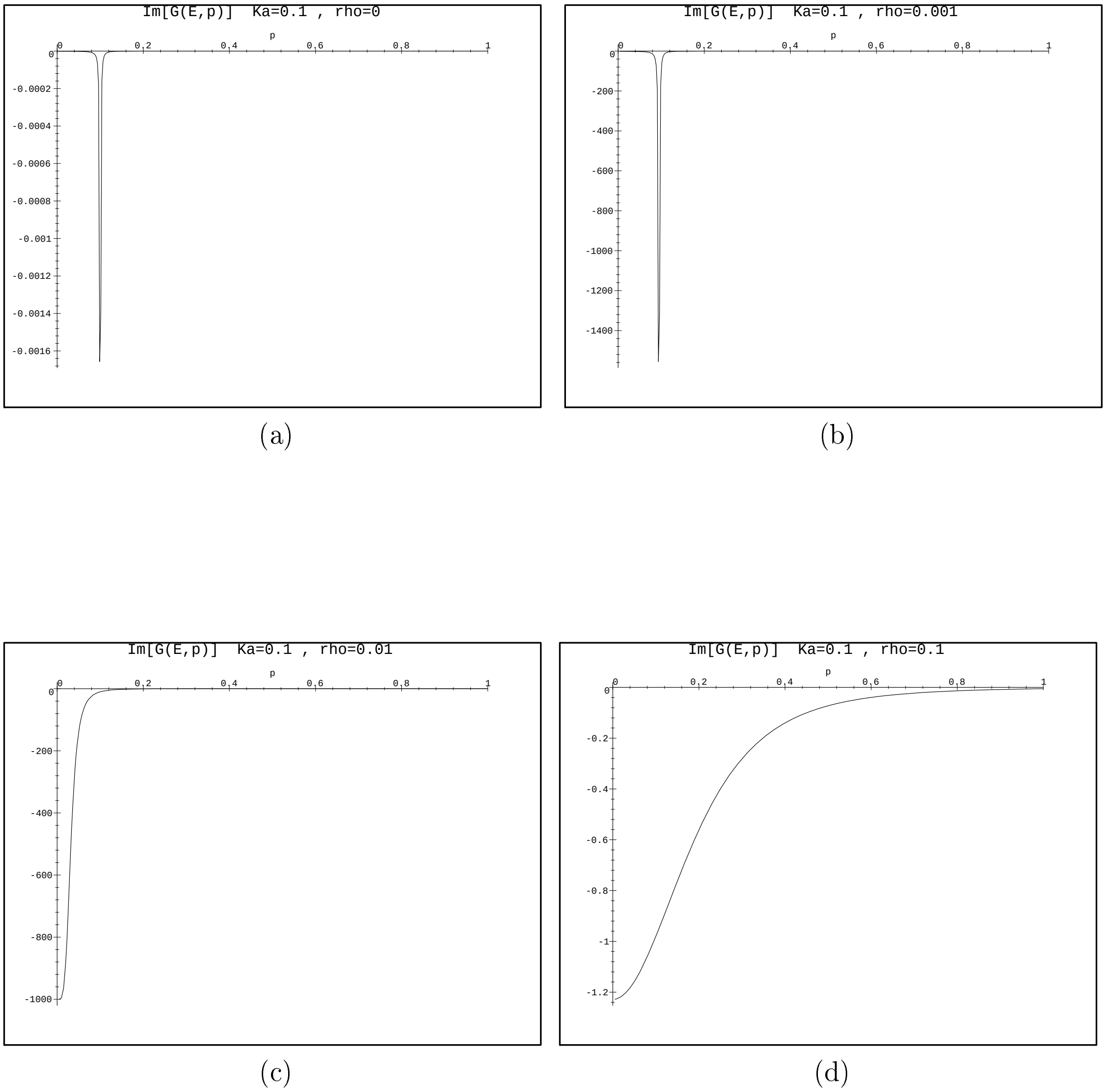


FIG. 2.3 – *Partie imaginaire de $G_{dir}(E,p)$. Dépendance en densité.*

2.4.3 Effets hors couche sur le pôle du propagateur

Après avoir vu de façon qualitative l'influence de la matrice de diffusion hors couche sur le pôle du propagateur, nous évaluons quantitativement les corrections qu'elle apporte. Le pôle du propagateur est donné par la solution $p = \tilde{K}$ de l'équation

$$K^2 - p^2 - \rho\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{p}\rangle = 0.$$

Il n'est pas possible de trouver la solution analytique de cette équation, mais il est possible de l'approcher par un développement de la matrice $\mathbf{t}$ autour de sa valeur sur couche. Si l'on pose $t(p) \equiv \frac{2m}{\hbar^2}\langle \mathbf{p}|\mathbf{t}_K|\mathbf{p}\rangle$, le pôle est donné par $\tilde{K} = K - \rho t(\tilde{K})/(\tilde{K}+K)$. Pour simplifier les notations, notons $f(\tilde{K}) = t(\tilde{K})/(\tilde{K}+K)$. Nous avons alors

$$\tilde{K} = K - \rho f(\tilde{K}) \approx K - \rho\big(f(K) + (\tilde{K}-K)f'(K) + \frac{1}{2}(\tilde{K}-K)^2 f''(K) + \cdots\big). \qquad (2.24)$$

De la première égalité, nous voyons que $(\tilde{K}-K)$ est proportionnel à la densité de diffuseurs ρ. Ceci confirme ce que nous avons vu sur les courbes des figures 2.3, à savoir que plus la densité est forte, plus les effets hors couche deviennent importants. Lorsque ρ est suffisamment faible, le pôle s'écrit

$$\tilde{K} = K - \rho f(K) + \rho^2 f(K) f'(K) + \mathcal{O}(\rho^3). \qquad (2.25)$$

Le premier terme en densité est proportionnel à la matrice $\mathbf{t}$ sur couche. Les corrections hors couche n'interviennent qu'à l'ordre 2 en densité. Remarquons cependant qu'une partie de ce terme du deuxième ordre provient de la matrice $\mathbf{t}$ sur couche d'énergie. Le terme d'ordre 2 en densité,

$$f(K)f'(K) = \frac{t(K)}{2K}\left(\frac{t'(K)}{2K} - \frac{t(K)}{4K^2}\right), \qquad (2.26)$$

contient en effet une contribution hors couche d'énergie (le 1er terme entre parenthèses) et une contribution sur couche d'énergie (le 2e terme entre parenthèses).

– À trois dimensions, un développement en puissances de a de la matrice $\mathbf{t}$ et de sa dérivée

$$t_{3D}(K) = \underbrace{4\pi a - 4i\pi K a^2}_{\text{onde } s} + \underbrace{\frac{4}{3}\pi K^2 a^3 + \frac{4}{3}i\pi K^3 a^4}_{\text{ondes } s+p} + \underbrace{\mathcal{O}(a^5)}_{\text{ondes } s+p+d} \qquad (2.27)$$

et

$$t'_{3D}(K) = \underbrace{\frac{16}{3}\pi K a^3}_{\text{ondes } s+p} + \underbrace{\frac{8}{3}i\pi K^2 a^4}_{\text{onde } s} + \underbrace{\mathcal{O}(a^5)}_{\text{ondes } s+p+d} \qquad (2.28)$$

permet d'obtenir les relations

$$\begin{aligned} f(K) &= \frac{2\pi a}{K} - 2i\pi a^2 + \frac{2}{3}\pi K a^3 + \frac{2}{3}i\pi K^2 a^4 + \mathcal{O}(a^5), \\ f(K)f'(K) &= -\frac{2\pi^2 a^2}{K^3} + i\frac{4\pi^2 a^3}{K^2} + \underbrace{\frac{6\pi^2 a^4}{K}}_{\substack{\text{hors couche} \\ \text{+ onde p}}} + \mathcal{O}(a^5). \end{aligned} \qquad (2.29)$$

Les effets hors couche n'apparaissent pas à l'ordre de l'onde s, mais seulement à l'ordre de l'onde p. De plus, à cet ordre, ils n'apparaissent que dans la partie réelle du pôle et n'ont par conséquent pas d'influence directe sur le libre parcours moyen.
Comme pour l'équation (1.33), le libre parcours moyen élastique est donné par

$$l \approx 1/2\mathfrak{Im}\tilde{K}.$$

À trois dimensions, il devient

$$l \approx \frac{1}{4\pi\rho a^2}\left(1 - \frac{2\pi\rho a^3}{(Ka)^2}\right). \tag{2.30}$$

Cette expression du libre parcours moyen ne provient que de la matrice $\mathbf{t}$ sur couche d'énergie. Les effets hors couche d'énergie n'apparaissent qu'à un ordre plus élevé en puissances de a.

– À deux dimensions, le développement de la matrice $\mathbf{t}$ pour $a \to 0$ est

$$t_{2D}(K) = \underbrace{\frac{-4i}{1 + \frac{2i}{\pi}\ln K'a}}_{\text{onde } s} + \underbrace{2\pi(Ka)^2}_{\text{onde } p} + \mathcal{O}\left(\frac{a^2}{\ln^2 Ka}\right) \tag{2.31}$$

et

$$t'_{2D}(K) = \underbrace{4\pi K a^2}_{\text{onde } p} + \underbrace{\frac{4iKa^2}{1 + \frac{2i}{\pi}\ln K'a}}_{\text{onde } s} + \mathcal{O}(a^4). \tag{2.32}$$

Nous avons utilisé la notation $K' = Ke^{\gamma}/2$. Le 1$^{\text{er}}$ et le 2$^{\text{e}}$ ordre en densité du pôle s'écrivent

$$\begin{aligned} f(K) =& \frac{-2i}{K(1 + \frac{2i}{\pi}\ln K'a)} + \pi K a^2 + \mathcal{O}(\frac{a^2}{\ln Ka}), \\ f(K)f'(K) =& \frac{2}{K^3}\frac{1}{(1 + \frac{2i}{\pi}\ln K'a)^2}\left(1 - \underbrace{i\pi(Ka)^2(1 + \frac{2i}{\pi}\ln K'a)}_{\text{onde } p \text{ + hors couche}} + \mathcal{O}\left(a^4\right)\right). \end{aligned} \tag{2.33}$$

Le libre parcours moyen est alors

$$l \approx \frac{K\ln^2 Ka}{\rho\pi^2}\Big(1 + \frac{\pi\rho}{K^2\ln Ka}\big(1 + \underbrace{(Ka)^2\ln Ka}_{\text{onde } p \text{ +hors couche}}\big)\Big). \tag{2.34}$$

Les effets hors couche d'énergie apparaissent au même ordre que les corrections dues à l'onde partielle p dans le libre parcours moyen élastique. Ils apparaissent en outre au deuxième ordre dans la densité.

Pour avoir toutes les corrections au 2$^{\text{e}}$ ordre en densité, il faut aussi tenir compte des *corrections à deux corps*, provenant des séquences de diffusion entre deux centres diffuseurs $(iji) + (ijij) + \cdots$. Cependant, le calcul de la moyenne du terme à une boucle (iji) (dernier terme de l'équation(1.29)), utilisant les éléments de matrice $\mathbf{t}$ hors couche, fait intervenir une intégrale du type

$$\int k^2 dk \frac{j_{l_1}(ka) j_{l_2}(ka) j_{l_3}(ka) j_{l_4}(ka)}{(K^2 - k^2 + i\epsilon)^2} \tag{2.35}$$

à 3 dimensions. (Le même genre d'intégrale apparaît à deux dimensions, où les fonctions de Bessel sphériques sont remplacées par des fonctions de Bessel ordinaires). Cette intégrale ne s'évalue qu'avec certaines conditions (voir appendice C) qui ne sont pas vérifiées ici. Ce problème montre que la matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie ne peut pas être utilisée dans une approche où l'on a supposé les potentiels sans volume. Les éléments de matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie sont dûs à la taille finie des diffuseurs. Il est donc plus cohérent de tenir compte du volume des diffuseurs lorsque la moyenne doit être prise.

De plus, le problème posé par la chaîne (iji) suggère de revoir l'ordre des différentes intégrations, à savoir l'intégration sur les vecteurs d'onde intermédiaires et l'intégration sur la position des centres diffuseurs. Physiquement, la somme sur tous les états intermédiaires devrait être effectuée en premier lieu, la moyenne d'ensemble venant ensuite. C'est ce qui est fait dans le prochain chapitre où le propagateur est calculé en sommant sur tous les états virtuels sans faire la moyenne.

Chapitre 3

Propagation dans un système à N centres diffuseurs

Introduction

Dans le chapitre précédent, nous nous sommes concentrés sur l'évaluation de matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie. Au premier ordre en densité, l'énergie propre du propagateur moyen resommant les chaînes directes est reliée à cette matrice $\mathbf{t}$. Nous avons montré que des corrections dues à l'existence d'éléments de matrice $\mathbf{t}$ hors couche apparaissent à l'ordre deux en densité. À cet ordre, il faut également prendre en compte les chaînes indirectes (celles dans lesquelles il y a diffusion répétée entre deux centres). Mais le calcul de la chaîne (iji) avec les matrices $\mathbf{t}$ hors couche après avoir fait la moyenne sur les positions conduit à des problèmes mathématiques provenant du fait que la série de Watson n'est pas définie lorsque les potentiels se recouvrent — voir l'équ. (2.35).

Nous nous proposons ici de calculer le propagateur de l'électron dans un système désordonné particulier. Pour cela, nous reprenons la série de Watson et calculons chaque terme de la série en fonction de la position de chaque centre diffuseur. Nous commencerons par évaluer les différents termes en dimension deux. La fonction d'onde de l'électron dans ce système peut ensuite se déduire de ce propagateur à l'aide de l'équation de Lippmann-Schwinger. Les expressions du propagateur et de la fonction d'onde sont également dérivées pour les systèmes à trois dimensions.

Le calcul qui suit peut être généralisé à un système composé de potentiels de tailles différentes et de types différents (puits de potentiel, barrière, sphère dure). Pour un centre i donné, on aurait un rayon a_i et une matrice $\mathbf{t}_i$ associée au type de potentiel. La distance entre les différents centres diffuseurs serait bornée inférieurement ($R_{ij} \geq a_i + a_j$) pour éviter que deux potentiels ne se recouvrent.

3.1 Expression analytique d'une séquence de diffusion quelconque

Rappel de notation : en dimension 2, l'élément de matrice $\mathbf{t}$ s'écrit

$$\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k}\rangle = \frac{\hbar^2}{2mV}\sum_m e^{im(\theta'-\theta)}\langle k'|\mathbf{t}(E)|k\rangle_m,$$

où θ est l'angle du vecteur d'onde $\mathbf{k}$ et θ' celui de $\mathbf{k}'$.

3.1.1 Calcul de la séquence (ij)

Les diverses matrices $\mathbf{t}$ pour trois types de potentiels (chapitre 2) étant connues, le calcul des différentes séquences de diffusion peut se faire de façon générale. La séquence de diffusion sur deux potentiels distincts i et j s'écrit

$$\begin{aligned}
&\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k}\rangle \\
&=\sum_{\mathbf{k_1}} \frac{\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k_1}\rangle\langle \mathbf{k_1}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k}\rangle}{E-E_{k_1}+i\epsilon} e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k_1})\mathbf{R}_i} e^{-i(\mathbf{k_1}-\mathbf{k})\mathbf{R}_j} \\
&=\frac{1}{(2\pi)^2}\frac{\hbar^2}{2mV} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i+i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \int \frac{k_1 dk_1 d\theta_1}{K^2-{k_1}^2+i\epsilon} \sum_{m_1=-\infty}^{+\infty} e^{im_1(\theta'-\theta_1)} \langle k'|\mathbf{t}(E)|k_1\rangle_{m_1} \\
&\quad\times \sum_{m_2=-\infty}^{+\infty} e^{im_2(\theta_1-\theta)} \langle k_1|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{m_2} \sum_{m_3=-\infty}^{+\infty} i^{m_3} J_{m_3}(k_1 R_{ij}) e^{im_3(\theta_1-\theta_{ij})},
\end{aligned}$$

où l'onde plane a été développée en ondes partielles, $R_{ij} \equiv |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|$ est la distance entre les deux diffuseurs et θ_{ij} est l'angle du vecteur $\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$ par rapport à l'axe des abscisses.

L'intégration sur θ_1 fait apparaître un facteur $2\pi\delta_{m_1,m_2+m_3}$. Il s'ensuit que

$$\begin{aligned}
&\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k}\rangle \\
&\qquad=\frac{1}{2\pi}\frac{\hbar^2}{2mV} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i+i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \sum_{m_1}\sum_{m_2}\sum_{m_3} e^{im_1\theta'+im_2\theta+im_3(\pi/2-\theta_{ij})}\delta_{m_1,m_2+m_3} \\
&\qquad\qquad\times \int_0^{\infty} \frac{k_1 dk_1}{K^2-{k_1}^2+i\epsilon} \langle k'|\mathbf{t}(E)|k_1\rangle_{m_1} \langle k_1|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{m_2} J_{m_3}(k_1 R_{ij}).
\end{aligned}$$

Le calcul de cette dernière intégrale fait intervenir les expressions des éléments de matrice $\mathbf{t}$ hors couche obtenus au chapitre 2. L'intégrale radiale intervenant dans l'expression précédente est évaluée par le théorème des résidus dans l'annexe C. L'élément de matrice $\langle k'|\mathbf{t}(E)|k_1\rangle_{m_1}$ pour un disque dur, donné par (2.17), contient un terme en $({k'}^2 - {k_1}^2)^{-1}$ qui semble donner une singularité en $k_1 = \pm k'$. L'élément de matrice $\langle k'|\mathbf{t}(E)|k_1\rangle_{m_1}$ est analytique quel que soit k_1 et n'a donc pas de pôle en $k_1 = \pm k'$: c'est en fait l'élément de matrice $\mathbf{t}$ hors couche élastique de l'équation (2.19). Nous avons déjà vu que celui-ci n'a pas de comportement singulier et le contour choisi pour le calcul de cette intégrale est celui de la Fig. C.1. (Remarque : un calcul avec un contour évitant les pseudo-pôles en $k_1 = \pm k'$ aboutit au même résultat, mais demande un travail supplémentaire long et fastidieux). Il est également facile de vérifier que les matrices $\mathbf{t}$ des équations (2.16) et (2.23) ne possèdent pas de pôles non plus. Le seul vrai pôle est alors celui du propagateur.

Les conditions de convergence de l'intégrale données par les équations (C.2) sont vérifiées quelque soit le terme de l'élément de matrice $\mathbf{t}$ pris en compte par le simple fait que le symbole δ de Kronecker force la relation $m_1 = m_2 + m_3$. On a en effet

$$\begin{cases} \rho + m_1 + m_2 + m_3 \text{ pair lorsque } \rho = 2, \\ \rho + |m_1| + |m_2| = \rho + |m_2 + m_3| + |m_2| \geq \rho + |m_3| > |m_3|. \end{cases}$$

La condition $R_{ij} \geq 2a$ est imposée par le fait que les potentiels ne peuvent pas s'interpénétrer.

Ainsi,

$$\int_0^\infty \frac{k_1 dk_1}{K^2 - {k_1}^2 + i\epsilon} \langle k'|\mathbf{t}(E)|k_1\rangle_{m_1} \langle k_1|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{m_2} J_{m_3}(k_1 R_{ij}) \\ = -i\frac{\pi}{2} \langle k'|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_1} \langle K|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{m_2} H^{(1)}_{m_3}(KR_{ij}), \quad (3.1)$$

où le terme $i\epsilon$ a été négligé. Il faut garder en mémoire que K signifie en fait $K + i\epsilon$; cette partie imaginaire infinitésimale sera importante par la suite, en particulier pour le calcul de la moyenne des séquences de diffusion. Cela signifie que l'énergie physique du propagateur est toujours prise dans le demi-plan complexe supérieur. L'expression de la séquence de diffusion sur deux potentiels situés en $\mathbf{R}_i$ et $\mathbf{R}_j$ s'écrit finalement

$$\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E) G_0^{(+)}(E) \mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k}\rangle \\ = \frac{1}{4i} \frac{\hbar^2}{2mV} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i + i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \sum_{m_1} \sum_{m_2} e^{im_1\theta' - im_2\theta + i(m_1 - m_2)(\pi/2 - \theta_{ij})} \\ \times \langle k'|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_1} \langle K|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{m_2} H^{(1)}_{m_1 - m_2}(KR_{ij}). \quad (3.2)$$

Dans le cas des disques durs, cette séquence de diffusion se ramène à

$$\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E) G_0^{(+)}(E) \mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k}\rangle \\ = 4i \frac{\hbar^2}{2mV} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i + i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \sum_{m_1} \sum_{m_2} e^{im_1\theta' - im_2\theta + i(m_1 - m_2)(\pi/2 - \theta_{ij})} \\ \times \frac{J_{m_1}(k'a)}{H^{(1)}_{m_1}(Ka)} \frac{J_{m_2}(ka)}{H^{(1)}_{m_2}(Ka)} H^{(1)}_{m_1 - m_2}(KR_{ij}). \quad (3.3)$$

Dans cette expression, on reconnaît les rapports des fonctions de Bessel et Hankel qui représentent l'interaction, et la fonction de Hankel qui représente la propagation de l'électron du diffuseur j au diffuseur i.

Cette expression est valable pour $R_{ij} \geq 2a$. La condition de non recouvrement des potentiels ne peut pas être relaxée simplement avec cette approche. Le développement en série de Watson n'est valable que lorsque les potentiels sont distincts. Cela peut se voir dans le calcul des expressions de chaque terme de la série. Lorsque $R_{ij} < 2a$, l'intégrale (C.1) diverge exponentiellement. Lorsque deux centres se recouvrent, ils doivent donc être traités comme un objet entier et non comme deux entités distinctes. Cet objet ne peut être décrit simplement par deux matrices de diffusion et il faudrait lui définir une matrice de diffusion associée. À la condition de pouvoir définir un potentiel unique pour cet objet, la série de Watson serait encore définie. Elle ferait alors apparaître des termes de diffusion sur des objets simples (potentiels individuels) et d'autres sur des objets composites (regroupement de potentiels se chevauchant). La difficulté est de connaître les expressions des matrices de diffusion sur les potentiels particuliers que forment les regroupements de potentiels individuels. Ceci pourrait être envisagé par un calcul d'expressions asymptotiques dans le cas d'un milieu dilué composé de divers objets, mais il est peu probable qu'il soit possible de conserver toute l'information offerte par les éléments de matrice $\mathbf{t}$ hors couche. Ces éléments de matrice $\mathbf{t}$ hors couche permettent en effet de connaître la fonction d'onde en tout point de l'espace, même au voisinage du potentiel, contrairement aux expressions asymptotiques.

3.1.2 Calcul de la séquence (kij)

Nous évaluons ici une séquence à trois diffusions en nous aidant du calcul précédent. Ici, le centre diffuseur k peut être identique au centre diffuseur j, mais il est nécessairement différent de i. L'expression (3.2) permet d'écrire

$$\begin{aligned}
&\langle \mathbf{k'}|\mathbf{t}_k(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k}\rangle \\
&=\sum_{\mathbf{k_1}} \frac{\langle \mathbf{k'}|\mathbf{t}_k(E)|\mathbf{k_1}\rangle}{E-E_{k_1}+i\epsilon}\langle \mathbf{k_1}|\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k}\rangle \\
&=\frac{1}{4i}\frac{e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}}{(2\pi)^2}\sum_{m_1}\sum_{m_2} e^{-im_2\theta+i(m_1-m_2)(\pi/2-\theta_{ij})}\langle K|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{m_2}H^{(1)}_{m_1-m_2}(KR_{ij}) \\
&\int \frac{k_1dk_1d\theta_1}{K^2-{k_1}^2+i\epsilon}\langle \mathbf{k'}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k_1}\rangle e^{-i(\mathbf{k'}-\mathbf{k_1})\mathbf{R}_k}e^{-i\mathbf{k_1}\mathbf{R}_i}e^{im_1\theta_1}\langle k_1|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_1}.
\end{aligned}$$

L'intégrale devient

$$\begin{aligned}
&\frac{\hbar^2}{2mV}e^{-i\mathbf{k'}\mathbf{R}_k}\sum_m e^{im\theta'}\int_0^\infty \frac{k_1dk_1}{K^2-{k_1}^2+i\epsilon}\langle k'|\mathbf{t}(E)|k_1\rangle_m\langle k_1|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_1} \\
&\qquad\qquad\int d\theta_1 e^{ik_1R_{ki}\cos(\theta_1-\theta_{ki})-i(m-m_1)\theta_1} \\
&=2\pi\frac{\hbar^2}{2mV}e^{-i\mathbf{k'}\mathbf{R}_k}\sum_m e^{im\theta'}e^{i(m-m_1)(\pi/2-\theta_{ki})} \\
&\times\int_0^\infty \frac{k_1dk_1}{K^2-{k_1}^2+i\epsilon}\langle k'|\mathbf{t}(E)|k_1\rangle_m\langle k_1|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_1}J_{m-m_1}(k_1R_{ki}).
\end{aligned}$$

Ici, nous avons utilisé la forme intégrale (A.4) de la fonction de Bessel, mais l'onde plane aurait très bien pu être développée en ondes partielles comme cela a été fait pour la chaîne (ij), le résultat aurait été évidemment inchangé. Les critères de convergence (C.2) pour cette dernière intégrale sont vérifiés :

$$\begin{cases}
\rho+m+m_1+(m-m_1) \text{ avec } \rho=2 \text{ est pair,} \\
R_{ki}\geq 2a, \\
\rho+|m|+|m_1|\geq\rho+|m-m_1|>|m-m_1|.
\end{cases}$$

L'intégrale sur le module de $\mathbf{k_1}$ dans la dernière égalité est la même que celle évaluée en (3.1). On trouve alors que

$$\begin{aligned}
&\langle \mathbf{k'}|\mathbf{t}_k(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k}\rangle \\
&=\frac{1}{(4i)^2}\frac{\hbar^2}{2mV}e^{-i\mathbf{k'}\mathbf{R}_k+i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}\sum_{m_1}\sum_{m_2}\sum_{m_3}e^{im_1\theta'-im_3\theta+i(m_1-m_2)(\pi/2-\theta_{ki})+i(m_2-m_3)(\pi/2-\theta_{ij})} \\
&\quad\times\langle k'|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_1}\langle K|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_2}\langle K|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{m_3}H^{(1)}_{m_1-m_2}(KR_{ki})H^{(1)}_{m_2-m_3}(KR_{ij}).
\end{aligned}$$

Pour les disques durs, il vient immédiatement

$$\begin{aligned}
&\langle \mathbf{k'}|\mathbf{t}_k(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k}\rangle \\
&\quad=-4i\frac{\hbar^2}{2mV}e^{-i\mathbf{k'}\mathbf{R}_k+i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}\sum_{m_1}\sum_{m_2}\sum_{m_3}e^{im_1\theta'-im_3\theta+i(m_1-m_2)(\pi/2-\theta_{ki})+i(m_2-m_3)(\pi/2-\theta_{ij})} \\
&\quad\times\frac{J_{m_1}(k'a)}{H^{(1)}_{m_1}(Ka)}\frac{J_{m_2}(Ka)}{H^{(1)}_{m_2}(Ka)}\frac{J_{m_3}(ka)}{H^{(1)}_{m_3}(Ka)}H^{(1)}_{m_1-m_2}(KR_{ki})H^{(1)}_{m_2-m_3}(KR_{ij}).
\end{aligned}$$

3.1.3 Généralisation

Le mécanisme du calcul d'une séquence de diffusion apparaît maintenant clairement et nous pouvons en déduire l'expression d'une séquence de diffusion tout à fait générale. Il est d'ailleurs assez remarquable que les conditions (C.2) sur les ordres des différentes fonctions de Bessel, nécessaires au calcul des intégrales sur les modules des vecteurs d'onde intermédiaires, sont toujours vérifiées grâce aux intégrales angulaires. Le terme de la série de Watson décrivant n_{diff} diffusions s'écrit

$$\begin{aligned}
&\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_k(E)G_0^{(+)}(E)\cdots G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_l(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_n(E)|\mathbf{k}\rangle \\
&= \frac{1}{(4i)^{n_{\text{diff}}-1}}\frac{\hbar^2}{2mV}e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i+i\mathbf{k}\mathbf{R}_n}\sum_{m_i}\sum_{m_j}\sum_{m_k}\cdots\sum_{m_l}\sum_{m_n}e^{im_i\theta'-im_n\theta} \\
&\quad\times e^{i(m_i-m_j)(\pi/2-\theta_{ij})+i(m_j-m_k)(\pi/2-\theta_{jk})+\cdots i(m_l-m_n)(\pi/2-\theta_{ln})} \\
&\quad\times \langle k'|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_i}\langle K|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_j}\cdots\langle K|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_l}\langle K|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{m_n} \\
&\quad\times H^{(1)}_{m_i-m_j}(KR_{ij})H^{(1)}_{m_j-m_k}(KR_{jk})\cdots H^{(1)}_{m_l-m_n}(KR_{ln}).
\end{aligned} \tag{3.4}$$

Ici, chaque matrice $\mathbf{t}$ peut représenter un potentiel différent (disque dur, barrière ou puits) de rayon différent. Dans ce cas, il faudrait indicer les opérateurs $\mathbf{t}$ de façon à reconnaître la forme et la taille des différents potentiels.

Dans cette expression, il est intéressant de constater que chaque matrice $\mathbf{t}$ interne est sur couche et que les deux matrices $\mathbf{t}$ externes sont semi hors couche. L'écriture de chaque séquence de diffusion n'est donc pas plus compliquée hors couche que sur couche. Les termes hors couche sont seulement dans les deux matrices $\mathbf{t}$ externes.

Par ailleurs, du fait de la taille finie des centres diffuseurs, il existe un couplage des ondes partielles empêchant l'écriture de cette séquence de diffusion sous la forme d'un simple produit de matrices $\mathbf{t}$.

Dans le cas où tous les potentiels sont des disques durs de même rayon, l'expression devient

$$\boxed{\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}'| \;& \mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_k(E)G_0^{(+)}(E)\ldots G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_l(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_n(E)|\mathbf{k}\rangle \\
= \;& (-1)^{n_{\text{diff}}}4i\frac{\hbar^2}{2mV}e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i+i\mathbf{k}\mathbf{R}_n}\sum_{m_i}\sum_{m_j}\sum_{m_k}\ldots\sum_{m_l}\sum_{m_n}e^{im_i\theta'-im_n\theta} \\
&\times e^{i(m_i-m_j)(\pi/2-\theta_{ij})+i(m_j-m_k)(\pi/2-\theta_{jk})+\ldots i(m_l-m_n)(\pi/2-\theta_{ln})} \\
&\times \frac{J_{m_i}(k'a)}{H^{(1)}_{m_i}(Ka)}\frac{J_{m_j}(Ka)}{H^{(1)}_{m_j}(Ka)}\frac{J_{m_k}(Ka)}{H^{(1)}_{m_k}(Ka)}\cdots\frac{J_{m_l}(Ka)}{H^{(1)}_{m_l}(Ka)}\frac{J_{m_n}(ka)}{H^{(1)}_{m_n}(Ka)} \\
&\times H^{(1)}_{m_i-m_j}(KR_{ij})H^{(1)}_{m_j-m_k}(KR_{jk})\ldots H^{(1)}_{m_l-m_n}(KR_{ln}).
\end{aligned}} \tag{3.5}$$

3.2 Fonction d'onde

À partir des expressions de chaque séquence de diffusion contenue dans la série de Watson, la fonction d'onde d'un électron se propageant dans un système désordonné fixé s'obtient à l'aide de l'équation de Lippmann-Schwinger

$$|\Psi_{\mathbf{K}}\rangle = |\mathbf{K}\rangle + \mathbf{G}_0(E_K)\mathcal{T}(E_K)|\mathbf{K}\rangle. \tag{3.6}$$

où $\mathcal{T}$ représente la série de Watson (1.21).

Pour obtenir l'amplitude de diffusion de la fonction d'onde dans l'espace réel, le ket $|\Psi_{\mathbf{K}}\rangle$ est projeté sur la base des positions. Le premier terme de diffusion de la série de Watson est donné par

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{r}|G_0\mathbf{t}_i|\mathbf{K}\rangle &= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}'}\frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}}{E_K - E_{k'} + i\epsilon}e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{K})\mathbf{R}_i}\langle\mathbf{k}'|\mathbf{t}(E)|\mathbf{K}\rangle \\ &= -\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}_i}\sum_m e^{im(\pi/2+\theta_{r-R_i}-\theta)}\frac{J_m(Ka)}{H_m^{(1)}(Ka)}H_m^{(1)}(K|\mathbf{r}-\mathbf{R}_i|),\end{aligned} \tag{3.7}$$

où θ_{r-R_i} est l'angle que fait le vecteur $\mathbf{r}-\mathbf{R_i}$ avec l'axe des abscisses. La seule énergie apparaissant dans cette expression est l'énergie physique $E = \hbar^2K^2/2m$. L'expression est sur couche d'énergie et la diffusion sur un centre diffuseur calculée au chapitre 1 à l'équation (1.6) est retrouvée en posant $\mathbf{R}_i = \mathbf{0}$. Pour les autres séquences de diffusion, il faut évaluer des termes du type

$$\begin{aligned}&\langle\mathbf{r}|G_0\mathbf{t}_iG_0\mathbf{t}_jG_0\mathbf{t}_kG_0\cdots G_0\mathbf{t}_lG_0\mathbf{t}_n|\mathbf{K}\rangle \\ &\quad= \frac{1}{\sqrt{V}}\sum_{\mathbf{k}'}\frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}}{E_K - E_{k'} + i\epsilon}\langle\mathbf{k}'|\mathbf{t}_iG_0\mathbf{t}_jG_0\mathbf{t}_kG_0\cdots G_0\mathbf{t}_lG_0\mathbf{t}_n|\mathbf{K}\rangle,\end{aligned} \tag{3.8}$$

où les opérateurs G_0 et $\mathbf{t}_i$ sont pris à l'énergie physique E_K. L'intégrale à évaluer pour calculer cette expression est

$$\sum_{\mathbf{k}'}\frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}}{E_K - E_{k'} + i\epsilon}e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i + im_i\theta'}J_{m_i}(k'a).$$

La formule (C.5) de l'annexe C conduit au résultat

$$-\frac{i}{4}\frac{2mV}{\hbar^2}e^{im_i(\pi/2+\theta_{r-R_i})}J_{m_i}(Ka)H_{m_i}^{(1)}(K|\mathbf{r}-\mathbf{R}_i|).$$

Ainsi le terme général de la fonction d'onde s'écrit

$$\begin{aligned}&\langle\mathbf{r}|G_0\mathbf{t}_iG_0\mathbf{t}_jG_0\mathbf{t}_kG_0\cdots G_0\mathbf{t}_lG_0\mathbf{t}_n|\mathbf{K}\rangle \\ &= -\frac{(-1)^{n_{\text{diff}}}}{\sqrt{V}}e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}_n}\sum_{m_i}\sum_{m_j}\sum_{m_k}\cdots\sum_{m_l}\sum_{m_n}e^{-im_n\theta+im_i(\pi/2+\theta_{r-R_i})} \\ &\quad\times e^{i(m_i-m_j)(\pi/2-\theta_{ij})+i(m_j-m_k)(\pi/2-\theta_{jk})+\cdots i(m_l-m_n)(\pi/2-\theta_{ln})} \\ &\quad\times\frac{J_{m_i}(Ka)}{H_{m_i}^{(1)}(Ka)}\frac{J_{m_j}(Ka)}{H_{m_j}^{(1)}(Ka)}\frac{J_{m_k}(Ka)}{H_{m_k}^{(1)}(Ka)}\cdots\frac{J_{m_l}(Ka)}{H_{m_l}^{(1)}(Ka)}\frac{J_{m_n}(Ka)}{H_{m_n}^{(1)}(Ka)} \\ &\quad\times H_{m_i-m_j}^{(1)}(KR_{ij})H_{m_j-m_k}^{(1)}(KR_{jk})\cdots H_{m_l-m_n}^{(1)}(KR_{ln})H_{m_i}^{(1)}(K|\mathbf{r}-\mathbf{R}_i|).\end{aligned} \tag{3.9}$$

Dans la limite où $Ka \ll 1$, seule l'onde s domine (les rapports $\frac{J_m(Ka)}{H_m^{(1)}(Ka)}$ sont très vite négligeables lorsque $m \neq 0$). La fonction d'onde se simplifie alors

$$\begin{aligned}\langle\mathbf{r}|G_0\mathbf{t}_iG_0\mathbf{t}_jG_0\mathbf{t}_kG_0\cdots G_0\mathbf{t}_lG_0\mathbf{t}_n|\mathbf{K}\rangle &= \frac{e^{i\mathbf{K}\mathbf{R}_n}}{\sqrt{V}}\left(-\frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)}\right)^{n_{\text{diff}}} \\ &\times H_0^{(1)}(KR_{ij})H_0^{(1)}(KR_{jk})\cdots H_0^{(1)}(KR_{ln})H_0^{(1)}(K|\mathbf{r}-\mathbf{R}_i|).\end{aligned} \tag{3.10}$$

Dans cette limite, la fonction d'onde s'écrit comme un simple produit parce que toutes les ondes partielles, autres que l'onde s, ont été négligées.

3.3 Développement à trois dimensions

Nous répétons ici les étapes précédentes dans le cas de la propagation d'un électron dans un système à trois dimensions.

Rappel de notation : l'élément de matrice $\mathbf{t}$ est noté

$$\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k}\rangle = \frac{\hbar^2}{2mV}4\pi \sum_{l=0}^{+\infty}\sum_{m=-l}^{+l} Y_l^{m*}(\widehat{\mathbf{k}'})Y_l^m(\widehat{\mathbf{k}})\langle k'|\mathbf{t}(E)|k\rangle_l.$$

3.3.1 Diffusion sur deux centres

La séquence de diffusion sur deux centres diffuseurs exprimée dans la base des ondes planes et développée en ondes partielles est

$$\begin{aligned}
&< \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k} > \\
&\quad= \sum_{\mathbf{k_1}} \frac{\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k_1}\rangle\langle \mathbf{k_1}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k}\rangle}{E - E_{k_1} + i\epsilon} e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k_1})\mathbf{R}_i} e^{-i(\mathbf{k_1}-\mathbf{k})\mathbf{R}_j} \\
&\quad= \frac{1}{(2\pi)^3}\frac{\hbar^2}{2mV} e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i + i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \int \frac{k_1^2 dk_1 d\Omega_1}{K^2 - {k_1}^2 + i\epsilon} \\
&\quad\quad \times 4\pi \sum_{l_1=0}^{+\infty}\sum_{m_1=-l_1}^{+l_1} Y_{l_1}^{m_1*}(\widehat{\mathbf{k}'})Y_{l_1}^{m_1}(\widehat{\mathbf{k_1}})\langle k'|\mathbf{t}(E)|k_1\rangle_{l_1} \\
&\quad\quad \times 4\pi \sum_{l_2=0}^{+\infty}\sum_{m_2=-l_2}^{+l_2} Y_{l_2}^{m_2*}(\widehat{\mathbf{k}})Y_{l_2}^{m_2}(\widehat{\mathbf{k_1}})\langle k_1|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{l_2} \\
&\quad\quad \times 4\pi \sum_{l_3=0}^{+\infty}\sum_{m_3=-l_3}^{+l_3} i^{l_3} j_{l_3}(k_1 R_{ij}) Y_{l_3}^{m_3*}(\widehat{\mathbf{R_{ij}}})Y_{l_3}^{m_3}(\widehat{\mathbf{k_1}}).
\end{aligned}$$

L'intégration sur l'angle solide d'un produit de trois harmoniques sphériques fait apparaître les symboles « $3j$ » de Wigner [67, App. C]

$$\begin{aligned}
&\int d\Omega_1 Y_{l_1}^{m_1}(\widehat{\mathbf{k_1}})Y_{l_2}^{m_2}(\widehat{\mathbf{k_1}})Y_{l_3}^{m_3}(\widehat{\mathbf{k_1}}) \\
&\quad = \sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}{4\pi}} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}. \qquad (3.11)
\end{aligned}$$

Étant donné que

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} = (-1)^{l_1+l_2+l_3} \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ -m_1 & -m_2 & -m_3 \end{pmatrix},$$

le résultat de l'intégration angulaire (3.11) implique que $l_1 + l_2 + l_3$ est pair, ce qui permet de vérifier la première condition de (C.6). La deuxième condition de (C.6) est automatiquement vérifiée puisque les configurations choisies n'autorisent pas le recouvrement des potentiels. Enfin, la dernière condition de (C.6) est vérifiée grâce aux relations du triangle des symboles « $3j$ » : $|l_1 - l_2| \leq l_3 \leq |l_1 + l_2|$. La formule d'intégration (C.7) peut alors être utilisée. Comme dans le cas à deux dimensions, c'est l'intégration angulaire qui fournit les conditions nécessaires à l'intégration sur le module du vecteur d'onde. Il vient

$$\begin{aligned}
&< \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k} > \\
&\quad = \frac{1}{(2\pi)^3}\frac{\hbar^2}{2mV}e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i+i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}(4\pi)^{5/2} \\
&\quad \times \sum_{l_1=0}^{+\infty}\sum_{m_1=-l_1}^{+l_1}\sum_{l_2=0}^{+\infty}\sum_{m_2=-l_2}^{+l_2}\sum_{l_3=0}^{+\infty}\sum_{m_3=-l_3}^{+l_3} i^{l_3}Y_{l_1}^{m_1*}(\widehat{\mathbf{k}'})Y_{l_2}^{m_2*}(\widehat{\mathbf{k}})Y_{l_3}^{m_3*}(\widehat{\mathbf{R_{ij}}}) \\
&\quad \times \sqrt{(2l_1+1)(2l_2+1)(2l_3+1)}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix} \\
&\quad \times \left(-\frac{\pi}{2}\right)K\langle k'|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{l_1}\langle K|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{l_2}h_{l_3}^{(+)}(KR_{ij}).
\end{aligned}$$

Pour les sphères dures, les éléments de matrice $\mathbf{t}$ sont remplacés par leur expression semi hors couche du paragraphe 2.2.2 et la séquence de deux diffusions s'écrit

$$\begin{aligned}
&= -\frac{\hbar^2}{2mV}\frac{(4\pi)^{5/2}}{K}e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i+i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \\
&\times \sum_{l_1=0}^{+\infty}\sum_{m_1=-l_1}^{+l_1}\sqrt{2l_1+1}Y_{l_1}^{m_1*}(\widehat{\mathbf{k}'})\sum_{l_2=0}^{+\infty}\sum_{m_2=-l_2}^{+l_2}\sqrt{2l_2+1}Y_{l_2}^{m_2*}(\widehat{\mathbf{k}}) \\
&\times \sum_{l_3=0}^{+\infty}\sum_{m_3=-l_3}^{+l_3} i^{l_3}\sqrt{2l_3+1}Y_{l_3}^{m_3*}(\widehat{\mathbf{R_{ij}}}) \\
&\times \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}\frac{j_{l_1}(k'a)}{h_{l_1}^{(+)}(Ka)}\frac{j_{l_2}(ka)}{h_{l_2}^{(+)}(Ka)}h_{l_3}^{(+)}(KR_{ij}).
\end{aligned}\tag{3.12}$$

En permutant l_3 et l_2, et sachant que

$$\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix} = (-1)^{l_1+l_2+l_3}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix},$$

cette séquence de diffusion peut se mettre sous la forme

$$\begin{aligned}
&< \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k} > \\
&\quad = -\frac{\hbar^2}{2mV}\frac{(4\pi)^{5/2}}{K}e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i+i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \\
&\quad \times \sum_{l_1=0}^{+\infty}\sum_{m_1=-l_1}^{+l_1}\sqrt{2l_1+1}Y_{l_1}^{m_1*}(\widehat{\mathbf{k}'})\sum_{l_2=0}^{+\infty}\sum_{m_2=-l_2}^{+l_2} i^{l_2}\sqrt{2l_2+1}Y_{l_2}^{m_2*}(\widehat{\mathbf{R_{ij}}}) \\
&\quad \times \sum_{l_3=0}^{+\infty}\sum_{m_3=-l_3}^{+l_3}\sqrt{2l_3+1}Y_{l_3}^{m_3*}(\widehat{\mathbf{k}}) \\
&\quad \times \begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_1 & l_2 & l_3 \\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}\frac{j_{l_1}(k'a)}{h_{l_1}^{(+)}(Ka)}\frac{j_{l_3}(ka)}{h_{l_3}^{(+)}(Ka)}h_{l_2}^{(+)}(KR_{ij}).
\end{aligned}\tag{3.13}$$

3.3.2 Généralisation

Le calcul de toutes les séquences de diffusion se fait comme dans le cas à deux dimensions en ajoutant une matrice $\mathbf{t}$ à chaque diffusion et en intercalant les relations de fermeture sur les vecteurs d'onde. En numérotant les centres diffuseurs avec les nombres impairs, une séquence de n diffusions s'écrit

$$\begin{aligned}
&< \mathbf{k}'|\mathbf{t}_1(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_3(E)\cdots G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_{2n-1}(E)|\mathbf{k} > \\
&=(-1)^{n+1}\frac{\hbar^2}{2mV}\frac{(4\pi)^{\frac{n+3}{2}}}{K}e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_1+i\mathbf{k}\mathbf{R}_{2n-1}}\sum_{\{l_j,m_j\}_{j=1..2n-1}} \\
&\quad\Bigg\{\sqrt{2l_1+1}Y_{l_1}^{m_1*}(\widehat{\mathbf{k}'})\frac{j_{l_1}(k'a)}{h_{l_1}^{(+)}(Ka)}\sqrt{2l_{2n-1}+1}Y_{l_{2n-1}}^{m_{2n-1}*}(\widehat{\mathbf{k}})\frac{j_{l_{2n-1}}(ka)}{h_{l_{2n-1}}^{(+)}(Ka)} \\
&\quad\times\Bigg[\prod_{j=1}^{n-1}i^{l_{2j}}\sqrt{2l_{2j}+1}\begin{pmatrix} l_{2j-1} & l_{2j} & l_{2j+1} \\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix} l_{2j-1} & l_{2j} & l_{2j+1} \\ m_{2j-1} & m_{2j} & m_{2j+1}\end{pmatrix} \\
&\qquad Y_{l_{2j}}^{m_{2j}*}(\mathbf{R}_{2j-1,2j})h_{2j}^{(+)}(KR_{2j-1,2j})\Bigg]\Bigg[\prod_{j=1}^{n-2}(-1)^{m_{2j+1}}(2l_{2j+1}+1)\frac{j_{l_{2j+1}}(Ka)}{h_{l_{2j+1}}^{(+)}(Ka)}\Bigg]\Bigg\}.
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Nous avons ainsi l'expression exacte de chaque séquence de diffusion de la série de Watson pour la diffusion dans un système de sphères dures à trois dimensions. Comme dans le cas à deux dimensions, il est possible de calculer la fonction d'onde d'un électron dans un système désordonné particulier à partir de l'équation de Lippmann-Schwinger (3.6).

Dans ce chapitre, nous avons obtenu les expressions analytiques de chaque terme de la série de Watson. Ces expressions dépendent toutes de la position des différents centres diffuseurs. Lorsqu'elles sont prises sur couche d'énergie, les expressions obtenues par la méthode des déphasages de [64] sont retrouvées.

Le chapitre suivant est consacré au calcul de la moyenne de ces diverses séquences de diffusion apparaissant dans le propagateur.

Chapitre 4

Propagateur moyen

Introduction

Dans ce chapitre, nous développons le calcul de la moyenne d'ensemble de la fonction de corrélation à une particule obtenue dans le chapitre précédent. La série de Watson n'étant définie que pour un ensemble de potentiels qui ne se recouvrent pas, il faut introduire une moyenne d'ensemble adaptée au cas des potentiels de taille finie. Cette taille finie introduit des corrélations entre les diffuseurs et conduit à des corrections de volume exclu dans le calcul du libre parcours moyen élastique. Après avoir présenté la façon de prendre la moyenne dans le cas des diffuseurs de taille finie, nous calculons explicitement chaque terme de la série de Watson. À l'aide des expressions obtenues, les chaînes directes sont resommées à l'approximation de l'onde s pour obtenir le premier ordre en densité de l'énergie propre. Le deuxième ordre en densité de l'énergie propre est ensuite évalué à partir des séquences de diffusion sur deux centres et les corrections au libre parcours moyen en sont déduites. Le chapitre est clos par une discussion sur la resommation d'un autre type de série.

4.1 Calcul de la moyenne

Comme nous l'avons déjà vu au chapitre 1, la moyenne d'ensemble d'une quantité, notée à l'aide d'une barre sur celle-ci, est obtenue par intégration sur la position des centres diffuseurs. Dans le premier chapitre, les corrélations existant entre les centres diffuseurs n'avaient pas été prises en compte. Ces derniers ont une taille finie et ne doivent pas se superposer ; il convient donc, pour effectuer la moyenne, d'interdire les configurations où les diffuseurs se recouvrent. La moyenne d'une quantité Q est définie en conséquence par

$$\overline{Q} = \frac{1}{\mathcal{Z}} \int \prod_{i=1}^{N} d\mathbf{R}_i \prod_{j>i} \Theta(R_{ij} - 2a)\, Q(\{\mathbf{R}_i\}_{i=1,\cdots,n}), \tag{4.1}$$

où $R_{ij} \equiv |\mathbf{R}_{ij}| \equiv |\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|$ et

$$\mathcal{Z} = \int \prod_{i=1}^{N} d\mathbf{R}_i \prod_{j>i} \Theta(R_{ij} - 2a)$$

est une constante de normalisation (c'est également la fonction de partition d'un ensemble de N disques durs ou sphères dures à température nulle). La distribution de Heaviside, $\Theta(x) = 1$ si

$x \geq 0$, empêche le recouvrement des potentiels d'interaction. La notation $Q(\{\mathbf{R}_i\}_{i=1,\cdots,n})$ indique que la quantité Q dépend d'un nombre $n \leq N$ de centres diffuseurs placés en $\mathbf{R}_1,\cdots,\mathbf{R}_n$. Pour le calcul explicite, les coordonnées cycliques R_{ij} sont mieux appropriées que les coordonnées des positions des diffuseurs car elles mesurent la distance entre les diffuseurs ; la distribution de Heaviside introduit une coupure naturelle sur cette distance, qui est deux fois la taille du potentiel. La moyenne définie en (4.1) fait intervenir la fonction de corrélation à n corps,

$$\frac{1}{V^n} g^{(n)}(\mathbf{R}_1,\cdots,\mathbf{R}_n) = \frac{1}{\mathcal{Z}} \prod_{\substack{i,j=1\\ j>i}}^{n} \Theta(R_{ij}-2a) \int \prod_{k=n+1}^{N} d\mathbf{R}_k \Theta(R_{ik}-2a) \prod_{\substack{l=n+1\\ l>k}}^{N} \Theta(R_{kl}-2a),$$

qui permet d'écrire la moyenne de Q sous la forme

$$\overline{Q} = \frac{1}{V^n} \int \prod_{i=1}^{n} d\mathbf{R}_i \, g^{(n)}(\mathbf{R}_1,\cdots,\mathbf{R}_n) Q(\{\mathbf{R}_i\}_{i=1..n}). \tag{4.2}$$

La fonction de corrélation $g^{(n)}$ intervient en particulier dans le développement du viriel des gaz réels. Elle nécessite la connaissance de la fonction de corrélation $g^{(n+1)}$, qui elle-même, nécessite la connaissance de la fonction de corrélation $g^{(n+2)}$, etc. [43, chap. 6]. Ces fonctions de corrélation sont reliées par les équations intégrales de Born-Green-Yvon-Kirkwood. Pour briser cette chaîne d'interdépendance entre les $g^{(n)}$, Kirkwood a introduit *l'approximation de superposition* (voir [42, chap. 17]) qui relie explicitement la fonction de corrélation $g^{(3)}$ à $g^{(2)}$ en écrivant

$$g^{(3)}(\mathbf{R}_i,\mathbf{R}_j,\mathbf{R}_k) \approx g^{(2)}(R_{ij}) g^{(2)}(R_{ik}) g^{(2)}(R_{jk}).$$

Cette approximation consiste à supposer que $g^{(3)}$ est le produit de trois fonctions de corrélation à deux corps indépendantes. La fonction de corrélation à n corps se sépare sous forme d'un produit de fonctions de corrélation à 2 corps $g^{(2)}$, notées simplement g. La résolution de l'équation intégrale de Kirkwood exprimant g en fonction de $g^{(3)}(\mathbf{R}_i,\mathbf{R}_j,\mathbf{R}_k)/g^{(2)}(R_{ij})$ conduit au développement en puissances de la densité de centres diffuseurs, $\rho = N/V$ [42] :

$$g(R_{12}) = g_0(R_{12}) + \rho g_1(R_{12}) + \rho^2 g_2(R_{12}) + \cdots . \tag{4.3}$$

Ainsi, la moyenne de Q est approchée par

$$\overline{Q} = \frac{1}{V^n} \int \prod_{i=1}^{n} d\mathbf{R}_i \prod_{j>i} g(R_{ij}) Q(\{\mathbf{R}_i\}_{i=1..n}). \tag{4.4}$$

Une approximation supplémentaire, qui va être utilisée pour le calcul de la moyenne des chaînes directes, consiste à ne considérer que la corrélation entre deux diffuseurs successifs, *i.e.*

$$\overline{Q} = \frac{1}{V^n} \int d\mathbf{R}_n \int \prod_{i=1}^{n-1} d\mathbf{R}_{i,i+1} g(R_{i,i+1}) Q(\{\mathbf{R}_i\}_{i=1..n}). \tag{4.5}$$

Cette approximation néglige le recouvrement des centres diffuseurs non successifs. Elle traite la séquence de n diffusions comme étant composée de paires de diffuseurs indépendantes les unes des autres. Chaque paire prend en compte la présence des $(N-2)$ autres diffuseurs par le développement de g en puissances de la densité selon (4.3). Nous justifierons cette approximation au § 4.3.3.

L'intégration sur $\mathbf{R}_n$ dans (4.5) n'est pas contrainte et produira l'invariance par translation du système moyenné. En première approximation, la fonction de corrélation à deux diffuseurs est simplement une distribution de Heaviside,

$$g(R_{12}) \approx g_0(R_{12}) = \Theta(R_{12} - 2a),$$

qui empêche le recouvrement entre deux diffuseurs consécutifs. Dans ce chapitre, nous utiliserons essentiellement cette approximation. Nous montrerons cependant qu'il est nécessaire de choisir une approximation moins grossière, en incluant le 2e terme du développement (4.3) dans g, pour obtenir toute la dépendance en ρ^2 de l'énergie propre. Le terme $\rho g_1(R_{12})$ rend compte du fait que les diffuseurs 1 et 2 ne sont pas seuls dans le système et que la présence des $(N-2)$ autres diffuseurs influe sur leur distribution spatiale.

4.2 Moyenne d'une chaîne directe

Dans ce paragraphe, la moyenne des chaînes directes, c.-à-d. des séquences de diffusion dans lesquelles la particule ne rencontre jamais deux fois le même centre diffuseur, est calculée en détail. Ce sont ces chaînes directes qui, une fois resommées permettent d'obtenir la décroissance exponentielle du propagateur, et par conséquent le libre parcours moyen élastique (voir chap. 1). Le calcul est fait en dimension 2 ; le cas de la dimension 3 est traitée au § 4.4.

4.2.1 Diffusion sur un centre

La moyenne de la séquence de diffusion sur un centre se fait de la même façon qu'au chapitre 1 — équ. (1.29). La moyenne du premier terme de la série de Watson s'écrit alors simplement

$$\langle \mathbf{k} | \mathbf{t}(E) | \mathbf{k} \rangle.$$

Dans ce cas particulier, l'élément de matrice $\mathbf{t}$ doit être considéré totalement hors couche d'énergie, ce qui signifie que k est indépendant de $K = \frac{2m}{\hbar^2}E$. Cet élément de matrice $\mathbf{t}$ est donné par l'expression (2.19). Cette remarque sera importante pour la resommation des chaînes directes.

4.2.2 Diffusion sur deux centres

La première séquence de diffusion non triviale à moyenner est la chaîne directe (ij) de longueur 2. Celle-ci s'écrit

$$\begin{aligned}
&\frac{1}{V^2}\int d\mathbf{R}_i \int d\mathbf{R}_j \, \Theta(R_{ij}-2a) < \mathbf{k}' | \mathbf{t}_i(E) G_0^{(+)}(E) \mathbf{t}_j(E) | \mathbf{k} > \\
=&\frac{1}{4i}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{V^3}\int d\mathbf{R}_i \int d\mathbf{R}_j \, \Theta(R_{ij}-2a) e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i + i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \\
&\times \sum_{m_1}\sum_{m_2} e^{im_1\theta' - im_2\theta + i(m_1-m_2)(\pi/2-\theta_{ij})} \langle k' | \mathbf{t}(E) | K \rangle_{m_1} \langle K | \mathbf{t}(E) | k \rangle_{m_2} H^{(1)}_{m_1-m_2}(KR_{ij}) \\
=&\frac{1}{4i}\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{V^3}\sum_{m_1}\sum_{m_2} e^{im_1\theta' - im_2\theta} \langle k' | \mathbf{t}(E) | K \rangle_{m_1} \langle K | \mathbf{t}(E) | k \rangle_{m_2} \\
&\times \int d\mathbf{R}_{ij} \, \Theta(R_{ij}-2a) e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_{ij}} e^{i(m_1-m_2)(\pi/2-\theta_{ij})} H^{(1)}_{m_1-m_2}(KR_{ij}) \int d\mathbf{R}_j \, e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_j},
\end{aligned}$$

où $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$, θ_{ij} est l'angle de $\mathbf{R}_{ij}$, θ celui de $\mathbf{k}$ et θ' celui de $\mathbf{k}'$. L'intégration sur $\mathbf{R}_j$ donne une distribution de Dirac contraignant les vecteurs d'onde entrant et sortant à être identiques. Autrement dit, elle impose l'invariance par translation du système du moment que l'intégration se fait sur un volume infini. Cette invariance par translation est attendue puisque la moyenne efface les différences entre les configurations de désordre. Dans l'intégrale sur la différence de position entre les centres diffuseurs, le volume exclu est pris en compte par la distribution de Heaviside qui interdit l'interpénétration des centres diffuseurs. La plus petite distance entre deux potentiels est $2a$ (a étant le rayon du disque) et la plus grande distance est $L \to +\infty$.

$$\begin{aligned}
&\int d\mathbf{R}_{ij}\; \Theta(R_{ij} - 2a) e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_{ij}} e^{i(m_1-m_2)(\pi/2-\theta_{ij})} H^{(1)}_{m_1-m_2}(KR_{ij}) \\
&= \int_{2a}^{L} R_{ij} dR_{ij} H^{(1)}_{m_1-m_2}(KR_{ij}) \int_0^{2\pi} d\theta_{ij} e^{-ik'R_{ij}\cos(\theta_{ij}-\theta')+i(m_1-m_2)(\pi/2-\theta_{ij})} \\
&= 2\pi e^{-i(m_1-m_2)\theta'} \int_{2a}^{L} R_{ij} dR_{ij} H^{(1)}_{m_1-m_2}(KR_{ij}) J_{m_1-m_2}(k'R_{ij}) \\
&= 2\pi e^{-i(m_1-m_2)\theta'} \Big[\frac{R_{ij}}{K^2 - k'^2} \\
&\quad \times \left(k' H^{(1)}_{m_1-m_2}(KR_{ij}) J_{m_1-m_2-1}(k'R_{ij}) - K H^{(1)}_{m_1-m_2-1}(KR_{ij}) J_{m_1-m_2}(k'R_{ij})\right)\Big]_{2a}^{L}.
\end{aligned}$$

Pour obtenir cette expression, les formules (A.4) et (A.12a) ont été utilisées. Il faut se souvenir ici que K possède une partie imaginaire infinitésimale : le nombre d'onde K est associé à l'énergie physique du propagateur et est en fait $K + i\epsilon$ — voir le commentaire après l'équation (3.1). Cette prescription permet d'éliminer la contribution en $L \to +\infty$. Il vient alors

$$\begin{aligned}
&\overline{< \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E) G_0^{(+)}(E) \mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k} >} \\
&\quad = \frac{1}{4i}(2\pi)^3 \frac{\hbar^2}{2m} \frac{1}{V^3} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k}') \frac{2a}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \sum_{m_1} \sum_{m_2} \langle k|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_1} \langle K|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{m_2} \\
&\quad \times \left(K H^{(1)}_{m_1-m_2-1}(2Ka) J_{m_1-m_2}(2ka) - k H^{(1)}_{m_1-m_2}(2Ka) J_{m_1-m_2-1}(2ka) \right). \qquad (4.6)
\end{aligned}$$

On reconnaît dans cette expression le propagateur libre et la distribution de Dirac due à l'hypothèse d'invariance par translation du système. On remarque que les termes restant ne se séparent pas simplement en un produit de 2 matrices $\mathbf{t}$ semi hors couche, mais qu'il apparaît un couplage des ondes partielles dû à la taille finie des centres diffuseurs. Dans la limite de centres diffuseurs ponctuels ($a \to 0$), le terme de mélange des ondes partielles (terme entre parenthèses) ne devient pas une simple constante — voir annexe E, équ. (E.9) — et ne permet pas de découpler les deux matrices $\mathbf{t}$. Par contre, dans le cas où il est pris sur couche, il donne alors un wronskien, (A.11), c.-à-d. une constante qui permettrait de découpler les différentes ondes partielles. C'est ce qui arrive habituellement quand la moyenne est faite sans tenir compte des corrélations spatiales et quand l'élément de matrice $\mathbf{t}$ est choisi sur couche d'énergie — voir chap. 1.

4.2.3 Moyenne d'une chaîne directe de longueur quelconque

Le résultat trouvé pour la chaîne directe de longueur 2 se généralise sans difficulté à une chaîne directe de longueur quelconque. En introduisant la notation

$$A_{m_1,m_2}(K,k) = K H^{(1)}_{m_1-m_2-1}(2Ka) J_{m_1-m_2}(2ka) - k H^{(1)}_{m_1-m_2}(2Ka) J_{m_1-m_2-1}(2ka), \qquad (4.7)$$

la contribution d'une chaîne directe de longueur n_{diff} s'écrit

$$\overline{< \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_k(E)G_0^{(+)}(E)\cdots G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_l(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_n(E)|\mathbf{k} >}$$
$$= \left(\frac{1}{4i}\right)^{n_{diff}-1} (\frac{2\pi}{V})^{n_{diff}+1}\frac{\hbar^2}{2m}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\left(\frac{2a}{K^2-k^2+i\epsilon}\right)^{n_{diff}-1}$$
$$\sum_{\{m_i\}_{i=1..n_{diff}}} \langle k|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_1}\left(\prod_{i=2}^{n_{diff}-1}\langle K|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_i}\right)\langle K|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{m_{n_{diff}}}$$
$$\times\left(\prod_{i=1}^{n_{diff}-1} A_{m_i,m_{i+1}}(K,k)\right). \tag{4.8}$$

Remarquons encore une fois que le découplage des ondes partielles ne peut se produire que si on impose *à la main* que A soit sur couche, $A_{m_1,m_2}(K,K) = i/\pi a$. Seuls les éléments de matrice $\mathbf{t}$ externes sont encore semi hors couche. Le passage dans l'espace des positions de cette expression n'est pas triviale, puisque la présence d'un pôle d'ordre $n_{diff} - 1$ implique, par le théorème des résidus, $(n_{diff} - 2)$ dérivées d'un produit de fonctions de Bessel. Il est donc préférable de rester dans l'espace de Fourier pour effectuer la resommation de la série des chaînes directes.

Le cas des disques durs est immédiatement obtenu à l'aide de cette dernière expression en remplaçant $\langle K|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_i}$ par $-4iJ_{m_i}(Ka)/H^{(1)}_{m_i}(Ka)$ et, $\langle k|\mathbf{t}(E)|K\rangle_{m_i}$ et $\langle K|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{m_i}$ par $-4iJ_{m_i}(ka)/H^{(1)}_{m_i}(Ka)$.

Explicitement, la moyenne d'une chaîne directe de longueur n_{diff} composée de disques durs s'écrit

$$\overline{< \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_k(E)G_0^{(+)}(E)\ldots G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_l(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_n(E)|\mathbf{k} >}$$
$$= -4i(\frac{2\pi}{V})^{n_{diff}+1}\frac{\hbar^2}{2m}\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\left(\frac{-2a}{K^2-k^2+i\epsilon}\right)^{n_{diff}-1}$$
$$\sum_{\{m_i\}_{i=1..n_{diff}}}\frac{J_{m_1}(ka)}{H^{(1)}_{m_1}(Ka)}\left(\prod_{i=2}^{n_{diff}-1}\frac{J_{m_i}(Ka)}{H^{(1)}_{m_i}(Ka)}\right)\frac{J_{m_{n_{diff}}}(ka)}{H^{(1)}_{m_{n_{diff}}}(Ka)}\left(\prod_{i=1}^{n_{diff}-1}A_{m_i,m_{i+1}}(K,k)\right). \tag{4.9}$$

4.3 Resommation du propagateur : Cas des disques durs

4.3.1 Resommation des chaînes directes

Connaissant la moyenne de toutes les chaînes directes, il est possible de resommer chaque contribution, en faisant attention au cas particulier de la première séquence de diffusion,

$$\mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathbf{t}(E)\mathbf{G}_0^{(+)}(E),$$

où la matrice $\mathbf{t}$ est à prendre totalement hors couche. Pour resommer l'ensemble des chaînes directes, y compris la séquence de diffusion sur un seul potentiel, l'expression (2.19) de la matrice $\mathbf{t}$

doit être séparée en deux contributions :

$$\langle \mathbf{k}|\mathbf{t}(E)|\mathbf{k}\rangle = \left\{ 2\pi a \frac{\hbar^2}{2mV}\left[(k^2-K^2)\frac{a}{2} - K\sum_m \frac{J_m(ka)^2 J_{m-1}(Ka)}{J_m(Ka)}\right]\right\} - 4i\frac{\hbar^2}{2mV}\sum_m \frac{J_m(ka)^2}{J_m(Ka)H_m^{(1)}(Ka)}.$$

Le deuxième terme de cette matrice $\mathbf{t}$ ressemble à ce que l'on pourrait attendre de l'écriture de l'expression (4.9) dans le cas d'une seule diffusion. Ce terme entre dans la série géométrique des chaînes directes. Lorsqu'il est pris en $k = K$, il donne exactement l'élément de matrice $\mathbf{t}$ sur couche. Par conséquent, la partie entre accolades que nous noterons $f_K^{\text{off}}(k)$ est une quantité strictement hors couche qui doit s'annuler pour $k = K$. Le théorème d'addition $(A.13)$ des fonctions de Bessel permet d'écrire

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} J_m(Ka)J_{m-\nu}(Ka) = J_{-\nu}(0) = \delta_{\nu,0}.$$

Ce qui implique que la relation $f_K^{\text{off}}(K) = 0$ est vérifiée. Le propagateur moyenné est

$$\overline{G}_{dir}(E) = \mathbf{G}_0^{(+)}(E) + \mathbf{G}_0^{(+)}(E)\overline{\mathcal{T}}\mathbf{G}_0^{(+)}(E). \tag{4.10}$$

En traitant $f_K^{\text{off}}(k)$ séparément, les séquences de diffusion directes peuvent se resommer et le propagateur devient, si l'on oublie les chaînes indirectes,

$$\begin{aligned} < \mathbf{k}'|\overline{G}_{dir}(E)|\mathbf{k} >= &\frac{2m}{\hbar^2}\frac{\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}}{K^2-k^2+i\epsilon} \\ &\times \left\{1 + \frac{i}{\pi a} tr\left[DF(1-AF)^{-1}D\right] + \frac{2m}{\hbar^2}\rho\frac{f_K^{\text{off}}(k)}{K^2-k^2+i\epsilon}\right\}, \end{aligned} \tag{4.11}$$

où tr désigne une trace sur les ondes partielles. La matrice A est définie par l'équation (4.7), et les matrices D et F sont données par

$$D_{ij} = \delta_{ij}\frac{J_i(ka)}{J_i(Ka)} \quad \text{et} \quad F_{ij} = \delta_{ij}\frac{-4\pi a\rho}{K^2-k^2+i\epsilon}\frac{J_i(Ka)}{H_i^{(1)}(Ka)}. \tag{4.12}$$

Le terme strictement hors couche contenant $f_K^{\text{off}}(k)$ est traité dans l'annexe F où l'on montre qu'il a une contribution nulle.

Dans le cas où l'on s'intéresse seulement à l'onde s, l'équation matricielle (4.11) devient une simple équation algébrique.

$$< \mathbf{k}'|\overline{G}_{dir}(E)|\mathbf{k} >= \frac{2m}{\hbar^2}\frac{\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}}{K^2-k^2+i\epsilon}\left\{1 - 4i\rho\frac{B_{00}D_{00}^2}{K^2-k^2+i\epsilon+4\pi\rho a A_{00}B_{00}}\right\},$$

où

$$B_{ij} = \delta_{ij}\frac{J_i(Ka)}{H_i^{(1)}(Ka)}.$$

En utilisant la relation $(ab)^{-1} = (a-b)^{-1}(b^{-1} - a^{-1})$, on obtient

$$\begin{aligned} < \mathbf{k}'|\overline{G}_{dir}(E)|\mathbf{k} >= & \frac{2m}{\hbar^2} \frac{\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \Big(1 - \frac{i}{\pi a} \frac{D_{00}^2}{A_{00}} \Big) \\ & + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{i}{\pi a} \frac{D_{00}^2}{A_{00}} \frac{\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}}{K^2 - k^2 + i\epsilon + 4\pi\rho a A_{00} B_{00}}. \end{aligned}$$

Le premier terme de $\overline{G}_{dir}(E)$ s'annule lors de sa transformation de Fourier inverse (à la condition que $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \geq 2a$) et le propagateur devient

$$< \mathbf{k}'|\overline{G}_{dir}(E)|\mathbf{k} >= + \frac{2m}{\hbar^2} \frac{i}{\pi a} \frac{D_{00}^2}{A_{00}} \frac{\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}}{K^2 - k^2 + i\epsilon + 4\pi\rho a A_{00} B_{00}}. \tag{4.13}$$

$\overline{G}_{dir}(E,\mathbf{k})$ est une fonction paire de k. Sa transformée de Fourier inverse s'écrit

$$\frac{V}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} k dk J_0(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \overline{G}_{dir}(E,\mathbf{k}).$$

Le contour d'intégration peut être fermé dans le demi-plan supérieur. Les effets hors couche sont traités de la même façon qu'au paragraphe 2.4.3. Pour simplifier les notations, introduisons les fonctions $t(k) \equiv -4\pi a A_{00} B_{00}$ et $f(k) = t(k)/(k+K)$. Le pôle du propagateur est donné, à faible densité (*i.e.* $\rho \to 0$), par

$$\tilde{K} = K - \rho f(K) + \rho^2 f(K) f'(K) + O(\rho^3), \tag{2.25}$$

où

$$f(K) = -\frac{2i}{K} \frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)} \approx -i \frac{\pi^2}{2K \ln^2 Ka} - \frac{\pi}{K \ln Ka} \tag{4.14}$$

et sa dérivée est

$$f'(K) = \frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)} \left[\frac{i}{K^2} - 4\pi a^2 (J_0(2Ka) H_0^{(1)}(2Ka) + J_1(2Ka) H_1^{(1)}(2Ka)) \right].$$

Dans la limite $Ka \to 0$,

$$f'(K) \approx \frac{i}{K^2} \frac{1}{1 + \frac{2i}{\pi} \ln \frac{Kae^\gamma}{2}} - 4\pi a^2 \left(1 + \frac{i}{\pi} \frac{2\ln 2 - 1}{1 + \frac{2i}{\pi} \ln \frac{Kae^\gamma}{2}} \right). \tag{4.15}$$

Le pôle s'écrit alors

$$\tilde{K} \approx K + \rho \frac{2i}{K} \frac{1}{1 + \frac{2i}{\pi} \ln \frac{Kae^\gamma}{2}} + \rho^2 \left(\frac{2}{K^3} \frac{1}{(1 + \frac{2i}{\pi} \ln \frac{Kae^\gamma}{2})^2} + \frac{8i\pi a^2}{K(1 + \frac{2i}{\pi} \ln \frac{Kae^\gamma}{2})^2} \right). \tag{4.16}$$

Le premier ordre en densité redonne bien la matrice $\mathbf{t}$ sur couche d'énergie (cf. chap. 2). Le libre parcours moyen obtenu à partir de la partie imaginaire du pôle ($l = 1/2\Im\mathrm{m}\tilde{K}$) à l'approximation du premier ordre en densité, est le libre parcours moyen, l_0, de Boltzmann à deux dimensions.

$$l_0 \approx \frac{K \ln^2 Ka}{\rho \pi^2}.$$

Le premier terme d'ordre 2 en densité, dans l'expression (4.16) du pôle, provient de la matrice $\mathbf{t}$ sur couche d'énergie — voir l'équation (2.26) — et domine le second terme d'ordre 2 qui provient de la matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie. Ces corrections du 2$^{\text{e}}$ ordre en densité dans le pôle conduisent à des corrections du premier ordre en densité dans le libre parcours moyen, mais ce ne sont pas les seules. Elles proviennent de l'énergie propre qui est au premier ordre

$$\Sigma^{(1)} = -4\pi\rho A_{00}B_{00}.$$

Cependant, d'autres corrections d'ordre 2 existent, qui proviennent de la resommation des diagrammes faisant intervenir deux centres diffuseurs distincts. Elles apportent un deuxième terme dans l'énergie propre, qui s'écrit

$$\Sigma = \Sigma^{(1)} + \Sigma^{(2)} + \mathcal{O}(\rho^3),$$

et contribuent aux corrections du premier ordre en densité du libre parcours moyen. Le calcul de $\Sigma^{(2)}$ fait l'objet du prochain paragraphe.

4.3.2 Corrections à deux corps

Le calcul des corrections à deux corps fait intervenir tous les termes de diffusion contenant seulement deux centres diffuseurs. Ces termes forment une série géométrique : $(iji) + (ijij) + (ijiji) + (ijijij) + \cdots$ qui peut être resommée avant d'effectuer la moyenne. Les propagateurs libres apparaissant entre chaque diffusion peuvent être remplacés par les propagateurs moyennés évalués au paragraphe précédent. En termes de diagrammes, cela revient à resommer beaucoup plus de graphes. En effet, l'insertion de propagateurs moyennés représente l'insertion de toutes les chaînes directes possibles entre les diffuseurs i et j, les séquences de diffusion du type $(ij\mathsf{klmn}ijiji)$ sont alors prises en compte. On peut vérifier que cette insertion de propagateurs resommés se fait sans problème de double comptage ni divergence, sauf pour la chaîne (iji) dont le calcul fera d'ailleurs l'objet du paragraphe 4.6. Cependant, cette resommation supplémentaire n'est pas nécessaire pour l'évaluation des corrections du deuxième ordre en densité. Les séquences de diffusion telles que $(ij\mathsf{klmn}ijiji)$ sont d'ordre supérieur à 2 en densité et n'ont donc pas leur place dans un calcul qui se limite à l'ordre deux.

Utilisant l'expression générale (3.5) d'une séquence de diffusion dans l'approximation de l'onde s, l'ensemble des termes à deux diffuseurs forme en fait deux séries géométriques ; une série contenant les diffusions, qui partant d'un centre i, reviennent sur ce centre i : $(iji) + (ijiji) + \cdots$ et une série dans laquelle l'électron « entre » en i et « ressort » par j après plusieurs diffusions : $(ijij) + (ijijij) + \cdots$. La resommation de ces deux séries se met sous la forme

$$\begin{aligned}(iji) + (ijij) + \cdots = &- 4i\frac{\hbar^2}{2mV}\frac{J_0(k'a)}{H_0^{(1)}(Ka)}\frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)}\frac{J_0(ka)}{H_0^{(1)}(Ka)}H_0^{(1)}(KR_{ij})^2 \\ &\times \frac{e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\mathbf{R}_i}}{1-\left[\frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)}H_0^{(1)}(KR_{ij})\right]^2}\left\{1 - e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{ij}}\frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)}H_0^{(1)}(KR_{ij})\right\}.\end{aligned} \tag{4.17}$$

La moyenne de cette série consiste à intégrer sur les positions $\mathbf{R}_i$ et $\mathbf{R}_j$ des centres diffuseurs i et

j et donne la contribution des corrections à deux corps au deuxième ordre de l'énergie propre

$$\Sigma^{(2)}(k) = -4i\frac{\hbar^2}{2m}\rho^2\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\left(\frac{J_0(ka)}{H_0^{(1)}(Ka)}\right)^2\frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)} \times \int d\mathbf{R}_{ij}H_0^{(1)}(KR_{ij})^2\frac{1-e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_{ij}}\frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)}H_0^{(1)}(KR_{ij})}{1-\left[\frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)}H_0^{(1)}(KR_{ij})\right]^2}. \tag{4.18}$$

L'intégration sur l'angle θ_{ij}, que forme le vecteur $\mathbf{R}_{ij}$ avec l'axe des abscisses, donne

$$\Sigma^{(2)}(k) = -8i\pi\frac{\hbar^2}{2m}\rho^2\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\left(\frac{J_0(ka)}{H_0^{(1)}(Ka)}\right)^2\frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)} \times \int_{2a}^{\infty}\frac{R_{ij}dR_{ij}H_0^{(1)}(KR_{ij})^2}{1-\left[\frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)}H_0^{(1)}(KR_{ij})\right]^2}\left(1-\frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)}J_0(kR_{ij})H_0^{(1)}(KR_{ij})\right). \tag{4.19}$$

Cette partie de l'énergie propre est aussi hors couche d'énergie (elle dépend de k) et la prendre sur couche revient à négliger un terme d'ordre supérieur en densité (c.-à-d. d'ordre ρ^3). Elle peut alors s'écrire

$$\Sigma^{(2)}(k) = -\frac{8i\pi}{K^2}\frac{\hbar^2}{2m}\rho^2\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}t^3\int_{2Ka}^{\infty}\frac{xdxH_0^{(1)}(x)^2\left(1-tJ_0(x)H_0^{(1)}(x)\right)}{1-\left[tH_0^{(1)}(x)\right]^2}+O(\rho^3), \tag{4.20}$$

où la notation $t \equiv \frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)}$ a été introduite. Dans le cas des diffuseurs ponctuels, ce terme de corrections à deux corps est le premier terme dépendant du nombre d'onde k, *i.e.* hors couche d'énergie [92]. Dans le cas des diffuseurs de taille finie, une première correction dépendant du nombre d'onde a pu être obtenue en (4.16) grâce à la connaissance de la matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie. Cette correction apparaît à l'ordre deux en densité ; elle doit donc être ajoutée à celle provenant de (4.20). L'expression (4.20) est très proche de celle obtenue pour les diffuseurs ponctuels [92].

Les figures 4.1 représentent l'allure de l'intégrand de l'équation (4.20). La série qui resomme les séquences contenant un nombre impair de diffuseurs (c.-à-d. celles commençant et terminant avec le même diffuseur) donne une fonction oscillante qui ne décroît pas lorsque $x \to \infty$, alors que la série contenant un nombre pair de diffuseurs est une fonction oscillante atténuée.

La formule (4.20) donne une expression compacte du 2$^{\text{e}}$ ordre en densité de l'énergie propre, mais son évaluation n'est pas triviale et il est préférable de l'évaluer en laissant la série développée. L'intégrale

$$I \equiv \int_{2Ka}^{\infty}xdx\frac{H_0^{(1)}(x)^2\left(1-tJ_0(x)H_0^{(1)}(x)\right)}{1-\left[tH_0^{(1)}(x)\right]^2} \tag{4.21}$$

est remise sous la forme de deux séries, notées I_i et I_p.

$$I_i \equiv \int_{2Ka}^{\infty}xdxH_0^{(1)}(x)^2\left\{1+\left(tH_0^{(1)}(x)\right)^2+\left(tH_0^{(1)}(x)\right)^4+\cdots\right\}. \tag{4.22}$$

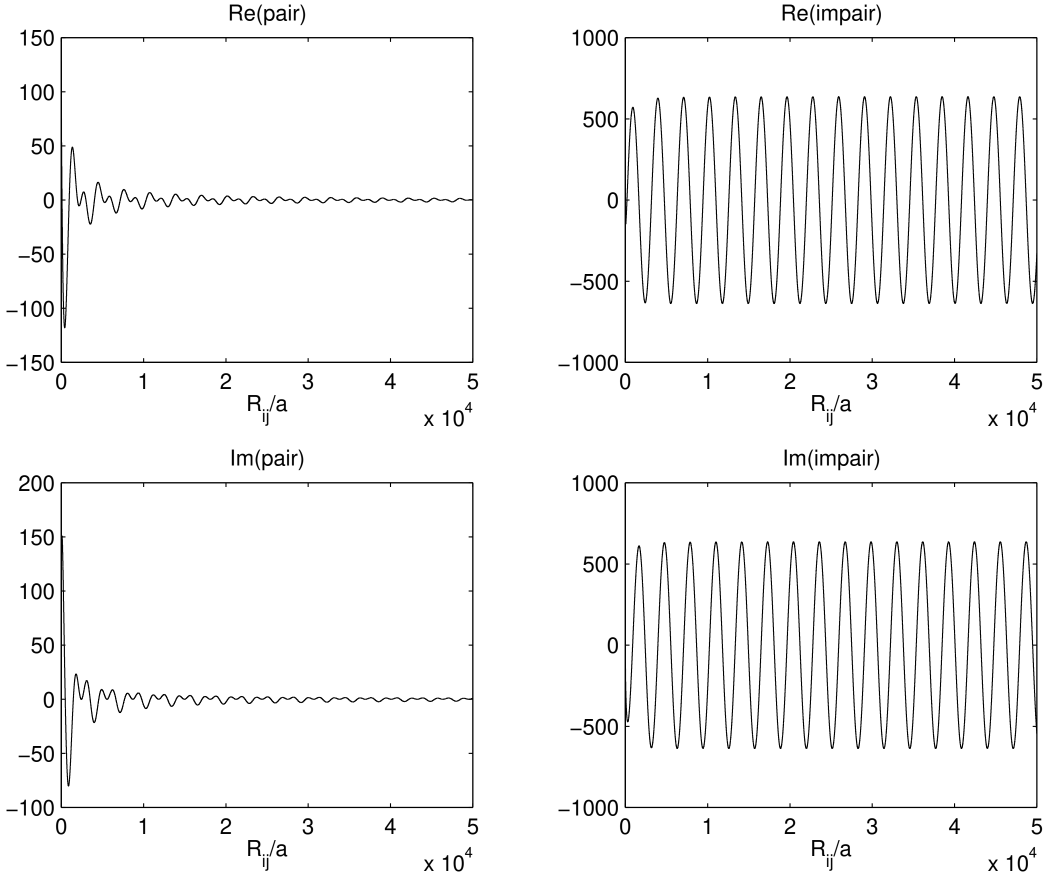


FIG. 4.1 – *Allure des parties réelle et imaginaire des séries* $(ijij) + (ijijij) + \cdots$ *(colonne de gauche) et* $(iji) + (ijiji) + (ijijiji) + \cdots$ *(colonne de droite) pour une valeur donnée de* Ka *(*$= .001$*).*

Cette série représente les séquences de diffusion partant de i et retournant en i. La série

$$I_p \equiv t \int_{2Ka}^{\infty} x dx J_0(x) H_0^{(1)}(x)^3 \left\{ 1 + \left(tH_0^{(1)}(x) \right)^2 + \left(tH_0^{(1)}(x) \right)^4 + \cdots \right\}. \tag{4.23}$$

représente les séquences de diffusion allant du diffuseur i au diffuseur j.

Les expressions asymptotiques (A.10) des fonctions de Bessel et Hankel impliquent une divergence infrarouge ($x \to \infty$) pour le premier terme de chaque série. Le premier terme de I_i, donné par (iji), se comporte à l'infini comme $\int^{\infty} dx$, il diverge linéairement. Le premier terme de la série I_p, donné par $(ijij)$ diverge logarithmiquement. Cette divergence disparaît lorsque l'énergie physique est prise au-dessus de l'axe réel, c.-à-d. en utilisant la prescription $K \to K + i\epsilon$. Ceci est démontré par le calcul de la séquence de diffusion (iji) qui est la seule chaîne indirecte qui peut être évaluée de façon exacte (voir l'annexe G). La partie infinitésimale en $i\epsilon$ permet une décroissance exponentielle des fonctions de Hankel à l'infini.

Contrairement à ce qui est dit dans le cas des diffuseurs ponctuels [92], il n'y a pas de divergence ultraviolette ($x \to 0$) dans le premier terme de la série I_p et il n'est pas nécessaire de resommer la série entière pour l'éliminer. L'intégration angulaire, qui est déjà faite dans (4.23) — voir le passage de (4.18) à (4.19), est suffisante pour faire disparaître cette pseudo-divergence.

Nous verrons un peu plus loin que ceci est également vrai à trois dimensions.

Les intégrales à évaluer sont du type

$$I_{i,n} \equiv \int_{2Ka}^{L} xdx \left(H_0^{(1)}(x)\right)^{2n+2}$$

et

$$I_{p,n} \equiv \int_{2Ka}^{L} xdx J_0(x) \left(H_0^{(1)}(x)\right)^{2n+3},$$

où L est la taille linéaire su système ($L \to \infty$). Le calcul de $I_{i,0}$ peut être fait de façon exacte, car sa primitive est connue et est donnée par la formule (A.12). Ainsi,

$$I_{i,0} = \frac{L^2}{2}\left(H_0^{(1)}(KL)^2 + H_1^{(1)}(KL)^2\right) - 2(Ka)^2\left(H_0^{(1)}(2Ka)^2 + H_1^{(1)}(2Ka)^2\right).$$

La prescription $K \to K + i\epsilon$ permet d'annuler la contribution due à L et un développement pour $Ka \to 0$ du deuxième terme donne

$$I_{i,0} \approx \frac{2}{\pi^2} - 2(Ka)^2\left(1 + \frac{2i}{\pi}\ln\frac{Kae^{\gamma}}{2}\right)^2. \tag{4.24}$$

Les termes pour $n \geq 1$ n'ont pas de primitives connues et leur évaluation est obtenue au moyen de la méthode du col. Les intégrales $I_{i,n}$ et $I_{p,n}$ sont dominées par le comportement de $H_0^{(1)}(x)$ pour $x \ll 1$. Le développement à l'origine des fonctions de Bessel et de Hankel, donné par les formules (A.3) et (A.9), permet de réduire les intégrales $I_{i,n}$ et $I_{p,n}$ à une seule intégrale du type

$$a_n \approx \left(\frac{2i}{\pi}\right)^n \int_{2Ka}^{\Lambda} xdx \ln^n cx,$$

où Λ est une coupure inférieure à 1 et $c = e^{\gamma}/2i$. Cette approximation est d'autant meilleure que n est plus grand. Le changement de variable $y = -\ln cx$ conduit à

$$a_n \approx \left(\frac{2i}{\pi}\right)^n \frac{1}{c^2}\int_{-\ln 2cKa}^{-\ln c\Lambda} e^{-2y+n\ln y}dy$$

Lorsque n est grand, l'intégrand est maximal pour $y = n/2$. la méthode du col [83, p. 274] donne alors le développement, pour n grand,

$$a_n \approx \left(\frac{2i}{\pi}\right)^n \frac{1}{c^2}e^{-n}\left(\frac{n}{2}\right)^n \frac{\sqrt{2\pi n}}{2} \approx -2e^{-2\gamma}\left(\frac{i}{\pi}\right)^n n! \tag{4.25}$$

Ce résultat permet d'écrire l'intégrale (4.21) sous la forme

$$I = I_i - I_p \approx \sum_{n\geq 0} a_{2n+2}t^{2n} - \sum_{n\geq 0} a_{2n+3}t^{2n+1}, \tag{4.26}$$

où les a_n sont donnés par (4.25) lorsque n est grand. L'approximation $t \approx \frac{1}{1+\frac{2i}{\pi}\ln\frac{Kae^{\gamma}}{2}}$ montre que cette série est composée de corrections logarithmiques dont le premier terme provenant de la séquence (iji) est simplement $a_2 \approx \frac{2}{\pi^2}$.

Le 2$^{\mathrm{e}}$ ordre en densité de l'énergie propre est alors, d'après (4.20), (4.21) et (4.26),

$$\boxed{\Sigma^{(2)} \approx -\frac{\hbar^2}{2m}\rho^2\frac{16i}{\pi K^2}\left(\frac{1}{1+\frac{2i}{\pi}\ln K'a}\right)^3 \approx \frac{\hbar^2}{2m}\left(\frac{\pi\rho}{K}\right)^2\left\{\frac{2}{\ln^3 K'a} + \frac{3\pi i}{\ln^4 K'a}\right\},} \tag{4.27}$$

où $K' \equiv \frac{Ke^{\gamma}}{2}$.

4.3.3 Recouvrement de centres diffuseurs

La moyenne, telle qu'elle est effectuée dans ce chapitre, exclue les configurations pour lesquelles deux centres diffuseurs successifs s'interpénètrent. Cependant, l'approximation utilisée pour la moyenne des chaînes directes tolère les configurations pour lesquelles deux centres diffuseurs non successifs, appartenant à une chaîne directe, se recouvrent. Par exemple, la configuration où les diffuseurs i et k se recouvrent dans la chaîne directe (ijk), n'est pas exclue de la moyenne d'ensemble (4.5) alors qu'elle devrait l'être.

La séquence (ijk) est en fait la première chaîne directe dans laquelle deux diffuseurs peuvent se recouvrir ; les séquences (i) et (ij) n'offrent pas la possibilité d'avoir un recouvrement entre les centres diffuseurs qui les composent. La première correction qu'apporte les configurations où deux diffuseurs non successifs se recouvrent, est donnée par l'exemple ci-dessus avec (ijk). Elle est d'ordre ρ^3 puisqu'il faut au minimum trois diffuseurs pour avoir un recouvrement entre diffuseurs non successifs. Pour que ces configurations engendrent des corrections au libre parcours moyen, il faut resommer une série formée par ces configurations. Cette série peut contenir des séquences du type $(ijkl\cdots mn)$, dans laquelle les centres occupent successivement les positions i et j — *i.e.* $(ijiji\cdots)$, ou bien des séquences dans lesquelles seuls deux diffuseurs se recouvrent — *i.e.* $(ijkl\cdots mj)$. Quoi qu'il en soit, le premier terme de cette série est d'ordre ρ^3 et sa resommation conduirait à des corrections à l'énergie propre du même ordre. Il n'est donc pas nécessaire de se préoccuper de ces corrections ici.

4.3.4 Corrections de volume exclu

Nous appelons *corrections de volume exclu* les corrections aux quantités moyennes engendrées par le fait que le volume couvert par l'intégration sur la position d'un diffuseur n'est pas le volume V, mais un volume inférieur qui tient compte du non recouvrement des centres diffuseurs.

Le développement (4.3) de la fonction de corrélation g apparaissant dans la resommation des chaînes directes a conduit, à l'approximation $g \approx g_0$, à un terme du premier ordre en densité dans l'énergie propre. La resommation des chaînes directes, à l'approximation $g \approx g_0 + \rho g_1$, conduit à un terme du 2e ordre en densité dans l'énergie propre. Cela montre que le volume exclu doit être pris en compte lors du calcul de corrections à l'énergie propre d'ordre ρ^2.

Le terme g_1 est donné, à l'approximation de superposition [42], par

$$g_1(R_{12}) = \Theta(R_{12} - 2a) \int d\mathbf{R}_i \left[\Theta(R_{1i} - 2a) - 1\right] \left[\Theta(R_{i2} - 2a) - 1\right].$$

Le premier ordre en densité de la fonction de corrélation est donc proportionnel au volume engendré par un disque de rayon $2a$.

$$g_1(R_{12}) \propto v_e = \pi(2a)^2.$$

Il s'ensuit que la contribution de ρg_1 à l'énergie propre est en $\rho^2 v_e \propto \rho^2 a^2$. Sans entrer dans le détail du calcul de ces corrections, on voit qu'elles sont négligeables devant $\Sigma^{(2)}$, donné en (4.27). On verra au § 4.5 qu'elles apportent une correction au libre parcours moyen du même ordre que les effets hors couche d'énergie.

4.4 Moyenne des chaînes directes à trois dimensions

4.4.1 Moyenne de la séquence (ij)

La moyenne de la séquence (ij) est aussitôt obtenue en utilisant

$$i^{l_2}\int d\mathbf{R}_{ij}e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_{ij}}Y_{l_2}^{m_2*}(\widehat{\mathbf{R}_{ij}})h_{l_2}^{(+)}(Kr_{ij}) = 4\pi Y_{l_2}^{m_2*}(\widehat{\mathbf{k}'})\frac{4a^2}{K^2-k'^2+i\epsilon}$$
$$\times\left(Kj_{l_2}(2k'a)h_{l_2-1}^{(+)}(2Ka)-k'j_{l_2-1}(2k'a)h_{l_2}^{(+)}(2Ka)\right). \quad (4.28)$$

Cette identité se démontre à l'aide de la relation d'orthonormalisation des harmoniques sphériques (A.37) et la primitive (A.35). Elle permet d'écrire

$$\overline{<\mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k}>} = -\frac{1}{V^2}\frac{\hbar^2}{2mV}\frac{(4\pi)^{7/2}}{K}(2\pi)^3\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k})$$
$$\times\sum_{l_1=0}^{+\infty}\sum_{m_1=-l_1}^{+l_1}\sqrt{2l_1+1}Y_{l_1}^{m_1*}(\widehat{\mathbf{k}})\sum_{l_2=0}^{+\infty}\sum_{m_2=-l_2}^{+l_2}\sqrt{2l_2+1}Y_{l_2}^{m_2*}(\widehat{\mathbf{k}})\sum_{l_3=0}^{+\infty}\sum_{m_3=-l_3}^{+l_3}\sqrt{2l_3+1}Y_{l_3}^{m_3*}(\widehat{\mathbf{k}})$$
$$\times\begin{pmatrix}l_1 & l_2 & l_3\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}l_1 & l_2 & l_3\\ m_1 & m_2 & m_3\end{pmatrix}\frac{j_{l_1}(ka)}{h_{l_1}^{(+)}(Ka)}\frac{j_{l_3}(ka)}{h_{l_3}^{(+)}(Ka)}$$
$$\times\frac{4a^2}{K^2-k^2+i\epsilon}\left(Kj_{l_2}(2ka)h_{l_2-1}^{(+)}(2Ka)-kj_{l_2-1}(2ka)h_{l_2}^{(+)}(2Ka)\right). \quad (4.29)$$

Comme à deux dimensions, introduisons la notation

$$A_l(K,k)\equiv Kj_l(2ka)h_{l-1}^{(+)}(2Ka)-kj_{l-1}(2ka)h_l^{(+)}(2Ka).$$

Cette quantité, prise sur couche d'énergie ($k=K$), est simplement le wronskien, noté W, que multiplie $-K$:

$$A_l(K,K)\equiv -KW(h_l^{(+)}(2Ka),j_l(2Ka)) = -\frac{1}{4Ka^2}.$$

4.4.2 Expression générale

La séquence de n diffusions s'écrit

$$\boxed{\begin{aligned}&\overline{<\mathbf{k}'|\mathbf{t}_1(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_3(E)G_0^{(+)}(E)\cdots G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_{2n-1}(E)|\mathbf{k}>}\\
&=\frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{V^n}\frac{(2\pi)^3}{V}\delta(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\frac{(4\pi)^{\frac{3n+1}{2}}}{K}\left[\frac{-4a^2}{K^2-k^2+i\epsilon}\right]^{n-1}\\
&\sum_{\{l_j,m_j\}_{j=1..2n-1}}\left\{\sqrt{2l_1+1}Y_{l_1}^{m_1*}(\widehat{\mathbf{k}})\frac{j_{l_1}(ka)}{h_{l_1}^{(+)}(Ka)}\right.\\
&\sqrt{2l_{2n-1}+1}Y_{l_{2n-1}}^{m_{2n-1}*}(\widehat{\mathbf{k}})\frac{j_{l_{2n-1}}(ka)}{h_{l_{2n-1}}^{(+)}(Ka)}\\
&\left[\prod_{j=1}^{n-1}\sqrt{2l_{2j}+1}\begin{pmatrix}l_{2j-1} & l_{2j} & l_{2j+1}\\ 0 & 0 & 0\end{pmatrix}\begin{pmatrix}l_{2j-1} & l_{2j} & l_{2j+1}\\ m_{2j-1} & m_{2j} & m_{2j+1}\end{pmatrix}Y_{l_{2j}}^{m_{2j}*}(\mathbf{k})A_{l_{2j}}(K,k)\right]\\
&\left.\left[\prod_{j=1}^{n-2}(-1)^{m_{2j+1}}(2l_{2j+1}+1)\frac{j_{l_{2j+1}}(Ka)}{h_{l_{2j+1}}^{(+)}(Ka)}\right]\right\},\end{aligned}}$$

(4.30)

où les centres diffuseurs sont indicés par les nombres impairs.

Contrairement au cas à deux dimensions, nous n'écrirons pas ici de formule générale pour le propagateur resommé, mais nous nous plaçons directement dans le régime où $Ka \ll 1$ dans lequel seule l'onde s subsiste. Lorsque $Ka \to 0$, le rapport des fonctions de Bessel et Hankel sphériques atténue exponentiellement les ondes partielles d'ordre supérieur. Dans l'expression (4.30), cela implique que $l_{2j+1} = 0$ quelque soit $j = 1..n$. La relation du triangle,

$$|l_{2j-1} - l_{2j+1}| \leq l_{2j} \leq |l_{2j-1} + l_{2j+1}|,$$

imposée par les symboles $3j$ contraint l_{2j} à être nul. Ainsi, la moyenne d'une séquence de diffusion quelconque à l'approximation de l'onde s s'écrit

$$\begin{aligned}
&\overline{< \mathbf{k}'|\mathbf{t}_1(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_3(E)G_0^{(+)}(E)\cdots G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_{2n-1}(E)|\mathbf{k} >} \\
&\approx \frac{\hbar^2}{2m}\frac{1}{V^n}\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}\frac{(4\pi)^n}{K}\left[\frac{-4a^2A_0(K,k)}{K^2-k^2+i\epsilon}\right]^{n-1}\left(\frac{j_0(ka)}{h_0^{(+)}(Ka)}\right)^2\left(\frac{j_0(Ka)}{h_0^{(+)}(Ka)}\right)^{n-2}. \qquad (4.31)
\end{aligned}$$

Cette expression s'applique à toutes les chaînes directes de longueur $n \geq 2$. La séquence de diffusion sur un seul centre est particulière car la matrice $\mathbf{t}$ doit être considérée comme étant complètement hors couche d'énergie — voir le 1^er terme de la série de Watson (1.29) — alors que ce n'est pas le cas des autres séquences de diffusion dont les éléments de matrice $\mathbf{t}$ internes sont sur couche et les éléments de matrice $\mathbf{t}$ externes semi hors couche. Il faut séparer la matrice $\mathbf{t}$ individuelle en deux parties, dont une est de la forme suggérée par (4.31).

$$\begin{aligned}
\langle \mathbf{k}|\mathbf{t}_K|\mathbf{k}\rangle =& \frac{\hbar^2}{2mV}4\pi a^2\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)\left\{\frac{a}{2}(k^2-K^2)\left[(j_l(ka))^2 - j_{l-1}(ka)j_{l+1}(ka)\right]\right. \\
&\left. + kj_l(ka)j_{l-1}(ka) - K(j_l(ka))^2\frac{j_{l-1}(Ka)}{j_l(Ka)}\right\} \\
&+ \frac{\hbar^2}{2mV}4\pi a^2\sum_{l=0}^{+\infty}(2l+1)\frac{1}{Ka^2}\frac{(j_l(ka))^2}{j_l(Ka)h_l^{(+)}(Ka)}. \qquad (4.32)
\end{aligned}$$

La première partie de la matrice $\mathbf{t}$ est notée $f_K^{3\text{d}}(k)$. Il s'ensuit que le propagateur moyenné est

$$\begin{aligned}
\overline{G_{\text{dir}}}(E,\mathbf{k}) \approx& \frac{f_K^{3\text{d}}(k)}{(K^2-k^2+i\epsilon)^2} + \frac{2m}{\hbar^2}\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}\frac{1}{K^2-k^2+i\epsilon}\left\{1\right. \\
&\left. + \frac{4\pi\rho}{K}\frac{j_0(ka)^2}{j_0(Ka)h_0^{(+)}(Ka)}\frac{1}{K^2-k^2+16\pi\rho a^2\frac{j_0(Ka)}{h_0^{(+)}(Ka)}A_0(K,k)}\right\}. \qquad (4.33)
\end{aligned}$$

On montre facilement que la contribution du premier terme s'annule lors du calcul de la transformée de Fourier inverse de $\overline{G_{\text{dir}}}(E,\mathbf{k})$. La démonstration suit les mêmes lignes que l'annexe F et utilise la relation [4, p. 440]

$$\sum_l (2l+1)j_l(z)j_{l+\nu}(z) = \delta_{\nu,l}.$$

Par les mêmes considérations qui ont permis d'écrire l'équation (4.13), la resommation des chaînes directes conduit finalement à

$$\overline{G_{\text{dir}}}(E,\mathbf{k}) \approx -\frac{2m}{\hbar^2}\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}\frac{j_0(ka)^2}{j_0(Ka)^2}\frac{1}{4Ka^2A_0(K,k)}\frac{1}{K^2-k^2+16\pi\rho a^2\frac{j_0(Ka)}{h_0^{(+)}(Ka)}A_0(K,k)}. \qquad (4.34)$$

Le pôle $\tilde{K}$ du propagateur $\overline{G_{\text{dir}}}(E,\mathbf{k})$ s'écrit

$$\tilde{K} = K - \rho f(K) + \rho^2 f(K) f'(K) + O(\rho^3) \qquad (2.25)$$

avec

$$\begin{aligned} f(K) =& \frac{2\pi a}{K} - 2i\pi a^2 - \frac{4}{3}\pi K a^3 + \frac{2}{3} i\pi K^2 a^4 + \mathcal{O}(a^5) \\ f(K)f'(K) =& -\frac{2\pi^2 a^2}{K^3} + \frac{4i\pi^2 a^3}{K^2} - \underbrace{\frac{34\pi^2 a^4}{3K}}_{\text{h.c. + s.c.}} + O(a^5). \end{aligned} \qquad (4.35)$$

L'ordre a^4 de $f(K)f'(K)$ contient des effets hors couche et sur couche. Rappelons que seule l'onde s est prise en compte et que l'onde p apparaît également à l'ordre a^4, mais sa contribution est négligée ici. Le développement est quand même fait jusqu'à cet ordre pour pouvoir le comparer avec la contribution du volume exclu.

4.4.3 Corrections à deux corps

Les corrections à deux corps se mettent sous la même forme que les expressions à deux dimensions — voir l'expression (4.20).

$$\begin{aligned} \Sigma^{(2)}(k) = & \frac{\hbar^2}{2m} \frac{(4\pi)^2}{K} \rho^2 \delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \left(\frac{j_0(Ka)}{h_0^{(+)}(Ka)} \right)^3 \\ & \times \int_{2a}^{\infty} \frac{r^2 dr h_0^{(+)}(Kr)^2 \left(1 - \frac{j_0(Ka)}{h_0^{(+)}(Ka)} j_0(Kr) h_0^{(+)}(Kr) \right)}{1 - \left[\frac{j_0(Ka)}{h_0^{(+)}(Ka)} h_0^{(+)}(Kr) \right]^2} + O(\rho^3). \end{aligned} \qquad (4.36)$$

L'intégrale, que nous appellerons I, s'écrit en termes de fonctions sinusoïdales à l'aide des expressions (A.31) pour les fonctions de Bessel et Hankel sphériques.

$$I = \frac{1}{z^2} \int_2^{\infty} dx \; e^{2izx} \frac{1 - \frac{\sin z \sin zx}{(zx)^2} e^{iz(x-1)}}{1 - \left(\frac{\sin z}{zx} e^{iz(x-1)} \right)^2}, \qquad (4.37)$$

où $z \equiv Ka$. Comme à 2 dimensions, le premier terme de chacune des séries (notées I_i et I_p au paragraphe 4.3.2) est divergent. Ces deux termes sont évalués séparément :

– l'intégrale à évaluer pour le calcul de la séquence (iji) est

$$I^{(1)} \equiv \frac{1}{z^2} \int_2^{\infty} dx \; e^{2izx} = \frac{ie^{4izx}}{2z^3} \approx \frac{i}{2z^3} - \frac{2}{z^2} \; ; \qquad (4.38)$$

– l'intégrale intervenant dans la séquence $(ijij)$ est

$$I^{(2)} \equiv -\frac{\sin z e^{-iz}}{z^4} \int_2^{\infty} \frac{dx}{x^2} e^{3izx} \sin zx = \frac{i \sin z e^{-iz}}{4z^4} \int_1^{\infty} \frac{dy}{y^2} \left(e^{8izy} - e^{4izy} \right). \qquad (4.39)$$

Une intégration par parties conduit à

$$I^{(2)} = \frac{i \sin z e^{-iz}}{4z^4} \left[e^{8iz} - e^{4iz} + 8izE_1(-8iz) - EizE_1(-4iz) \right], \qquad (4.40)$$

où $E_1(z) \equiv \int_1^\infty e^{-zx}/x dx$ est une exponentielle intégrale [4, p. 228]. Dans la limite où $Ka = z \to 0$, l'exponentielle intégrale se développe pour donner

$$I^{(2)} \approx \frac{1}{z^2}\left(\ln z + 4\ln 2 + \gamma - 1 - \frac{i\pi}{2}\right). \tag{4.41}$$

Le reste de l'intégrale (4.37) est convergent et peut être approché en posant directement $z = 0$. Cela donne

$$I^{(3)} \equiv \int_2^\infty \left(\frac{1-\frac{1}{x}}{1-\frac{1}{x^2}} - 1 + \frac{1}{x}\right) = \int_2^\infty \frac{dx}{x(x+1)} = \frac{1}{z^2}\ln\frac{3}{2}. \tag{4.42}$$

Regroupant les trois contributions précédentes, on obtient

$$I = \frac{i}{2z^3} + \frac{1}{z^2}\left(\ln z + 3\ln 2 + \ln 3 + \gamma - 3 - \frac{i\pi}{2}\right). \tag{4.43}$$

Finalement, la contribution des corrections à deux corps à l'énergie propre est

$$\boxed{\Sigma^{(2)} \approx \frac{\hbar^2}{2m}\frac{(4\pi)^2 a^3}{K}\rho^2 \left\{\frac{i}{2} + Ka\left(\ln Ka + 3\ln 2 + \ln 3 + \gamma - 3 - \frac{i\pi}{2}\right)\right\}.} \tag{4.44}$$

4.4.4 Recouvrement de diffuseurs et corrections de volume exclu

Les raisonnements des paragraphes 4.3.3 et 4.3.4 s'appliquent de la même manière à 3 dimensions. La fonction de corrélation à deux diffuseurs se développe encore selon (4.3), avec [43, p. 211]

$$\begin{aligned} g_1(R_{12}) =& \Theta(R_{12}-2a)\int d\mathbf{R}_i \left[\Theta(R_{1i}-2a)-1\right]\left[\Theta(R_{i2}-2a)-1\right] \\ =& \begin{cases} v_e\left[1-\frac{3}{4}\left(\frac{R_{12}}{2a}\right)+\frac{1}{16}\left(\frac{R_{12}}{2a}\right)^3\right] & \text{pour} \quad 2a \le R_{12} \le 4a, \\ 0 & \text{ailleurs,} \end{cases} \end{aligned} \tag{4.45}$$

où $v_e = 4\pi(2a)^3/3$ est le volume d'une sphère de rayon $2a$.

4.5 Corrections au libre parcours moyen

Nous avons déjà vu aux paragraphes 1.3 et 2.4.3 que le libre parcours moyen élastique est donné par la partie imaginaire du pôle du propagateur. Nous évaluons ici l'influence des corrections du deuxième ordre en densité de l'énergie propre sur le libre parcours moyen. Le libre parcours moyen calculé à partir de l'énergie propre développée jusqu'au 2$^{\text{e}}$ ordre en densité, noté l, est comparé au libre parcours moyen calculé par la formule de Boltzmann ($l_0 = 1/\rho\sigma$, où σ est la section efficace totale d'un diffuseur).

4.5.1 Expression générale

En appelant $\Sigma^{(1)}$ la contribution du premier ordre en densité à l'énergie propre et $\Sigma^{(2)}$ celle du deuxième ordre, le libre parcours moyen de Boltzmann est obtenu à partir du premier ordre en densité de la partie imaginaire du pôle du propagateur qui s'écrit

$$\tilde{K}_1^2 = K^2 - \bar{\Sigma}^{(1)},$$

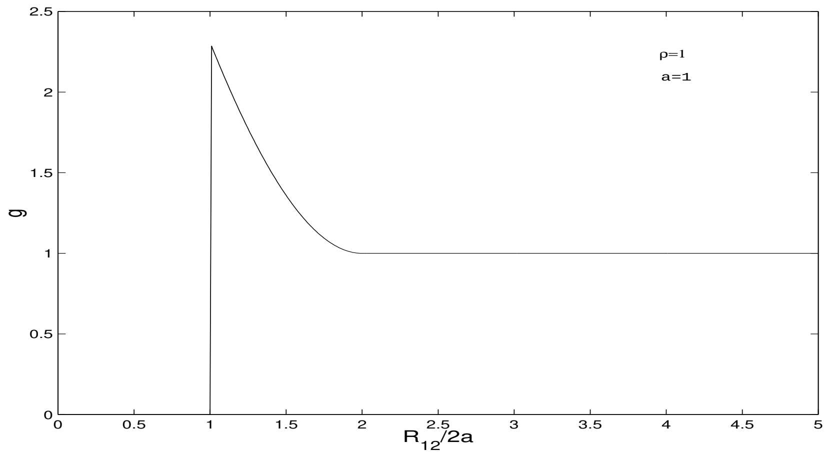


FIG. 4.2 – *Allure de la fonction de corrélation radiale des sphères dures à l'approximation* $g \approx g_0 + \rho g_1$.

où $\bar{\Sigma}^{(n)}$ est l'ordre n en densité de l'énergie propre en unités réduites,

$$\bar{\Sigma}^{(n)} \equiv \frac{2m}{\hbar^2}\Sigma^{(n)}.$$

Reprenant les notations du § 4.3.1, la partie imaginaire du premier ordre en ρ du pôle est

$$\mathfrak{Im}\tilde{K}_1^{(1)} = -\rho\mathfrak{Im}f(K) = -\frac{1}{2K}\mathfrak{Im}\bar{\Sigma}^{(1)}.$$

Le libre parcours moyen de Boltzmann, noté l_0, est

$$l_0 = \frac{1}{2\mathfrak{Im}\tilde{K}_1^{(1)}} = -\frac{K}{\mathfrak{Im}\bar{\Sigma}^{(1)}}. \tag{4.46}$$

Le libre parcours moyen, contenant les corrections du 2e ordre en densité dues à $\Sigma^{(2)}$, s'obtient à partir du pôle

$$\tilde{K}_2^2 = K^2 - \bar{\Sigma}^{(1)} - \bar{\Sigma}^{(2)}.$$

La partie imaginaire de ce pôle est

$$\begin{aligned}\mathfrak{Im}\tilde{K}_2 =& -\rho\mathfrak{Im}f(K) + \rho^2\mathfrak{Im}f(K)f'(K) - \frac{1}{2K}\mathfrak{Im}\bar{\Sigma}^{(2)} + \mathcal{O}(\rho^3)\\ =& -\frac{1}{2K}\bar{\Sigma}^{(1)} - \mathfrak{Im}\left(\frac{1}{(2K)^3}\left(\bar{\Sigma}^{(1)}\right)^2 - \frac{1}{(2K)^2}\bar{\Sigma}^{(1)}\bar{\Sigma}^{(1)\prime}\right) - \frac{1}{2K}\mathfrak{Im}\bar{\Sigma}^{(2)},\end{aligned} \tag{4.47}$$

où le signe $'$ représente la dérivée par rapport à k. Le libre parcours moyen l contenant les corrections d'ordre 2 en densité à l'énergie propre est

$$l = \frac{1}{2\mathfrak{Im}\tilde{K}_2}$$

et la variation du libre parcours moyen par rapport à la valeur de Boltzmann est alors

$$\boxed{\frac{l}{l_0} \approx 1 - \left(\frac{\mathfrak{Re}\bar{\Sigma}^{(1)}}{2K^2} - \frac{\mathfrak{Re}\bar{\Sigma}^{(1)\prime}}{K} + \frac{\mathfrak{Im}\Sigma^{(2)}}{\mathfrak{Im}\Sigma^{(1)}}\right) + \mathcal{O}(\rho^2).} \tag{4.48}$$

Cette expression est la même que pour le cas des diffuseurs ponctuels [92] hormis la présence du terme supplémentaire $\frac{\mathfrak{Re}\bar{\Sigma}^{(1)\prime}}{K}$ provenant de l'existence d'effets hors couche d'énergie.

4.5.2 Expression en dimension deux

De l'expression (4.13) pour le propagateur resommant les chaînes directes, il vient

$$\Sigma^{(1)} \approx -\frac{\hbar^2}{2m}\rho\left(\frac{2\pi}{\ln K'a} + i\frac{\pi^2}{\ln^2 K'a}\right) \tag{4.49}$$

et

$$\Sigma^{(1)\prime} \approx \frac{\hbar^2}{2m}\rho\left(8\pi K a^2\right). \tag{4.50}$$

Le 2e ordre en densité de l'énergie propre, donné par (4.27), s'écrit encore

$$\Sigma^{(2)} \approx \frac{\hbar^2}{2m}\frac{\pi^2\rho^2}{K^2}\left(\frac{2}{\ln^3 K'a} + \frac{3\pi i}{\ln^4 K'a}\right). \tag{4.27}$$

Les expressions précédentes et la formule (4.48) permettent d'obtenir le libre parcours moyen élastique d'un système bidimensionnel composé de disques durs. La variation du libre parcours moyen par rapport au libre parcours moyen de Boltzmann, engendrée par les termes d'ordre 2 en densité dans l'énergie propre, s'écrit finalement

$$\boxed{\frac{l}{l_0} \approx 1 + \frac{\pi\rho}{K^2}\left(\frac{1}{\ln K'a} + \frac{3}{\ln^2 K'a} + \mathcal{O}\left((Ka)^2\right)\right),} \tag{4.51}$$

où $K' = Ke^{\gamma}/2$, $\gamma \simeq 0.5772$ et $l_0 = \frac{K\ln^2 K'a}{\rho\pi^2}$.

Le terme d'ordre a^2 contient les corrections dues aux effets hors couche d'énergie, au volume exclu et à l'onde partielle p. Dans la limite où $Ka \ll 1$, les corrections en densité tendent à diminuer le libre parcours moyen. Ceci peut se comprendre intuitivement : lorsque la densité augmente, la distance entre deux collisions successives diminue entraînant une diminution du libre parcours moyen. Remarquons que l diminue également quand $K \to 0$. Cependant, cette diminution du libre parcours moyen avec K est due au chaînes directes (c'est l'élément de matrice $\mathbf{t}$ sur couche qui domine les corrections) et non aux diffusions à deux corps. Les diffusions à deux corps — terme en $\ln^{-2} K'a$ dans (4.51) — ont plutôt tendance à augmenter le libre parcours moyen lorsque $K \to 0$.

4.5.3 Expression en dimension trois

Le premier ordre de l'énergie propre est donné par l'élément de matrice $\mathbf{t}$ sur couche d'énergie développé en puissances de Ka — voir (2.27).

$$\Sigma^{(1)} = \frac{\hbar^2}{2m}\rho(4\pi a - 4\pi i K a^2) + \mathcal{O}(a^3). \tag{4.52}$$

Le terme $\Sigma^{(1)\prime}$ s'obtient à partir du développement (2.10).

$$\Sigma^{(1)\prime} = \frac{\hbar^2}{2m}\rho(8\pi K a^3) + \mathcal{O}(a^4). \tag{4.53}$$

Il est du même ordre que les corrections dues à l'onde partielle p, c'est-à-dire en a^3. Les corrections de volume exclu apparaissent également en ρa^3 lorsqu'elles sont placées dans l'expression (4.48). Le libre parcours moyen élastique d'un système tridimensionnel composé de sphères dures s'écrit

$$\boxed{\frac{l}{l_0} \approx 1 - \rho\left(\frac{\pi^2 a^2}{K} + \mathcal{O}(a^3)\right),} \tag{4.54}$$

où

$$l_0 = \frac{1}{4\pi\rho a^2}.$$

Comme à deux dimensions, le libre parcours moyen diminue lorsque la densité augmente. Il diminue également quand $K \to 0$. Mais contrairement au cas bidimensionnel, cette diminution est due aux diffusions à deux corps — en particulier à la séquence de diffusion $(ijij)$. En effet, le terme provenant des chaînes directes ($\mathfrak{Re}\bar{\Sigma}^{(1)}$) se trouve compensé par le terme provenant de la séquence de diffusion (iji), ce qui ne se produit pas en dimension 2.

Ce calcul peut être mis en parallèle avec celui effectué pour les diffuseurs ponctuels [92]. Le comportement des corrections au libre parcours moyen dans le cas des diffuseurs ponctuels est en ρ/K^3, alors que pour les diffuseurs de taille finie a, il est en $\rho a^2/K$. Ainsi, dans le cas des diffuseurs ponctuels, les corrections au libre parcours moyen montrent un comportement plus sensible à la limite $K \to 0$ que dans le cas des diffuseurs de taille finie.

4.6 Matrice de diffusion auto-cohérente

Comme nous l'avons mentionné au paragraphe 4.3, il existe plusieurs choix pour la resommation des graphes de l'énergie propre. Le choix que nous avons fait se justifiait par notre volonté de calculer des corrections d'ordre supérieur en densité. Ce choix est justifié si l'on se place à faible densité, $\rho \to 0$, *et* dans le régime métallique $Kl \gg 1$. Dans cette section, nous allons voir plus en détail pourquoi le régime métallique est important pour notre calcul des corrections à deux corps. Nous allons d'abord resommer une classe de diagrammes différents qui correspond à un développement à une boucle, développement perturbatif naturel en théorie des champs [60]. De là, nous verrons émerger naturellement le concept de matrice de diffusion auto-cohérente qui permet d'aller beaucoup plus loin dans la resommation des graphes, mais au prix d'une équation non linéaire.

4.6.1 Calcul de l'énergie propre à l'ordre d'une boucle

La resommation des chaînes directes du propagateur a permis d'obtenir le premier ordre en ρ de l'énergie propre, proportionnel à la matrice $\mathbf{t}$.

$$\Sigma^{(1)} = -4i\rho\frac{\hbar^2}{2m}\frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)} \approx \frac{\hbar^2}{2m}\frac{-4\rho}{1+\frac{4}{\pi^2}\ln^2\frac{Kae^\gamma}{2}}\left[\frac{2}{\pi}\ln\frac{Kae^\gamma}{2} + i\right]. \tag{4.55}$$

L'étape suivante possible consiste à utiliser le propagateur habillé avec cette énergie propre (équ. (4.13)) pour évaluer les diagrammes d'ordres supérieurs en densité apparaissant dans l'énergie propre. Le premier diagramme d'ordre 2 en densité est la chaîne (iji) dans laquelle le remplacement du propagateur nu par le propagateur habillé permet de resommer tous les diagrammes à une boucle. Cependant, le développement en série de Watson n'autorise pas la juxtaposition de

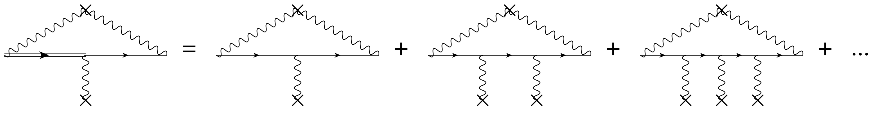


FIG. 4.3 – *Resommation des diagrammes à une boucle dans l'énergie propre.*

deux matrices $\mathbf{t}$ portant sur le même centre diffuseur. Par conséquent, la resommation des diagrammes à une boucle ne peut pas s'écrire $\mathbf{t}_i\overline{G}_{dir}\mathbf{t}_i$ car elle contient le diagramme $\mathbf{t}_iG_0\mathbf{t}_i$ qui ne doit pas exister par construction. Il est cependant possible de resommer ces diagrammes en définissant un propagateur effectif G_e de façon à ce que la divergence due à $\mathbf{t}_iG_0\mathbf{t}_i$ soit éliminée de $\mathbf{t}_iG_e\mathbf{t}_i$ (cf. [49]), ce propagateur est donné par $\overline{G}_{dir} - G_0$. Remplacer les propagateurs nus par les propagateurs habillés ($\mathbf{t}_i\overline{G}_{dir}\mathbf{t}_j\overline{G}_{dir}\mathbf{t}_i$) évite les divergences mais conduit à compter doublement certains diagrammes. Une possibilité est de ne remplacer qu'un seul propagateur nu : l'expression $\mathbf{t}_i\overline{G}_{dir}\mathbf{t}_jG_0\mathbf{t}_i$ ne produit pas de double comptage et ne contient pas de divergence (voir Fig. 4.3). La resommation des diagrammes de la Fig. 4.3 s'écrit

$$\begin{aligned}\Sigma^{(1b)}(\mathbf{k},\mathbf{k}')\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} =& \overline{\sum_{\mathbf{k}_1}\langle\mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)|\mathbf{k_1}\rangle < \mathbf{k}_1|\overline{G}_{dir}(E)|\mathbf{k}_1 >< \mathbf{k}_1|\mathbf{t}_j(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_i(E)|\mathbf{k}>}\\ =&\rho^2\int d\mathbf{R}_i\int d\mathbf{R}_j\sum_{\mathbf{k}_1}\frac{\langle\mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)|\mathbf{k_1}\rangle}{\tilde{E}-E_{k_1}} < \mathbf{k}_1|\mathbf{t}_j(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_i(E)|\mathbf{k}> ,\end{aligned} \tag{4.56}$$

où $\tilde{E} = E - \Sigma^{(1)} = E' + i\frac{E}{Kl}$, E' étant donné par $E - Re\Sigma^{(1)}$.
Ce calcul est formellement le même que pour la chaîne (iji) (voir annexe G).

$$\begin{aligned}\Sigma^{(1b)}(\mathbf{k},\mathbf{k}') =& 2\pi\rho^2\frac{\hbar^2}{2m}\sum_{m_1,m_2}\langle k'|\mathbf{t}(E)|\tilde{K}\rangle_{m_1}\frac{J_{m_2}(\tilde{K}a)}{H^{(1)}_{m_2}(Ka)}\frac{J_{m_1}(ka)}{H^{(1)}_{m_1}(Ka)}\\ &\times\int_{2a}^{\infty}RdRH^{(1)}_{m_1-m_2}(KR)H^{(1)}_{m_1-m_2}(\tilde{K}R) \qquad (4.57)\\ =&\rho^2\frac{\hbar^2}{2m}\frac{4\pi a}{\frac{2m}{\hbar^2}\Sigma^{(1)}}\sum_{m_1,m_2}\langle k'|\mathbf{t}(E)|\tilde{K}\rangle_{m_1}\frac{J_{m_2}(\tilde{K}a)}{H^{(1)}_{m_2}(Ka)}\frac{J_{m_1}(ka)}{H^{(1)}_{m_1}(Ka)}\\ &\times\left[KH^{(1)}_{m_1-m_2}(2\tilde{K}a)H^{(1)}_{m_1-m_2-1}(2Ka) - \tilde{K}H^{(1)}_{m_1-m_2-1}(2\tilde{K}a)H^{(1)}_{m_1-m_2}(2Ka)\right].\end{aligned}$$

Ici, la matrice $\mathbf{t}$ apparaît hors couche d'énergie. On peut alors se poser la question suivante : faut-il renormaliser l'expression de la matrice $\mathbf{t}$, c'est-à-dire calculer la matrice $\mathbf{t}$ à partir de $\mathbf{t}(\tilde{E}) = \mathbf{v} + \mathbf{v}\overline{G}_{dir}(E)\mathbf{t}(\tilde{E})$? Cette matrice $\mathbf{t}$ tiendrait compte du fait que la diffusion se passe dans un milieu effectif ; la présence des autres centres diffuseurs serait intégrée dans cette nouvelle matrice $\mathbf{t}$. La réponse à cette question sera donnée un peu plus loin.

On considère un développement à basse énergie et on ne garde que les premiers termes. On retrouve la prédominance de l'onde s, mais on peut déjà constater que $\Sigma^{(1b)}$ est d'ordre ρ, et semble donc intervenir au même ordre que les chaînes directes. Il semble que l'utilisation du propagateur habillé ait fait perdre une puissance de la densité. En fait, $\Sigma^{(1b)}$ est d'ordre $\rho\times 1/Kl$. La puissance perdue de ρ est donc dans le facteur $1/Kl$. Le paramètre $1/Kl$ est le paramètre de développement le plus naturel si l'on fait un développement en nombre de boucles (ici, le calcul est fait à l'ordre d'une boucle ; l'ordre suivant contient les diagrammes avec 2 boucles).

Si la densité d'impuretés est suffisamment faible et $Ka \ll 1$, alors on a également $|\tilde{K}a| \ll 1$. Ainsi, l'onde s de l'élément de matrice $\mathbf{t}$ (2.17) s'écrit

$$\langle k'|\mathbf{t}(E)|\tilde{K}\rangle_0 \approx -4i\frac{J_0(k'a)}{1+\frac{2i}{\pi}\ln\frac{Kae^{\gamma}}{2}}. \tag{4.58}$$

L'énergie propre de (4.57) devient

$$\begin{aligned}\Sigma^{(1b)}(\mathbf{k},\mathbf{k}') \approx& 4\pi\rho a\frac{\hbar^2}{2m}\frac{J_0(ka)^2}{H_0^{(1)}(Ka)} \\ &\times\big[-KH_0^{(1)}(2\tilde{K}a)H_1^{(1)}(2Ka)+\tilde{K}H_1^{(1)}(2\tilde{K}a)H_0^{(1)}(2Ka)\big].\end{aligned} \tag{4.59}$$

On peut utiliser cette resommation pour habiller à nouveau le propagateur :

$$< \mathbf{k}'|\overline{G}(E)|\mathbf{k} >= \frac{\delta_{\mathbf{k}',\mathbf{k}}}{E-E_k-(\Sigma^{(1)}+\Sigma^{(1b)})}. \tag{4.60}$$

Alors

$$\begin{aligned}\Sigma^{(1)}+\Sigma^{(1b)} &\approx -4\frac{\hbar^2}{2m}\rho\frac{i}{H_0^{(1)}(Ka)}\left(1+\frac{2i}{\pi}\ln\frac{\tilde{K}}{K}\right) \\ &\approx -4\frac{\hbar^2}{2m}\rho\frac{i}{H_0^{(1)}(Ka)}\left(1+\frac{i}{\pi}\ln(1+\frac{i}{Kl})\right).\end{aligned} \tag{4.61}$$

Dans le régime métallique, $Kl >> 1$, le logarithme peut être développé pour donner des corrections d'ordre $1/Kl$ dans la partie imaginaire de l'énergie propre. Le premier terme de ce développement peut être vu comme une correction d'ordre ρ^2. Il intervient donc dans les corrections à deux corps au même titre que celles qui sont évaluées dans le paragraphe 4.3.2. C'est en fait la correction apportée par la chaîne indirecte (iji).

Considérations sur le régime métallique

Les paramètres de perturbation utilisés pour la resommation des diagrammes dans les paragraphes précédents étaient $Ka \ll 1$ et la densité ρ faible. Ici, le paramètre $1/Kl$ donne une relation entre les deux paramètres précédents. En effet,

$$\frac{1}{Kl} \approx \rho\left(\frac{\pi}{K\ln Ka}\right)^2 \ll 1 \;\Rightarrow\; \rho a^2 \ll \left(\frac{Ka\ln Ka}{\pi}\right)^2. \tag{4.62}$$

Cela signifie que plus on travaille à basse énergie ($Ka \ll 1$), plus le milieu doit être dilué pour que la théorie de perturbation soit valide. Le choix des limites est donc le suivant : il faut d'abord prendre $\rho a^2 \to 0$, puis $Ka \to 0$.

4.6.2 Équations auto-cohérentes

Dans ce paragraphe, nous présentons une approche formelle permettant de dériver une matrice de diffusion effective resommant tous les diagrammes sans croisement de ligne de potentiel.

Lors du calcul de l'énergie propre à une boucle, la matrice $\mathbf{t}$ est apparue hors couche, suggérant la possibilité de la calculer à une énergie effective $\tilde{E}$ pour rendre compte d'une resommation de graphes — voir les commentaires après (4.57). On peut donc imaginer évaluer la matrice $\mathbf{t}$

pour une énergie complexe rendant compte de la diffusion sur les chaînes directes, c.-à-d. utiliser un propagateur effectif $G(\tilde{E})$ dans l'expression de la matrice $\mathbf{t}$ donnée par l'équation (1.8). Il est ensuite possible d'évaluer un nouveau propagateur habillé avec des chaînes directes utilisant cette matrice $\mathbf{t}$. Cet habillage nous donne une nouvelle énergie effective qui peut à son tour être utilisée dans le calcul de la matrice $\mathbf{t}$, et ainsi de suite *ad infinitum.* La resommation de tous les diagrammes sans croisement de lignes d'interaction est donnée formellement par les équations couplées suivantes :

$$\begin{cases} \mathbf{t}(\tilde{E}) = & \mathbf{v} + \mathbf{v}\mathbf{G}(\tilde{E})\mathbf{t}(\tilde{E}) \\ \mathbf{G}(\tilde{E}) = & \mathbf{G}_0(E) + \rho\mathbf{G}_0(E)\mathbf{t}(\tilde{E})\mathbf{G}(\tilde{E}), \end{cases} \tag{4.63}$$

où le propagateur vaut $G(\tilde{E},\mathbf{k}) = (\tilde{E} - E_k)^{-1}$ et $\tilde{E} = E - \rho\langle\mathbf{k}|\mathbf{t}(\tilde{E})|\mathbf{k}\rangle$. Cette matrice $\mathbf{t}$ peut se

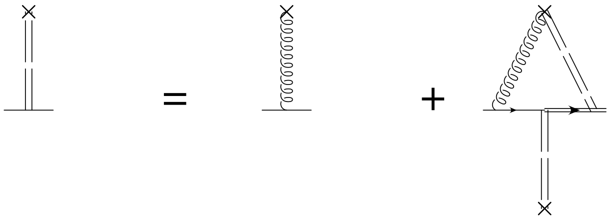


FIG. 4.4 – *Expression de la matrice* $\mathbf{t}$ *auto-cohérente en fonction de la matrice* $\mathbf{t}$ *usuelle.*

récrire en fonction de la matrice $\mathbf{t}$ habituelle, c.-à-d. la matrice $\mathbf{t}$ calculé dans l'espace vide. Diagrammatiquement, elle est représentée par une double ligne en traits discontinus dans la figure 4.4.

$$\mathbf{t}(\tilde{E}) = \mathbf{t}(E) + \mathbf{t}(E)\mathbf{G}_0(E)\mathbf{t}(\tilde{E})\mathbf{G}(\tilde{E})\mathbf{t}(\tilde{E}). \tag{4.64}$$

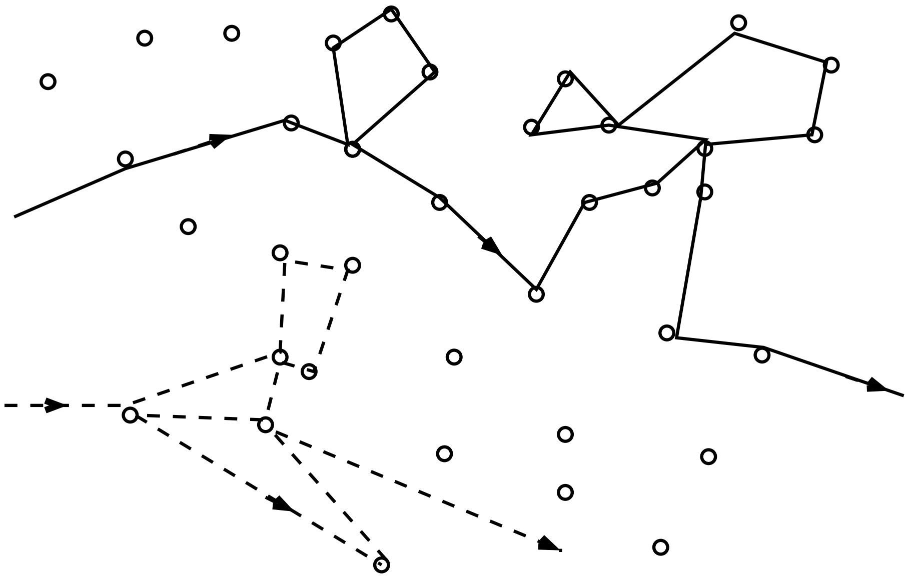


FIG. 4.5 – *Exemple de séquence incluse dans la matrice* $\mathbf{t}$ *auto-cohérente (en trait plein). La séquence en pointillés ne fait pas partie des séquences resommées par* $\mathbf{t}(\tilde{E})$.

Cette matrice $\mathbf{t}$ permet de collecter tous les diagrammes exceptés ceux qui possèdent des lignes d'interaction qui se croisent (voir la Fig. 1.1). Sachant que les effets hors couche n'apparaissent qu'à l'ordre 2 en densité, la matrice $\mathbf{t}$ peut être prise avec une impulsion $\mathbf{K}$ correspondant à l'énergie $E = \hbar^2 K^2/2m$. Les solutions complexes $\tilde{E}$ de l'équation fermée

$$\tilde{E} = E - \rho \langle \mathbf{K} | \mathbf{t}(\tilde{E}) | \mathbf{K} \rangle \tag{4.65}$$

contiennent la diffusion due à toutes les séquences qui contiennent des boucles sans intersection (voir Fig. 4.5).

Chapitre 5

Applications numériques

Introduction

Dans ce chapitre, nous montrons que la série de Watson peut se mettre sous une forme compacte, permettant une application numérique plus aisée. Seul le cas à deux dimensions est traité ici, mais la généralisation à trois dimensions peut se faire de la même façon [41]. L'approche utilisée est l'approche matricielle de Korringa-Kohn-Rostoker (dite KKR) [53, 52], plus couramment employée dans le domaine du chaos [103, 22]. Alors que cette méthode est plutôt utilisée pour rechercher les résonances de diffusion dans des configurations particulières de quelques disques [37, 23], nous l'utilisons à basse énergie (paramètre $Ka \ll 1$) de façon à n'avoir que l'onde s à considérer dans des systèmes comportant un grand nombre de disques placés aléatoirement. Dans un premier temps, nous faisons le lien direct entre la série de Watson et l'écriture matricielle du formalisme KKR à deux dimensions et nous généralisons l'approche KKR de façon à incorporer la possibilité d'avoir de la diffusion hors couche d'énergie en utilisant la base des ondes planes. Cette généralisation permet ensuite de dériver la fonction d'onde et la section efficace de diffusion d'un électron par un système composé de N disques durs. Ces deux quantités sont ensuite étudiées numériquement pour des systèmes de petite taille (pour la fonction d'onde) et de grande taille (pour la section efficace totale).

5.1 Écriture compacte de la série de Watson pour des systèmes à N disques

S'inspirant des travaux de Berry [16], Gaspard et Rice [37] développent un formalisme décrivant la diffusion quantique dans un système classiquement chaotique. Dans le cadre de ce travail, ils présentent un calcul exact de la diffusion d'une particule quantique sur un ensemble de trois disques durs fixés dans le plan. Le formalisme évalue la matrice de diffusion $\mathbf{S}$ du système en se plaçant dans la base des ondes partielles. Il décrit la diffusion élastique d'une particule d'énergie $E = \frac{\hbar^2 K^2}{2m}$. Comme nous l'avons déjà mentionné dans l'introduction du chapitre 2, l'électron diffuse de façon élastique ; ses états quantiques possibles sont ceux de la base des ondes partielles $\{|K; lm\rangle\}$, où le nombre d'onde K est fixé par l'énergie E de l'électron. L'utilisation de la relation de fermeture $\sum_{lm} |K; lm\rangle\langle K; lm| = 1$ ne fait intervenir que les états physiques possibles de l'électron, contrairement à ce qu'il se passe lors de l'utilisation de la relation de fermeture sur les ondes planes $\sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}| = 1$. Cette dernière relation de fermeture fait intervenir des états d'impulsion incompatibles avec le processus de diffusion élastique. Ces états *virtuels* nécessitent l'introduction d'éléments de matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie.

Le développement en série de Watson de la matrice $\mathbf{S}$, évaluée dans la base des ondes partielles, conduit alors à des séquences de diffusion sur couche d'énergie [64]. La méthode s'applique à un nombre quelconque de diffuseurs de tailles diverses [103] et également à des diffuseurs de différentes natures (puits, barrières, disques durs, ...) [22].

La matrice $\mathbf{S}$ du système global est reliée à la matrice $\mathcal{T}$ décrivant la série de Watson par

$$\mathbf{S}(K) = \mathbf{1} - i\mathcal{T}(K). \tag{5.1}$$

La matrice de transfert du système, $\mathcal{T}$, s'écrit comme le produit de trois matrices selon la relation

$$\mathcal{T}(K) = -\mathbf{C}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{E}, \tag{5.2}$$

où les matrices $\mathbf{C}^{(j)}$ et $\mathbf{E}^{(j)}$ paramétrisent le couplage des ondes partielles, entrantes et sortantes respectivement, avec l'intérieur du système au niveau du centre j. La matrice $\mathbf{M}$ contient toute l'information sur la diffusion multiple de l'onde dans le système. Ces notations matricielles s'explicitent dans la base des ondes partielles $\{|K; lm\rangle\}$. Chaque matrice $\mathbf{C}$, $\mathbf{M}$ et $\mathbf{E}$ est connue pour des conditions au bord des disques particulières [22]. Nous sommes intéressés ici par les disques durs, c'est-à-dire par les conditions au bord de Dirichlet. La difficulté technique essentielle de cette approche est l'inversion de la matrice $\mathbf{M}$. Le développement en série de Watson est une façon d'inverser cette matrice qui a ses avantages (permettre le calcul de moyennes d'ensemble, par ex.) et ses inconvénients (c'est une série infinie dont on ne sait resommer que quelques classes de diagrammes dans le régime de diffusion qui est un régime perturbatif). Dans les problèmes de diffusion sur quelques disques, le déterminant de $\mathbf{M}$ suffit pour obtenir des informations sur le système : les résonances de diffusion du système sont obtenues en recherchant les zéros du déterminant de la matrice $\mathbf{M}$ pour des valeurs de Ka complexes. Ces zéros donnent les divergences de la matrice de diffusion $\mathbf{S}$ et, par conséquent, les énergies correspondantes sont celles pour lesquelles le comportement de l'électron est le plus affecté par la présence des centres diffuseurs.

5.1.1 Lien entre la formulation KKR et la série de Watson

Dans un premier temps, la série de Watson $\mathcal{T}(K)$ est obtenue en développant $\mathbf{M}^{-1}$ autour de l'identité selon une série géométrique et en utilisant les expressions matricielles données par [22]. Les matrices $\mathbf{C}$, $\mathbf{M}$ et $\mathbf{E}$ sont ensuite généralisées pour pourvoir travailler dans la base des ondes planes.

$$\begin{aligned}
\mathbf{M} &= \frac{\pi a}{2i}\,(\mathbf{1} - \mathbf{N}) \\
\Rightarrow \frac{\pi a}{2i}\,\mathbf{M}^{-1} &= \mathbf{1} + \mathbf{N} + \mathbf{N}^2 + \cdots \\
\Rightarrow -\frac{\pi a}{2i}\,\mathcal{T}(K) &= \mathbf{CE} + \mathbf{CNE} + \mathbf{CN}^2\mathbf{E} + \cdots
\end{aligned} \tag{5.3}$$

Les expressions des matrices $\mathbf{C}$, $\mathbf{N}$ et $\mathbf{E}$ sont [1]

$$\begin{aligned}
C_{mp}^{(i)} &= 2e^{im\theta_i}\frac{J_{m-p}(KR_i)}{H_p^{(1)}(Ka)} \\
E_{mp}^{(i)} &= \pi a e^{-ip\theta_i} J_{p-m}(KR_i) J_m(Ka) \\
N_{mp}^{(ij)} &= -\frac{J_m(Ka)}{H_p^{(1)}(Ka)} H_{m-p}^{(1)}(KR_{ij})\xi_{ij}(m,p)
\end{aligned} \tag{5.4}$$

1. Dans [22], une coquille s'est glissée dans la définition de ξ et un facteur 2 manque dans la matrice C. Les expressions correctes peuvent être retrouvées dans [103, p. 15].

où

$$\xi_{ij}(m,p) = \begin{cases} 0 & \text{si} \quad i = j \\ e^{im(\theta_{ji}-\theta_i)} e^{ip(\theta_j-\theta_{ji})} & \text{si} \quad i \neq j \end{cases}$$

Rappelons que θ_i est l'angle entre l'axe des abscisses (Ox) et le vecteur $\mathbf{R}_i$ et que θ_{ji} est celui entre (Ox) et $\mathbf{R}_{ji} \equiv \mathbf{R}_j - \mathbf{R}_i$. Le premier terme du membre de droite de l'équation (5.3) est le terme de diffusion sur un seul centre, c'est la matrice $\mathbf{t}$ écrite dans la base des ondes partielles.

$$\begin{aligned} \frac{-2i}{\pi a} \mathbf{t}_{mp}^{(i)} &= \frac{-2i}{\pi a} \sum_{q=-\infty}^{+\infty} C_{mq}^{(i)} E_{qp}^{(i)} \\ &= -4i\ e^{i(m-p)\theta_i} \sum_{q=-\infty}^{+\infty} \frac{J_q(Ka)}{H_q^{(1)}(Ka)} J_{m-q}(KR_i) J_{p-q}(KR_i). \end{aligned} \tag{5.5}$$

Avec $\frac{\hbar^2}{2mV} = 1$, la matrice sur couche d'énergie (2.20) est

$$\langle \mathbf{k}' | \mathbf{t}(E) | \mathbf{k} \rangle = -4i\ e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\mathbf{R}_i} \sum_{q=-\infty}^{+\infty} e^{iq(\theta'-\theta)} \frac{J_q(Ka)}{H_q^{(1)}(Ka)}, \tag{5.6}$$

et s'écrit, en développant l'exponentielle en ondes partielles $(A.14)$ et en réarrangeant les indices de sommation,

$$\langle \mathbf{k}' | \mathbf{t}(E) | \mathbf{k} \rangle = \frac{-2i}{\pi a} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} \sum_{p=-\infty}^{+\infty} e^{-im(\theta-\frac{\pi}{2})}\ \mathbf{t}_{mp}^{(i)}\ e^{ip(\theta'-\frac{\pi}{2})}. \tag{5.7}$$

Le deuxième terme du membre de droite de l'équation (5.3) est le premier terme non trivial (*i.e.* contenant plus d'une diffusion). Il s'écrit

$$\begin{aligned} (\mathbf{CNE})_{mp}^{(ij)} =& \sum_q \sum_r C_{mq}^{(i)} N_{qr}^{(ij)} E_{rp}^{(j)} \\ =& -2\pi a \sum_{qr} e^{im\theta_i} e^{iq(\theta_{ji}-\theta_i)} e^{ir(\theta_j-\theta_{ji})} e^{-ip\theta_j} \frac{J_q(Ka)}{H_q^{(1)}(Ka)} \frac{J_r(Ka)}{H_r^{(1)}(Ka)} \\ & \times J_{m-q}(KR_i) H_{q-r}^{(1)}(KR_{ij}) J_{p-r}(KR_j). \end{aligned} \tag{5.8}$$

Ce terme correspond à $\langle \mathbf{k}' | \mathbf{t}_j(E) G_0^{(+)}(E) \mathbf{t}_i(E) | \mathbf{k} \rangle$ obtenu à l'équation (3.2). En effet, l'onde entrante étant $|\mathbf{k}\rangle$ et l'onde sortante $\langle \mathbf{k}'|$, les termes de translation de l'équation (3.2) se développent sous forme d'ondes partielles de la façon suivante

$$e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_j + i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} = \sum_l \sum_n i^{n-l} e^{il(\theta'-\theta_j) - in(\theta-\theta_i)} J_l(k'R_j) J_n(kR_i).$$

Ainsi, la séquence de diffusion sur deux centres de l'équation (3.3) s'écrit

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}' | \mathbf{t}_j(E) G_0^{(+)}(E) \mathbf{t}_i(E) | \mathbf{k} \rangle = 4i & \sum_l \sum_n \sum_r \sum_q i^{n-l} e^{i(l+r)\theta'} e^{-i(n+q)\theta} e^{in\theta_i - il\theta_j} \\ & \times e^{i(r-q)(\pi/2-\theta_{ji})} \frac{J_r(k'a)}{H_r^{(1)}(Ka)} \frac{J_q(ka)}{H_q^{(1)}(Ka)} H_{r-q}^{(1)}(KR_{ij}) J_n(kR_i) J_l(k'R_j). \end{aligned}$$

Ce qui donne, en réarrangeant les indices ($m = n + q$ et $p = l + r$),

$$\begin{aligned}\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}_j(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_i(E)|\mathbf{k}\rangle = 4i &\sum_m\sum_p\sum_r\sum_q e^{-im(\theta-\pi/2)}e^{ip(\theta'-\pi/2)} \\ &\times e^{im\theta_i}e^{iq(\theta_{ji}-\theta_i)+ir(\theta_j-\theta_{ji})}e^{-ip\theta_j}e^{i(r-q)\pi} \\ &\times \frac{J_r(k'a)}{H_r^{(1)}(Ka)}\frac{J_q(ka)}{H_q^{(1)}(Ka)}J_{m-q}(kR_i)H_{r-q}^{(1)}(KR_{ij})J_{p-r}(k'R_j). \end{aligned} \tag{5.9}$$

Pour généraliser les matrices $\mathbf{C}$ et $\mathbf{E}$ de façon à incorporer la possibilité d'avoir $\mathbf{k}$ et $\mathbf{k}'$ hors couche, nous introduisons les nouvelles matrices $\tilde{\mathbf{C}}(k)$ et $\tilde{\mathbf{E}}(k)$ pour écrire cette séquence de diffusion sous la forme

$$\begin{aligned}&\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}_j(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_i(E)|\mathbf{k}\rangle \\ &\quad = -\frac{2i}{\pi a}\sum_m\sum_p\sum_r\sum_q e^{-im(\theta-\pi/2)}\ \tilde{C}_{mq}^{(i)}(k)N_{qr}^{(ij)}\tilde{E}_{rp}^{(j)}(k')\ e^{ip(\theta'-\pi/2)}.\end{aligned} \tag{5.10}$$

La correspondance entre les autres séquences de diffusion se fait de la même façon et la généralisation à toutes les séquences de diffusion de la série de Watson permet d'écrire

$$\boxed{\langle \mathbf{k}'|\mathcal{T}(K)|\mathbf{k}\rangle = -\sum_m\sum_p e^{-im(\theta-\pi/2)}\left(\tilde{\mathbf{C}}(k)\mathbf{M}^{-1}\tilde{\mathbf{E}}(k')\right)_{mp} e^{ip(\theta'-\pi/2)},} \tag{5.11a}$$

avec les nouvelles matrices de couplage des ondes partielles incluant les effets hors couche d'énergie

$$\begin{aligned}\tilde{C}_{mp}^{(i)}(k) &= 2e^{im\theta_i}\frac{J_{m-p}(kR_i)}{H_p^{(1)}(Ka)}\frac{J_p(ka)}{J_p(Ka)} \\ \tilde{E}_{mp}^{(i)}(k') &= \pi a e^{-ip\theta_i}J_{p-m}(k'R_i)J_m(k'a).\end{aligned} \tag{5.11b}$$

On a ainsi une écriture condensée de la série de Watson sous forme d'un produit de matrices. Remarquons que la matrice $\mathbf{M}$ (ou $\mathbf{N}$) est prise sur couche d'énergie. Toute la diffusion multiple a lieu sur couche, seules les matrices externes sont hors couche d'énergie. Lors du calcul des séquences de diffusion de la série de Watson (3.4), il apparaissait déjà que toutes les diffusions internes se passe sur couche.

5.1.2 Discussion des effets hors couche d'énergie

Dans le cas de la diffusion sur un seul centre, le produit $\tilde{\mathbf{C}}\tilde{\mathbf{E}}$ ne reproduit pas exactement la matrice $\mathbf{t}$ hors couche de l'équation (2.17). Pour simplifier, considérons le cas où le potentiel est placé à l'origine du repère, $\mathbf{R}_i = \mathbf{0}$. La matrice $\mathbf{t}$ décrivant le premier terme du développement de l'équation (5.11) est

$$\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}_K|\mathbf{k}\rangle = -4i\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-im(\theta-\theta')}\frac{J_m(ka)J_m(k'a)}{J_m(Ka)H_m^{(1)}(Ka)}. \tag{5.12}$$

La comparaison avec l'élément de matrice $\mathbf{t}$ donné en (2.17) montre que le terme omis dans cette formulation matricielle est

$$\begin{aligned} f_K^{hc}(\mathbf{k},\mathbf{k}') =& 2\pi a \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{-im(\theta-\theta')} \left\{ \frac{k'^2 - K^2}{k'^2 - k^2} \times k J_m(k'a) J_{m-1}(ka) \right. \\ & \left. - J_m(ka) \Big(k' J_{m-1}(k'a) \frac{k^2 - K^2}{k'^2 - k^2} + K J_m(k'a) \frac{J_{m-1}(Ka)}{J_m(Ka)} \Big) \right\} \end{aligned} \tag{5.13}$$

Ce terme généralise la fonction $f_K^{\text{off}}(k)$ introduite au § 4.3.1 au cas où les vecteurs d'onde entrant et sortant sont différents.

$$f_K^{hc}(k,k) = f_K^{\text{off}}(k).$$

On montre immédiatement que ce terme strictement hors couche s'annule dès que l'un des vecteurs d'onde d'entrée ou de sortie est sur couche d'énergie.

$$f_K^{hc}(K,k) = f_K^{hc}(k,K) = f_K^{hc}(K,K) = 0.$$

Le produit $\tilde{C}\tilde{E}$ correspond alors à un élément de matrice $\mathbf{t}$ semi hors couche d'énergie. Il disparaît également lors du calcul du propagateur avec l'expression

$$\mathbf{G}(E) = \mathbf{G}_0^{(+)}(E) + \mathbf{G}_0^{(+)}(E)\mathcal{T}(E)\mathbf{G}_0^{(+)}(E).$$

Dans ce cas, le propagateur libre $\mathbf{G}_0^{(+)}(E)$ qui accompagne la matrice $\mathbf{t}$ rend celle-ci semi hors couche — voir l'annexe F.

Les effets hors couche disparaissent lors du calcul de quantités mesurables. En effet, il n'est pas possible de mesurer un état virtuel. On peut alors se demander l'utilité de la généralisation qu'apportent les matrices $\tilde{\mathbf{C}}(k)$ et $\tilde{\mathbf{E}}(k)$. Ces effets hors couche sont dus à l'utilisation de la base des impulsions $\{|\mathbf{k}\rangle\}$ dans laquelle une particule en cours de diffusion peut avoir n'importe quelle énergie. Dans l'approche KKR, la base choisie est celle des ondes partielles ayant toutes le même nombre d'onde physique K. Les éléments de matrice $\mathbf{t}$ sont sur couche d'énergie. Notre approche utilise la base des ondes planes qui fait apparaître des éléments de matrice $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie. Nous verrons dans le prochain paragraphe que la généralisation qu'apportent les matrices $\tilde{\mathbf{C}}(k)$ et $\tilde{\mathbf{E}}(k)$ permet d'obtenir la fonction d'onde en travaillant avec la base des ondes planes (par l'insertion d'une relation de fermeture $\sum_{\mathbf{k}} |\mathbf{k}\rangle\langle\mathbf{k}|$).

Par ailleurs, comme nous l'avons vu dans les chapitres précédents, cette base présente également un intérêt pour le calcul du propagateur moyenné qui s'évalue alors plus facilement que dans la base des ondes partielles et qui s'écrit sous la forme d'une équation de Dyson (1.31).

5.2 Fonction d'onde

La fonction d'onde peut s'écrire sous forme matricielle à l'aide de l'équation de Lippmann-Schwinger

$$|\Psi_{\mathbf{K}}\rangle = |\mathbf{K}\rangle + \mathbf{G}_0(E_K)\mathcal{T}(K)|\mathbf{K}\rangle.$$

Dans la représentation position, la partie diffusée s'écrit

$$\langle\mathbf{r}|\mathbf{G}_0(E_K)\mathcal{T}(K)|\mathbf{K}\rangle = \frac{V}{(2\pi)^2} \int d\mathbf{k}' \frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}}{E_K - E_{k'} + i\epsilon} \langle\mathbf{k}'|\mathcal{T}(K)|\mathbf{K}\rangle.$$

La généralisation qu'apportent les matrices $\tilde{\mathbf{C}}$ et $\tilde{\mathbf{E}}$ permet d'effectuer l'intégration précédente de façon simple. L'intégration sur $\mathbf{k}'$ se ramène à

$$\begin{aligned}\sum_p \int d\mathbf{k}' \frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}}{K^2-k'^2+i\epsilon} \tilde{E}^{(j)}_{sp}(k')e^{ip(\theta'-\pi/2)} \\ =\pi a \int d\mathbf{k}' \frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}}}{K^2-k'^2+i\epsilon} J_s(k'a) \sum_p J_{p-s}(k'R_j)e^{ip(\theta'-\theta_j-\pi/2)} \\ =\pi a \int d\mathbf{k}' \frac{e^{i\mathbf{k}'(\mathbf{r}-\mathbf{R}_j)}}{K^2-k'^2+i\epsilon} J_s(k'a)e^{is(\theta'-\theta_j-\pi/2)}.\end{aligned}$$

Selon le cas où le point $\mathbf{r}$ se trouve dans un disque dur ou à l'extérieur, le résultat de l'intégration est

$$\begin{aligned}&-i\pi^2 e^{is(\theta_{r-R_j}-\theta_j)} J_s(Ka)H^{(1)}_s(K|\mathbf{r}-\mathbf{R}_j|) \qquad \text{si } |\mathbf{r}-\mathbf{R}_j|\geq a \\ &-i\pi^2 e^{is(\theta_{r-R_j}-\theta_j)} H^{(1)}_s(Ka)J_s(K|\mathbf{r}-\mathbf{R}_j|) \qquad \text{si } |\mathbf{r}-\mathbf{R}_j|\leq a.\end{aligned}$$

La fonction d'onde s'écrit alors

$$\boxed{\begin{aligned}\Psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \ & \sum_m e^{-im(\theta_K-\pi/2)}\Bigg\{ J_m(Kr)e^{im\theta_r} - \frac{\pi a}{4i}\sum_{ij}\sum_{qs} C^{(i)}_{mq}\big(M^{-1}\big)^{(ij)}_{qs} \\ & \times e^{is(\theta_{r-R_j}-\theta_j)}\Big[\Theta(|\mathbf{r}-\mathbf{R}_j|-a)J_s(Ka)H^{(1)}_s(K|\mathbf{r}-\mathbf{R}_j|) \\ & +\Theta(a-|\mathbf{r}-\mathbf{R}_j|)H^{(1)}_s(Ka)J_s(K|\mathbf{r}-\mathbf{R}_j|)\Big]\Bigg\},\end{aligned}} \tag{5.14}$$

où les fonctions Θ de Heaviside paramétrisent le fait que l'on se trouve à l'intérieur ou à l'extérieur d'une sphère dure. Bien sûr, à l'intérieur d'une sphère dure la fonction d'onde globale $\Psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r})$ s'annule : la partie diffusée de la fonction d'onde y compense exactement l'onde plane incidente.

5.3 Section efficace

La section efficace est une autre quantité qui s'obtient directement à partir de la matrice $\mathcal{T}$. Elle peut être calculée de deux manières:

– par intégration angulaire de la section efficace différentielle — voir l'expression (1.12) —

$$\sigma_{\text{tot}}(\mathbf{K}) = \frac{1}{8\pi K}\int_0^{2\pi} d\theta |\langle \mathbf{K}'|\mathcal{T}|\mathbf{K}\rangle|^2 \ ; \tag{5.15}$$

– ou en prenant la partie imaginaire de l'amplitude de diffusion vers l'avant,

$$\sigma_{\text{i}}(\mathbf{K}) = -\frac{1}{K}\mathfrak{Im}\langle \mathbf{K}|\mathcal{T}|\mathbf{K}\rangle. \tag{5.16}$$

Le théorème optique impose l'égalité entre ces deux relations (σ_{tot}=σ_{i}). L'introduction de deux notations différentes pour la section efficace totale est nécessaire pour repérer la façon dont le calcul numérique de la section efficace est effectué.

La section efficace totale dépend de la direction du vecteur d'onde incident $\mathbf{K}$ et la section efficace différentielle $\sigma_{\mathbf{K}\to\mathbf{K}'}$ dépend en plus de la direction de l'onde diffusée donnée par $\mathbf{K}'$. L'information sur ces directions est contenue dans les matrices $\mathbf{C}$ et $\mathbf{E}$ qui relient l'intérieur du système à l'extérieur. Une troncature trop brutale dans les ondes partielles m et p de l'expression (5.11) ferait perdre cette information sur les directions qui est nécessaire pour une bonne définition de la section efficace.

5.4 Application numérique

5.4.1 Approximations

L'écriture matricielle de la fonction d'onde ou de la section efficace est mieux adaptée que la série de Watson pour une étude numérique. L'inconvénient de la série de Watson est qu'elle nécessite la resommation d'une infinité de termes, même si l'on ne considère que l'onde s. Au contraire, la formulation matricielle présente une matrice de la taille du nombre d'ondes partielles multipliée par le nombre de diffuseurs. La troncature se fait seulement sur le nombre d'ondes partielles alors que l'approche par la série de Watson nécessite la troncature sur le nombre d'ondes partielles et sur le nombre de diffusions. Lorsque $Ka \ll 1$, la contribution principale provient essentiellement de l'onde s ; il est donc possible de négliger les ondes partielles d'ordre supérieur. La taille de la matrice M est alors donnée par le nombre de centres diffuseurs.

Pour le calcul numérique, il est nécessaire de tronquer les sommes sur les ondes partielles. Lors de la diffusion multiple, chaque disque dur agit comme une source secondaire (voir équ. (1.22)) et l'onde émise par chaque disque contient une série d'ondes partielles. Lorsque $Ka \ll 1$, ces ondes secondaires sont des ondes isotropes. La matrice $N_{mp}^{(ij)}$ est alors évaluée seulement pour l'onde s, *i.e.* $N_{00}^{(ij)}$ est une matrice de dimensions $N \times N$, où N est le nombre de diffuseurs dans le système. L'expression (5.14) de la fonction d'onde se simplifie dans l'approximation de l'onde s pour donner

$$\begin{aligned}\Psi_{\mathbf{K}}(\mathbf{r}) = \sum_m e^{-im(\theta_K-\pi/2)}\Bigg\{ & J_m(Kr)e^{im\theta_r} - \frac{\pi a}{4i}\sum_{ij}\sum_{qs} C_{m0}^{(i)}\left(M^{-1}\right)_{00}^{(ij)} \\ & \Big[\Theta(|\mathbf{r}-\mathbf{R}_j|-a)J_0(Ka)H_0^{(1)}(K|\mathbf{r}-\mathbf{R}_j|) \\ & + \Theta(a-|\mathbf{r}-\mathbf{R}_j|)H_0^{(1)}(Ka)J_0(K|\mathbf{r}-\mathbf{R}_j|)\Big]\Bigg\}. \end{aligned} \tag{5.17}$$

La somme sur m du premier terme ne peut pas être tronquée à $m = 0$ car elle représente le développement de l'onde plane incidente en ondes partielles. En effet, si l'on imposait $m = 0$, cette onde serait une onde cylindrique émanant de l'origine des coordonnées. La troncature de la somme sur m restreint la région de l'espace où l'onde incidente est plane à une surface finie, que nous appellerons *support de l'onde plane*. L'intensité de l'onde plane vaut 1 dans cette région et décroît ensuite très rapidement après quelques oscillations dans la direction transverse à la direction de propagation (voir Fig. 5.1). Plus la somme sur m contient d'ondes partielles, plus le support de l'onde plane s'étend, *i.e.* plus la série se rapproche de $e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}}$.

D'un point de vue numérique, lors du tracé de l'intensité de la fonction d'onde, nous choisissons un support de l'onde plane toujours supérieur à la taille de l'échantillon étudié de façon à ce que l'onde incidente soit effectivement une onde plane là où a lieu la diffusion multiple.

Dans le cas de l'onde plane, il est évident que la somme sur m peut être faite analytiquement pour donner $e^{i\mathbf{K}\mathbf{r}}$ pour toute position $\mathbf{r}$ de l'espace, mais cette somme ne peut en général pas être

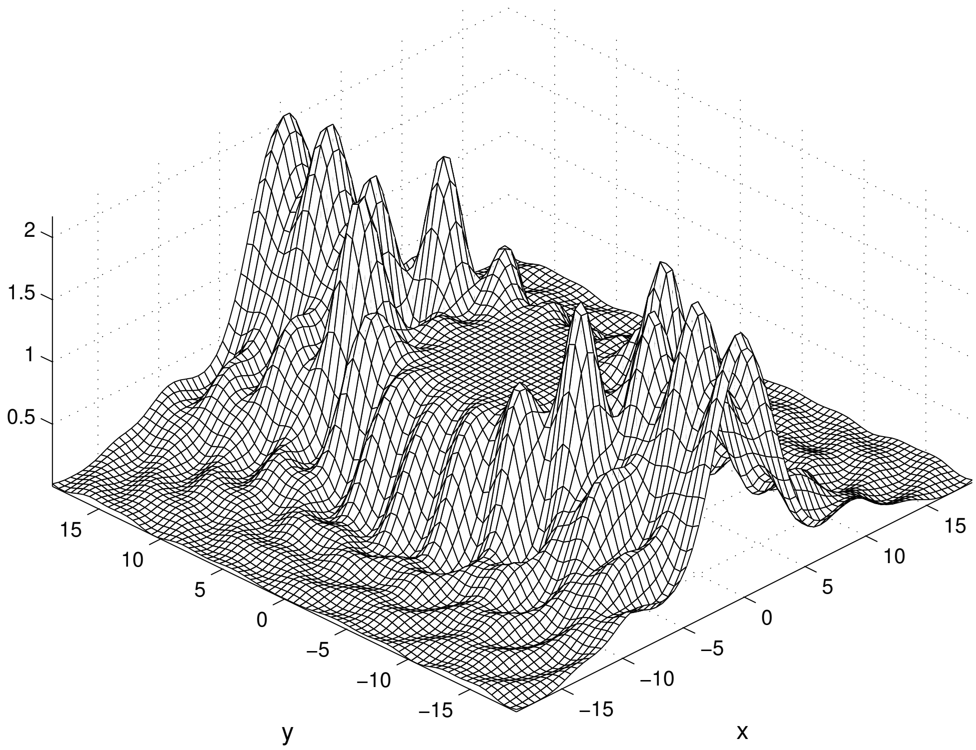


FIG. 5.1 – *Intensité de l'onde plane représentée par une somme tronquée sur les ondes partielles. Le plateau au centre de la figure est le support de l'onde plane,* i.e. *l'endroit où l'onde est effectivement plane.*

faite pour la partie diffusée de l'onde. Pour des raisons de cohérence, il est préférable de tronquer la série donnant l'onde plane au même ordre que la série de l'onde diffusée.

Une exception peut être faite pour la diffusion à basse énergie ($Ka \ll 1$). Dans ce cas particulier, la somme sur m peut être faite de façon analytique également pour l'onde diffusée, ce qui permet d'avoir une « vraie » onde plane incidente (non tronquée).

La fonction d'onde est tracée à l'aide de l'équation (5.14) contenant un certain nombre d'ondes partielles. Rappelons que le nombre d'ondes partielles peut être tronqué à $m \approx Ka$ puisque le rapport $J_m(Ka)/H_m^{(1)}(Ka)$ devient très vite négligeable pour $m > Ka$. En pratique cependant, la prise en compte d'un certain nombre d'ondes partielles prend de la mémoire qui pourrait être allouée au nombre de centres diffuseurs. Par conséquent, l'approximation de l'onde s est celle qui permet de faire des calculs numériques avec le plus grand nombre de diffuseurs. Le programme numérique de calcul de l'intensité de la fonction d'onde doit vérifier plusieurs conditions :

1. il doit permettre de reproduire l'intensité liée à la diffusion sur un centre ;
2. la fonction d'onde doit s'annuler sur le bord et dans les disques durs ;
3. le volume sous la surface de l'onde plane, c.-à-d. le volume défini par le support de l'onde plane, doit être le même que le volume sous la surface de la fonction d'onde totale (conservation du flux) ;
4. le programme doit être robuste par rapport à une légère variation dans la longueur d'onde λ, le rayon des disques a, la position des disques $\mathbf{R}_i$ où le nombre d'ondes partielles utilisées m_{max}.

En ce qui concerne la section efficace, nous avons choisi de ne considérer que l'onde s pour la diffusion multiple dans le système et de resommer analytiquement les deux séries d'ondes partielles donnant le couplage avec l'extérieur — sommes sur m et p de l'expression (5.11). De cette façon, la matrice $\mathcal{T}$ s'écrit simplement

$$\langle \mathbf{K}' | \mathcal{T} | \mathbf{K} \rangle = -4i \frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)} \sum_{i=1}^{N} \sum_{j=1}^{N} e^{i\mathbf{K}'\mathbf{R}_i} \left(\mathbf{M}^{-1}\right)_{00}^{(ij)} e^{-i\mathbf{K}\mathbf{R}_j}. \tag{5.18}$$

Cette expression montre que l'information sur les directions incidente et sortante est conservée dans les exponentielles, mais cette resommation analytique ne peut pas se faire au-delà de l'approximation de l'onde s.

5.4.2 Diffusion sur un disque dur

En ce qui concerne le point 1, les figures 5.2 montrent l'intensité de la fonction d'onde lors de la diffusion sur un centre à basse énergie. La diffusion est isotrope et la fonction d'onde s'annule dans le disque dur. La première figure est une représentation en trois dimensions et la deuxième est un tracé des courbes de niveau de la même figure. Le petit cercle au centre de la figure représente l'emplacement du disque dur et non le disque dur lui-même (la taille du symbole n'est pas proportionnelle à la taille du disque dur). L'onde incidente vient des $y < 0$ et se propage dans la direction des y croissants. Le rayon du centre diffuseur en question est $a = 1$, seule l'onde $m = 0$ a été prise en compte et $Ka = 10^{-3}$.

Lorsque le rayon du disque devient grand devant la longueur d'onde, il est nécessaire prendre en compte suffisamment d'ondes partielles pour annuler de la fonction d'onde sur le bord du disque. Les figures 5.3 sont une illustration du fait qu'un nombre insuffisant d'ondes partielles n'annule pas la fonction d'onde. Le rayon du disque est $a = 5$, $Ka = 5$ et le nombre d'ondes

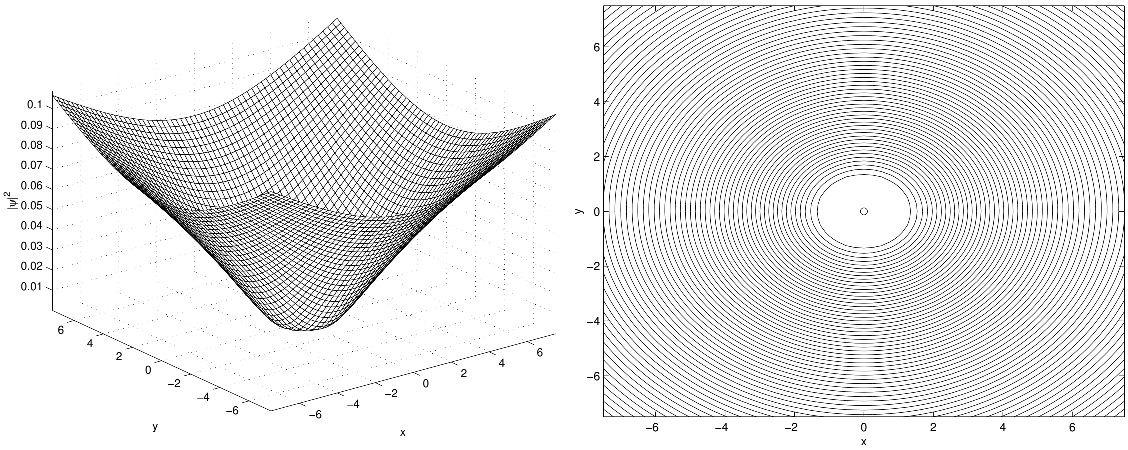


FIG. 5.2 – *Intensité de la fonction d'onde lors de la diffusion dans l'onde s sur un centre de rayon $a = 1$. $Ka = 10^{-3}$.*

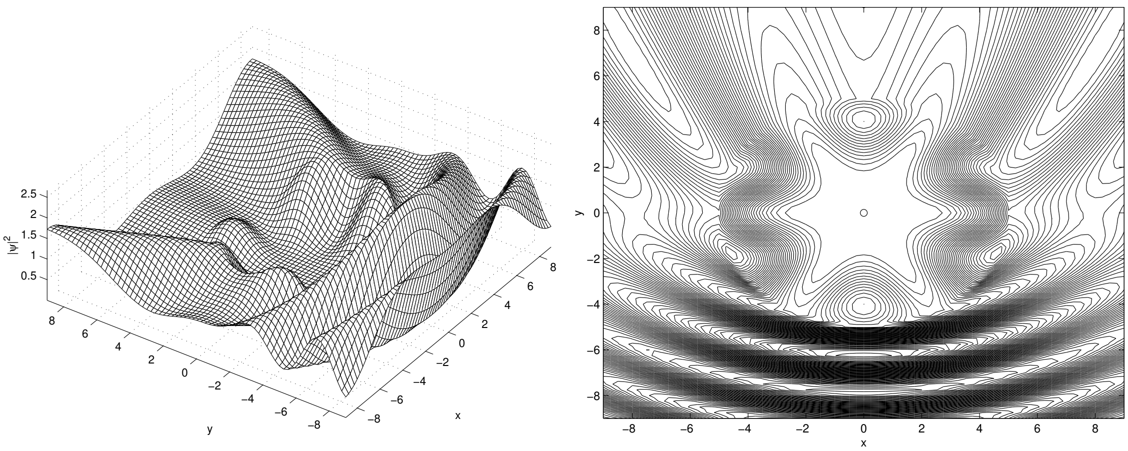


FIG. 5.3 – *Intensité de la fonction d'onde lors de la diffusion sur un centre de rayon $a = 5$. $Ka = 5$, $m_{max} = 2$.*

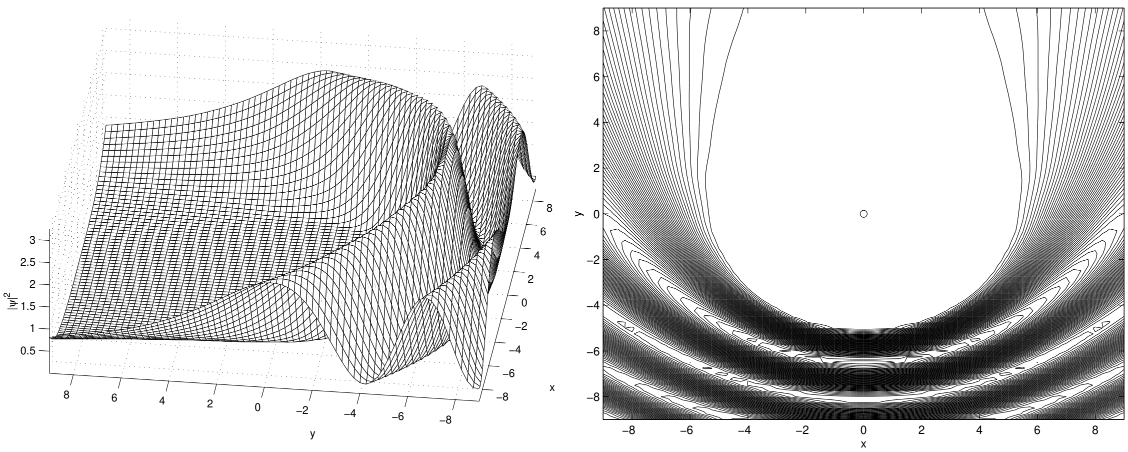


FIG. 5.4 – *Intensité de la fonction d'onde lors de la diffusion sur un centre de rayon $a = 5$. $Ka = 5$, $m_{max} = 7$.*

partielles représentées est $m_{max} = 2$. Sur la figure de droite avec les courbes de niveaux, nous voyons le bord du disque se dessiner, mais l'onde pénètre tout de même dans le disque.

La même configuration contenant plus d'ondes partielles ($m_{max} = 7$) est montrée par les figures 5.4. Le disque apparaît clairement dans la figure avec les contours. La fonction d'onde est repoussée à l'extérieur du potentiel comme il se doit.

5.4.3 Diffusion sur un système désordonné particulier

Ce paragraphe illustre les différentes conditions à vérifier sur un système particulier composé de 25 disques durs répartis aléatoirement. La taille de ce système est mesurée par

$$L = \sqrt{L_x L_y} \approx 3.81,$$

où L_x est l'écart maximal entre deux centres selon la direction x, et L_y l'écart maximal entre deux centres selon la direction y. L'intensité de la fonction d'onde, dans ce système et pour une valeur de Ka donnée, est représentée par la figure 5.5. L'onde incidente stationnaire prend son origine dans les y négatifs et se propage selon les y croissants. Le nombre d'onde est $K = 2.32$, la longueur d'onde, $\lambda = 2.71$, est inférieure à la taille du système. Le rayon des diffuseurs est $a = .05$. Le produit $Ka = .116$ est inférieur à 1, autorisant l'approximation de l'onde s. La densité sans dimension est $\rho a^2 = .0028$. L'apparition d'un pic d'intensité est dû à des interférences constructives provenant de la diffusion multiple. La vue de dessus de la même courbe permet de voir la position des différents disques représentés par des cercles (dont le diamètre n'est pas relié à la taille réelle du diffuseur).

Bien qu'il y ait une augmentation de l'intensité de la fonction d'onde, le point 2 est vérifié : l'onde ne pénètre pas dans les disques durs. L'intensité de la fonction d'onde est de l'ordre de 10^{-31} dans les diffuseurs comme le montre la figure 5.6. Elle n'a pas la même valeur dans tous les centres diffuseurs car elle n'est pas homogène dans le système, mais varie selon la position des disques durs. Dans le cas d'un système ordonné, la répartition des valeurs de l'intensité est régulière. Le point 3 est également vérifié : l'intégration de l'intensité de l'onde plane sur la surface considérée donne le même résultat que l'intégration de l'intensité de l'onde globale. Enfin, le dernier point est aussi vérifié : l'existence du pic est stable sous une faible variation des différents paramètres à disposition. Les figures 5.7 et 5.8 montrent la fonction d'onde dans le même système mais à des énergies différentes indiquées dans la figure 5.9 par les flèches 3 et 1 respectivement. La longueur d'onde associée à la figure 5.7 est $\lambda = 2.04$, celle associée à la figure 5.8 est $\lambda = 3.41$.

La section efficace étant une quantité asymptotique, il n'est pas possible de tronquer la somme sur les ondes partielles à une petite valeur de m ; en faisant cela l'information sur la direction des ondes incidente et sortante serait perdue. Pour éviter d'avoir une somme trop importante à calculer, il est préférable de remplacer celle-ci par l'expression exacte de la somme infinie, c.-à-d. par l'onde plane. L'approximation de diffusion de l'onde s dans le système permet de faire ces resommations exactes. Cette approximation, donnée par l'expression (5.18), impose de choisir $Ka \ll 1$. La variation de la section efficace totale du système reflète la présence de résonances de diffusion : pour certaines valeurs de l'énergie (Ka), la diffusion de l'onde est fortement augmentée. Cependant, il ne suffit pas que la section efficace totale soit forte pour provoquer une augmentation de l'intensité de la fonction d'onde. C'est le cas par exemple de l'intensité représentée dans la figure 5.7 qui correspond à l'énergie signalée par la flèche 3 dans la figure 5.9. Ici, les interférences constructives n'augmentent pas énormément l'intensité de la fonction d'onde alors que la section efficace totale du système est plus importante que la somme des sections efficaces individuelles. Le travail de Gaspard et Rice [37] précise que les résonances de diffusion

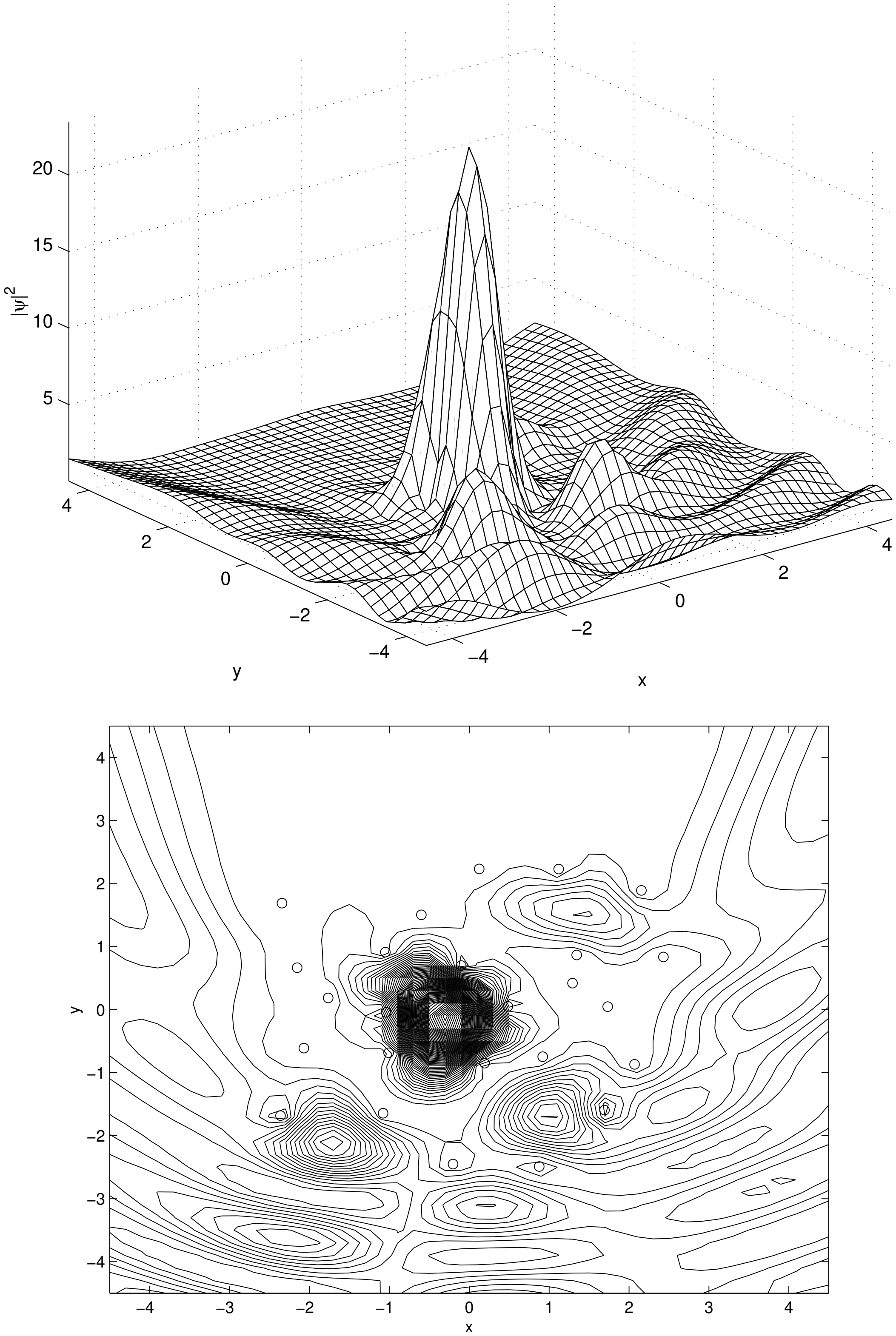


FIG. 5.5 – *Intensité de la fonction d'onde dans un système désordonné de 25 disques durs.* $K = 2.32, Ka = .116$.

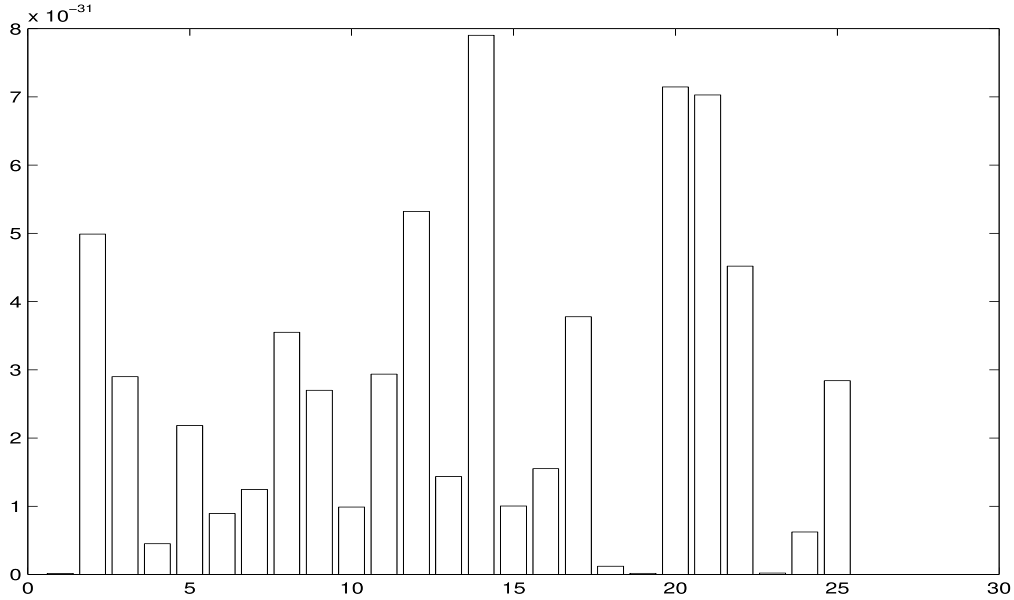


FIG. 5.6 – *Intensité de la fonction d'onde à l'intérieur des disques durs d'un système désordonné.*

ne se traduisent pas toujours par des pics de la section efficace totale. La relation entre une résonance de diffusion (Ka complexe) et un pic de la section efficace totale (Ka réel) n'est pas triviale.

Dans le cas du tracé de la fonction d'onde, la conservation du flux a été vérifiée par intégration de l'intensité de l'onde sur la surface du support de l'onde plane. Dans le cas de la section efficace, la conservation du flux peut être vérifiée par le théorème optique, qui relie les deux façons (5.15) et (5.16) d'évaluer la section efficace totale.

Les courbes de la figure 5.10 représentent la section efficace totale du système à 25 centres diffuseurs. La courbe en tirets est obtenue par la formule (5.15) et la courbe en pointillés par (5.16). Le théorème optique (σ_{tot}=σ_{i}) est d'autant mieux vérifié numériquement que Ka est plus petit. Pour vérifier le théorème optique aux grandes valeurs de Ka, il est nécessaire d'inclure les ondes partielles dans la matrice $\mathbf{M}$, mais cela demande l'utilisation de l'expression exacte de la matrice $\mathcal{T}$ donnée par la formule (5.11).

5.5 Transition entre le régime balistique et le régime diffusif

Dans ce paragraphe, nous étudions la variation de la section efficace totale de systèmes comportant un grand nombre de diffuseurs (entre 441 et 3701) lorsque l'on passe du régime balistique au régime diffusif. Le grand nombre de diffuseurs permet de diminuer les fluctuations statistiques autour de la valeur moyenne, qui sont de l'ordre de $1/\sqrt{N} \approx 5\%$ au maximum.

5.5.1 Régimes asymptotiques

Dans le régime balistique, le libre parcours moyen l est très grand devant la taille du système, L, et l'onde incidente subit au plus une collision en traversant le système. Dans la série de Watson, seul le premier terme de la série contribue, c.-à-d. le terme de diffusion sur un centre. La matrice

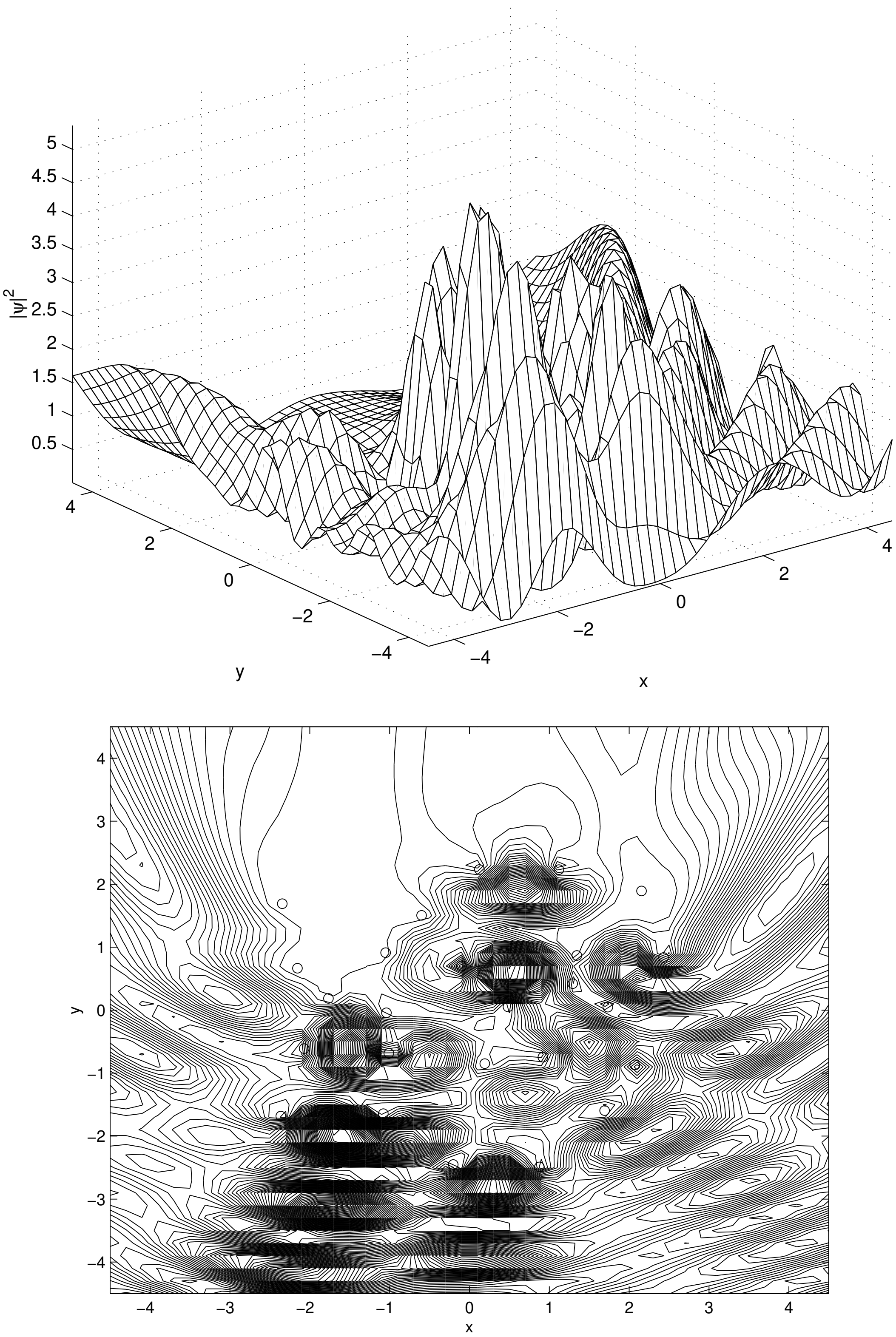


FIG. 5.7 – *Intensité de la fonction d'onde* . $K = 3.08,\ Ka = .154.$

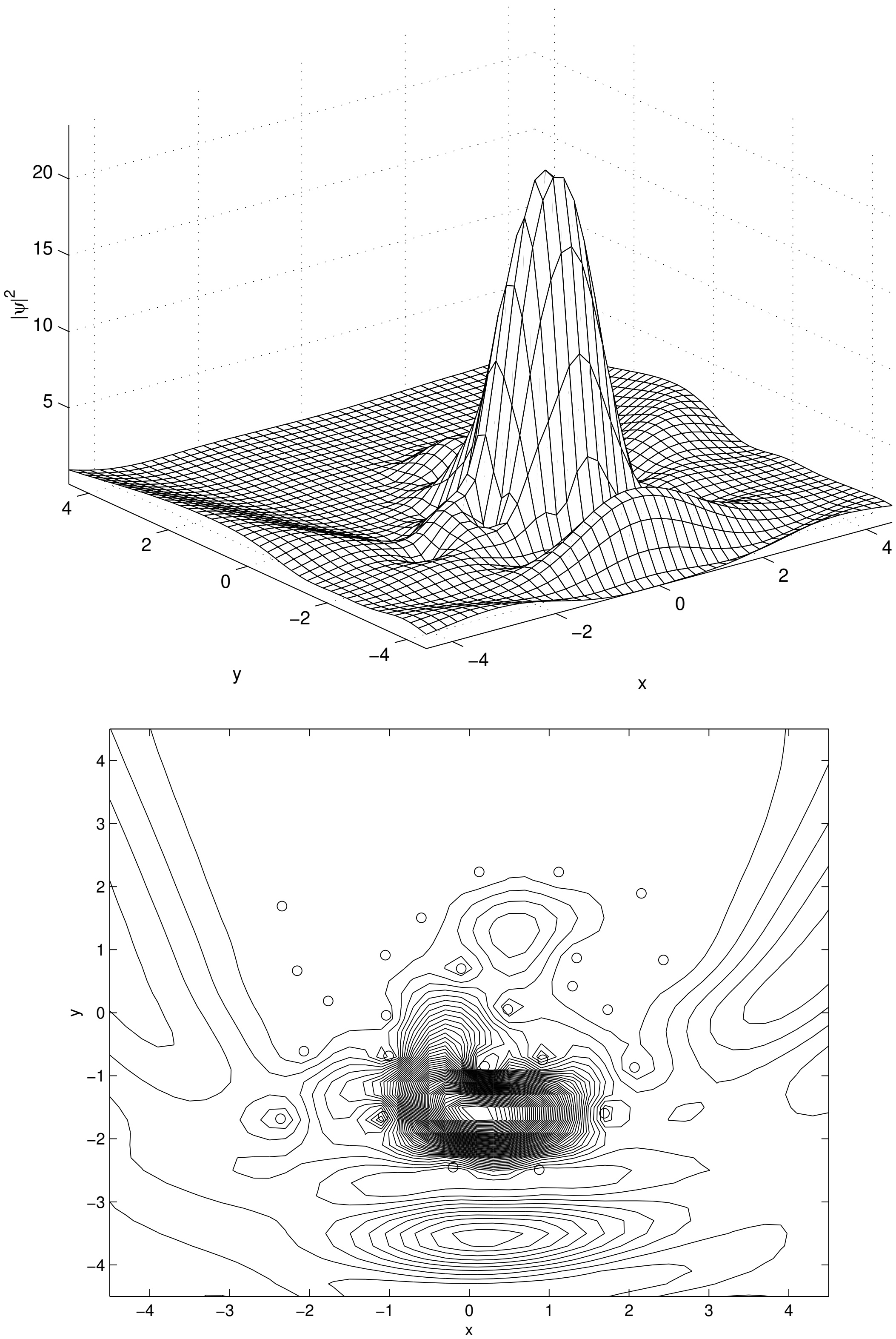


FIG. 5.8 – *Intensité de la fonction d'onde .* $K = 1.84$, $Ka = .092$.

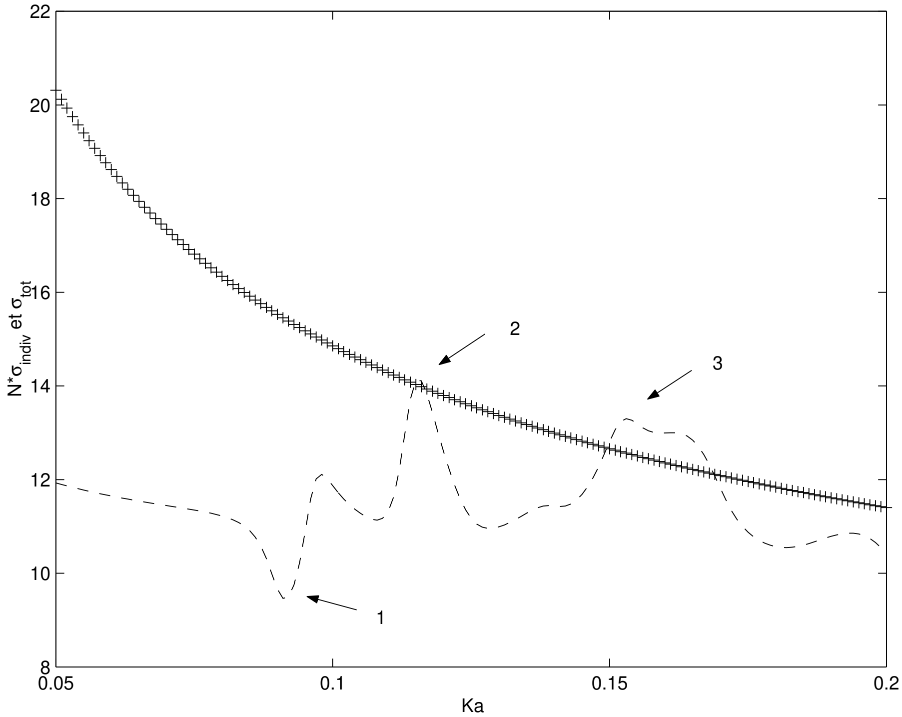


FIG. 5.9 – *Représentation de la section efficace totale (en pointillés) et de la somme des sections efficaces individuelles (points en croix).*

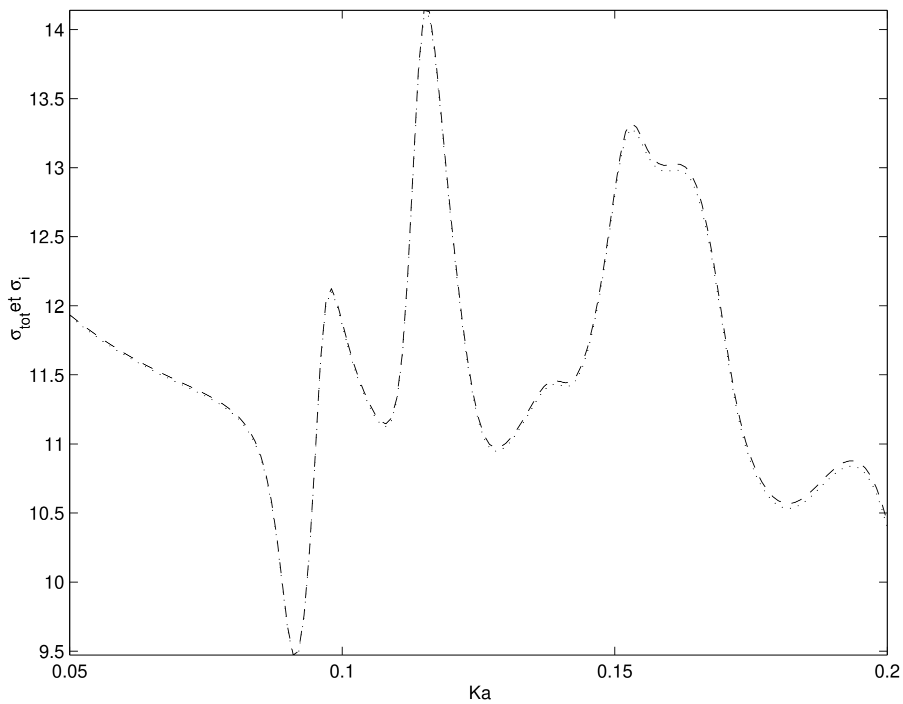


FIG. 5.10 – *Section efficace totale d'un système de 25 diffuseurs. Vérification du théorème optique.*

de diffusion du système est alors

$$\mathcal{T} \approx \sum_{i=1}^{N} \mathbf{t}_i. \tag{5.19}$$

La section efficace est simplement la somme de toutes les sections efficaces individuelles.

$$\sigma_{\text{tot}} \approx N\sigma_{\text{indiv}},$$

où σ_{indiv} est la section efficace d'un disque dur donnée par l'expression (1.17).

Dans le régime diffusif ($l \ll L$), la longueur de pénétration de l'onde dans le système est de l'ordre du libre parcours moyen l. La diffusion prend place sur une portion du système d'épaisseur l. La section efficace totale est donc proportionnelle à la surface que voit l'onde incidente en arrivant sur le système.

$$\sigma_{\text{tot}} \approx cL,$$

en dimension 2, où c est une constante à évaluer. Le nombre de diffuseurs N est donné par

$$N = \rho L^2$$

et le libre parcours moyen est donné par la formule de Boltzmann $l = 1/\rho\sigma_{\text{indiv}}$ (en oubliant les corrections du chapitre 4). Le rapport $\sigma_{\text{tot}}/N\sigma_{\text{indiv}}$ est alors une simple fonction de L/l.

$$\sigma_{\text{tot}} = N\sigma_{\text{indiv}} f\left(\frac{L}{l}\right), \tag{5.20}$$

où

$$\begin{cases} f(x) \to 1 & \text{si } x \ll 1, \\ f(x) \sim \frac{c}{x} & \text{si } x \gg 1. \end{cases}$$

5.5.2 Calcul numérique

La courbe 5.12 montre le rapport $\sigma_{\text{tot}}(\mathbf{K})/N\sigma_{\text{indiv}}(\mathbf{K})$, où $\sigma_{\text{indiv}}(\mathbf{K})$ est la section efficace de diffusion sur un centre, donnée par (1.12), en fonction du rapport de la taille du système L et du libre parcours moyen calculé par l'expression de Boltzmann $l = 1/\rho\sigma_{\text{indiv}}$. La section efficace totale σ_{tot} est calculée en prenant la partie imaginaire de la matrice $\mathcal{T}$, équ. (5.16). L'approximation de l'onde s reste encore valable pour les systèmes de grande taille, *i.e.* contenant un grand nombre de disques durs. Pour une configuration typique de 1681 disques durs répartis aléatoirement, la figure 5.11 montre que σ_{tot} et σ_{i} sont identiques à 5% près. La précision peut être améliorée avec un pas plus fin pour l'intégration angulaire (le pas pour l'intégration angulaire de cette figure est $d\theta = .005$). Le calcul de σ_{tot} avec un pas plus fin montre que les valeurs de σ_{tot} se rapprochent effectivement de celles de σ_{i}. Le calcul numérique de la section efficace totale au moyen de l'expression σ_{i} se révèle donc plus aisé et plus fiable que celui utilisant la définition σ_{tot}.

Dans la figure 5.12, chaque croix représente le calcul du rapport $\sigma_{\text{i}}/N\sigma_{\text{indiv}}$ pour une configuration du désordre donnée ayant un nombre de diffuseurs N compris entre 441 et 3721, une densité ρa^2 comprise entre $4.5\ 10^{-7}$ et $1.5\ 10^{-4}$, une énergie Ka comprise entre 0.04 et 0.1 et un rayon a fixé à 0.05.

Dans le régime balistique, on retrouve le fait que $\sigma_{\text{i}}/N\sigma_{\text{indiv}} \to 1$. En outre, dans le régime diffusif, le rapport $\sigma_{\text{i}}/N\sigma_{\text{indiv}}$ a le comportement en cl/L attendu, avec $c \approx 2$. Au niveau de

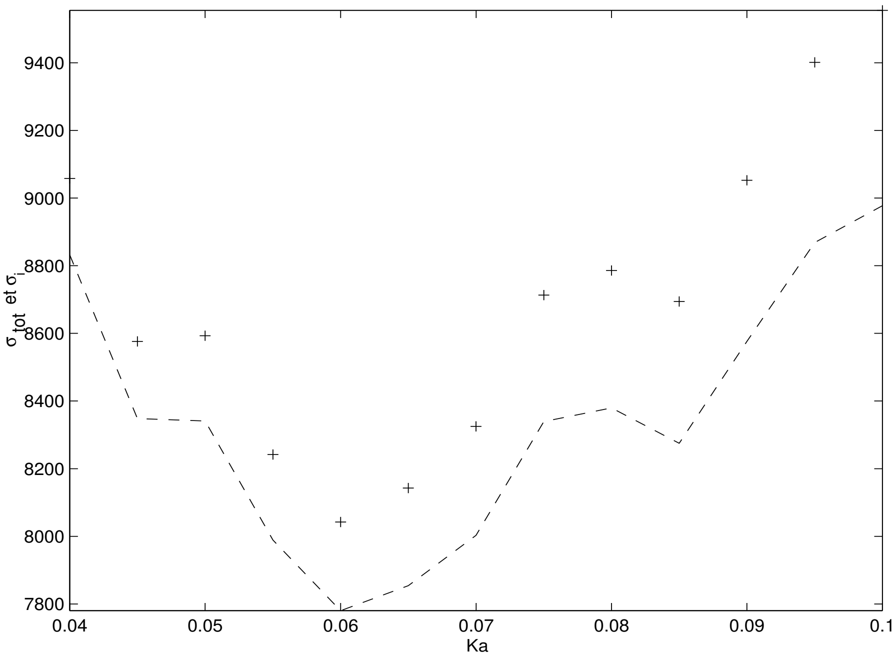


FIG. 5.11 – *Vérification du théorème optique pour une configuration de 1681 diffuseurs. En pointillé, la section efficace est évaluée par* σ_i *— expression* (5.16) *; les points en croix représentent la section efficace évaluée par* σ_{tot} *— expression* (5.15).

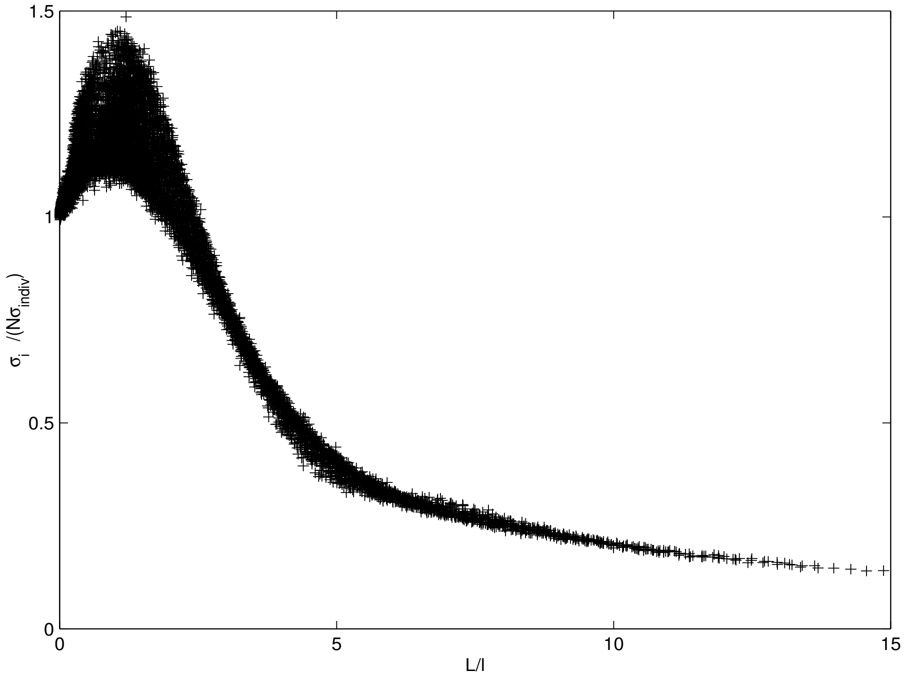


FIG. 5.12 – *Rapport de la section efficace totale sur N fois la section efficace individuelle en fonction du rapport* L/l.

la transition entre le régime diffusif et le régime balistique, la fonction f dépend fortement de l'énergie Ka. Plus Ka est faible, plus la section efficace totale du système devient importante devant $N\sigma_{\text{indiv}}(\mathbf{K})$.

Il est possible de diminuer Ka, mais cela nécessite de diminuer le rayon a de façon à conserver les conditions $\lambda \ll l,L$. Dans la figure 5.13, nous avons superposé les données obtenues pour $Ka = 10^{-3}$, ($a = 10^{-3}$; $N = 441, \cdots, 1681$; $\rho a^2 = 4.10^{-10}, \cdots, 2.10^{-7}$) avec celles de la figure 5.12.

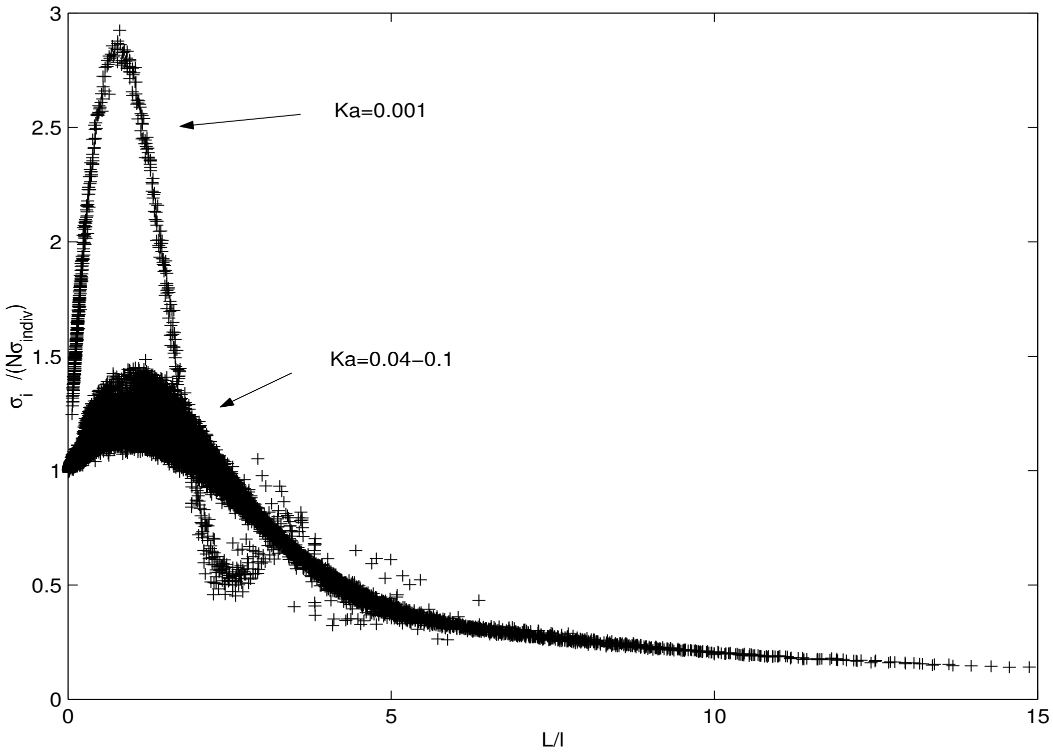


FIG. 5.13 – *Rapport de la section efficace totale sur N fois la section efficace individuelle en fonction du rapport L/l lorsque $Ka \to 0$.*

5.5.3 Section efficace d'un système à deux centres diffuseurs

La diffusion multiple commence à apparaître lorsque l'on passe du régime balistique au régime diffusif, c.-à-d. lorsque le libre parcours moyen l est de l'ordre de la taille L du système. Il est donc intéressant d'étudier d'un peu plus près le passage du régime de diffusion sur les centres diffuseurs individuels au régime de diffusion multiple.

La comparaison de la section efficace totale pour deux centres diffuseurs par rapport à la somme des sections efficaces totales de chaque diffuseur montre que cette première est en général plus importante pour $Ka \ll 1$ fixé. Elle montre également que l'écart entre la section efficace totale pour deux diffuseurs et la somme des sections efficaces totales individuelles augmente lorsque Ka diminue. Il y a bien sûr une dépendance de la section efficace totale aussi bien au niveau de l'orientation des deux diffuseurs par rapport à la direction de l'onde incidente qu'au niveau de la distance relative séparant les diffuseurs. En effet, le rapport $\sigma_{\text{i}}/2\sigma_{\text{indiv}}$ augmente au fur et à mesure que la direction de l'onde incidente s'approche de la perpendiculaire à la direction que forme les deux diffuseurs.

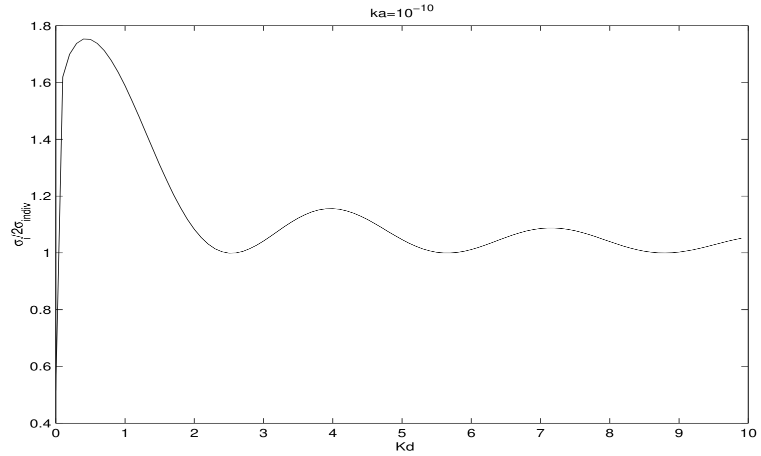


FIG. 5.14 – *Rapport de la section efficace totale moyenne pour deux centres diffuseurs sur la somme des sections efficaces individuelles en fonction de la distance entre les deux diffuseurs pour $Ka = 10^{-10}$.*

Dans l'approximation de l'onde s, le calcul de l'inverse de la matrice $\mathbf{M}$ pour deux diffuseurs situés en $\mathbf{R}_1$ et $\mathbf{R}_2$ (distance relative $R_{12} = d$) conduit à l'expression suivante de la matrice $\mathcal{T}$ du système à deux corps.

$$\langle \mathbf{K}|\mathcal{T}|\mathbf{K}\rangle = -8i \frac{1 - \frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)} H_0^{(1)}(Kd)\cos(Kd\cos\theta_{12})}{\frac{H_0^{(1)}(Ka)}{J_0(Ka)} - \frac{J_0(Ka)}{H_0^{(1)}(Ka)} H_0^{(1)}(Kd)^2}. \tag{5.21}$$

La moyenne sur la direction formée par les deux diffuseurs conduit à la section efficace totale moyenne $\bar{\sigma}_{\mathrm{i}}$ dont l'expression est la suivante :

$$\bar{\sigma}_{\mathrm{i}} = -\frac{1}{K}\mathfrak{Im}\int \frac{d\theta_{12}}{2\pi}\langle \mathbf{K}|\mathcal{T}|\mathbf{K}\rangle. \tag{5.22}$$

En utilisant les développements adéquats des fonctions de Bessel et de Hankel dans la limite $Ka \ll Kd \ll 1$, donnés dans l'annexe A, on trouve que la valeur maximale de $\bar{\sigma}_{\mathrm{i}}$ est approximativement donnée par

$$\bar{\sigma}_{\mathrm{i}}^{\max} \approx \frac{4}{K}\frac{\pi^2}{\ln^2 K'a} \approx 2 \times 2\sigma_{\mathrm{2D}}, \tag{5.23}$$

et que la valeur de Kd pour laquelle $\bar{\sigma}_{\mathrm{i}}$ est maximale vérifie

$$(Kd)^2 \approx -\frac{8}{\ln K'a + \ln K'd}.$$

Ces deux expressions utilisent la relation $K' = Ke^{\gamma}/2$, où γ est la constante d'Euler. La figure 5.14 confirme la validité de ces expressions approchées.

Les calculs de section efficace pour deux diffuseurs montrent qu'il est possible d'obtenir une section efficace totale supérieure à la somme des sections efficaces individuelles, mais ils ne suffisent cependant pas à expliquer complètement le pic qui atteint presque la valeur 3 dans la figure 5.13.

Deuxième partie

Approche de théorie des champs pour les systèmes désordonnés et les électrons corrélés

Notations et conventions

Notations de la partie II

Les notations et conventions générales de cette deuxième partie sont données dans le tableau 1.

TAB. 1 – *Notations de la partie II*

symbole	signification
$\mathbf{x}$, $\lvert\mathbf{x}\rvert \equiv \mathsf{x}$	vecteur position, norme du vecteur position,
$x \equiv (t,\mathbf{x})$	notation abrégée pour l'espace et le temps,
$\mathbf{p}$, $\lvert\mathbf{p}\rvert \equiv \mathsf{p}$	vecteur impulsion, norme du vecteur impulsion,
$p \equiv (\omega_p,\mathbf{p})$	notation abrégée pour la fréquence et l'impulsion,
$px \equiv \mathbf{px} - \omega_p t$	produit scalaire,
$V = L^d$	volume en dimension d,
T	intervalle temporel,
$\psi(x) \equiv \psi(\mathbf{x},t) \equiv \psi_x$	champ de l'électron (variable de Grassmann),
$\psi(x) = \frac{1}{\sqrt{VT}} \sum_p e^{ipx}\psi(p)$	décomposition sur les modes de Fourier,
$\mathcal{Z}$	fonction de partition,
j	source de l'électron,
m	masse de l'électron,
k_F	vecteur d'onde de Fermi,
$\mu = \frac{k_F^2}{2m}$	potentiel chimique de l'électron,
$\xi_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \mu$	énergie cinétique,
$\xi_{\mathbf{qp}} = \xi_{\mathbf{p+q}} - \xi_{\mathbf{p}} = \frac{\mathbf{pq}}{m} + \frac{\mathbf{q}^2}{2m}$	différence d'énergies cinétiques,
$\delta_p^\mu = \begin{cases} +\delta & \text{si} \quad \frac{\mathbf{p}^2}{2m} > \mu, \\ -\delta & \text{si} \quad \frac{\mathbf{p}^2}{2m} < \mu. \end{cases}$	partie infinitésimale apparaissant dans le propagateur de l'électron.

Notations du chapitre 6

Dans le chapitre 6, l'introduction d'impuretés statiques rendra nécessaire le passage à une description discrète de l'espace. Pour cela, nous utiliserons des notations de théorie des champs sur réseau de temps en temps.

Nous donnons ici le lien entre la représentation continue de différentes variables et leur représentation discrète.

TAB. 2 – *Passage des notations du continu aux notations du discret.*

$$\begin{array}{|ll|}
\hline
\mathbf{x} \to \mathbf{x}_n = \mathbf{n}a_s, & \int d\mathbf{x} \to a_s^d \sum_{\mathbf{x}_n}, \\
\mathbf{k} \to \mathbf{k}_n = \frac{2\pi}{L}\mathbf{n}, & \int d\mathbf{k} \to \frac{(2\pi)^d}{V} \sum_{\mathbf{k}_n}, \\
t \to t_m = m a_t, & \int dt \to a_t \sum_{t_m}, \\
\omega \to \omega_m = \frac{\pi}{T} m, & \int d\omega \to \frac{\pi}{T} \sum_{\omega_m}, \\
\Delta \to \frac{1}{a_s^d}\hat{\Delta}, & \partial_t \to \frac{1}{a_t}\hat{\partial}_t. \\
\hline
\end{array}$$

Pour un réseau spatial de pas a_s, et un réseau temporel de pas a_t, le passage du continu au discret est donné dans le tableau 2, où $\hat{\Delta}$ est le Laplacien sur réseau, $\mathbf{n}$ est un vecteur pointant sur un site du réseau (M est le nombre de sites sur le réseau, $Ma^d = V$; $V \equiv L^d$ est le volume) ; m varie de $-\mathcal{M} = -T/a_t$ à $\mathcal{M}$ ($2T$ est l'intervalle de temps sur lequel on travaille). Pour alléger les écritures, on pourra écrire $\sum_{\mathbf{x}}$ à la place de $\sum_{\mathbf{x}_n}$, sachant que la somme porte sur des valeurs discrètes.

Écriture de l'action sur réseau

L'action du continuum s'exprime sur le réseau par

$$\frac{i}{\hbar}\int dtdxS[\phi^\dagger,\phi,\psi^\dagger,\psi] \to i\sum_{\hat{x},\hat{t}} \hat{S}[\hat{\phi}^\dagger,\hat{\phi},\hat{\psi}^\dagger,\hat{\psi}],$$

où ψ est le champ de l'électron et ϕ celui de l'impureté. Les quantités portant un chapeau représentent les quantités sur le réseau. Les trois termes de l'action $S = S_{imp} + S_{e^-} + S_{int}$ deviennent

$$S_{imp} = \hbar\int dtdx\phi^\dagger(x,t)(i\partial_t - \alpha)\phi(x,t) \to \hat{S}_{imp} = \sum_{\mathbf{n},m} \hat{\phi}^\dagger_{\mathbf{n},m}(i\hat{\partial}_t - \hat{\alpha})\hat{\phi}_{\mathbf{n},m},$$

$$S_{e^-} = \hbar\int dtdx\psi^\dagger(x,t)(i\partial_t + \frac{\hbar}{2m}\Delta + \mu)\psi(x,t) \to \hat{S}_{e^-} = \sum_{\mathbf{n},m} \hat{\psi}^\dagger_{\mathbf{n},m}(i\hat{\partial}_t + \frac{\hat{\hbar}}{2\hat{m}}\hat{\Delta} + \hat{\mu})\hat{\psi}_{\mathbf{n},m},$$

$$S_{int} = -g\hbar\int dtdx\psi^\dagger(x,t)\psi(x,t)\phi^\dagger(x,t)\phi(x,t) \to \hat{S}_{int} = -\hat{g}\sum_{\mathbf{n},m} \hat{\psi}^\dagger_{\mathbf{n},m}\hat{\psi}_{\mathbf{n},m}\hat{\phi}^\dagger_{\mathbf{n},m}\hat{\phi}_{\mathbf{n},m},$$

avec les quantités suivantes sans dimensions

$$\begin{aligned}
\hat{\phi}_{\mathbf{n},m} &= a_s^{\frac{d}{2}}\phi(x,t) = a_s^{\frac{d}{2}}\phi(\mathbf{n}a,ma_t), \quad \hat{\alpha} = a_t\alpha, \quad \frac{\hat{\hbar}}{\hat{m}} = \frac{a_t}{a_s^d}\frac{\hbar}{m}, \\
\hat{\psi}_{\mathbf{n},m} &= a_s^{\frac{d}{2}}\psi(x,t) = a_s^{\frac{d}{2}}\psi(\mathbf{n}a,ma_t), \quad \hat{g} = \frac{a_t}{a_s^d}g, \quad \hat{\mu} = a_t\mu,
\end{aligned}$$

et les opérateurs $\hat{\partial}_t\hat{\phi}_{\mathbf{n},m} = \hat{\phi}_{\mathbf{n},m+1} - \hat{\phi}_{\mathbf{n},m}$ et $\hat{\Delta}\hat{\phi}_{\mathbf{n},m} = \sum_{i=1}^d \hat{\phi}_{\mathbf{n}+\mathbf{e}_i,m} + \hat{\phi}_{\mathbf{n}-\mathbf{e}_i,m} - 2\hat{\phi}_{\mathbf{n},m}$, où $\mathbf{e}_i$ est un vecteur unité du réseau.

Notations du chapitre 7

La constante $\hbar$ sera omise ($\hbar = 1$).

TAB. 3 – *Notations du chapitre 7*

symbole	signification
$\delta_{x,x'} \equiv \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\delta(t-t')$	notation simplifiée de la distribution de Dirac,
$\delta_{p,p'} \equiv \frac{(2\pi)^3}{V}\delta(\mathbf{p}-\mathbf{p}')\frac{2\pi}{T}\delta(\omega_p-\omega_{p'})$	relation entre symbole de Kronecker et distribution de Dirac,
$j\cdot\phi \equiv \int_x j_x\phi_x \equiv \int dtd\mathbf{x}j(t,\mathbf{x})\phi(t,\mathbf{x})$	produit scalaire de $j(x)$ avec $\phi(x)$,
$\frac{1}{VT}\sum_p \equiv \int_p \equiv \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^d}\int\frac{d\omega}{2\pi}$	intégration dans l'espace de Fourier,
$\frac{\delta^n F[j]}{\delta j(x)^n} \equiv F^{(n)}_{j_x}[j]$	dérivée fonctionnelle n^{e} de $F[j]$.

À l'aide de ces notations, le vertex propre à n points est noté

$$\Gamma^{(n)}_{\psi_1,\psi_2,\cdots,\psi_n} \equiv \frac{\delta^n}{\delta\psi(x_1)\delta\psi(x_2)\cdots\psi(x_n)}\Gamma[\psi].$$

De même, la dérivée fonctionnelle n^{e} par rapport à $\bar{u}(x)$ d'une constante de couplage $Z(\bar{u})$ (ou $U(\bar{u})$), fonction de $\bar{u}(x)$, est notée

$$\frac{\delta^n Z(\bar{u})}{\delta\bar{u}(x)^n} \equiv Z^{(n)}(\bar{u}),$$

et lorsque celle-ci est évaluée pour un champ homogène, $\bar{u}(x) = u_0$, elle est simplement notée $Z^{(n)}$.

Introduction aux variables de Grassmann

Les opérateurs de création $\Psi^\dagger$ et d'annihilation Ψ des fermions obéissent aux relations d'anti-commutation ci-dessous.

$$\{\Psi^\dagger,\Psi\} = \Psi^\dagger\Psi + \Psi\Psi^\dagger = 1,$$
$$\{\Psi,\Psi\} = \{\Psi^\dagger,\Psi^\dagger\} = 0.$$

L'action de ces opérateurs sur un état vide $|0\rangle$ ou un état occupé $|1\rangle$ est donnée par

$$\Psi^\dagger|0\rangle = |1\rangle, \quad \Psi^\dagger|1\rangle = 0,$$
$$\Psi|1\rangle = |0\rangle, \quad \Psi|0\rangle = 0.$$

Un *état cohérent* fermionique $|\psi\rangle$ est défini comme étant un état propre de l'opérateur d'annihilation Ψ avec la valeur propre ψ, *i.e.*

$$\Psi|\psi\rangle = \psi|\psi\rangle.$$

Cet état cohérent s'écrit
$$|\psi\rangle = |0\rangle - \psi|1\rangle.$$
Les relations d'anticommutation données plus haut impliquent que ψ doit être une variable anticommutante. Cette variable ψ est une *variable de Grassmann*.

De la même façon, on définit $\psi^\dagger$ telle que

$$\begin{aligned}\langle\psi^\dagger|\Psi^\dagger =&\langle\psi^\dagger|\psi^\dagger,\\ \langle\psi^\dagger| =&\langle 0| - \langle 1|\Psi^\dagger = \langle 0| + \psi^\dagger\langle 1|.\end{aligned}$$

La variable $\psi^\dagger$ est également une variable de Grassmann. Elle n'est cependant pas conjuguée complexe de ψ.

Les relations d'anticommutation impliquent que $\psi^2 = (\psi^\dagger)^2 = 0$. De ce fait, toute fonction de ψ et $\psi^\dagger$ s'écrit
$$f(\psi^\dagger,\psi) = a + b\psi^\dagger + c\psi + d\psi^\dagger\psi,$$
où a,b,c,d sont des nombres complexes usuels.

Toutes les intégrations sur les variables de Grassmann peuvent se ramener aux deux intégrales suivantes.
$$\int d\psi = 0 \qquad \int \psi d\psi = 1.$$
De même, on a
$$\int d\psi^\dagger = 0 \qquad \int \psi^\dagger d\psi^\dagger = 1.$$
L'intégrale n'a pas de bornes car ce n'est pas une intégration ordinaire.

L'opérateur de dérivation agit sur une variable de Grassmann lorsque celle-ci est adjacente (par convention) : si η est une variable de Grassmann, on a

$$\frac{d}{d\psi}\psi\eta = \eta \quad \text{et} \quad \frac{d}{d\psi}\eta\psi = -\eta.$$

Pour approfondir le sujet, le lecteur est renvoyé au paragraphe III de l'article de revue de Shankar [80] ou au chapitre 1 de [70].

Chapitre 6

Modèle d'impuretés statiques

Introduction

Les systèmes désordonnés présentent en général une distribution du désordre relativement uniforme. Ce désordre, engendré par la présence d'impuretés occupant les sites d'un réseau de façon aléatoire, nécessite le calcul de moyennes d'ensemble des quantités physiques. Dans la 1re partie de cette thèse, la moyenne d'ensemble s'obtenait en intégrant sur toutes les positions possibles que peuvent prendre les centres diffuseurs. Toutefois, le potentiel restait le même, c.-à-d. un potentiel de type sphère dure. Dans l'approche courante utilisant les techniques de théorie des champs [10], la moyenne sur le potentiel désordonné est obtenue en intégrant sur toutes les configurations possibles du potentiel, qui est supposé gouverné par une distribution gaussienne. Contrairement à l'approche de la partie I, le potentiel n'est plus fixé à un type particulier mais peut prendre différentes formes selon une distribution gaussienne.

Le fait que le désordre soit gelé (*quenched*) impose le calcul successif de la moyenne statistique de l'observable $\mathcal{O}(\psi)$ pour une configuration donnée puis de la moyenne d'ensemble en intégrant sur la distribution gaussienne du potentiel U, ce qui s'écrit

$$\langle \mathcal{O}(\psi) \rangle_{\text{dés}} = \int \mathcal{D}U P(U) \langle \mathcal{O}(\psi) \rangle, \tag{6.1}$$

où $\langle\ \rangle_{\text{dés}}$ représente la moyenne sur le désordre,

$$\langle \mathcal{O}(\psi) \rangle = \frac{\displaystyle\int \mathcal{D}\psi \mathcal{O}(\psi) e^{S[\psi,U]}}{\displaystyle\int \mathcal{D}\psi e^{S[\psi,U]}}$$

est la valeur moyenne de l'opérateur $\mathcal{O}$ et

$$P(U) = \frac{e^{-c\int_x U_x^2}}{\displaystyle\int \mathcal{D}U e^{-c\int_x U_x^2}}$$

la distribution gaussienne du potentiel désordonné U. La constante $c = \pi N_0(\mu)\tau$ fait intervenir la densité d'états électroniques $N_0(\mu)$ et le temps de collision τ, relié au libre parcours moyen élastique l par $\tau = ml/k_F$, k_F étant le niveau de Fermi.

Le calcul de (6.1) apparaît plus aisé en utilisant la méthode des répliques introduite par [28]. Cette méthode permet d'échanger l'ordre des intégrations fonctionnelles en introduisant n répliques du système. Elle est basée sur l'identité

$$\ln \mathcal{Z} = \lim_{n\to 0} \frac{\mathcal{Z}^n - 1}{n},$$

où la puissance n de la fonction de partition s'écrit

$$\mathcal{Z}^n = \int \prod_{\alpha=1}^{n} \mathcal{D}\psi^\alpha e^{\sum_\alpha S^\alpha[\psi,U]},$$

l'indice α servant à numéroter les répliques. L'introduction des répliques permet d'écrire la moyenne d'ensemble de l'opérateur $\mathcal{O}$ donnée en (6.1) sous une forme plus usitée en théorie des champs et plus appropriée aux calculs.

$$\langle \mathcal{O}(\psi)\rangle_{\text{dés}} = \frac{\displaystyle\int \prod_\alpha \mathcal{D}\psi^\alpha \int \mathcal{D}U \mathcal{O}(\psi) e^{-c\int_x U_x^2 + \sum_\alpha S^\alpha[\psi,U]}}{\displaystyle\int \prod_\alpha \mathcal{D}\psi^\alpha \int \mathcal{D}U e^{-c\int_x U_x^2 + \sum_\alpha S^\alpha[\psi,U]}}. \tag{6.2}$$

La procédure des répliques, qui est basée sur le prolongement analytique $n \to 0$, s'est révélée incorrecte dans certains cas [94]. N'ayant pas de base mathématique rigoureuse, elle peut s'avérer incapable de décrire correctement la transition localisation-délocalisation. Il semble d'ailleurs que cette procédure est limitée au régime perturbatif [106]. Pour ces raisons, nous proposons dans ce chapitre une nouvelle façon d'obtenir une moyenne sur les configurations du désordre. Nous revenons à une description plus microscopique du désordre en modélisant les impuretés par des particules fermioniques. Leur masse est choisie infinie de façon à les rendre statiques et le choix de leur nature fermionique permet d'éviter les configurations particulières où plusieurs impuretés se retrouvent en un même point de l'espace. Cependant, l'introduction de particules fermioniques de masse infinie génère une surface de Fermi très singulière, se réduisant à un point dans l'espace des impulsions, montrant par là la grande dégénérescence de l'état fondamental de ce système d'impuretés. L'utilisation de l'ensemble canonique pour la description des impuretés évite cette situation.

Après avoir décrit le modèle, nous calculons le propagateur de l'électron en interaction avec le désordre et nous montrons que cette approche permet de retrouver les résultats du modèle d'Edwards [27]. Le modèle d'Edwards peut être vu comme une approximation du modèle étudié dans la partie I en ce sens que la matrice $\mathbf{t}$ est approchée par $\mathbf{t} \approx \mathbf{v} + \mathbf{v}\mathbf{G}_0\mathbf{v}$, où $\mathbf{v}$ n'est plus un potentiel de sphère dure, mais un potentiel de hauteur finie et d'énergie très petite devant l'énergie cinétique.

6.1 Description du modèle

D'une façon générale, le système des électrons de masse m, décrits par le champ ψ, en interaction avec les impuretés de masse m_i, décrites par le champ ϕ, est représenté par le hamiltonien

$$H = \int d\mathbf{x} \left[-\frac{\hbar^2}{2m}\psi^\dagger(\mathbf{x})\Delta\psi(\mathbf{x}) - \frac{\hbar^2}{2m_i}\phi^\dagger(\mathbf{x})\Delta\phi(\mathbf{x}) + g\psi^\dagger(\mathbf{x})\psi(\mathbf{x})\phi^\dagger(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}) \right]. \tag{6.3}$$

L'interaction entre électrons et impuretés est contrôlée par la constante de couplage g. Les interactions entre électrons ne sont pas prises en compte dans ce modèle. Dans ce chapitre, nous étudions le cas des impuretés statiques pour lequel $m_i = \infty$. Ainsi, le hamiltonien ne contient que deux termes.

6.1.1 Ensemble canonique pour les impuretés libres

La moyenne d'un opérateur $\mathcal{O}$ dans l'ensemble canonique, correspondant à une densité d'impuretés ρ, est donnée par

$$\langle \mathcal{O} \rangle_\rho = \frac{1}{\mathcal{Z}_\rho} Tr \left\{ P_\rho T \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-T}^{T} dt H_i(t)} \mathcal{O} \right] \right\}, \tag{6.4}$$

où $\mathcal{Z}_\rho$ est la fonction de partition,

$$\mathcal{Z}_\rho = Tr \left\{ P_\rho T \left[e^{-\frac{i}{\hbar} \int_{-T}^{T} dt H_i(t)} \right] \right\}, \tag{6.5}$$

et

$$H_i(t) = \int d\mathbf{x} \left[-\frac{\hbar^2}{2m_i} \phi^\dagger(\mathbf{x},t) \Delta \phi(\mathbf{x},t) \right], \tag{6.6}$$

le hamiltonien décrivant les impuretés de masse m_i, écrit en représentation de Heisenberg. Le symbole Tr représente la somme sur tous les états et T ordonne le produit d'opérateurs dans le temps. L'opérateur P_ρ est un opérateur de projection sur le sous-espace contenant $N = \rho V$ particules. Il impose une densité d'impuretés constante et s'écrit

$$P_\rho = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\alpha}{2\pi} e^{i\alpha \int d\mathbf{x} (\phi^\dagger \phi - \rho)}. \tag{6.7}$$

La moyenne effectuée en (6.4) est une somme sur toutes les configurations possibles du champ d'impuretés à température nulle et à densité finie ; elle joue donc le rôle d'une moyenne d'ensemble. La généralisation à une température finie peut s'obtenir à l'aide d'une rotation de Wick,

$$t \to \tau = it.$$

La trace d'un opérateur $\mathcal{O}$ est obtenue en sommant sur tous les états propres $|n\rangle$ du hamiltonien.

$$Tr\mathcal{O} = \sum_{\{n\}} \langle n|\mathcal{O}|n\rangle,$$

où les états $|n\rangle$ de l'espace de Fock sont donnés, en représentation nombre d'occupation, par

$$|n\rangle = \begin{cases} \prod_{\mathbf{x}} \left(a_{\mathbf{x}}^\dagger \right)^{n_{\mathbf{x}}} |0\rangle & \text{pour } m_i = \infty, \\ \prod_{\mathbf{p}} \left(a_{\mathbf{p}}^\dagger \right)^{n_{\mathbf{p}}} |0\rangle & \text{pour } m_i < \infty. \end{cases}$$

Les opérateurs $a_{\mathbf{x}}^\dagger$ et $a_{\mathbf{x}}$ sont les opérateurs de création et d'annihilation d'une impureté à la position $\mathbf{x}$, écrits en représentation de Schrödinger (indépendants du temps).

$$\begin{aligned} a_{\mathbf{x}}^\dagger &= a_s \phi^\dagger(\mathbf{x}) = a_s e^{iH_i t}\, \phi^\dagger(\mathbf{x},t)\, e^{-iH_i t} \\ a_{\mathbf{x}} &= a_s \phi(\mathbf{x}) = a_s e^{iH_i t}\, \phi(\mathbf{x},t)\, e^{-iH_i t}. \end{aligned}$$

Le nombre de particules à la position $\mathbf{x}$, $n_{\mathbf{x}}$, (ou d'impulsion $\mathbf{p}$, $n_{\mathbf{p}}$) vaut 0 ou 1 pour les fermions. Les opérateurs de création et d'annihilation d'une impureté d'impulsion $\mathbf{p}$, $a_{\mathbf{p}}^\dagger$ et $a_{\mathbf{p}}$, sont définis de la même manière dans l'espace des impulsions. Les relations

$$\langle a_{\mathbf{x}}^\dagger a_{\mathbf{y}} \rangle_\rho = \hat{\rho} \delta_{\mathbf{x},\mathbf{y}}, \qquad \langle a_{\mathbf{p}}^\dagger a_{\mathbf{q}} \rangle_\rho = \hat{\rho} \delta_{\mathbf{p},\mathbf{q}}, \tag{6.8}$$

où $\hat{\rho} = N/M = \rho a_s^d$ est la densité d'impuretés sans dimensions, permettent de dériver le propagateur de l'impureté

$$iG(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t') = \langle T[\phi(\mathbf{x},t)\phi^\dagger(\mathbf{x}',t')]\rangle_\rho. \tag{6.9}$$

Dans le cas des impuretés statiques, $m_i = \infty$, celui-ci est donné par

$$iG(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t') = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\left\{\theta(t-t'-\eta)(1-\hat{\rho}) - \theta(t'-t+\eta)\hat{\rho}\right\}, \tag{6.10}$$

où η est une quantité infinitésimale permettant de définir correctement le propagateur lorsque $t = t'$. Dans le cas des impuretés de masse finie, il s'écrit

$$iG(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t') = \frac{1}{V}\sum_{\mathbf{p}} e^{i\mathbf{p}(\mathbf{x}-\mathbf{x}')-i\epsilon_p(t-t')}\left\{\theta(t-t'-\eta)(1-\hat{\rho}) - \theta(t'-t+\eta)\hat{\rho}\right\} \tag{6.11}$$

La transformée de Fourier s'obtient avec la prescription usuelle du $i\epsilon$

$$\begin{aligned} G(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega) &= \int d(t-t')e^{i\omega(t-t')}G(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t') \\ &= \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\lim_{\eta\to 0^+} e^{i\omega\eta}\left(\frac{1-\hat{\rho}}{\omega+i\epsilon} + \frac{\hat{\rho}}{\omega-i\epsilon}\right). \end{aligned} \tag{6.12}$$

et

$$\begin{aligned} G(\mathbf{p},\omega) &= \lim_{\eta\to 0^+} e^{i\omega\eta}\frac{1-\hat{\rho}}{\omega-\epsilon_p+i\delta} + \frac{\hat{\rho}}{\omega-\epsilon_p-i\delta} \\ &= \lim_{\eta\to 0^+} e^{i\omega\eta}\left(\frac{1}{\omega-\epsilon_p+i\delta} + 2\pi i\hat{\rho}\delta(\omega-\epsilon_p)\right), \end{aligned} \tag{6.13}$$

pour $m_i = \infty$ et $m_i < \infty$ respectivement. Le facteur $e^{i\omega\eta}$ contraint l'énergie physique ω à se trouver dans le demi-plan supérieur.

Remarque : Bien que les impuretés évoluent sur le réseau, les propagateurs sont donnés par leur expression dans le continu pour simplifier le calcul des intégrales de boucle. Ceci peut se justifier dans la limite du continu ($a_s \to 0$) où le propagateur sur réseau redonne le propagateur du continu.

6.1.2 Quantités auxiliaires

Le propagateur de l'impureté donné en (6.10) est correct pour les impuretés libres, mais il n'est pas adapté au cas où les impuretés sont en interaction avec les électrons. La partie de l'opérateur de projection (6.7) qui dépend du champ d'impuretés ϕ peut être absorbée dans une redéfinition du hamiltonien des impuretés en écrivant

$$H_\alpha(t) = \int d\mathbf{x}\left[-\frac{\hbar^2}{2m_i}\phi^\dagger(\mathbf{x},t)\Delta\phi(\mathbf{x},t) + \hbar\alpha\phi^\dagger(\mathbf{x},t)\phi(\mathbf{x},t)\right]. \tag{6.14}$$

La moyenne d'un opérateur $\mathcal{O}$, donnée par (6.4), s'écrit en fonction de ce hamiltonien auxiliaire de la façon suivante.

$$\langle\mathcal{O}\rangle_\rho = \frac{\int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{i\alpha\rho V} TrT\left[e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-T}^{T} dtH_{\alpha'}(t)}\mathcal{O}\right]}{\int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{i\alpha\rho V} TrT\left[e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-T}^{T} dtH_{\alpha'}(t)}\right]} = \frac{1}{\mathcal{Z}_\rho}\int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{i\alpha\rho V} Tr\langle\mathcal{O}\rangle_{\alpha'}, \tag{6.15}$$

où $\alpha' = \alpha/2T$.

Le propagateur auxiliaire suivant de l'impureté est défini par (voir annexe H)

$$iG_{\alpha'}(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t') = \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')e^{-i\alpha'(t-t')}\left\{\theta(t-t'-\eta)\left(1-n_\alpha\right)-\theta(t'-t+\eta)n_\alpha\right\}, \quad (6.16)$$

Le facteur n_α vérifie

$$n_\alpha = \frac{e^{-i\alpha}}{1+e^{-i\alpha}} \qquad \text{et} \qquad 1-n_\alpha = \frac{1}{1+e^{-i\alpha}}. \quad (6.17)$$

On notera la ressemblance du facteur n_α avec la distribution de Fermi-Dirac $n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{1+e^{\beta(\epsilon_k-\mu)}}$, où $\epsilon_k = \frac{k^2}{2m_i} = 0$.

6.1.3 Électrons en interaction avec les impuretés

Le calcul de quantités associées à l'électron, comme le propagateur, nécessite l'introduction d'une fonction de partition auxiliaire. Comme le suggère la notation $\langle\mathcal{O}\rangle_{\alpha'}$ apparaissant dans l'équation (6.15), la quantité $\langle\mathcal{O}\rangle_{\alpha'}$ peut être obtenue à partir d'une fonction de partition dépendant de α. Cette fonction de partition auxiliaire décrivant les électrons en interaction avec les impuretés de masse infinie, qui sert de fonctionnelle génératrice des fonctions de corrélation, s'écrit

$$\mathcal{Z}_{\alpha'}[J^\dagger,J,j^\dagger,j] = \int D[\psi^\dagger]D[\psi]D[\phi^\dagger]D[\phi]e^{\frac{i}{\hbar}\int_x[\phi^\dagger(i\hbar\partial_t-\hbar\alpha')\phi+\psi^\dagger(i\hbar\partial_t+\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+\mu)\psi]-i\frac{g}{\hbar}\int_x\psi^\dagger\psi\phi^\dagger\phi} \times e^{i\int dtd\mathbf{x}[J^\dagger\phi+\phi^\dagger J+j^\dagger\psi+\psi^\dagger j]}, \quad (6.18)$$

où le champ J (resp. j) sert de source aux impuretés (resp. aux électrons). Cette fonctionnelle génératrice peut se mettre sous une forme plus commode, qui fait intervenir le propagateur de l'électron G_0 et celui de l'impureté $G_{\alpha'}$.

$$\mathcal{Z}_{\alpha'}[J^\dagger,J,j^\dagger,j] = \det[(iG_{\alpha'})^{-1}]\det[(iG_0)^{-1}] \times e^{-\frac{ig}{\hbar}\int dtd\mathbf{x}\frac{\delta}{\delta J^\dagger(\mathbf{x},t)}\frac{\delta}{\delta J(\mathbf{x},t)}\frac{\delta}{\delta j^\dagger(\mathbf{x},t)}\frac{\delta}{\delta j(\mathbf{x},t)}}e^{i\int dtd\mathbf{x}J^\dagger G_{\alpha'}J}e^{i\int dtd\mathbf{x}j^\dagger G_0 j}. \quad (6.19)$$

La quantité $\langle\mathcal{O}\rangle_{\alpha'}$ s'obtient par dérivation fonctionnelle par rapport aux sources de $\mathcal{Z}_{\alpha'}$ et la moyenne d'ensemble de l'opérateur $\mathcal{O}$, donnée par (6.15), s'écrit

$$\langle\mathcal{O}\rangle_\rho = \frac{\int_{-\pi}^{\pi}d\alpha e^{i\alpha\rho V}Tr\langle\mathcal{O}\rangle_{\alpha'}}{\int_{-\pi}^{\pi}d\alpha e^{i\alpha\rho V}\mathcal{Z}_{\alpha'}}. \quad (6.20)$$

Ainsi, le propagateur de l'électron est donné par

$$\langle\psi(\mathbf{x}_1,t_1)\psi^\dagger(\mathbf{x}_2,t_2)\rangle_\rho = \frac{\int_{-\pi}^{\pi}d\alpha e^{i\alpha N}\langle\psi(\mathbf{x}_1,t_1)\psi^\dagger(\mathbf{x}_2,t_2)\rangle_{\alpha'}}{\int_{-\pi}^{\pi}d\alpha e^{i\alpha N}\mathcal{Z}_{\alpha'}[0,0,0,0]}, \quad (6.21)$$

où le propagateur auxiliaire de l'électron est

$$\langle\psi(\mathbf{x}_1,t_1)\psi^\dagger(\mathbf{x}_2,t_2)\rangle_{\alpha'} = \frac{\delta^2}{\delta j(\mathbf{x}_2,t_2)\delta j^\dagger(\mathbf{x}_1,t_1)}\mathcal{Z}_{\alpha'}[J^\dagger,J,j^\dagger,j]\Big|_{J^\dagger=J=j^\dagger=j=0}. \quad (6.22)$$

6.2 Développement perturbatif du propagateur de l'électron

Dans ce paragraphe, le propagateur de l'électron (6.21) est évalué de façon perturbative. Le dénominateur et le numérateur apparaissant dans (6.21) sont développés en puissances de la constante de couplage g.

6.2.1 Fonction de partition auxiliaire $\mathcal{Z}_{\alpha'}$

Nous considérons ici le dénominateur intervenant dans (6.21). Celui-ci contient la fonction de partition auxiliaire $\mathcal{Z}_{\alpha'}$ dans laquelle l'exponentielle de l'interaction est développée de façon perturbative jusqu'à l'ordre g.

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_{\alpha'} = & \int D[\psi^\dagger]D[\psi]D[\phi^\dagger]D[\phi]e^{\frac{i}{\hbar}\int dtd\mathbf{x}[\phi^\dagger(i\hbar\partial_t-\hbar\alpha')\phi+\psi^\dagger(i\hbar\partial_t+\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+\mu)\psi]} \\
& \times \left(1-i\frac{g}{\hbar}\int dtd\mathbf{x}\psi^\dagger(\mathbf{x},t)\psi(\mathbf{x},t)\phi^\dagger(\mathbf{x},t)\phi(\mathbf{x},t)+\mathcal{O}(g^2)\right) \\
= & \det[iG_0]^{-1}\Bigg\{\left(1+e^{-i\alpha}\right)^M \\
& -i\frac{g}{\hbar}\left(1+e^{-i\alpha}\right)^M\int_V d\mathbf{x}\int_{-T}^{T}dtiG_0(\mathbf{x}t;\mathbf{x}t)iG_{\alpha'}(\mathbf{x}t;\mathbf{x}t)+\mathcal{O}(g^2)\Bigg\}
\end{aligned} \tag{6.23}$$

où G_0 est le propagateur libre de l'électron, donné par l'inverse de $(i\hbar\partial_t+\frac{\hbar^2}{2m}\Delta+\mu)$. La constante $\det[iG_0]^{-1}$ disparaît lors du calcul des quantités physiques — car elle se trouve également dans le numérateur de (6.21) — et peut donc être laissée ainsi. Ce développement est représenté diagrammatiquement, jusqu'à l'ordre g^2 inclu, dans la figure 6.1, où la ligne pleine représente la propagation d'un électron et la ligne pointillée celle d'une impureté. Ces diagrammes sont appelés *fluctuations du vide*. Le calcul explicite donné par (6.23) est arrêté à l'ordre g car, comme nous le verrons lors du calcul du propagateur de l'électron, le 2e ordre se simplifie trivialement.

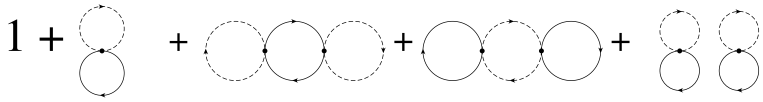


FIG. 6.1 – *Diagrammes de fluctuation du vide à l'ordre g^2.*

Les règles pour évaluer les graphes de Feynman sont

- à chaque ligne électronique, associer $iG_0(\omega,\mathbf{p})$,
- à chaque ligne d'impureté, associer $iG_{\alpha'}(\omega,\mathbf{p})$,
- à chaque vertex, associer un facteur $-ig$,
- à chaque boucle fermionique, associer un facteur (-1),
- sommer sur les énergies et impulsions de toutes les boucles internes,
- à chaque boucle électronique fermée sur elle-même, associer le facteur $-N_0(\mu)$.

La trace du propagateur libre de l'électron permet d'obtenir la densité d'états $N_0(\mu)$.

$$\begin{aligned}
-N_0(\mu) = Tr[iG_0] &= i \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^d} \lim_{\eta\to 0^+} \int \frac{d\omega}{(2\pi)} \frac{e^{i\omega\eta}}{\omega - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu + i\delta_p^\mu} \\
&= \frac{i}{(2\pi)^d} i\Omega_d \int_0^{\sqrt{2m\mu}} \mathsf{p}^{d-1} d\mathsf{p} = -\frac{\Omega_d}{(2\pi)^d}\frac{k_F^d}{d},
\end{aligned} \tag{6.24}$$

où $\delta_p^\mu = \begin{cases} +\delta & \text{si } \frac{\mathbf{p}^2}{2m} > \mu, \\ -\delta & \text{si } \frac{\mathbf{p}^2}{2m} < \mu. \end{cases}$ et Ω_d est l'angle solide en dimension d qui vaut 4π,2π,2 en dimension 3,2,1 respectivement.

6.2.2 Fonction de partition

La connaissance de la quantité $G_{\alpha'}(\mathbf{x},t;\mathbf{x},t)$ est nécessaire dans plusieurs graphes du développement perturbatif. Cependant, pour les temps égaux, il faut prendre des précautions (cf. annexe H). Dans une formulation fonctionnelle, l'opérateur de création apparaît toujours un temps infinitésimal après l'opérateur d'annihilation.

La fonction de partition $\mathcal{Z}_\rho$ est obtenue par intégration de l'expression (6.23) sur la variable α.

$$\begin{aligned}
\mathcal{Z}_\rho &= \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\alpha}{2\pi} e^{i\alpha N} \mathcal{Z}_{\alpha'} \\
&= \det[iG_0]^{-1} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{d\alpha}{2\pi} e^{i\alpha N} \Bigg\{ \left(1 + e^{-i\alpha}\right)^M \\
&\quad + i\frac{g}{2\hbar a^2}\left(1 + e^{-i\alpha}\right)^{M-1} e^{-i\alpha} \int_V d\mathbf{x} \int_{-T}^{T} dt iG_0(\mathbf{x}t;\mathbf{x}t) + \mathcal{O}(g^2) \Bigg\} \\
&= \det[iG_0]^{-1} \left\{ \binom{M}{N} + i\frac{g}{2\hbar a^2}\binom{M-1}{N-1} Tr[iG_0] + \mathcal{O}(g^2) \right\} \\
&= \det[iG_0]^{-1} \binom{M}{N} \left\{ 1 + i\frac{g}{2\hbar a^2} \hat{\rho} Tr[iG_0] + \mathcal{O}(g^2) \right\},
\end{aligned} \tag{6.25}$$

où la dernière ligne provient de l'identité $\binom{M-1}{N-1} = \frac{N}{M}\binom{M}{N}$ et de la définition de la densité d'impuretés $\hat{\rho} = N/M$.

6.2.3 Propagateur auxiliaire de l'électron

Le propagateur de l'électron dépendant de α, qui apparaît au numérateur de (6.21), se développe en puissances de g. Pour simplifier les notations, notons $x \equiv (\mathbf{x},t)$.

$$
\begin{aligned}
\langle \psi(x_1)\psi^\dagger(x_2)\rangle_{\alpha'} = & \det[(iG_{\alpha'})^{-1}]\det[(iG_0)^{-1}] \\
& \times\Bigg\{ iG_0(x_1,x_2) \times \Big[1 - i\frac{g}{\hbar}\int dx iG_{\alpha'}(x,x)iG_0(x,x) \\
& \quad + \Big(-i\frac{g}{\hbar}\Big)^2 \int dx \int dy \Big(iG_0(x,x)iG_0(y,y)iG_{\alpha'}(x,x)iG_{\alpha'}(y,y) \\
& \quad - iG_{\alpha'}(x,x)iG_{\alpha'}(y,y)iG_0(x,y)iG_0(y,x) \\
& \quad - iG_{\alpha'}(x,y)iG_{\alpha'}(y,x)iG_0(x,x)iG_0(y,y)\Big)\Big] \\
& + i\frac{g}{\hbar}\int dx iG_0(x_1,x)iG_0(x,x_2)iG_{\alpha'}(x,x) \times \Big[1 \\
& \quad - i\frac{g}{\hbar}\int dy iG_0(y,y)iG_{\alpha'}(y,y)\Big] \\
& + \Big(i\frac{g}{\hbar}\Big)^2 \int dx \int dy \Big(iG_0(x_1,x)iG_0(x,x_2)iG_{\alpha'}(x,y)iG_{\alpha'}(y,x)iG_0(y,y) \\
& \quad - iG_0(x_1,x)iG_0(x,y)iG_0(y,x_2)iG_{\alpha'}(x,y)iG_{\alpha'}(y,x)\Big)\Bigg\} + \mathcal{O}(g^3).
\end{aligned}
\tag{6.26}
$$

Les termes entre crochets factorisent les fluctuations du vide pour chaque ordre en g.

6.3 Calcul de l'énergie propre

Dans ce paragraphe, l'intégration sur α, apparaissant au numérateur et au dénominateur du propagateur (6.21), est effectuée et le rapport des deux quantités est simplifié. Nous allons voir que ce rapport entraîne la disparition des diagrammes de Feynman non connexes (diagrammes de fluctuations du vide) seulement dans la limite thermodynamique, $N,V \to \infty$, $\rho = const$.

Le développement perturbatif du propagateur est fait jusqu'au deuxième ordre en g.

6.3.1 Ordre 0 en g

Lorsque l'expression (6.26) est replacée dans le propagateur de l'électron, donné par (6.21), les fluctuations du vide en facteur de $G_0(x_1,t_1;x_2,t_2)$ sont compensées trivialement par celles qui apparaissent au dénominateur de (6.21), c.-à-d. par les termes représentés dans la figure 6.1. Par conséquent, le premier terme de ce développement perturbatif donne $iG_0(x_1,t_1;x_2,t_2)$, c.-à-d. le propagateur libre comme il se doit.

6.3.2 Premier ordre en g

Le deuxième terme de (6.26) ne se simplifie pas aussi trivialement. L'intégration sur α de ce terme conduit à

$$\begin{aligned}\int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{i\alpha N} \det[(iG_{\alpha'})^{-1}] i\frac{g}{\hbar} \int dx iG_0(x_1,x) iG_0(x,x_2) iG_{\alpha'}(x,x) \\ \times \left[1 - i\frac{g}{\hbar}\int dy iG_0(y,y) iG_{\alpha'}(y,y)\right] \\ = i\frac{g}{\hbar a^2}\int dx G_0(x_1,x)G_0(x,x_2)\left[\binom{M-1}{N-1} + i\frac{g}{\hbar a^2} Tr[iG_0]\binom{M-2}{N-2}\right].\end{aligned} \tag{6.27}$$

Alors le propagateur (6.21) s'écrit

$$\begin{aligned}\langle\psi(x_1)\psi^\dagger(x_2)\rangle &= iG_0(x_1,x_2) \\ &+ i\frac{g}{\hbar a^2}\int dx G_0(x_1,x)G_0(x,x_2)\frac{\binom{M-1}{N-1} + i\frac{g}{\hbar a^2}Tr[iG_0]\binom{M-2}{N-2}}{\binom{M}{N} + i\frac{g}{\hbar}Tr[iG_0]\binom{M-1}{N-1}} + \mathcal{O}(g^2) \\ &\approx iG_0(x_1,x_2) + i\frac{g}{\hbar a^2}\rho\int dx G_0(x_1,x)G_0(x,x_2) + \mathcal{O}(g^2),\end{aligned} \tag{6.28}$$

où l'on a utilisé la limite thermodynamique $(N,M \to \infty, (N-1)/(M-1) \to N/M = \hat{\rho})$. Finalement, dans l'espace de Fourier, le propagateur de l'électron s'écrit au premier ordre en g

$$G_\psi(\omega,\mathbf{p}) = \frac{1}{\omega - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu + i\delta_p^\mu} + \rho g\frac{1}{(\omega - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu + i\delta_p^\mu)^2}. \tag{6.29}$$

Le diagramme de Feynman décrivant ce premier ordre en g est représenté par la figure 6.2. Ainsi, la boucle d'impureté a pour effet de produire un facteur ρg.

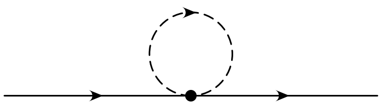


FIG. 6.2 – *Premier ordre en g du propagateur de l'électron.*

La resommation de la série géométrique formée par les diagrammes contenant n boucles d'impuretés indépendantes conduit, dans la limite thermodynamique, à l'équation de Dyson pour le propagateur de l'électron.

$$G_\psi(\omega,\mathbf{p}) = G_0(\omega,\mathbf{p}) + G_0(\omega,\mathbf{p})\Sigma(\omega,\mathbf{p})G_\psi(\omega,\mathbf{p}), \tag{6.30}$$

avec $\Sigma = \Sigma^{(1)} + \Sigma^{(2)} + \cdots$ où l'exposant indique l'ordre du développement en puissance de la constante de couplage g. Au premier ordre en g, l'énergie propre est donnée par le diagramme de la figure 6.2.

$$\boxed{\Sigma^{(1)} = \rho g.} \tag{6.31}$$

En effet, un diagramme à n boucles d'impuretés produit un facteur $\binom{M-n}{N-n}/\binom{M}{N} = \frac{N!}{(N-n)!}/\frac{M!}{(M-n)!}$ qui est toujours inférieur à $\hat{\rho}^n$. On retrouve ici une combinatoire qui ressemble à celle qui apparaît

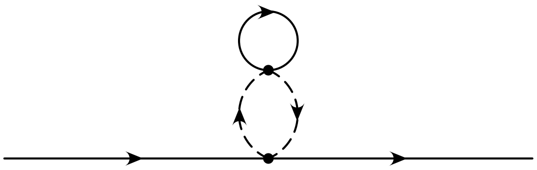
$I_1 =$ 

FIG. 6.3 – *Diagramme du deuxième ordre.*

dans la partie I provenant des chaînes directes de la série de Watson (1.29). La différence réside dans le fait que le volume subit aussi la combinatoire ici, c'est-à-dire qu'il y a un facteur $\frac{M!}{(M-n)!}$ et pas simplement un facteur M^n. Dans la limite thermodynamique, le coefficient $\binom{M-n}{N-n}/\binom{M}{N}$ peut être approché par $\hat{\rho}^n$, comme cela a été fait avec les chaînes directes de la série de Watson — voir les commentaires après (1.29).

À cet ordre, l'énergie propre est réelle, ce qui a pour conséquence de produire un simple déplacement de l'échelle des énergies. Il faut développer jusqu'au 2$^{\text{e}}$ ordre en g pour obtenir une partie imaginaire à l'énergie propre qui donne le libre parcours moyen.

6.3.3 Deuxième ordre en g

L'ordre 2 du développement du propagateur contient deux termes représentés par les Figs 6.3 et 6.6.

Le premier terme d'ordre g^2 est (cf Fig. 6.3)

$$\begin{aligned}
I_{\alpha 1} \equiv & \int d\mathbf{x}dtd\mathbf{y}dt' iG_0(\mathbf{x}_1,t_1;\mathbf{x},t)iG_0(\mathbf{x},t;\mathbf{x}_2,t_2)iG_0(\mathbf{y},t';\mathbf{y},t')iG_{\alpha'}(\mathbf{x},t;\mathbf{y},t')iG_{\alpha'}(\mathbf{y},t';\mathbf{x},t) \\
=& \frac{1}{a^2}\int d\mathbf{x}\int dt\int dt' iG_0(\mathbf{x}_1,t_1;\mathbf{x},t)iG_0(\mathbf{x},t;\mathbf{x}_2,t_2)iG_0(\mathbf{x},t';\mathbf{x},t') \\
& \times \left[\theta(t-t')\left(1-n_\alpha\right)-\theta(t'-t)n_\alpha\right]\left[\theta(t'-t)\left(1-n_\alpha\right)-\theta(t-t')n_\alpha\right] \\
=& \frac{i^5}{a^2}\int\frac{d\omega_1}{2\pi}\int\frac{d\omega_2}{2\pi}\int\frac{d\omega_3}{2\pi}\int\frac{d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^2}\int\frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^2}\frac{e^{ip_1(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2)-i\omega_1(t_1-t_2)}}{(\omega_1-\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m}+\mu+i\delta^\mu_{p_1})^2} \\
& \times\frac{1}{\omega_2-\frac{\mathbf{p}_2^2}{2m}+\mu+i\delta^\mu_{p_2}}e^{2i\omega_3\eta}\left(\frac{1-n_\alpha}{\omega_3+i\epsilon}+\frac{n_\alpha}{\omega_3-i\epsilon}\right)^2 .
\end{aligned} \tag{6.32}$$

L'intégration sur ω_3, en utilisant le théorème des résidus, donne une quantité divergente :

$$\int\frac{d\omega_3}{2\pi}e^{2i\omega_3\eta}\left(\frac{1-n_\alpha}{\omega_3+i\epsilon}+\frac{n_\alpha}{\omega_3-i\epsilon}\right)^2=\frac{(1-n_\alpha)n_\alpha}{\epsilon}, \tag{6.33}$$

où $\epsilon\to 0^+$. La projection de ce terme sur le sous-espace contenant N impuretés est obtenue grâce à l'intégration sur α ci-après.

$$\begin{aligned}
\frac{\int_{-\pi}^{\pi}e^{i\alpha N}\det[(iG_{\alpha'})^{-1}](1-n_\alpha)n_\alpha}{\int_{-\pi}^{\pi}e^{i\alpha N}\det[(iG_{\alpha'})^{-1}]} =& \frac{\int_{-\pi}^{\pi}e^{i\alpha(N-1)}(1+e^{-i\alpha})^{M-2}}{\int_{-\pi}^{\pi}e^{i\alpha(N)}(1+e^{-i\alpha})^{M}} \\
=& \frac{\binom{M-2}{N-1}}{\binom{M}{N}}=\frac{N(M-N)}{M(M-1)}\approx\hat{\rho}(1-\hat{\rho}).
\end{aligned} \tag{6.34}$$

L'intégration sur ω_2 et $\mathbf{p}_2$ donne

$$\int \frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^2} \int \frac{d\omega_2}{2\pi} \frac{1}{\omega_2 - \frac{\mathbf{p}_2^2}{2m} + \mu + i\delta^{\mu}_{p_2}} = iN_0(\mu). \tag{6.35}$$

Ainsi,

$$I_1(\omega,\mathbf{p}) = \frac{i}{a^2} \frac{\hat{\rho}(1-\hat{\rho})}{\epsilon} \frac{1}{(\omega - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu + i\delta^{\mu}_{p})^2} iN_0(\mu). \tag{6.36}$$

À cet ordre, l'énergie propre vaut

$$\Sigma_1^{(2)}(\omega,\mathbf{p}) = -i \times (-g^2) \frac{i}{a^2} \frac{\hat{\rho}(1-\hat{\rho})}{\epsilon} i \frac{m\mu}{2\pi} = -\frac{i}{\epsilon} g^2 \rho(1-\hat{\rho}) N_0(\mu). \tag{6.37}$$

Ce terme diverge quand ϵ tend vers 0. Ce comportement est très dangereux car il intervient dans la partie imaginaire de l'énergie propre et ϵ correspondrait au temps de collision. Un temps de collision nul signifierait que l'électron ne peut pas se propager. Le système serait isolant quelque soit la densité d'impuretés. Ce résultat n'est pas physique.

Cette divergence en $1/\epsilon$ provient de la non localité en temps de l'interaction entre électrons et impuretés. Le diagramme de la Fig. 6.3 représente l'interaction d'un électron avec une impureté qui interagira ensuite (à un autre instant) avec un *autre* électron. La théorie de perturbation partant d'un hamiltonien $H = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + V$, où V est le potentiel d'interaction, ne prend en considération qu'un seul électron se propageant dans le système. Le diagramme de la Fig. 6.3 n'a en effet pas d'équivalent dans le modèle d'Edwards. On peut montrer également que si l'on considère un système à un seul électron, alors ce diagramme disparaît. On peut le voir de la façon suivante : s'il n'y a qu'un seul électron dans le système, alors le potentiel chimique est nul $\mu = 0$, et la particule sera un électron (il n'y a pas de trous) d'énergie cinétique $\frac{p^2}{2m}$ supérieure au potentiel chimique, alors l'équation (6.24) nous donne

$$N \equiv \frac{1}{V} \sum_k \langle 0|c_k^\dagger c_k|0\rangle = i \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^2} \lim_{\eta \to 0^+} \int \frac{d\omega}{(2\pi)} \frac{e^{i\omega\eta}}{\omega - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + i\delta} = 0. \tag{6.38}$$

La boucle électronique de la Fig. 6.3 s'annule. Ainsi, la divergence due au corrélations temporelles s'évanouit.

Pour faire disparaître cette divergence non physique dans notre système à plusieurs électrons, le propagateur de l'impureté doit être partiellement resommé. La première resommation envisageable est la resommation des boucles électroniques apparaissant dans la boucle d'impureté comme cela est montré dans la figure 6.4.

Remarquons que, dans l'ensemble grand-canonique et pour des impuretés en mouvement, ce diagramme a une contribution nulle en vertu du principe de Pauli qui interdit aux deux particules dans la boucle d'impureté de la Fig. 6.3 d'avoir même énergie et même impulsion. Il faut en effet que l'une possède une impulsion au dessus du niveau de Fermi et que l'autre ait son impulsion sous la surface de Fermi. Or cela est impossible car il n'y a pas de transfert d'impulsion possible entre les boucles. Cette contrainte est réalisée (à température nulle) par la présence de la densité d'états des impuretés ($n_k = 1$ si $k < k_F$ et 0 sinon). L'intégration sur le produit croisé correspondant à l'équation (6.33) est nul car $(1 - n_k)n_k = 0$. Le problème est qu'ici n_α n'est pas aussi restrictif.

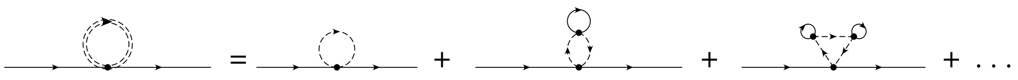


FIG. 6.4 – *Renormalisation de la boucle d'impureté.*

6.3.4 Renormalisation du propagateur de l'impureté

Pour tenir compte des boucles électroniques apparaissant dans le propagateur de l'impureté (boucles en traits pleins apparaissant dans la boucle d'impureté en pointillés représentées dans la Fig. 6.4), le hamiltonien H_α subit la transformation

$$H_\alpha(t) = \alpha \int d\mathbf{x}\phi^\dagger(\mathbf{x},t)\phi(\mathbf{x},t) \to H_{\alpha+gN_0(\mu)}(t) = (\alpha + gN_0(\mu)) \int d\mathbf{x}\phi^\dagger(\mathbf{x},t)\phi(\mathbf{x},t). \quad (6.39)$$

Chaque boucle électronique de la figure 6.4 produit un facteur $gN_0(\mu)$ qui est pris en compte par cette transformation. Si H_α joue le rôle du hamiltonien libre et $gN_0(\mu) \int d\mathbf{x}\phi^\dagger(\mathbf{x},t)\phi(\mathbf{x},t)$ celui d'une perturbation, alors un développement perturbatif conduit à la série de la figure 6.5. Le

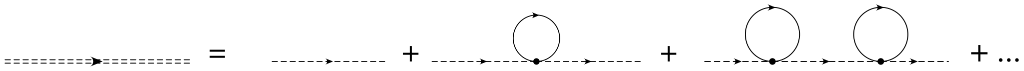


FIG. 6.5 – *Renormalisation du propagateur de l'impureté.*

propagateur de l'impureté de la figure 6.5 est alors

$$\begin{aligned} iG_{\alpha'+\frac{gN_0(\mu)}{2T}}(\mathbf{x},t,\mathbf{x}',t') &= \delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')e^{-i(\alpha'+\frac{gN_0(\mu)}{2T})(t-t')} \\ &\quad \times \left\{\theta(t-t'-\eta)\left(1-n_{\alpha+gN_0(\mu)}\right) - \theta(t'-t+\eta)n_{\alpha+gN_0(\mu)}\right\} \end{aligned} \quad (6.40)$$

avec

$$n_{\alpha'+\frac{gN_0(\mu)}{2T}} = \frac{1}{1+e^{i(\alpha+gN_0(\mu))}}. \quad (6.41)$$

Le diagramme de la Fig. 6.4 vaut alors

$$\begin{aligned} &\frac{1}{\mathcal{Z}_\rho}\int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{i\alpha N} \det[(iG_{\alpha'+\frac{gN_0(\mu)}{2T}})^{-1}] i\frac{g}{\hbar}\int dx iG_0(x_1,x)iG_0(x,x_2)iG_{\alpha'+\frac{gN_0(\mu)}{2T}}(x,x) \\ &= i\frac{g}{\hbar a^2}\int dx G_0(x_1,x)G_0(x,x_2)\frac{\int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{i\alpha N}(1+e^{-i(\alpha+gN_0(\mu))})^{M-1}e^{-i(\alpha+gN_0(\mu))}}{\int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{i\alpha N}(1+e^{-i(\alpha+gN_0(\mu))})^{M}} \\ &= i\frac{g}{\hbar a^2}\int dx G_0(x_1,x)G_0(x,x_2)\frac{\binom{M-1}{N-1}e^{-i(N-1)gN_0(\mu)}e^{-igN_0(\mu)}}{\binom{M}{N}e^{-igN_0(\mu)}} \\ &= i\frac{\rho g}{\hbar}\int dx G_0(x_1,x)G_0(x,x_2). \end{aligned} \quad (6.42)$$

On retrouve pour l'énergie propre associée à cette boucle de propagateur l'expression (6.28) qui conduit à

$$\Sigma^{(1)} = \rho g. \quad (6.31)$$

Cela montre que les divergences des diagrammes en « marguerite » (diagrammes de la figure 6.4 d'ordre au moins g^2, c'est-à-dire comportant au moins une boucle électronique) ne sont pas physiques.

6.3.5 Énergie propre à l'ordre 2 en g

Le deuxième terme d'ordre g^2 apparaissant dans l'énergie propre est (voir Fig. 6.6)

$$\begin{aligned}
I_{\alpha 2} \equiv & \int d\mathbf{x}dtd\mathbf{y}dt' iG_0(\mathbf{x}_1,t_1;\mathbf{x},t)iG_0(\mathbf{x},t;\mathbf{y},t')iG_0(\mathbf{y},t';\mathbf{x}_2,t_2)iG_{\alpha'}(\mathbf{x},t;\mathbf{y},t')iG_{\alpha'}(\mathbf{y},t';\mathbf{x},t)\\
=&\frac{1}{a^2}\int d\mathbf{x}\int dt\int dt' iG_0(\mathbf{x}_1,t_1;\mathbf{x},t)iG_0(\mathbf{x},t;\mathbf{x},t')iG_0(\mathbf{x},t';\mathbf{x}_2,t_2)\\
&\times\left[\theta(t-t')\left(1-n_\alpha\right)-\theta(t'-t)n_\alpha\right]\left[\theta(t'-t)\left(1-n_\alpha\right)-\theta(t-t')n_\alpha\right]\\
=&\frac{i}{a^2}\int\frac{d\omega_1}{2\pi}\int\frac{d\omega_2}{2\pi}\int\frac{d\omega_3}{2\pi}\int\frac{d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^2}\int\frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^2}\frac{e^{i\mathbf{p}_1(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2)-i\omega_1(t_1-t_2)}}{(\omega_1-\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m}+\mu+i\delta^\mu_{\mathbf{p}_1})^2}\\
&\times\frac{1}{\omega_2-\frac{\mathbf{p}_2^2}{2m}+\mu+i\delta^\mu_{p_2}}\left(\frac{1-n_\alpha}{\omega_3+i\epsilon}+\frac{n_\alpha}{\omega_3-i\epsilon}\right)\\
&\times\left(\frac{1-n_\alpha}{\omega_3+\omega_2-\omega_1+i\epsilon}+\frac{n_\alpha}{\omega_3+\omega_2-\omega_1-i\epsilon}\right).
\end{aligned}\tag{6.43}$$

L'intégration sur ω_3 des termes entre parenthèses conduit à

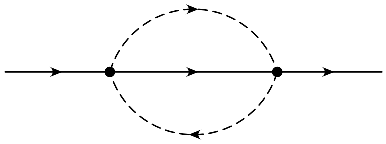


FIG. 6.6 – *Deuxième terme d'ordre 2 en g.*

$$i(1-n_\alpha)n_\alpha\left(\frac{1}{\omega_1-\omega_2+i\epsilon}-\frac{1}{\omega_1-\omega_2-i\epsilon}\right)=2\pi(1-n_\alpha)n_\alpha\delta(\omega_1-\omega_2).\tag{6.44}$$

Ainsi

$$I_{\alpha 2}=\frac{i}{a^2}\int\frac{d\omega_1}{2\pi}\int\frac{d\mathbf{p}_1}{(2\pi)^2}\int\frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^2}\frac{e^{i\mathbf{p}_1(\mathbf{x}_1-\mathbf{x}_2)-i\omega_1(t_1-t_2)}}{(\omega_1-\frac{\mathbf{p}_1^2}{2m}+\mu+i\delta^\mu_{p_1})^2}\frac{1}{\omega_1-\frac{\mathbf{p}_2^2}{2m}+\mu+i\delta^\mu_{p_2}}(1-n_\alpha)n_\alpha.\tag{6.45}$$

L'intégration sur $\mathbf{p}_2$ donne

$$\int\frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^2}\frac{1}{\omega_1-\frac{\mathbf{p}_2^2}{2m}+\mu+i\delta^\mu_{p_2}}=\int\frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^2}\left\{P.P.\frac{1}{\omega_1-\frac{\mathbf{p}_2^2}{2m}+\mu}-i\frac{\delta^\mu_{p_2}}{(\omega_1-\frac{\mathbf{p}_2^2}{2m}+\mu)^2+\delta^2}\right\},\tag{6.46}$$

où $P.P.$ désigne la partie principale, qui ne produit qu'un déplacement en énergie. La partie intéressante de cette expression est la partie imaginaire qui se décompose de la façon suivante

$$\begin{aligned}
-i\int\frac{d\mathbf{p}_2}{(2\pi)^2}&\frac{\delta^\mu_{p_2}}{(\omega_1-\frac{\mathbf{p}_2^2}{2m}+\mu)^2+\delta^2}\\
&=i\frac{(2m)^{\frac{d}{2}}\Omega_d}{2(2\pi)^d}\left(\int_0^\mu-\int_\mu^\infty\right)\varepsilon^{\frac{d}{2}-1}d\varepsilon\pi\delta(\omega_1+\mu-\varepsilon)\\
&=i\frac{\pi}{2}\frac{(2m)^{\frac{d}{2}}\Omega_d}{(2\pi)^d}(\omega_1+\mu)^{\frac{d}{2}-1}\left\{\left[\theta(\omega_1+\mu)-\theta(\omega_1)\right]-\theta(\omega_1)\right\},
\end{aligned}\tag{6.47}$$

où Ω_d est l'angle solide en dimension d. Le terme entre crochets représente la contribution des électrons sous la surface de Fermi et la distribution $\theta(\omega_1)$ qui suit est la contribution des électrons libres au-dessus de la surface de Fermi. Cette quantité est proportionnelle à la densité d'états de l'électron libre par unité d'énergie. Définissons la quantité

$$n_0(\varepsilon) = \frac{(2m)^{\frac{d}{2}}\Omega_d}{2(2\pi)^d}\varepsilon^{\frac{d}{2}-1}\left(2\theta(\varepsilon-\mu)-\theta(\varepsilon)\right)$$

qui est positive lorsque ε est au-dessus du niveau de Fermi, μ, et négative pour $0 < \varepsilon < \mu$. La densité d'états de l'électron libre est retrouvée par

$$N_0(\mu) = -\int_0^\mu d\varepsilon n_0(\varepsilon).$$

La partie imaginaire de l'énergie propre à l'ordre g^2 est alors donnée par

$$\mathfrak{Im}\Sigma_2^{(2)}(\omega_1,\mathbf{p}) = -\,g^2\rho(1-\hat{\rho})\pi n_0(\omega_1+\mu). \tag{6.48}$$

Autrement dit, ω_1 est l'énergie de l'électron évaluée à partir du niveau de Fermi ($\omega_1 > 0 \longrightarrow$ électron, $-\mu < \omega_1 < 0 \longrightarrow$ trou).

La partie imaginaire de l'énergie propre $\Sigma(\omega)$ s'écrit finalement

$$\boxed{\mathfrak{Im}\Sigma(\omega_1) = -g^2\rho(1-\hat{\rho})\frac{\pi}{2}\frac{(2m)^{\frac{d}{2}}\Omega_d}{(2\pi)^d}\left(2\theta(\omega_1)-\theta(\omega_1+\mu)\right)+\mathcal{O}(g^3).} \tag{6.49}$$

$\Sigma(\omega_1)$ est indépendante de l'impulsion car l'interaction est locale et l'impulsion de la particule incidente trop faible pour résoudre les caractéristiques du potentiel créé par les impuretés. La partie réelle de l'énergie propre ne fait que renormaliser l'énergie de propagation de l'électron. Par contre, sa partie imaginaire est reliée au libre parcours moyen de l'électron dans le système. À partir de l'expression (6.49), on peut constater que lorsque $\rho = 0$, c'est-à-dire lorsqu'il n'y a pas d'impuretés, la propagation de l'électron est libre. L'électron est également libre lorsque $\hat{\rho} = 1$, c'est-à-dire lorsque tous les sites du réseau sont occupés par les impuretés, on a alors un cristal parfait.

Le temps de collision τ (ou le libre parcours moyen élastique) est relié à la partie imaginaire de l'énergie propre par

$$\mathfrak{Im}\Sigma(\omega) = -\frac{\hbar}{2\tau(\omega+\mu)}. \tag{6.50}$$

Ce qui conduit à l'expression suivante du temps de collision

$$\boxed{\frac{\hbar}{\tau(\omega+\mu)} = 2\pi\rho(1-\hat{\rho})n_0(\omega+\mu)g^2.} \tag{6.51}$$

Cette expression peut être comparée à celle obtenue par le modèle d'Edwards [75, p. 145] décrit par un hamiltonien du type $H = T + V$ (T étant l'énergie cinétique de l'électron et V le potentiel d'interaction modélisant une distribution d'impuretés).

$$\frac{\hbar}{\tau_{Edw}(E,\mathbf{p})} = 2\pi\rho n_0(E)\int\frac{d\hat{\mathbf{p}}'}{\Omega_d}|V(\mathbf{p}-\mathbf{p}')|^2, \tag{6.52}$$

où $\mathbf{p} = \mathbf{p}'$ et $\hat{\mathbf{p}}'$ est la direction de $\mathbf{p}'$. L'absence de dépendance en impulsion de l'expression (6.51) vient du fait que le potentiel est ponctuel.

Une autre différence vient du terme $1 - \hat{\rho}$ qui montre que l'électron se comporte comme s'il était libre lorsque les impuretés forment un réseau parfait. Cependant, cette limite $\hat{\rho} = 1$ nécessite en toute rigueur la prise en compte d'autres diagrammes dans l'énergie propre et la comparaison entre notre modèle et celui d'Edwards doit s'arrêter à des valeurs très faibles de la densité d'impuretés, $\hat{\rho} \ll 1$. Par ailleurs, lorsque le pas du réseau tend vers 0, le rapport du nombre d'impuretés sur le nombre de sites $\hat{\rho} = a_s^d \rho$ tend vers 0.

6.4 Discussion

La moyenne sur le désordre, obtenue par la somme sur toutes les configurations possibles du champ d'impuretés, permet de retrouver le développement perturbatif du modèle d'Edwards. La correspondance des deux modèles est obtenue dans la limite thermodynamique, qui permet la simplification des diagrammes non connexes. Cette simplification intervient également dans les premiers termes du développement de la fonction de corrélation à 4 points (fonction de Green à deux particules) qui sert à calculer la conductivité des systèmes désordonnés par la resommation des diagrammes en échelles et des diagrammes maximalement croisés [96]. Cette correspondance du développement perturbatif indique que la théorie de la localisation, s'appliquant au modèle d'Edwards, s'applique également à ce modèle d'impuretés statiques.

Le but final de cette approche est son utilisation dans une approche non perturbative, faisant appel au groupe de renormalisation et incluant les interactions entre électrons, pour étudier la récente transition métal-isolant à deux dimensions [54]. Le chapitre suivant présente une nouvelle approche du groupe de renormalisation pour traiter les électrons en interaction.

Chapitre 7

Méthode de renormalisation pour les électrons en interaction

Introduction

Les expériences récentes sur les gaz d'électrons à deux dimensions [3] semblent montrer l'existence d'une transition métal-isolant, alors que la théorie de la localisation [2] prédit l'absence de conduction dans les matériaux bidimensionnels. L'apparition d'une conductivité dans ces systèmes étant fonction de la densité d'électrons, on pense que l'interaction de Coulomb est, au moins en partie, responsable de cette transition [54]. La théorie d'échelle de 1979 n'est donc pas remise en cause puisque les électrons y sont traités sans interaction, mais il est maintenant nécessaire de construire une théorie complète décrivant les systèmes d'électrons en interaction en présence de désordre.

Ce chapitre est une première étape dans cette direction. Laissant de côté le problème du désordre, il présente une approche non perturbative pour traiter les électrons interagissant via l'interaction de Coulomb. Cette approche s'inspire d'une nouvelle méthode de renormalisation élaborée par Alexandre et Polonyi [6].

Le groupe de renormalisation est un outil puissant pour étudier la physique au voisinage d'un point critique, c.-à-d. au voisinage d'une transition de phase. Un hamiltonien microscopique décrit la physique au niveau des particules et des interactions entre ces particules, mais la description des phénomènes macroscopiques est difficile à extraire de ce hamiltonien : dans l'approche perturbative, on est souvent amené à resommer des séries entières de diagrammes de Feynman. Au niveau macroscopique, les degrés de liberté microscopiques interagissent entre eux et forment souvent des états collectifs qui peuvent être décrits simplement à partir de quelques degrés de liberté effectifs. La formation d'états collectifs nécessite des corrélations à longue distance entre les degrés de liberté du système. La distance sur laquelle ces corrélations existent est appelée *longueur de corrélation* et est notée ξ. Lorsque cette longueur de corrélation est très petite, le hamiltonien microscopique H_0 donne une bonne description de la physique, mais lorsque celle-ci est grande, la description en terme de degrés de liberté effectifs est plus appropriée. Lors d'une transition de phase, le système physique change d'état au niveau macroscopique et la longueur de corrélation est alors infinie.

Le groupe de renormalisation consiste à obtenir un hamiltonien effectif H_n, décrivant le système à l'échelle macroscopique, à partir du hamiltonien initial H_0, décrivant les degrés de liberté microscopiques du système, à l'aide d'une transformation τ

$$H_1 = \tau(H_0), \qquad H_2 = \tau(H_1), \qquad H_3 = \tau(H_2), \qquad \cdots \qquad H_n = \tau(H_{n-1}).$$

Dans l'approche traditionnelle [102], cette transformation consiste à changer l'échelle d'observation. À chaque étape, les constantes de couplage du hamiltonien changent. Lorsque celles-ci tendent à disparaître au fur et à mesure des transformations successives, cela signifie qu'elles ne sont pas importantes pour la description de la physique à longue distance. Elles sont alors dites *inessentielles*. Dans le cas contraire, elles sont dites *essentielles* car elles décrivent le système macroscopique. Lorsque ces constantes de couplage n'évoluent plus avec la transformation du groupe de renormalisation, c.-à-d. que le hamiltonien vérifie l'équation

$$H^* = \tau(H^*),$$

la transformation possède alors un *point fixe* qui est un point critique pour un système infini. Ce point fixe signifie qu'un changement d'échelle n'a aucune influence sur la description du système physique. Le système est dit *invariant d'échelle* car la physique est la même quelque soit l'échelle d'observation. Un point fixe décrit un point critique ; c'est au point critique que la longueur de corrélation est infinie.

Les points fixes sont donnés par les zéros des fonctions d'échelle (β_n et γ_n définies plus loin) et permettent d'obtenir les exposants critiques des quantités physiques proches du point fixe.

La méthode employée dans ce chapitre diffère en plusieurs manières de l'approche traditionnelle. Les équations d'évolution des constantes de couplage ne sont plus recherchées en faisant varier la coupure, mais d'autres équations d'évolution sont dérivées en faisant varier un paramètre interne du système (la masse du champ par exemple). De ce fait, les points fixes de ces nouvelles équations d'évolution ne possèdent pas une interprétation simple en terme de point critique. En effet, l'invariance du système sous ce type de transformation ne signifie pas que le système est invariant d'échelle. L'objectif de cette méthode n'est pas tant de trouver des points fixes, mais plutôt de dériver de façon non perturbative une action effective décrivant le système. L'intégration (numérique) des équations d'évolution des diverses constantes de couplage du modèle doit retenir les constantes de couplage essentielles pour la physique.

Nous rappelons dans un premier paragraphe comment les équations d'évolution des constantes de couplage sont obtenues dans le cadre d'une théorie relativiste et selon l'approche traditionnelle, qui consiste à varier l'échelle d'observation. Ces équations, également appelées *équations de flot*, sont reliées aux fonctions d'échelle et leurs points fixes indiquent la présence d'une transition de phase.

Dans le paragraphe suivant, le même modèle est traité par l'approche de [6] de façon à donner une présentation des grandes lignes de la méthode que nous allons employer pour traiter les électrons non relativistes en interaction. D'autres équations d'évolution sont obtenues, qui ne sont pas générées par un changement d'échelle mais par la variation d'un paramètre M interne au hamiltonien. Lors de la variation de ce paramètre, les constantes de couplage sont renormalisées.

Le système non relativiste d'électrons corrélés est traité à partir du paragraphe 7.3. L'interaction de Coulomb y est modélisée à l'aide d'un champ scalaire $u(x)$ pour le photon. Nous aurons donc à travailler avec deux champs : un champ pour les électrons et un champ pour les photons. Ce choix et la présentation détaillée du reste du chapitre sont exposés au § 7.3.

Nous dérivons ensuite, dans les § 7.4 à 7.7, les équations de flot dépendant d'un paramètre interne M et montrons que les résultats de la théorie de perturbation sont retrouvés à l'approximation d'une boucle, qui sera expliquée en détail plus loin.

7.1 Équations exactes du groupe de renormalisation

Pour introduire les équations exactes du groupe de renormalisation dans le cadre de la théorie qui sera développée ci-après, nous utilisons une théorie de champ scalaire relativiste. L'action d'une telle théorie s'écrit

$$S_k[\varphi] = \int_x \left(\frac{1}{2}(\partial_\mu \varphi)^2 + U_k(\varphi) + \mathcal{O}(\partial^4) \right), \tag{7.1}$$

où φ est un champ scalaire, $U_k(\varphi)$ le potentiel d'interaction et $\partial_\mu \equiv (\partial_t, \nabla_{\mathbf{x}})$. L'indice k est l'échelle d'observation de la théorie. C'est une coupure sur les impulsions p permettant d'éliminer les divergences ultraviolettes (UV) de la théorie (dues à $p \to \infty$). On dit qu'elle *régularise* l'action. L'introduction d'une coupure k est justifiée par le fait que les modes d'impulsion $p > k$ ne peuvent pas être décrits par cette action. La prise en compte de ces modes nécessiterait une théorie plus complexe. Restreindre les impulsions à des valeurs inférieures à k revient à ne considérer que des particules ayant une longueur d'onde $\lambda > h/k$, h étant la constante de Planck. Comme un microscope, la théorie a une résolution limitée et ne peut « voir » que les objets de taille supérieure à h/k. L'action (7.1) est développée dans l'esprit de Ginzburg-Landau [60, chap. II] : les termes de l'action contenant des dérivées d'ordre supérieur à 4 représentent un couplage non local et sont négligés. Si l'on se représente les différents degrés de liberté $\varphi(x)$ sur un réseau, l'interaction entre plus proches voisins est décrite par $(\partial\varphi)^2$ et les dérivées supérieures décrivent une interaction à plus longue distance. Ce type de troncature est aussi connu sous le nom de développement du gradient (voir [14]). Le potentiel U_k contient toutes les interactions locales (*i.e.* en un point x donné) du champ φ et peut être mis sous une forme polynômiale

$$U_k(\varphi) = \sum_n \frac{g_n(k)}{n!} \varphi^n(x). \tag{7.2}$$

Les $g_n(k)$ sont les différentes constantes de couplage et dépendent de l'échelle k. Comme nous allons le voir dans ce paragraphe introductif, les équations du groupe de renormalisation vont permettre d'écrire des équations d'évolution des constantes de couplage en fonction de l'échelle d'observation.

En physique statistique, on cherche en général à décrire le comportement du système à longue distance à partir d'équations microscopiques. Cependant, la théorie, telle qu'elle est donnée par l'action (7.1), contient beaucoup trop de degrés de liberté pour être résolue simplement. L'idée originale de Wilson [102] consiste à « regarder » le système à différentes échelles. Lorsque la coupure $k \to \infty$, l'action (7.1) contient une infinité de degrés de liberté décrits par les modes de Fourier $\varphi(p)$ du champ φ. La théorie contient toute l'information sur les fluctuations de courte longueur d'onde du champ, mais il n'est pas nécessaire de connaître ces fluctuations si la physique intéressante peut être décrite par quelques degrés de liberté effectifs. L'approche du groupe de renormalisation de Wilson consiste à intégrer sur ces degrés de libertés de courte longueur d'onde et à ne conserver que les degrés de liberté intéressants pour la physique étudiée. Il s'agit alors de trouver une action effective décrivant le comportement de la théorie à longue distance en intégrant sur les détails de la théorie, c.-à-d. sur les modes UV. Cette intégration ne peut pas se faire brutalement, mais peut être faite par pas successifs [100].

Partant de l'action (7.1), on cherche à construire une action effective contenant moins de degrés de liberté que l'action initiale. Pour cela, les modes UV du champ φ ayant une impulsion située dans une couche de rayon k et d'épaisseur Δk sont intégrés et l'action effective ne contenant que des degrés de liberté d'impulsion inférieure à $k - \Delta k$ se déduit de la relation

$$e^{-S_{k-\Delta k}[\varphi]} = \int \mathcal{D}[\varphi'] e^{-S_k[\varphi+\varphi']}.$$

Le champ φ ayant son impulsion comprise dans la couche d'impulsion $[k - \Delta k, k]$ est noté φ', et φ est le champ infrarouge (IR), celui qui mène à des corrélations à longue distance ($p \to 0 \Rightarrow \lambda \to \infty$). L'intégration fonctionnelle sur φ' peut être approchée en appliquant la méthode du col autour de φ'_0.

$$e^{-S_{k-\Delta k}[\varphi]} = e^{-S_k[\varphi+\varphi'_0] - \frac{1}{2} Tr' \ln \frac{\delta^2 S_k}{\delta\varphi'\delta\varphi'}[\varphi+\varphi'_0](1+\mathcal{O}(\frac{\Delta k}{k}))}.$$

Les termes d'ordre supérieur dans le développement autour du champ φ'_0 sont de l'ordre du volume de la couche d'impulsions choisie pour l'intégration. Tr' signifie que la trace concerne seulement les modes d'impulsions comprises dans la couche $[k - \Delta k, k]$. Quand $\Delta k / k \to 0$, l'équation

$$S_{k-\Delta k}[\varphi] = S_k[\varphi + \varphi'_0] + \frac{1}{2} Tr' \ln S_k^{(2)}[\varphi + \varphi'_0] \tag{7.3}$$

devient exacte mais ne peut pas être résolue sans quelques approximations. En premier lieu [1], le champ IR peut être choisi homogène, $\varphi(x) = \phi$, et un point-selle trivial, $\varphi'_0 = 0$ simplifie également les expressions. L'action ne contient alors que le potentiel U_k,

$$S_k[\phi] = L^d U_k(\phi), \tag{7.4}$$

où d est la dimension d'espace et L^d est le volume. Cet ensemble d'approximations est connu sous le nom d'approximation du potentiel local (LPA). L'équation (7.3) devient une équation d'évolution pour le potentiel U_k,

$$\begin{aligned} L^d U_{k-\Delta k}(\phi) =& L^d U_k(\phi) + \frac{L^d}{2} \int' \frac{d^d p}{(2\pi)^d} \ln(p^2 + U_k^{(2)}(\phi)) \\ \Rightarrow U_k(\phi) - U_{k-\Delta k}(\phi) =& - \frac{\Omega_d}{2(2\pi)^d} k^{d-1} \Delta k \ln(k^2 + U_k^{(2)}(\phi)), \end{aligned}$$

qui s'écrit sous forme différentielle

$$\boxed{\partial_k U_k(\phi) = -\frac{\Omega_d}{2(2\pi)^d} k^{d-1} \ln(k^2 + U_k^{(2)}(\phi)).} \tag{7.5}$$

Ω_d est l'angle solide en dimension d.

À partir de la définition (7.2), les équations d'évolution des différentes constantes de couplage peuvent être obtenues par dérivation par rapport au champ ϕ de cette équation.

$$g_n(k) = \left. \frac{\partial^n U_k(\phi)}{\partial \phi^n} \right|_{\phi=0} \tag{7.6}$$

Ces équations forment un ensemble d'équations différentielles couplées. Les *fonctions d'échelle* β définies par [60, chap. VII]

$$\beta_n(k) \equiv k \partial_k g_n(k) \tag{7.7}$$

1. Des simplifications moins contraignantes sont possibles, mais celles-ci sont suffisantes pour illustrer ce qui peut être fait avec ces équations du groupe de renormalisation.

s'en déduisent immédiatement. Ces fonctions β représentent l'évolution des constantes de couplage en fonction de l'échelle k par une courbe paramétrée par k dans l'espace des constantes de couplage. Elles sont importantes pour la recherche de points fixes qui sont donnés par les constantes de couplage invariantes d'échelle. Si $g_n^*(k)$ est indépendant de l'échelle d'observation k pout tout n, alors l'ensemble des $g_n^*(k)$ définit un point fixe. Autrement dit, les points fixes sont donnés par les zéros des fonctions β.

Ces fonctions β ont certaines propriétés universelles, c.-à-d. indépendantes du schéma de renormalisation. En particulier, *l'approximation des modes indépendants* donne des résultats indépendants du processus de renormalisation. Cette approximation consiste à découpler les équations d'évolution des $g_n(k)$

$$\partial_k g_n(k) = \mathcal{F}_k\left(\{g_i(k)\}\right)$$

en remplaçant les valeurs des $g_i(k)$ du membre de droite par leur valeur initiale $g_i(k=\infty)$. Considérant ces équations différentielles couplées comme un ensemble infini d'itérations du groupe de renormalisation pour obtenir $g_n(0)$ à partir de $g_n(k=\infty)$ en passant par $g_n(k-\mathrm{n}\Delta k)$, l'approximation des modes indépendants revient à n'effectuer qu'une itération parmi l'infinité d'itérations que demande le groupe de renormalisation. Ceci revient à passer directement de $g_n(k=\infty)$ à $g_n(0)$ par l'intégration

$$g_n(0) = \int_{k=\infty}^{0} dk\mathcal{F}_k\left(\{g_i(\infty)\}\right).$$

D'autres propriétés, comme l'existence d'un zéro des fonctions $\beta_n(k)$ (existence de point fixe) et la valeur de $\frac{d\beta_n(k)}{dg_n}$ au point fixe (type de point fixe, stable ou instable), sont universelles. Mais en général, les fonctions β dépendent de la procédure de renormalisation et leur forme n'est plus universelle au-delà de l'approximation des modes indépendants. Cette approximation des modes indépendants est aussi appelée *approximation à une boucle*. En termes de diagrammes de Feynman, elle consiste à évaluer les graphes irréductibles contenant une seule boucle (voir par exemple les figs du tableau 4). L'universalité de cette approximation vient de l'existence d'un point fixe dans le régime UV.

7.2 Équations d'évolution en fonction d'un paramètre

Nous présentons ici une nouvelle approche de la renormalisation [6] pour obtenir une équation d'évolution du même type que l'équation (7.5). Cette approche se base sur une conception de la renormalisation différente de celle exposée ci-dessus. Afin de montrer les concepts qui la fondent, nous introduisons dans ce paragraphe son application à un modèle simple : une théorie de champ scalaire relativiste du même type que dans la section précédente. La théorie sera appliquée au gaz d'électrons corrélés à partir du paragraphe 7.3.

L'objectif est d'obtenir des équations d'évolution des constantes de couplage en fonction d'un paramètre indépendant de la coupure. Alors que l'approche habituelle, décrite dans le paragraphe précédent, consiste en une intégration successive sur les fluctuations du champ ordonnées selon le paramètre de coupure, cette technique consiste en une intégration successive sur les fluctuations du champ ordonnées selon un paramètre « interne ».

L'action étudiée est celle de l'équation (7.1) que l'on notera $S_B[\varphi]$; l'indice k est omis puisque la coupure ne varie pas dans ce type de renormalisation[2]. L'idée consiste à introduire une action supplémentaire, contenant un paramètre M, à l'action nue S_B, de façon à obtenir une théorie triviale pour $M=\infty$. L'action supplémentaire sera appelée *action de suppression* car elle a

2. La coupure k doit néanmoins être présente pour régulariser la théorie.

pour but de supprimer les fluctuations quantiques du champ engendrées par l'interaction. L'action nue est transformée en une action contenant le paramètre M qui gouverne la renormalisation. L'approche la plus simple consiste à choisir M comme étant un terme de masse pour le champ φ. Ainsi,

$$S_B[\varphi] \longrightarrow S_M[\varphi] = S_B[\varphi] + \int_x \frac{1}{2} M^2 \varphi_x^2.$$

Lorsque $M \to \infty$, S_B devient négligeable devant le terme de masse et S_M est simplement l'action de suppression.

$$S_M[\varphi] = \int_x \frac{1}{2} M^2 \varphi_x^2.$$

La théorie est alors gaussienne et donc parfaitement connue. Le paramètre M contrôle les fluctuations du champ. Lorsque M est grand mais fini, l'action S_B joue le rôle d'une perturbation de la théorie gaussienne. Un développement perturbatif diagrammatique fait alors apparaître tous les graphes de Feynman non triviaux. Lorsque ce paramètre $M \to 0$, les interactions du champ avec lui-même se mettent en place et l'action de la théorie physique étudiée est retrouvée.

Voyons maintenant comment sont dérivées les équations d'évolution de l'action effective. Le point de départ est la fonction de partition $\mathcal{Z}[j]$ du système considéré en présence d'une source j. Elle s'écrit comme l'exponentielle de la fonctionnelle génératrice des fonctions de corrélation connexes $W[j]$.

$$\mathcal{Z}[j] = e^{W[j]} = \int \mathcal{D}[\varphi] e^{-S_M[\varphi] + j\cdot\varphi}, \tag{7.8}$$

où j est la source du champ φ. L'action effective Γ est obtenue par la transformation de Legendre

$$W[j] + \Gamma[\phi] = j \cdot \phi,$$

où ϕ est la valeur moyenne du champ φ évaluée par

$$\phi_x \equiv \langle\varphi\rangle_j = \int \mathcal{D}[\varphi] \varphi e^{-S_M[\varphi] + j\cdot\varphi} = \frac{\delta W[j]}{\delta j_x}.$$

L'équation d'évolution de l'action effective s'obtient en variant M de façon infinitésimale. Cette variation de M s'écrit comme une dérivation de Γ par rapport à M. Il est en fait plus simple de choisir une évolution selon M^2.

$$\begin{aligned}
\partial_{M^2}\Gamma =& -\partial_{M^2} W[j] - \frac{\delta\Gamma[\phi]}{\delta\phi} \cdot \partial_{M^2}\phi + j \cdot \partial_{M^2}\phi \\
=& -\partial_{M^2} W[j] \\
=& \frac{1}{2} Tr \langle\varphi^2\rangle_j,
\end{aligned}$$

où $Tr \equiv \int_x$. L'expression du propagateur du champ $\langle\varphi^2\rangle_j$ en termes de $W[j]$ permet d'écrire

$$\begin{aligned}
\partial_{M^2}\Gamma =& \frac{1}{2} Tr \left(\frac{\delta^2 W[j]}{\delta j \delta j} \right) + \frac{1}{2} Tr \left(\frac{\delta W[j]}{\delta j} \right)^2 \\
=& \frac{1}{2} Tr \left(\left[\frac{\delta^2 \Gamma}{\delta\phi\delta\phi} \right]^{-1} \right) + \frac{1}{2} Tr \left(\phi^2\right).
\end{aligned} \tag{7.9}$$

La dernière égalité est obtenue à partir de l'identité

$$\int_y W^{(2)}_{j_x,j_y}\Gamma^{(2)}_{\phi_y,\phi_z} = \delta_{x,z}, \tag{7.10}$$

qui exprime le fait que la fonction de vertex $\Gamma^{(2)}_{\phi,\phi}$ est l'inverse du propagateur connexe $W^{(2)}_{j,j}$. On obtient ainsi une équation d'évolution exacte pour l'action effective sous la forme d'une équation différentielle fonctionnelle. Comme on le verra plus loin, cette équation mène aux équations de flot des constantes de couplage du potentiel et de l'énergie cinétique. Des approximations concernant cette action effective sont nécessaires pour résoudre cette équation en pratique.

Une forme fonctionnelle raisonnable pour l'action effective est donnée par le développement du gradient.

$$\Gamma[\phi] = \int \frac{1}{2}Z(\phi)(\partial_\mu\phi)^2 + U(\phi) + \frac{1}{2}M^2\phi^2 + \mathcal{O}(\partial^4), \tag{7.11}$$

où $Z(\phi)$ est la constante de renormalisation de la partie cinétique de l'action et $U(\phi)$ celle du potentiel. Cet Ansatz contient toutes les puissances du champ ϕ, mais s'arrête au terme cinétique en ce qui concerne les dérivées du champ. La présence de la constante de renormalisation de l'énergie cinétique, $Z(\phi)$, dans ce développement du gradient généralise l'approche du paragraphe 7.1 ; en posant $Z(\phi) = 1$, on retrouve l'approximation du potentiel local. Comme au paragraphe précédent, l'approximation d'un champ ϕ homogène dans (7.9) conduit à l'équation d'évolution du potentiel $U(\phi)$

$$\phi(x) = \phi_0 \Rightarrow \boxed{\partial_{M^2}U(\phi_0) = \frac{1}{2}\int_p \frac{1}{Z(\phi_0)p^2 + M^2 + U^{(2)}(\phi_0)}.} \tag{7.12}$$

Cette équation décrit l'évolution de la constante de renormalisation $U(\phi_0)$ en fonction de M^2. Elle fait appel à la constante de renormalisation $Z(\phi_0)$ dont l'évolution reste à déterminer. En utilisant l'approximation du potentiel local du paragraphe 7.1, $Z(\phi_0) = 1$, les équations d'évolution des diverses constantes de couplage sont obtenues à partir de (7.12) par

$$g_n(M^2) = \left.\frac{\partial U_n(\phi_0)}{\partial \phi_0^n}\right|_{\phi_0=0}.$$

Ces équations forment un ensemble fermé d'équations aux dérivées partielles couplées. Les fonctions β qui en découlent mènent aux équations de Callan-Symanzik [60, chap. VII]

$$\beta_n(M^2) \equiv M^2\partial_{M^2}g_n(M^2) = M^2\partial_{M^2}\left.\frac{\partial U_n(\phi_0)}{\partial \phi_0^n}\right|_{\phi_0=0}, \tag{7.13}$$

où le membre de droite se déduit de (7.12). À l'approximation d'une boucle, l'universalité des fonctions β est vérifiée. On trouve en effet la même forme pour les fonctions β de (7.6) et celles de (7.13) — voir [6].

$$\beta_n(M^2) \equiv M^2\partial_{M^2}g_n(M^2) = k\partial_k g_n(k) \equiv \beta_n(k). \tag{7.14}$$

Si l'approximation $Z(\phi_0) = 1$ est relaxée, les équations couplées des constantes de couplage ne forment plus un système fermé et il est nécessaire de trouver une équation d'évolution pour

$Z(\phi_0)$. Il est possible d'obtenir cette équation en ajoutant des fluctuations $\eta(x)$ autour du champ ϕ_0

$$\phi(x) = \phi_0 + \eta(x).$$

Les fluctuations $\eta(x)$ sont supposées faibles, ce qui permet de faire un développement des deux membres de l'équation (7.9) en puissances du champ η. L'identification des puissances de η et des termes proportionnels à ∂_μ^2 (termes d'énergie cinétique) conduit à une équation d'évolution pour $Z(\phi_0)$. Cette équation différentielle est couplée à l'équation d'évolution de $U(\phi_0)$; $Z(\phi_0)$ apparaît dans l'équation (7.12) et $U(\phi_0)$ dans l'équation d'évolution de $Z(\phi_0)$. Comme $U(\phi_0)$, la constante de renormalisation $Z(\phi_0)$ s'exprime sous la forme d'un polynôme du champ ϕ_0 introduisant les constantes de couplage α_n associées.

$$Z(\phi_0) = \sum_n \frac{\alpha_n}{n!}\phi_0^n.$$

Il existe également des équations de Callan-Symanzik pour les α_n. Les fonctions d'échelle associées à ces constantes de couplage sont notées

$$\gamma_n(M^2) \equiv M^2 \partial_{M^2} \alpha_n(M^2). \tag{7.15}$$

L'expression « fonctions d'échelle » est employée ici au sens large car ces fonctions dépendent de M et non de l'échelle k. Les équations (7.13) et (7.15) forment un ensemble d'équations différentielles non linéaires couplées qui doit être résolu de façon numérique.

Remarquons que les expressions de $\gamma_n(M^2)$ et $\gamma_n(k)$ sont en général différentes. L'universalité des fonctions d'échelle, qui a conduit à l'équation (7.14), ne s'applique qu'à l'approximation d'une boucle, dans le régime ultraviolet. À cet ordre d'approximation, la constante de renormalisation $Z(\phi_0)$ vaut 1 et l'équation (7.15) devient triviale. L'universalité des fonctions γ, à l'ordre d'une boucle, s'écrit

$$\gamma_n(M^2) = 0 = 0 = \gamma_n(k).$$

Les résultats trouvés pour la fonction d'échelle $\gamma_n(M^2)$ dépendent du schéma de renormalisation et peuvent être différents de ceux obtenus pour $\gamma_n(k)$.

Cette nouvelle méthode de renormalisation permet de dériver des équations de flot des constantes de couplage très proches de celles obtenues par l'approche usuelle du groupe de renormalisation. À l'approximation d'une boucle, les équations sont les mêmes dans le régime UV pour les deux approches. Ceci est dû à la propriété d'universalité du système, qui veut que les constantes de couplage aient le même comportement à proximité du point fixe ultraviolet.

Cette méthode présente quelques avantages par rapport à l'approche usuelle [6] :

– elle permet l'utilisation du développement du gradient, alors que l'approche usuelle fait apparaître des termes en $\sqrt{q^2}(\equiv \sqrt{\partial_\mu^2})$, dûs aux contraintes sur les impulsions dans le calcul de la trace dans (7.3) ; ces termes non locaux invalident le développement du gradient car la forme (7.11) de l'action effective n'est plus valable ;
– l'invariance de jauge peut être préservée lorsque le paramètre d'évolution est placé devant un terme invariant de jauge, alors que l'évolution en fonction de la coupure k la brise.

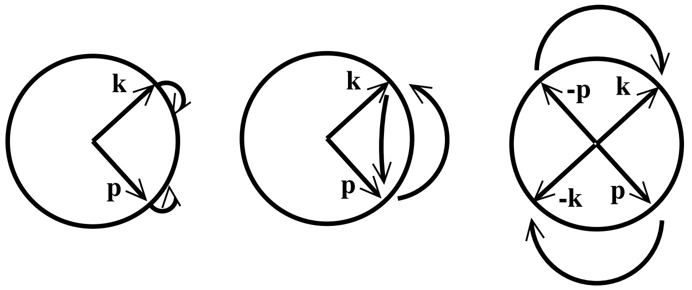
Cependant, il faut bien voir que cette approche est conceptuellement très différente de celle du groupe de renormalisation. Lorsque la coupure est changée, $k \to k - \Delta k$, le système physique est observé à une échelle différente. Lorsque le paramètre M varie, c'est le système physique étudié qui change, mais l'échelle d'observation (donnée par la coupure toujours présente) reste invariante. Le but principal de cette approche est d'obtenir une action effective de façon non perturbative qui décrit le système considéré, puis d'en dériver les quantités physiques pertinentes (comme la conductivité d'un gaz d'électrons par exemple).

7.3 Électrons non relativistes en interaction

L'objectif de ce chapitre est d'appliquer la méthode décrite précédemment aux électrons en interaction et de dériver des équations de flot pour les différentes constantes de couplage. En physique de la matière condensée, l'interaction entre les électrons est généralement décrite par le potentiel de Coulomb [65]

$$V_C(\mathbf{x}-\mathbf{x}') = \frac{e^2}{|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}, \tag{7.16}$$

mais celui-ci induit une interaction spatiale non locale entre les électrons, *i.e.* l'interaction n'est pas restreinte aux plus proches voisins. La description de cette interaction par le développement du gradient nécessiterait l'introduction d'un nombre infini de dérivées spatiales dans l'action effective pour rendre compte de la non localité spatiale de l'interaction. Il faudrait ensuite suivre l'évolution des constantes de couplage de chacun de ces termes apparaissant dans l'action. Cette façon de procéder est irréaliste. Une autre approche consiste à ne considérer que les trois processus de diffusion possibles de l'interaction de Coulomb décrits par la figure 7.1.



(a) (b) (c)

FIG. 7.1 – *Les 3 processus de diffusion engendrés par l'interaction de Coulomb.* (a) *Diffusion électron-trou aux petits angles (les 2 électrons sont faiblement déviés) ;* (b) *diffusion électron-trou aux grands angles (les 2 électrons échangent leur impulsion) et* (c) *diffusion BCS importante lorsque* $\mathbf{p} = -\mathbf{k}$.

Remarque : le processus de diffusion BCS sélectionne la partie de l'interaction de Coulomb importante dans le régime $\mathbf{p} = -\mathbf{k}$, mais ce n'est pas ce processus qui engendre la transition vers la supraconductivité ; il faut y ajouter la présence de phonons [65, chap. 9].

Le fait que l'on puisse se limiter aux 3 processus de diffusion décrits ci-dessus est dû aux contraintes imposées par la surface de Fermi (les impulsions avant et après l'interaction sont proches de la surface de Fermi). Cette séparation de l'interaction de Coulomb en trois processus nécessite de restreindre l'intervalle d'intégration de l'impulsion de transfert, notée $\mathbf{Q}$ dans les diagrammes de la figure 7.2, aux faibles impulsions [11], pour éviter le double comptage, car les 3 processus de diffusion sont issus de la même interaction. Ces différents processus décrivent déjà des interactions effectives. L'approche choisie ici est différente des deux précédentes. Elle part d'un niveau plus microscopique en modélisant l'interaction de Coulomb par un champ $u(x)$ que nous appellerons champ de photons, bien que nous ne considérions que la partie électrostatique

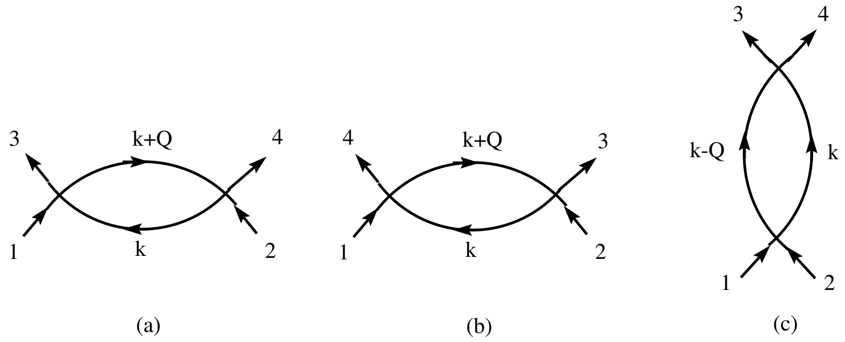


FIG. 7.2 – *Diagrammes à une boucle représentant les 3 processus de diffusion engendrés par l'interaction de Coulomb. Après interaction, les particules 1 et 2 deviennent 3 et 4. Les diagrammes (a), (b) et (c) correspondent aux processus de diffusion de la Fig. 7.1.*

du champ électromagnétique. Le potentiel vecteur **A** est supposé nul, seul le potentiel scalaire intervient sous la forme de $u(x)$. L'introduction d'un champ supplémentaire est une complication nécessaire si l'on veut une interaction ponctuelle pour utiliser le développement du gradient, et conserver l'interaction de Coulomb nue dans l'action de départ. L'action que nous allons considérer est la suivante.

$$S_B[\psi^\dagger,\psi,u] = \int_x \left[\psi_x^\dagger \left(i\partial_t + \frac{1}{2m}\Delta_{\mathbf{x}} + \mu + eu_x\right)\psi_x - \frac{1}{2}(\nabla_{\mathbf{x}} u_x)^2\right], \tag{7.17}$$

où ψ est le champ de l'électron et u le potentiel du champ électrique. On peut vérifier que l'intégrale fonctionnelle sur le champ de photons u de la fonction de partition

$$\mathcal{Z} = \int \mathcal{D}[\psi^\dagger]\mathcal{D}[\psi]\mathcal{D}[u]e^{iS_B[\psi^\dagger,\psi,u]}$$

conduit à l'action suivante, écrite seulement en terme des champs électroniques,

$$S[\psi^\dagger,\psi] = \sum_p \left[\psi_p^\dagger\left(\omega_p - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu\right)\psi_p + \frac{1}{2}\sum_q \int_{q'} \frac{e^2}{\mathbf{p}^2}\psi_{q-p}^\dagger\psi_q\psi_{q'+p}^\dagger\psi_{q'}\right], \tag{7.18}$$

où $\int_{q'} \equiv \frac{1}{VT}\sum_{q'} \equiv \int \frac{d\mathbf{q}'}{(2\pi)^3}\frac{d\omega}{2\pi}$. Le dernier terme est l'interaction de Coulomb qui s'écrit dans l'espace réel

$$\int dt \int d\mathbf{x} \int d\mathbf{x}' \frac{e^2}{4\pi|\mathbf{x}-\mathbf{x}'|}\psi^\dagger(\mathbf{x},t)\psi(\mathbf{x},t)\psi^\dagger(\mathbf{x}',t)\psi(\mathbf{x}',t). \tag{7.19}$$

Le passage de l'action (7.18) à l'action (7.17) peut se faire à l'aide d'une transformation de Hubbard-Stratonovich [70] qui consiste à introduire un champ auxiliaire (ici u) qui transforme l'interaction quartique dans les champs ψ en une interaction quadratique en ψ et u.

7.4 Équation d'évolution de l'action effective

7.4.1 Description générale de la méthode appliquée au système électrons-photons

L'organigramme de la figure 7.3 présente une vue générale de la méthode appliquée aux fermions corrélés. Le point de départ est une action décrivant une théorie quasi-libre, où les champs

ψ et u sont découplés. Cette action comprend l'action nue S_B (objet de l'étude) et une *action de suppression* quadratique dépendant d'un paramètre M, devant laquelle l'action nue est négligeable lorsque $M \to \infty$. Comme au paragraphe précédent, l'action effective Γ est obtenue par la transformée de Legendre de la fonction de corrélation connexe, et son équation d'évolution est déduite par dérivation par rapport au paramètre M. Cette équation d'évolution est exacte et fait intervenir les propagateurs de l'électron et du photon, notés G_e et G_p respectivement. La solution de cette équation fonctionnelle n'étant pas accessible sans approximation, nous choisirons un Ansatz pour Γ selon le développement du gradient, comme cela a été fait pour le champ scalaire (cf. équ. (7.11)). L'action (7.17) contient deux types de termes, des termes fermioniques (avec ψ) et des termes bosoniques (sans ψ). L'équation d'évolution de l'action effective se sépare en une partie fermionique et une partie bosonique. En notant les constantes de renormalisation de la fréquence, de l'énergie cinétique et du potentiel de l'électron par Z_0, Z_1, U_1 et celles de l'énergie cinétique et du potentiel du photon par Z_2 et U_2, l'approximation du champ de photons homogène conduira aux équations d'évolution des constantes de renormalisation Z_0, Z_1, U_1 pour l'électron et U_2 pour le photon. L'équation d'évolution de la constante de renormalisation Z_2 du photon ne sera obtenue qu'au deuxième ordre dans le développement des fluctuations du champ u, car la partie cinétique disparaît à l'approximation du champ homogène (comme c'était le cas pour Z avec le champ scalaire). Les équations d'évolution des constantes de couplage se déduisent ensuite aisément.

Pour tester la validité des équations ainsi obtenues, nous vérifierons analytiquement que la théorie des perturbations du gaz d'électrons est retrouvée à l'approximation d'une boucle.

L'organigramme ne mentionne pas de partie fermionique pour le développement dans les fluctuations. Cela ne signifie évidemment pas qu'elle n'existe pas. Il y a bien une partie fermionique à cet ordre, mais il n'est pas nécessaire de s'en préoccuper ici. En fait, les équations d'évolution des constantes de renormalisation dérivées de cette partie fermionique, sont les mêmes que celles obtenues à partir de l'approximation du champ homogène. Ceci doit toujours être vrai pour que la théorie soit cohérente. En effet, comment pourrait-on obtenir plusieurs équations d'évolution pour une même constante de couplage ? Si cette cohérence interne de la théorie n'est pas vérifiée, alors la théorie peut être abandonnée, car elle donne deux prédictions différentes pour une même constante de couplage. Nous reviendrons sur cette cohérence plus loin et en particulier à l'annexe I.

7.4.2 Choix de l'action de suppression

L'action de suppression est choisie de façon à supprimer les fluctuations quantiques des champs engendrées par l'interaction. Elle doit donc contenir un terme qui contrôle les fluctuations des électrons et un terme pour contrôler celles des photons. Nous choisissons l'action initiale suivante.

$$\boxed{S_M[\psi^\dagger,\psi,u] = \int_x \left[\psi_x^\dagger \left(i\partial_t + f(M^2)(\frac{1}{2m}\Delta_{\mathbf{x}} + \mu) + eu_x\right)\psi_x - \frac{1}{2}(\nabla_{\mathbf{x}} u_x)^2 - \frac{1}{2}M^2 u_x^2\right],} \tag{7.20}$$

où $f(M^2)$ est une fonction du paramètre M^2 et vérifie

$$f(0) = 1 \text{ et } \lim_{M\to\infty} f(M^2) = \infty.$$

Connaître la forme exacte de cette fonction n'est pas indispensable. Il faut simplement qu'elle soit continue et dérivable. Par exemple, nous pouvons choisir $f(M^2) = 1 + M^2/m^2$.

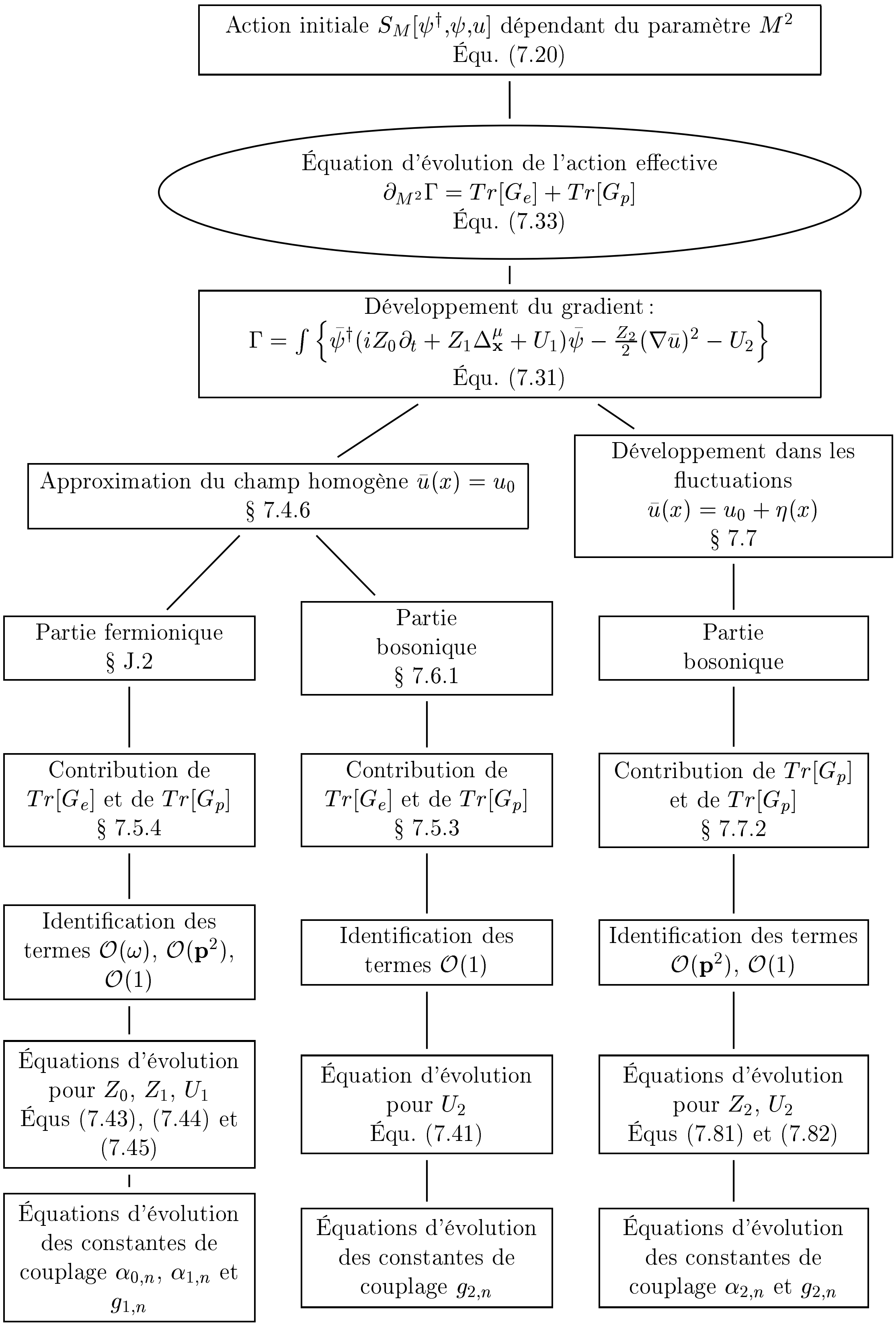
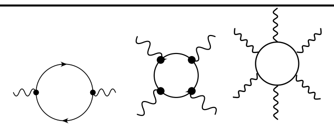
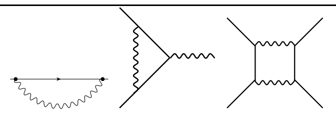


FIG. 7.3 – *Description schématique de la méthode.*

Remarquons que les fluctuations quantiques du champ électronique ne peuvent pas être éliminées par un simple terme en $M^2\psi^\dagger\psi$. Ce terme s'ajouterait en effet au potentiel chimique et, par conséquent, ferait diverger la densité d'électrons lorsque $M \to \infty$. Or, les diagrammes contenant des boucles d'électrons, c.-à-d. décrivant les fluctuations de l'électron, sont proportionnels à la densité d'électrons. Un tel terme n'éliminerait donc pas les fluctuations, au contraire. Un terme en $M^2\psi^\dagger\Delta\psi$ n'est pas acceptable non plus parce que le développement du gradient effectué dans la suite est un développement en puissances de $\xi_\mathbf{p} = \frac{p^2}{2m} - \mu$ et non en puissances de p^2.

Le tableau 4 indique le type de diagrammes de Feynman supprimés par chacun des termes de l'action de suppression. L'action de suppression fermionique élimine les fluctuations provenant des boucles d'électrons (lignes pleines) et l'action de suppression bosonique élimine les fluctuations provenant des photons (lignes ondulées).

TAB. 4 – *Correspondance entre action de suppression et diagrammes de Feynman supprimés.*

	Action de suppression	Types de diagrammes supprimés
Fermions	$\int_x \psi_x^\dagger \left(f(M^2) - 1\right) \left(\frac{1}{2m}\Delta_\mathbf{x} + \mu\right) \psi_x$	
Bosons	$-\frac{1}{2}\int_x M^2 u_x^2$	

Il est également possible de choisir des paramètres différents pour les deux types d'action de suppression. Il est cependant plus raisonnable de choisir un seul paramètre d'évolution car la trajectoire de l'action effective en fonction de ce paramètre est une simple ligne, alors que l'évolution avec deux paramètres possède une infinité de trajectoires possibles dans le plan formé par ces deux paramètres (voir figure 7.4). Il est d'ailleurs possible que l'action évolue vers différents points fixes selon la trajectoire empruntée.

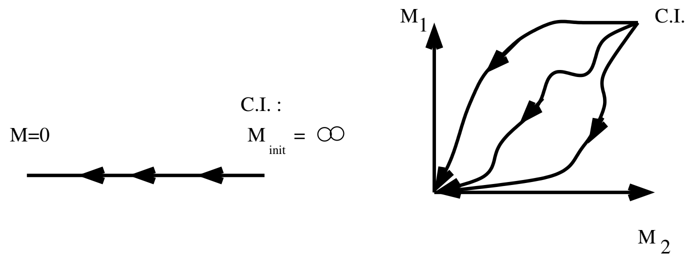


FIG. 7.4 – *Trajectoires dans l'espace des paramètres d'évolution.*

7.4.3 Fonctions de Green connexes et vertex propres

Les relations écrites ci-dessous sont tout à fait générales et peuvent être retrouvées dans les ouvrages de théorie des champs [60, 70]. Nous les écrivons explicitement car les signes ou la présence d'un facteur i peuvent changer selon les conventions choisies. La fonctionnelle génératrice des fonctions de corrélation s'écrit

$$\mathcal{Z}[j^\dagger,j,J] = e^{iW[j^\dagger,j,J]} = \int \mathcal{D}[\psi^\dagger]\mathcal{D}[\psi]\mathcal{D}[u] e^{i\left(S_M[\psi^\dagger,\psi,u]+j^\dagger\cdot\psi+\psi^\dagger\cdot j+J\cdot u\right)}, \tag{7.21}$$

où W est la fonctionnelle génératrice des fonctions de corrélation connexes. La valeur moyenne des champs ψ, $\psi^\dagger$ et u est obtenue par dérivation fonctionnelle par rapport aux sources de la fonctionnelle W.

$$\begin{aligned}\frac{\delta W[j^\dagger,j,J]}{\delta j^\dagger(x)} =& \frac{-i}{\mathcal{Z}[j^\dagger,j,J]}\frac{\delta}{\delta j^\dagger(x)}\mathcal{Z}[j^\dagger,j,J]\\ =& \frac{1}{\mathcal{Z}[j^\dagger,j,J]}\int \mathcal{D}[\psi^\dagger]\mathcal{D}[\psi]\mathcal{D}[u]\psi(x) e^{i\left(S[\psi^\dagger,\psi,u]+j^\dagger\cdot\psi+\psi^\dagger\cdot j+J\cdot u\right)}\\ =& \langle\psi(x)\rangle_{j^\dagger,j,J} \equiv \bar{\psi}(x).\end{aligned} \tag{7.22a}$$

De la même façon

$$\frac{\delta W[j^\dagger,j,J]}{\delta j(x)} = -\langle\psi^\dagger(x)\rangle_{j^\dagger,j,J} \equiv -\bar{\psi}^\dagger(x), \tag{7.22b}$$

et

$$\frac{\delta W[j^\dagger,j,J]}{\delta J(x)} = \langle u(x)\rangle_{j^\dagger,j,J} \equiv \bar{u}(x). \tag{7.22c}$$

La fonctionnelle génératrice des vertex propres, notée Γ, est obtenue par transformation de Legendre de W.

$$\Gamma[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}] = W[j^\dagger,j,J] - (j^\dagger\cdot\bar{\psi} + \bar{\psi}^\dagger\cdot j + J\cdot\bar{u}). \tag{7.23}$$

Γ est l'action effective que nous allons étudier. Cette relation implique

$$\frac{\delta\Gamma}{\delta\bar{\psi}(x)} = j^\dagger(x),\ \frac{\delta\Gamma}{\delta\bar{\psi}^\dagger(x)} = -j(x),\ \frac{\delta\Gamma}{\delta\bar{u}(x)} = -J(x). \tag{7.24}$$

Nous montrons maintenant que la fonction de corrélation connexe $W^{(2)}$ est l'inverse du vertex propre $\Gamma^{(2)}$ en utilisant le fait que la dérivée fonctionnelle d'une fonctionnelle $F[j^\dagger,j,J]$ s'écrit

$$\begin{aligned}\frac{\delta F}{\delta\bar{\psi}(x)} =& \int_y \left\{\frac{\delta F}{\delta j^\dagger(y)}\frac{\delta j^\dagger(y)}{\delta\bar{\psi}(x)} + \frac{\delta F}{\delta j(y)}\frac{\delta j(y)}{\delta\bar{\psi}(x)} + \frac{\delta F}{\delta J(y)}\frac{\delta J(y)}{\delta\bar{\psi}(x)}\right\}\\ =& \int_y \left\{\frac{\delta F}{\delta j^\dagger(y)}\frac{\delta}{\delta\bar{\psi}(x)}\frac{\delta\Gamma}{\delta\bar{\psi}(y)} - \frac{\delta F}{\delta j(y)}\frac{\delta}{\delta\bar{\psi}(x)}\frac{\delta\Gamma}{\delta\bar{\psi}^\dagger(y)} - \frac{\delta F}{\delta J(y)}\frac{\delta}{\delta\bar{\psi}(x)}\frac{\delta\Gamma}{\delta\bar{u}(y)}\right\}.\end{aligned}$$

F est tour à tour remplacée par $\bar{\psi}^\dagger(z)$, $\bar{\psi}(z)$, $\bar{u}(z)$ récrits en terme de W grâce aux équations (7.22). Par exemple, dans le cas où $F = \bar{\psi}(z)$, il vient

$$\begin{aligned}\delta_{x,z} = \frac{\delta\bar{\psi}(z)}{\delta\bar{\psi}(x)} =& \frac{\delta}{\delta\bar{\psi}(x)}\underbrace{\left[\frac{\delta W}{\delta j^\dagger(z)}\right]}_{F}\\ =& \int_y \left\{\frac{\delta^2 W}{\delta j^\dagger(y)\delta j^\dagger(z)}\frac{\delta^2\Gamma}{\delta\bar{\psi}(x)\delta\bar{\psi}(y)}\right.\\ &\left. - \frac{\delta^2 W}{\delta j(y)\delta j^\dagger(z)}\frac{\delta^2\Gamma}{\delta\bar{\psi}(x)\delta\bar{\psi}^\dagger(y)} - \frac{\delta^2 W}{\delta J(y)\delta j^\dagger(z)}\frac{\delta^2\Gamma}{\delta\bar{\psi}(x)\delta\bar{u}(y)}\right\}.\end{aligned}$$

Les dérivées fonctionnelles de ces trois quantités par rapport à $\bar{\psi}^\dagger(x)$, $\bar{\psi}(x)$, $\bar{u}(x)$ sont calculées de la même façon et les 9 équations obtenues s'écrivent sous la forme matricielle

$$\int_y \begin{pmatrix} -W^{(2)}_{j^\dagger_z j_y} & W^{(2)}_{j^\dagger_z j^\dagger_y} & -W^{(2)}_{j^\dagger_z J_y} \\ W^{(2)}_{j_z j_y} & -W^{(2)}_{j_z j^\dagger_y} & W^{(2)}_{j_z J_y} \\ W^{(2)}_{J_z j_y} & -W^{(2)}_{J_z j^\dagger_y} & -W^{(2)}_{J_z J_y} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Gamma^{(2)}_{\bar{\psi}^\dagger_y \bar{\psi}_x} & \Gamma^{(2)}_{\bar{\psi}^\dagger_y \bar{\psi}^\dagger_x} & -\Gamma^{(2)}_{\bar{\psi}^\dagger_y \bar{u}_z} \\ \Gamma^{(2)}_{\bar{\psi}_y \bar{\psi}_x} & \Gamma^{(2)}_{\bar{\psi}_y \bar{\psi}^\dagger_x} & -\Gamma^{(2)}_{\bar{\psi}_y \bar{u}_x} \\ \Gamma^{(2)}_{\bar{u}_y \bar{\psi}_x} & \Gamma^{(2)}_{\bar{u}_y \bar{\psi}^\dagger_x} & \Gamma^{(2)}_{\bar{u}_y \bar{u}_x} \end{pmatrix} = \delta_{x,z} \cdot \mathbf{1}. \tag{7.25}$$

L'écriture de cette équation matricielle dans l'espace de Fourier se met sous la forme

$$\int_z W^{(2)}(y_1,z)\Gamma^{(2)}(z,y_2) = \delta_{y_1,y_2} \Rightarrow \sum_q W^{(2)}(p_1,q)\Gamma^{(2)}(q,p_2) = \delta_{p_1,p_2}, \tag{7.26}$$

Cette équation relie les fonctions de Green connexes $W^{(2)}$ aux vertex propres $\Gamma^{(2)}$ et généralise l'équation (7.10) du cas scalaire. La matrice $W^{(2)}$ est l'inverse de $\Gamma^{(2)}$.

7.4.4 Évolution de l'action effective

Condition initiale

La fonction de partition (7.21) et la transformation de Legendre (7.23) permettent d'écrire l'équation suivante pour l'action effective Γ.

$$e^{i\Gamma[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}]} = \int \mathcal{D}[\psi^\dagger]\mathcal{D}[\psi]\mathcal{D}[u] e^{i\left(S_M[\psi^\dagger,\psi,u] + j^\dagger\cdot(\psi-\bar{\psi}) + (\psi^\dagger - \bar{\psi}^\dagger)\cdot j + J\cdot(u-\bar{u})\right)}. \tag{7.27}$$

Dans la limite $M \to \infty$, le membre de droite devient une gaussienne très piquée aux valeurs des champs $\bar{\psi}^\dagger$, $\bar{\psi}$ et $\bar{u}$. Un développement par la méthode du col autour de ces valeurs, à l'ordre 0, conduit à l'égalité

$$\Gamma[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}] = S_M[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}] \quad \text{pour} \quad M = \infty. \tag{7.28}$$

Lorsque M diminue, les fluctuations autour du col, engendrées par la présence de S_B dans l'action S_M, augmentent. Pour M grand, S_B peut être traitée comme un terme de perturbation. Quand M atteint 0, l'action de suppression est nulle et le système physique est décrit par l'action nue.

Équation d'évolution

Nous établissons maintenant l'équation d'évolution de l'action effective Γ en fonction du paramètre M^2. De l'équation (7.23), il vient

$$\partial_{M^2}\Gamma[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}] = \partial_{M^2} W[j^\dagger,j,J]. \tag{7.29}$$

L'équation d'évolution de Γ se déduit donc de celle de la fonction de corrélation connexe W qui s'obtient à partir de la fonction de partition (7.21) de la façon suivante.

$$\begin{aligned} \partial_{M^2} W[j^\dagger,j,J] &= -ie^{-iW}\partial_{M^2} e^{iW} \\ &= e^{-iW} \int \mathcal{D}[\psi^\dagger]\mathcal{D}[\psi]\mathcal{D}[u] \int_x \left(f'(M^2)\psi^\dagger(x)\Delta^\mu_{\mathbf{x}}\psi(x) - \frac{1}{2}u(x)^2 \right) \\ &\quad \times e^{i\left(S[\psi^\dagger,\psi,u] + j^\dagger\cdot\psi + \psi^\dagger\cdot j + J\cdot u\right)} \\ &= f'(M^2) Tr\langle \psi^\dagger(x)\Delta^\mu_{\mathbf{x}}\psi(x)\rangle_{j^\dagger,j,J} - \frac{1}{2} Tr\langle u(x)^2\rangle_{j^\dagger,j,J}, \end{aligned}$$

où $f' \equiv \partial_{M^2} f$ et la notation $\Delta^\mu_{\mathbf{x}}$ signifie $\Delta_{\mathbf{x}}/2m + \mu$. L'évolution de la fonctionnelle génératrice des fonctions de corrélation connexes s'écrit en fonction de la trace (Tr) des fonctions de Green de l'électron $\langle \psi^\dagger(x)\psi(x)\rangle_{j^\dagger,j,J}$ et du photon $\langle u(x)^2\rangle_{j^\dagger,j,J}$ en présence des sources. L'écriture explicite en termes des fonctions de Green connexes (propagateurs) donne

$$\begin{aligned}
\partial_{M^2} W[j^\dagger,j,J] =& \frac{1}{\mathcal{Z}[j^\dagger,j,J]} \int_x \Big(f'(M^2) \frac{\delta}{\delta j(x)} \Delta^\mu_{\mathbf{x}} \frac{\delta}{\delta j^\dagger(x)} + \frac{\delta^2}{\delta J(x)^2} \Big) e^{iW[j^\dagger,j,J]} \\
=& i f'(M^2) \int_x \frac{\delta}{\delta j(x)} \Delta^\mu_{\mathbf{x}} \frac{\delta W[j^\dagger,j,J]}{\delta j^\dagger(x)} + f'(M^2) \int_x \frac{\delta W[j^\dagger,j,J]}{\delta j(x)} \Delta^\mu_{\mathbf{x}} \frac{\delta W[j^\dagger,j,J]}{\delta j^\dagger(x)} \\
&+ \frac{i}{2} \int_x \frac{\delta^2 W[j^\dagger,j,J]}{\delta J(x)^2} - \frac{1}{2} \int_x \left(\frac{\delta W[j^\dagger,j,J]}{\delta J(x)} \right)^2 .
\end{aligned}$$

Finalement, l'équation d'évolution de l'action effective s'écrit

$$\partial_{M^2} \Gamma[\bar\psi^\dagger,\bar\psi,\bar u] = -i f'(M^2) Tr[\xi_{\mathbf{p}} W^{(2)}_{j,j^\dagger}] - f'(M^2) Tr[\xi_{\mathbf{p}} \bar\psi^\dagger \bar\psi] + \frac{i}{2} Tr[W^{(2)}_{J,J}] - \frac{1}{2} Tr[\bar u^2], \tag{7.30}$$

où $\xi_{\mathbf{p}} \equiv \mathbf{p}^2/2m - \mu$ mesure l'énergie cinétique de la particule par rapport au niveau de Fermi $\mu = k_F^2/2m$ et la trace (Tr) s'écrit $\sum_p$ dans l'espace de Fourier. Cette équation différentielle doit être résolue avec les conditions initiales fixées par l'égalité (7.28).

7.4.5 Développement de l'action effective

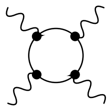
Comme dans les paragraphes 7.1 et 7.2, l'équation d'évolution (7.30) est exacte, mais il n'existe pas (encore) d'outils pour la résoudre. Il faut alors utiliser un Ansatz pour l'action effective. L'Ansatz choisi doit contenir tous les termes que nous supposons importants pour la compréhension de la physique du système.

Pour tenir compte de l'interaction coulombienne, nous choisissons

$$\boxed{\begin{aligned}
\Gamma[\bar\psi^\dagger,\bar\psi,\bar u] = & \int dx \Big\{ \bar\psi^\dagger(x)(iZ_0(\bar u(x))\partial_t + Z_1(\bar u(x))\Delta^\mu_{\mathbf{x}} + U_1(\bar u(x)))\bar\psi(x) \\
& -\frac{1}{2} Z_2(\bar u(x))(\nabla \bar u(x))^2 - U_2(\bar u(x)) \Big\}.
\end{aligned}} \tag{7.31}$$

Les fonctions Z_i $(i = 0,1,2)$ et U_j $(j = 1,2)$ sont exprimées sous forme de polynôme du champ de photons $\bar u(x)$.

$$\boxed{\begin{aligned}
&Z_0(\bar u) = 1 + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \alpha_{0,n}(M^2) \bar u^n && U_1(\bar u) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n!} g_{1,n}(M^2) \bar u^n \\
&Z_1(\bar u) = f(M^2) + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \alpha_{1,n}(M^2) \bar u^n && U_2(\bar u) = \frac{1}{2} M^2 \bar u^2 + \sum_{\substack{n \text{ pair} \\ n \geq 2}} \frac{1}{n!} g_{2,n}(M^2) \bar u^n \\
&Z_2(\bar u) = 1 + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \alpha_{2,n}(M^2) \bar u^n, &&
\end{aligned}} \tag{7.32}$$



Le terme $U_2(\bar{u}(x))$ est développé en puissances paires du champ $\bar{u}(x)$. En effet, les puissances impaires n'apparaissent pas ; le théorème de Furry [45] assure que seul un nombre pair de photons peut se connecter à une boucle électronique (voir par exemple la figure ci-contre ou le tableau 4).

En toute rigueur, l'action effective vérifiant l'équation d'évolution (7.30) comprend tous les ordres dans les dérivées et les puissances des champs $\bar{\psi}$, $\bar{\psi}^\dagger$ et $\bar{u}$. En tronquant cet Ansatz à un certain ordre dans les dérivées (développement du gradient), nous négligeons tous les termes d'ordre supérieur pouvant être engendrés par l'évolution de l'action effective : l'évolution des termes d'ordre supérieur à ceux apparaissant dans (7.31) ne peut pas être prise en compte puisqu'ils peuvent apparaître dans le membre de droite de l'équation (7.30), mais jamais dans celui de gauche. Le développement du gradient fait donc l'hypothèse que les termes négligés sont inessentiels, c.-à-d. que les constantes de couplage associées à ces termes deviennent négligeables lorsque $M \to 0$.

Les termes non connexes $Tr[\bar{u}^2]$ et $Tr[\xi_{\mathbf{p}}\bar{\psi}^\dagger\bar{\psi}]$ dans l'équation (7.30) sont compensés trivialement lorsque l'action effective du membre de gauche est développée en utilisant les relations (7.32) pour Z_1 et U_2. Il est possible de se débarrasser de ces termes inutiles en définissant

$$Z_1^c = Z_1 - f(M^2) \qquad \text{et} \qquad U_2^c = U_2 - \frac{1}{2}M^2\bar{u}^2.$$

L'équation d'évolution (7.30) de l'action effective s'écrit alors

$$\boxed{\partial_{M^2}\Gamma^c[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}] = -if'(M^2)Tr[\xi_{\mathbf{p}}W^{(2)}_{j,j^\dagger}] + \frac{i}{2}Tr[W^{(2)}_{J,J}],} \tag{7.33}$$

où Γ^c est l'Ansatz (7.31) dans lequel Z_1 et U_2 sont remplacés par Z_1^c et U_2^c. Les termes Z_1^c et U_2^c n'apparaissent que dans le membre de gauche de cette équation. Le membre de droite contient les constantes de renormalisation Z_1 et U_2.

Dans le cas de la théorie scalaire [6], la trace du propagateur du champ dans (7.9) s'écrit simplement comme la trace de l'inverse de la fonction de vertex du champ ϕ.

$$Tr[W^{(2)}_{j,j}] = Tr\left(\left[\frac{\delta^2\Gamma}{\delta\phi\delta\phi}\right]^{-1}\right).$$

Cette relation simple provenait de l'identité (7.10). Ici, le propagateur $W^{(2)}_{J,J}$ n'est pas simplement l'inverse de $\Gamma^{(2)}_{\bar{u},\bar{u}}$, mais un élément de matrice de l'inverse de $\Gamma^{(2)}$. Les propagateurs de l'électron et du photon s'obtiennent en inversant la matrice des vertex propres de l'équation (7.25). Cette inversion sera faite aux paragraphes 7.5.2 à l'approximation du champ homogène et 7.7.2 lorsque le champ de photons contient des fluctuations.

7.4.6 Approximation du champ électrostatique homogène

Nous explicitons maintenant le membre de gauche de l'équation (7.33), puis dans le paragraphe 7.6, nous procéderons à l'identification des deux membres de l'équation. À cet ordre dans le développement du champ de photons ($\bar{u}(x) = u_0$), l'expression de l'action effective est simplement

$$\Gamma^c[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},u_0] = \int dx \Big\{ \bar{\psi}^\dagger(x)(iZ_0\partial_t + Z_1^c\Delta_{\mathbf{x}}^\mu + U_1)\bar{\psi}(x) - U_2^c \Big\},$$

ce qui conduit aussitôt à

$$\boxed{\partial_{M^2}\Gamma^c[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},u_0] = \sum_q \bar{\psi}^\dagger(q)(\partial_{M^2}Z_0\omega_q - \partial_{M^2}Z_1^c\xi_{\mathbf{q}} + \partial_{M^2}U_1)\bar{\psi}(q) - VT\partial_{M^2}U_2^c.} \quad (7.34)$$

Lorsque la dépendance en $\bar{u}$ des constantes de couplages Z_i et U_i est omise, nous sous-entendons que ces constantes de couplage sont évaluées pour le champ homogène $\bar{u} = u_0$. À cette approximation, les seules constantes de renormalisation qui obéissent à une équation d'évolution sont Z_0, Z_1, U_1 et U_2. Nous n'avons pas d'information sur l'évolution de Z_2 puisque la partie cinétique du photon est nulle ($\nabla\bar{u} = \nabla u_0 = 0$).

Dans la suite, nous chercherons à écrire les fonctions de Green connexes du photon $W^{(2)}_{J,J}$ et de l'électron $W^{(2)}_{j,j^\dagger}$ à partir de cet Ansatz.

7.5 Développement des propagateurs de l'électron et du photon

Dans le paragraphe précédent, nous avons obtenu l'expression du membre de gauche de l'équation (7.33) ; nous explicitons ici le membre de droite. Les différents propagateurs s'obtenant en inversant la matrice des dérivées fonctionnelles de l'action effective apparaissant dans l'équation (7.25), nous devons dans un premier temps calculer les éléments de cette matrice à l'aide de l'Ansatz (7.31). Puis, dans la section 7.5.2, nous inverserons la matrice ainsi obtenue en la développant autour de sa diagonale à l'approximation du champ homogène. Les propagateurs du photon et de l'électron en seront déduits dans les paragraphes suivants.

7.5.1 Dérivées fonctionnelles de l'action effective

La matrice des vertex propres de l'équation (7.25) fait apparaître les dérivées fonctionnelles de l'action effective du type $\frac{\delta^2\Gamma[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}]}{\delta\bar{\psi}^\dagger(y_1)\delta\bar{\psi}(y_2)}$. Ces dérivées fonctionnelles sont notées simplement

$\Gamma^{(2)}_{\bar\psi_1^\dagger,\bar\psi_2}$. Les 9 éléments de la matrice $\Gamma^{(2)}$ s'écrivent en utilisant l'Ansatz (7.31)

$$\begin{aligned}
\Gamma^{(2)}_{\bar\psi_1^\dagger,\bar\psi_2} =& -\int_x \delta_{y_1,x}\Big(iZ_0(\bar u(x))\partial_t + Z_1(\bar u(x))\Delta^\mu_{\mathbf{x}} + U_1(\bar u(x))\Big)\delta_{x,y_2},\\
\Gamma^{(2)}_{\bar\psi_1,\bar\psi_2} =& \Gamma^{(2)}_{\bar\psi_1^\dagger,\bar\psi_2^\dagger} = 0,\\
\Gamma^{(2)}_{\bar\psi_1,\bar\psi_2^\dagger} =& \int_x \delta_{y_2,x}\Big(iZ_0(\bar u(x))\partial_t + Z_1(\bar u(x))\Delta^\mu_{\mathbf{x}} + U_1(\bar u(x))\Big)\delta_{x,y_1},\\
\Gamma^{(2)}_{\bar\psi_1,\bar u_2} =& -\int_x \delta_{x,y_2}\bar\psi^\dagger(x)\Big(iZ_0^{(1)}(\bar u(x))\partial_t + Z_1^{(1)}(\bar u(x))\Delta^\mu_{\mathbf{x}} + U_1^{(1)}(\bar u(x))\Big)\delta_{x,y_1},\\
\Gamma^{(2)}_{\bar u_1,\bar\psi_2} =& -\int_x \delta_{x,y_1}\bar\psi^\dagger(x)\Big(iZ_0^{(1)}(\bar u(x))\partial_t + Z_1^{(1)}(\bar u(x))\Delta^\mu_{\mathbf{x}} + U_1^{(1)}(\bar u(x))\Big)\delta_{x,y_2},\\
\Gamma^{(2)}_{\bar\psi_1^\dagger,\bar u_2} =& \int_x \delta_{y_1,x}\delta_{x,y_2}\Big(iZ_0^{(1)}(\bar u(x))\partial_t + Z_1^{(1)}(\bar u(x))\Delta^\mu_{\mathbf{x}} + U_1^{(1)}(\bar u(x))\Big)\bar\psi(x),\\
\Gamma^{(2)}_{\bar u_1,\bar\psi_2^\dagger} =& \int_x \delta_{y_2,x}\delta_{x,y_1}\Big(iZ_0^{(1)}(\bar u(x))\partial_t + Z_1^{(1)}(\bar u(x))\Delta^\mu_{\mathbf{x}} + U_1^{(1)}(\bar u(x))\Big)\bar\psi(x),
\end{aligned}\tag{7.35}$$

et

$$\begin{aligned}
\Gamma^{(2)}_{\bar u_1,\bar u_2} = \int_x \Bigg\{ & \bar\psi^\dagger(x)\delta_{x,y_1}\delta_{x,y_2}\Big(iZ_0^{(2)}(\bar u(x))\partial_t + Z_1^{(2)}(\bar u(x))\Delta^\mu_{\mathbf{x}} + U_1^{(2)}(\bar u(x))\Big)\bar\psi(x)\\
& - \frac{1}{2}\delta_{x,y_1}\delta_{x,y_2}Z_2^{(2)}(\bar u(x))(\nabla_{\mathbf{x}}\bar u(x))^2\\
& + \nabla_{\mathbf{x}}.\left[\delta_{x,y_1}Z_2^{(1)}(\bar u(x))\nabla_{\mathbf{x}}\bar u(x)\right]\delta_{x,y_2} + \nabla_{\mathbf{x}}.\left[\delta_{x,y_2}Z_2^{(1)}(\bar u(x))\nabla_{\mathbf{x}}\bar u(x)\right]\delta_{x,y_1}\\
& - \left[\Delta_{\mathbf{x}}Z_2(\bar u(x)).\delta_{x,y_2} + 2\nabla_{\mathbf{x}}Z_2(\bar u(x)).\nabla_{\mathbf{x}}\delta_{x,y_2} + Z_2(\bar u(x))\Delta_{\mathbf{x}}\delta_{x,y_2}\right]\delta_{x,y_1}\\
& + Z_2(\bar u(x))\Delta_{\mathbf{x}}\delta_{x,y_1}.\delta_{x,y_2} - \delta_{x,y_1}\delta_{x,y_2}U_2^{(2)}(\bar u(x))\Bigg\},
\end{aligned}$$

où

$$Z_i^{(n)}(\bar u(x)) \equiv \frac{\delta^n Z_i(\bar u(x))}{\delta \bar u^n(x)} \quad \text{et} \quad U_i^{(n)}(\bar u(x)) \equiv \frac{\delta^n U_i(\bar u(x))}{\delta \bar u^n(x)}.$$

Comme cela a été fait au paragraphe 7.2, l'approximation qui va suivre consiste à développer le champ de photons autour d'une valeur constante. Le champ de photons $\bar u(x)$ est la somme d'un champ homogène u_0 et de fluctuations $\eta(x)$.

$$\bar u(x) = u_0 + \eta(x).$$

Les fluctuations $\eta(x)$ sont supposées faibles, ce qui permet de faire un développement en puissances de l'amplitude des fluctuations. Dans les paragraphes suivants, le développement est arrêté à l'approximation du champ homogène, c.-à-d. à l'ordre 0 dans les fluctuations, afin de l'identifier à l'équation (7.34).

7.5.2 Inversion de la matrice des vertex propres

Le champ $\bar u(x)$ est choisi tel que $\bar u(x) = u_0\,\forall x$ dans les expressions (7.35). La matrice des $\Gamma^{(2)}$ s'écrit, dans l'espace de Fourier,

$$\Gamma^{(2)}[u_0] = \Gamma_{\rm d} + \Gamma_{\rm nd}, \tag{7.36}$$

où Γ_{d} est la partie diagonale

$$\Gamma_{\mathrm{d}} = \begin{pmatrix} -(Z_0\omega_1 - Z_1\xi_{\mathbf{p_1}} + U_1) & 0 & 0 \\ 0 & Z_0\omega_1 - Z_1\xi_{\mathbf{p_1}} + U_1 & 0 \\ 0 & 0 & -(Z_2\mathbf{p}_1^2 + U_2^{(2)}) \end{pmatrix} \delta_{p_1,p_2} \tag{7.37a}$$

et Γ_{nd} la partie non diagonale

$$\Gamma_{\mathrm{nd}} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & e \\ 0 & 0 & d \\ a & b & c \end{pmatrix}. \tag{7.37b}$$

Les éléments de la matrice Γ_{nd} sont donnés dans l'espace de Fourier par

$$\begin{aligned}
a_{p_1,p_2} =& -\sqrt{VT}\int_q \bar{\psi}^\dagger(q)(Z_0^{(1)}\omega_{p_2} - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p_2}} + U_1^{(1)})\delta_{q+p_1-p_2} \\
b_{p_1,p_2} =& \sqrt{VT}\int_q (Z_0^{(1)}\omega_q - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{q}} + U_1^{(1)})\bar{\psi}(q)\delta_{q-p_1+p_2} \\
c_{p_1,p_2} =& VT\int_{q_1}\int_{q_2} \bar{\psi}^\dagger(q_1)(Z_0^{(2)}\omega_{q_2} - Z_1^{(2)}\xi_{\mathbf{q_2}} + U_1^{(2)})\bar{\psi}(q_2)\delta_{q_2-q_1-p_1+p_2} \\
d_{p_1,p_2} =& \sqrt{VT}\int_q \bar{\psi}^\dagger(q)(Z_0^{(1)}\omega_{p_1} - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p_1}} + U_1^{(1)})\delta_{q+p_1-p_2} \\
e_{p_1,p_2} =& -\sqrt{VT}\int_q (Z_0^{(1)}\omega_q - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{q}} + U_1^{(1)})\bar{\psi}(q)\delta_{q-p_1+p_2}.
\end{aligned} \tag{7.37c}$$

Les fonctions de corrélation connexes sont obtenues sous forme de série grâce à un développement autour de la matrice diagonale.

$$W^{(2)} = \left[\Gamma^{(2)}\right]^{-1} = \Gamma_{\mathrm{d}}^{-1} - \Gamma_{\mathrm{d}}^{-1}\Gamma_{\mathrm{nd}}\Gamma_{\mathrm{d}}^{-1} + \Gamma_{\mathrm{d}}^{-1}\Gamma_{\mathrm{nd}}\Gamma_{\mathrm{d}}^{-1}\Gamma_{\mathrm{nd}}\Gamma_{\mathrm{d}}^{-1} - \cdots . \tag{7.38}$$

Cette série est tronquée au 2^e ordre dans Γ_{nd} car les ordres supérieurs contiennent au minimum trois champs fermioniques et leur évolution n'est pas prise en compte dans l'équation (7.33).

7.5.3 Contribution du propagateur du photon

L'inverse de la partie diagonale de $\Gamma^{(2)}$ donne les propagateurs « renormalisés » de l'électron et du photon. Le propagateur du photon $W_{J,J}^{(2)}$ est donné par l'élément de matrice de la dernière ligne et dernière colonne de la matrice des fonctions de Green connexes. Sa trace est [3]

$$\begin{aligned}
-Tr[W_{J,J}^{(2)}] =& \sum_p \frac{1}{Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)}} - \sum_p \frac{c_{p,p}}{(Z_2\mathbf{p} + U_2^{(2)})^2} \\
&- \sum_p\sum_{p'} \frac{a_{p,p'}}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^2}\frac{e_{p',p}}{Z_0\omega_{p'} - Z_1\xi_{\mathbf{p'}} + U_1} \\
&+ \sum_p\sum_{p'} \frac{b_{p,p'}}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^2}\frac{d_{p',p}}{Z_0\omega_{p'} - Z_1\xi_{\mathbf{p'}} + U_1} \\
&+ \sum_p\sum_{p'} \frac{c_{p,p'}}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^2}\frac{c_{p',p}}{Z_0\omega_{p'} - Z_1\xi_{\mathbf{p'}} + U_1}.
\end{aligned}$$

3. Attention, $W_{J,J}^{(2)}$ apparaît avec un signe $-$ dans la matrice $W^{(2)}$ de l'équation (7.25), *i.e.* $W_{3,3}^{(2)} = -W_{J,J}^{(2)}$.

Explicitant les variables a b c, d et e, la trace du propagateur de photon s'écrit

$$
\begin{aligned}
Tr[W_{J,J}^{(2)}] = -\sum_p \frac{1}{Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)}} \Bigg\{ 1 - \int_q \bar{\psi}^\dagger(q)(Z_0^{(2)}\omega_q - Z_1^{(2)}\xi_{\mathbf{q}} + U_1^{(2)})\bar{\psi}(q) \\
- \int_q \bar{\psi}^\dagger(q) \frac{(Z_0^{(1)}\omega_q - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{q}} + U_1^{(1)})(Z_0^{(1)}(\omega_p+\omega_q) - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p+q}} + U_1^{(1)})}{Z_0(\omega_p+\omega_q) - Z_1\xi_{\mathbf{p+q}} + U_1}\bar{\psi}(q) \\
- \int_q \bar{\psi}^\dagger(q) \frac{(Z_0^{(2)}\omega_q - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{q}} + U_1^{(1)})(Z_0^{(1)}(\omega_p-\omega_q) - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p-q}} + U_1^{(1)})}{Z_0(\omega_p-\omega_q) - Z_1\xi_{\mathbf{p-q}} + U_1}\bar{\psi}(q) \\
+ \mathcal{O}((\bar{\psi}^\dagger\bar{\psi})^2) \Bigg\}. \quad (7.39)
\end{aligned}
$$

Nous avons ainsi obtenu une partie du membre de droite de l'équation (7.33). Les termes d'ordre $(\bar{\psi}^\dagger\bar{\psi})^2$ sont négligés car ils ne sont pas pris en compte dans l'Ansatz (7.31) et n'apparaissent donc pas dans l'équation (7.34).

7.5.4 Contribution du propagateur de l'électron

De la même manière, le développement (7.38) donne pour le propagateur de l'électron

$$
\begin{aligned}
-W_{j,j^\dagger}^{(2)} = \frac{1}{Z_0\omega_{p_1} - Z_1\xi_{\mathbf{p_1}} + U_1}\delta_{p_1,p_2} \\
- \sum_{p'} \frac{1}{Z_0\omega_{p_1} - Z_1\xi_{\mathbf{p_1}} + U_1} d_{p_1,p'} \frac{1}{Z_2\mathbf{p'}^2 + U_2^{(2)}} b_{p',p_2} \frac{1}{Z_0\omega_{p_2} - Z_1\xi_{\mathbf{p_2}} + U_1}.
\end{aligned}
$$

De façon explicite, la trace du premier terme du membre de droite de l'équation (7.33) s'écrit

$$
\begin{aligned}
-Tr[\xi_{\mathbf{p}}W_{j,j^\dagger}^{(2)}] = \sum_p \frac{\xi_{\mathbf{p}}}{Z_0\omega_p - Z_1\xi_{\mathbf{p}} + U_1} \\
- \int_q \bar{\psi}^\dagger(q)(Z_0^{(1)}\omega_q - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{q}} + U_1^{(1)})\bar{\psi}(q) \\
\times \sum_p \xi_{\mathbf{p}} \frac{Z_0^{(1)}\omega_p - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p}} + U_1^{(1)}}{(Z_0\omega_p - Z_1\xi_{\mathbf{p}} + U_1)^2(Z_2(\mathbf{p}+\mathbf{q})^2 + U_2^{(2)})}. \quad (7.40)
\end{aligned}
$$

7.6 Approximation du champ homogène

Nous identifions ici les deux membres de l'équation d'évolution de l'action effective à l'aide des équations (7.34), (7.39) et (7.40). Dans ces expressions, il y a deux types de termes : les termes bosoniques qui sont des nombres usuels (indépendants de $\bar{\psi}$), et les termes fermioniques qui sont des variables de Grassmann (dépendants de $\bar{\psi}$). Chaque côté de l'équation (7.33) peut être séparé en une partie bosonique et une partie fermionique.

7.6.1 Constantes de renormalisation du photon

L'identification des termes bosoniques de l'équation (7.34) avec les termes bosoniques des équations (7.39) et (7.40) selon la relation (7.33) conduit à l'équation d'évolution de la constante de renormalisation U_2 à l'approximation du champ homogène

$$\boxed{\partial_{M^2} U_2^c = -if'(M^2) \int_p \frac{\xi_{\mathbf{p}}}{Z_0\omega_p - Z_1\xi_{\mathbf{p}} + U_1} + \frac{i}{2}\int_p \frac{1}{Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)}}.} \tag{7.41}$$

Les fonctions Z_i et U_i sont ensuite exprimées sous forme de polynômes du champ de photons homogène u_0 selon les notations (7.32) pour obtenir un ensemble d'équations aux dérivées partielles couplées. À cette approximation, nous devons poser $Z_2 = 1$ car il n'y a pas d'équation d'évolution pour Z_2 (cf. (7.34)).

Les constantes de couplage s'obtiennent par dérivation de U_2^c par rapport à $\bar{u}$.

$$g_{2,n} = U_2^{c(n)}(\bar{u} = 0). \tag{7.42}$$

7.6.2 Constantes de renormalisation de l'électron

L'identification des termes fermioniques des équations (7.34), (7.39) et (7.40) est faite explicitement dans l'annexe J et conduit aux équations d'évolution des constantes de renormalisation Z_0, Z_1 et U_1.

La constante de renormalisation de l'énergie Z_0 à l'approximation du champ homogène s'obtient en regroupant les équations (J.3) et (J.6).

$$\boxed{\begin{aligned}\partial_{M^2} Z_0 = \; & \frac{i}{2}\int_p \frac{Z_0^{(2)}}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^2} \\ & -\frac{1}{2\pi^2}\frac{Z_0^{(1)}}{Z_0^2}\int_0^{k_F} \mathsf{p}^2 d\mathsf{p} \frac{(Z_0^{(1)}Z_1 - Z_0 Z_1^{(1)})\xi_{\mathbf{p}} - (Z_0^{(1)} - Z_0)U_1^{(1)}}{[Z_2(\mathsf{p}^2 + {k_F}^2) + U_2^{(2)}]^2 - 4Z_2^2\mathsf{p}^2 {k_F}^2} \\ & + f'(M^2)\frac{\left(Z_0^{(1)}\right)^2}{2mZ_0^2}\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\frac{\mathbf{p}^2}{Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)}}.\end{aligned}} \tag{7.43}$$

L'évolution de la constante de renormalisation de la partie cinétique de l'électron Z_1 est obtenue à l'aide des équations (J.4) et (J.7).

$$\boxed{\begin{aligned}\partial_{M^2} Z_1^c = \; & \frac{i}{2}\int_p \frac{Z_1^{(2)}}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^2} \\ & -\frac{1}{2\pi^2 Z_0^2}\int_0^{k_F} \mathsf{p}^2 d\mathsf{p} \frac{(Z_0^{(1)}Z_1 - Z_0 Z_1^{(1)})\xi_{\mathbf{p}} - (Z_0^{(1)} - Z_0)U_1^{(1)}}{[Z_2(\mathsf{p}^2 + {k_F}^2) + U_2^{(2)}]^2 - 4Z_2^2\mathsf{p}^2 {k_F}^2} \\ & \times \left\{ Z_1^{(1)} + 4mZ_2U_1^{(1)} \frac{Z_2(k_F^2 - \mathsf{p}^2) + U_2^{(2)}}{[Z_2(\mathsf{p}^2 + {k_F}^2) + U_2^{(2)}]^2 - 4Z_2^2\mathsf{p}^2 {k_F}^2} \right\} \\ & + f'(M^2)\frac{Z_0^{(1)}}{Z_0^2}\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\frac{1}{Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)}}\left(Z_1^{(1)}\frac{\mathbf{p}^2}{2m} - U_1^{(1)}\right).\end{aligned}} \tag{7.44}$$

Enfin, l'évolution de U_1 s'écrit à l'aide des équations (J.5) et (J.8)

$$\boxed{\begin{aligned}\partial_{M^2}U_1 = \; & \frac{f'(M^2)}{2mZ_0^2}\int\frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\frac{Z_0^{(1)}U_1^{(1)}\mathbf{p}^2}{Z_2\mathbf{p}^2+U_2^{(2)}}+\frac{i}{2}\int_p\frac{U_1^{(2)}}{(Z_2\mathbf{p}^2+U_2^{(2)})^2}\\ & -\frac{U_1^{(1)}}{2\pi^2Z_0^2}\int_0^{k_F}\mathsf{p}^2d\mathsf{p}\frac{(Z_0^{(1)}Z_1-Z_0Z_1^{(1)})\xi_{\mathbf{p}}-(Z_0^{(1)}-Z_0)U_1^{(1)}}{[Z_2(\mathsf{p}^2+{k_F}^2)+U_2^{(2)}]^2-4Z_2^2\mathsf{p}^2{k_F}^2}.\end{aligned}} \tag{7.45}$$

7.6.3 Constantes de couplage de l'électron

Les équations de flot pour les constantes de couplage de l'électron s'obtiennent à partir de ces équations d'évolution des constantes de renormalisation, données en (7.43), (7.44) et (7.45). Ces trois équations d'évolution jouent le rôle de génératrices pour les fonctions de Callan-Symanzik. Les différentes fonctions β des électrons s'obtiennent en effet par

$$\beta_n^e(M^2)\equiv M^2\partial_{M^2}g_{1,n}=M^2\partial_{M^2}U_1^{(n)}, \tag{7.46}$$

où l'exposant e différencie ces fonctions β associées aux électrons de celle associées aux photons. Les fonctions de Callan-Symanzik pour la fréquence, η_n^e, et pour l'énergie cinétique, γ_n^e, sont également générées par les équations d'évolution des constantes de renormalisation.

$$\eta_n^e(M^2)\equiv M^2\partial_{M^2}\alpha_{0,n}=M^2\partial_{M^2}Z_0^{(n)}, \tag{7.47}$$

et

$$\gamma_n^e(M^2)\equiv M^2\partial_{M^2}\alpha_{1,n}=M^2\partial_{M^2}Z_1^{c(n)}. \tag{7.48}$$

En pratique, l'ensemble de ces équations différentielles doit être tronqué à une valeur finie de n pour pouvoir traiter ce système d'équations de façon numérique.

7.6.4 Approximation à l'ordre d'une boucle

Constantes de couplage du photon

L'approximation d'une boucle consiste à remplacer les différentes constantes de couplage apparaissant dans le membre de droite de l'équation (7.41) par leur valeur initiale. Dans la procédure habituelle du groupe de renormalisation, cette approximation est appelée approximation des modes indépendants. Le couplage des différentes équations différentielles est en effet négligé et chaque équation devient indépendante. La condition initiale pour l'action effective est $\Gamma = S_M$. Par conséquent, les valeurs initiales des constantes de renormalisation sont

$$Z_0=1,\quad Z_1=f(M^2),\quad U_1=eu_0, \tag{7.49}$$
$$Z_2=1,\quad U_2=M^2u_0^2. \tag{7.50}$$

Il s'ensuit que l'équation d'évolution des constantes de couplage s'écrit, à l'approximation d'une boucle,

$$\partial_{M^2}g_{2,n}=\frac{\partial^n}{\partial u_0^n}\left\{-if'(M^2)\int_p\frac{\xi_{\mathbf{p}}}{\omega_p-f(M^2)\xi_{\mathbf{p}}+eu_0}+\frac{i}{2}\int_p\frac{1}{\mathbf{p}^2+M^2}\right\}. \tag{7.51}$$

À cet ordre, le propagateur du photon est indépendant du champ u_0 et donne donc une contribution nulle ($n \geq 2$). Pour le calcul du propagateur de l'électron, l'intégration sur l'énergie est faite en premier à l'aide du théorème des résidus. Rappelons que le propagateur de l'électron s'écrit [66, 70]

$$\lim_{t\to 0^-} \frac{e^{-i\omega_p t}}{\omega_p - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu + i\delta_p} = \lim_{t\to 0^-} \left\{ \frac{\Theta(k_F - p)}{\omega_p - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu - i\delta} + \frac{\Theta(p - k_F)}{\omega_p - \frac{\mathbf{p}^2}{2m} + \mu + i\delta} \right\} e^{-i\omega_p t}, \quad (7.52)$$

où $k_F = \sqrt{2m\mu}$ et δ_p est une quantité infinitésimale positive lorsque l'impulsion p est au dessus du niveau de Fermi k_F et négative sinon. L'exponentielle est introduite pour assurer la convergence de l'intégrale lors du calcul de la trace du propagateur (pour obtenir le nombre total d'électrons par exemple). Elle impose le choix du contour d'intégration dans le demi-plan supérieur et annule la contribution du demi-cercle. Cette exponentielle n'est pas nécessaire lorsque l'on a affaire à un produit de propagateurs, puisque les puissances de ω_p dans le dénominateur sont suffisantes pour assurer la convergence. L'évaluation de la trace du propagateur de l'électron apparaissant dans l'équation d'évolution (7.51) nécessite la présence de cette exponentielle régularisatrice (voir aussi le propagateur du § 6.1.1).

$$\begin{aligned} &\lim_{t\to 0^-} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{\xi_{\mathbf{p}} e^{-i\omega_p t}}{\omega_p - f(M^2)\xi_{\mathbf{p}} + eu_0 + i\delta_p} \\ &\quad = \lim_{t\to 0^-} \int_p \left\{ \frac{\Theta(-\xi_{\mathbf{p}})}{\omega_p - f(M^2)\xi_{\mathbf{p}} + eu_0 - i\delta} + \frac{\Theta(\xi_{\mathbf{p}})}{\omega_p - f(M^2)\xi_{\mathbf{p}} + eu_0 + i\delta} \right\} e^{-i\omega_p t}. \quad (7.53) \end{aligned}$$

Le contour de l'intégration étant fermé dans le demi-plan supérieur, le théorème des résidus ne retient que la partie du propagateur décrivant les électrons sous la surface de Fermi. L'expression précédente devient

$$i \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \xi_{\mathbf{p}} \Theta(-\xi_{\mathbf{p}}) = \frac{i}{4\pi^2 m} \int_0^\infty p^2 dp (p^2 - k_F^2) \Theta(k_F - \mathsf{p}) = -\frac{ik_F^5}{30\pi^2 m}. \quad (7.54)$$

L'équation d'évolution (7.51) est alors triviale puisqu'il n'y a pas de dépendance en u_0 dans l'équation précédente. La valeur initiale de $g_{2,n}$ étant nulle, elle reste nulle tout au long de l'évolution en fonction du paramètre M^2.

$$\partial_{M^2} g_{2,n} \equiv \partial_{M^2} U_2^{c(n)} = 0 \Rightarrow g_{2,n} = 0 \quad \forall n \geq 2. \quad (7.55)$$

Ce résultat peut paraître étrange ; il signifie que le photon ne subit aucune renormalisation. L'interaction médiée par le photon reste l'interaction de Coulomb nue.

En théorie de perturbation, l'approximation RPA (Random Phase Approximation) consistant à calculer un potentiel effectif en resommant les diagrammes de polarisation de l'électron de la figure 7.5, donne une longueur d'écrantage (que l'on peut assimiler à la masse effective du photon dans notre formalisme) [66, 70]

$$V_C(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2} \longrightarrow V_{eff}(\mathbf{q}) = \frac{4\pi e^2}{\mathbf{q}^2 + \lambda^2}. \quad (7.56)$$

λ est connue sous le nom de nombre d'onde (ou masse) de Thomas-Fermi.

L'approximation d'une boucle étant l'équivalent de la resommation de tous les graphes à une boucle de la figure 7.5, le groupe de renormalisation devrait engendrer cette masse effective du photon. (Rappelons que Γ est l'inverse du propagateur — voir l'identité (7.25). La contribution

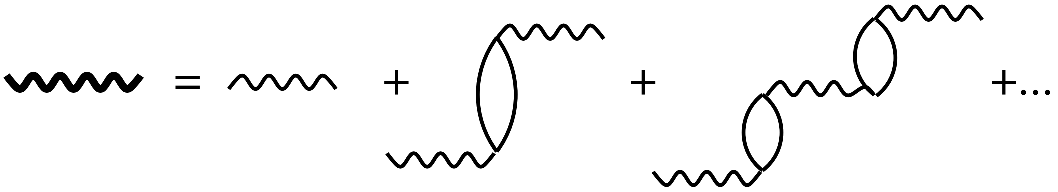


FIG. 7.5 – *Resommation RPA. Les lignes ondulées représentent l'interaction de Coulomb nue et les boucles sont des paires électron-trou. Le potentiel effectif (ligne ondulée grasse) resomme les diagrammes de polarisation.*

du photon à Γ est donc l'inverse de V_{eff} qui représente le propagateur du photon renormalisé ; c'est pourquoi un seul diagramme dans Γ correspond à toute une série de graphes en théorie de perturbation). Or, il n'en est rien, l'équation d'évolution de l'action effective (7.33) n'engendre pas automatiquement la première correction à une boucle au propagateur du photon. Cet apparent paradoxe vient du fait que le champ de photons considéré est homogène.

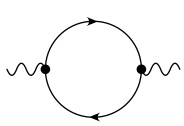


FIG. 7.6 –

Le diagramme de polarisation ci-contre a une contribution nulle si le champ de photon est homogène. En effet, l'approximation $\bar{u}(x) \approx u_0$ signifie dans l'espace de Fourier $\bar{u}(p) \approx u_0 \delta_{p,0}$. Le champ de photons est statique, les propagateurs externes du diagramme de polarisation ont une impulsion et une énergie nulle. Les propagateurs internes possèdent alors la même impulsion q sur laquelle il faut sommer, c.-à-d.

$$\int \frac{d\omega_q}{2\pi} \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^d} \frac{1}{(\omega_q - \frac{\mathbf{q}^2}{2m} + \mu)^2}.$$

L'intégration sur l'énergie ω_q, effectuée par le théorème des résidus donne un résultat nul. Lorsque le champ possède une impulsion non nulle, il peut engendrer cette paire qui vient s'intercaler entre deux électrons contribuant ainsi à écranter l'interaction entre les électrons.

L'effet d'écran pourrait être reproduit en introduisant *à la main* la masse de Thomas-Fermi comme condition initiale pour le terme de masse du photon ($g_{2,2}(M^2_{\text{init}}) = M_{TF}$). Cette masse apparaîtrait ensuite dans les équations d'évolution des constantes de couplage et permettrait d'implémenter le groupe de renormalisation en partant de la théorie de perturbation RPA. Il est cependant préférable de pouvoir générer cet effet d'écran simplement à partir d'une équation d'évolution pour l'action effective. En effet, la masse obtenue à partir du graphe de la figure 7.6 évolue, car les propagateurs électroniques évoluent, alors qu'une masse introduite *à la main* est fixée une fois pour toute.

Il est donc nécessaire d'autoriser les fluctuations du champ de photons $\bar{u}(p) \approx u_0 + \eta(x)$ pour obtenir une évolution non triviale de la constante de couplage g_2 et retrouver l'effet d'écran.

Constantes de couplage de l'électron

À l'approximation d'une boucle, *i.e.* en prenant la valeur initiale de $Z_0 = 1$, l'équation (7.43) s'écrit immédiatement

$$\partial_{M^2} Z_0 = 0.$$

La constante de renormalisation de l'énergie ne varie pas à cet ordre.

La constante de renormalisation l'énergie cinétique de l'équation (7.44) s'écrit

$$\partial_{M^2} Z_1^c = -\frac{2me^2}{\pi^2}\int_0^{k_F} \frac{\mathsf{p}^2 d\mathsf{p}\left(k_F^2 - \mathsf{p}^2 + M^2\right)}{\left[(\mathsf{p}+k_F)^2 + M^2\right]^2\left[(\mathsf{p}-k_F)^2 + M^2\right]^2}. \tag{7.57}$$

Le membre de droite est une constante indépendante du champ u_0. Il donne donc l'évolution de la constante de couplage $\alpha_{1,0}$ qui est reliée à la masse renormalisée m_r de l'électron par $\alpha_{1,0} = m/m_r$. L'intégration sur p conduit à

$$\partial_{M^2}\alpha_{1,0} = -\frac{me^2}{8\pi^2}\left\{\frac{1}{2k_F^3}\ln\frac{M^2}{4k_F^2+M^2} + \frac{1}{k_F(4k_F^2+M^2)} + \frac{1}{k_F M^2}\right\}. \tag{7.58}$$

L'intégration sur M^2 de M^2_{init} à $\epsilon \to 0$ donne l'expression de la constante de couplage à l'ordre d'une boucle

$$\boxed{\alpha_{1,0} = -\frac{me^2}{8\pi^2}\frac{1}{k_F}\left(2 + \lim_{\epsilon\to 0}\ln\frac{\epsilon}{4k_F^2}\right) + \mathcal{O}\left(\frac{1}{M^2_{\text{init}}}\right).} \tag{7.59}$$

Lorsque $\epsilon \to 0$, $\alpha_{1,0} \to \infty$. Remarquons cependant que cette divergence n'est pas due à $M^2_{\text{init}} \to \infty$. Une telle divergence aurait mis en défaut la méthode employée. Les résultats à l'ordre d'une boucle doivent effectivement être indépendants de la masse initiale du photon qui n'est qu'un paramètre servant à engendrer les fluctuations quantiques.

La divergence logarithmique de $\alpha_{1,0}$ est donc le résultat d'un calcul à une boucle et non une incohérence de la théorie. Elle signifie que la masse effective de l'électron est nulle. Évidemment, il est connu expérimentalement que la masse de l'électron n'est pas nulle, mais ce résultat provient d'une théorie développée à l'ordre d'une boucle. Nous savons qu'en théorie de perturbation usuelle, l'approximation Hartree-Fock conduit à une masse effective m^* nulle [66, p. 95]. Cette masse effective de l'électron est évaluée par

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{k_F}\left.\frac{\partial\epsilon_k}{\partial k}\right|_{k_F}, \tag{7.60}$$

où

$$\epsilon_k = \frac{k^2}{2m} - \frac{e^2 k_F}{2\pi}\left[2 + \frac{k_F^2 - k^2}{k k_F}\ln\left|\frac{k+k_F}{k-k_F}\right|\right]. \tag{7.61}$$

L'inverse de m^* s'écrit donc, à l'approximation Hartree-Fock (HF),

$$\frac{1}{m^*} = \frac{1}{m} + \frac{e^2}{\pi}\left[\frac{1}{k_F} - \frac{1}{k_F}\lim_{k\to k_F}\ln\frac{k-k_F}{2k_F}\right]. \tag{7.62}$$

La divergence logarithmique apparaissant dans $\alpha_{1,0}$ est du même type que celle obtenue à l'approximation Hartree-Fock. Les expressions analytiques de m^* et m_r sont les mêmes à un facteur 4π près.

$$\frac{1}{m_r} = \frac{4\pi}{m^*}.$$

Le facteur 4π est le fait de la convention choisie en (7.19). La divergence de (7.62) indique que l'approximation HF n'est pas appropriée pour la manipulation des interactions de longue portée. À cette approximation, l'électron interagit avec un champ moyen représentant la présence des autres électrons, mais cette approximation est trop grossière pour rendre compte du fait que les autres électrons suivent l'électron et provoque l'effet d'écran. En théorie des perturbations habituelle, la prise en compte de cet effet d'écran est obtenue en resommant une autre série de diagrammes (Random Phase Approximation) au-delà l'approximation HF. L'effet de la resommation RPA est d'écranter l'interaction de Coulomb en introduisant une longueur d'écran dans le potentiel effectif, éliminant ainsi la divergence infrarouge (IR). Dans notre approche, cet effet d'écran intervient au niveau du photon qui transmet l'interaction de Coulomb. Le photon doit acquérir une masse (masse de Thomas-Fermi) rendant le propagateur convergent dans le domaine IR.

Pour U_1, l'équation (7.45), à l'approximation d'une boucle, conduit à

$$\partial_{M^2} U_1 = -\frac{e^2}{2\pi^2} \int_0^{k_F} \frac{\mathsf{p}^2 d\mathsf{p}}{[(\mathsf{p}+k_F)^2 + M^2]\,[(\mathsf{p}-k_F)^2 + M^2]}. \tag{7.63}$$

Le membre de droite de cette équation est indépendant du champ u_0. Par conséquent, les constantes de couplage $g_{1,n} \equiv U_1^{(n)}(\bar{u})\Big|_{\bar{u}=0}$, $n \geq 1$, sont toutes nulles à l'approximation d'une boucle. Rappelons qu'il n'existe pas de constante de couplage $g_{1,0}$ (cf. les relations (7.32)).

Hormis pour la constante de couplage $g_{2,2}$ qui devrait être non nulle, l'approximation à l'ordre d'une boucle redonne bien les résultats attendus par la théorie des perturbations. Pour atteindre le régime non perturbatif, il faut se donner un nombre n fini de constantes de couplage $g_{i,n}$ $(i = 1{,}2)$ et $\alpha_{i,n}$ $(i = 0{,}1{,}2)$, puis obtenir les équations d'évolution associées par dérivations successives des constantes de renormalisation. Ces équations d'évolution doivent ensuite être résolues numériquement. Mais avant cela, il faut introduire les fluctuations du champ de photons pour obtenir les équations d'évolution donnant l'effet d'écran de l'interaction de Coulomb.

7.7 Fluctuations du champ de photons

Dans le développement du champ $\bar{u}(x) = u_0 + \eta(x)$, η représente les fluctuations du champ $\bar{u}$. D'une façon générale, une fonctionnelle F de $\bar{u}$ se développe autour de sa valeur pour le champ homogène u_0 selon

$$F[\bar{u}] = F[u_0] + \int_z \eta(z)\, \frac{\delta F[\bar{u}]}{\delta \bar{u}(z)}\Bigg|_{\bar{u}=u_0} + \frac{1}{2}\int_z\int_{z'} \eta(z)\eta(z')\, \frac{\delta^2 F[\bar{u}]}{\delta \bar{u}(z)\delta \bar{u}(z')}\Bigg|_{\bar{u}=u_0} + \cdots. \tag{7.64}$$

Dans le cas où F est une fonctionnelle de $\bar{u}$ seulement, le deuxième terme du membre de droite est nul puisque[4] $\int_z \eta(z) = 0$ et que $\frac{\delta F[\bar{u}]}{\delta \bar{u}(z)}$ est calculé en $\bar{u} = u_0$, *i.e.* est indépendant de z. Cependant, dans le développement en puissances de η de l'équation d'évolution (7.33), il faut faire un développement de l'action effective et de sa dérivée seconde qui dépendent toutes deux non seulement de $\bar{u}$ mais aussi de $\bar{\psi}^\dagger$ et de $\bar{\psi}$. La présence des champs électroniques dans l'action effective empêche cette simplification du développement (7.64) et il faudra tenir compte de ce terme linéaire dans la fluctuation.

7.7.1 Développement de l'action effective

Nous cherchons à déterminer l'évolution de Γ à partir d'un développement de $\partial_{M^2}\Gamma$ au deuxième ordre dans les fluctuations du champ $\bar{u}$. Dans ce paragraphe, nous évaluons le membre de

4. Dans l'espace de Fourier, $\bar{u}(p) = u_0 \delta p{,}0 + \eta(p)$. Par transformée de Fourier $\int_z \eta(z) = \int_p \delta_{p,0}\eta(p) = \eta(p=0)$. Or u_0 est choisi tel que $u_0 = \bar{u}(p=0)$, d'où $\eta(p=0) = 0$.

gauche de l'équation (7.33). Le développement de l'action effective s'écrit

$$\Gamma[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}] = \Gamma[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},u_0] + \int_z \eta(z) \left.\frac{\delta\Gamma[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}]}{\delta\bar{u}(z)}\right|_{\bar{u}=u_0} + \frac{1}{2}\int_z\int_{z'} \eta(z)\eta(z') \left.\frac{\delta^2\Gamma[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}]}{\delta\bar{u}(z)\delta\bar{u}(z')}\right|_{\bar{u}=u_0} + \mathcal{O}(\eta^3). \quad (7.65)$$

Le premier terme de ce développement a déjà été évalué et est donné par l'équation (7.34). Le deuxième terme est

$$\int_z \eta(z)\Gamma^{(1)}_{\bar{u}_z} = \frac{1}{\sqrt{VT}}\sum_{q_1}\sum_{q_2}\sum_{q_3} \eta(q_1)\bar{\psi}^\dagger(q_2)(Z_0^{(1)}\omega_{q_3} - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{q_3}} + U_1^{(1)})\bar{\psi}(q_3)\delta_{q_1-q_2+q_3}.$$

La partie contenant U_2 a disparu car $\eta(q_1=0)=0$. Le terme du 2$^{\mathrm{e}}$ ordre vaut

$$\begin{aligned}\frac{1}{2}\int_z\int_{z'} \eta(z)\eta(z')\Gamma^{(2)}_{\bar{u}_z,\bar{u}_{z'}} &\equiv \frac{1}{2}\int_z\int_{z'} \eta(z)\eta(z') \left.\frac{\delta^2\Gamma[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}]}{\delta\bar{u}(z)\delta\bar{u}(z')}\right|_{\bar{u}=u_0}\\
&= \frac{1}{2VT}\sum_{\{q_i\}_{i=1..4}} \eta(q_1)\eta(q_2)\bar{\psi}^\dagger(q_3)(Z_0^{(2)}\omega_{q_4} - Z_1^{(2)}\xi_{\mathbf{q_4}} + U_1^{(2)})\bar{\psi}(q_4)\delta_{q_1+q_2-q_3+q_4}\\
&\quad - \frac{1}{2}\sum_q (Z_2\mathbf{q}^2 + U_2^{(2)})\eta(-q)\eta(q). \end{aligned} \quad (7.66)$$

La partie bosonique apparaît seulement dans le terme quadratique dans les fluctuations. Par contre, la partie fermionique apparaît aussi au 1$^{\mathrm{er}}$ ordre dans les fluctuations.

Ceci termine le calcul du développement du membre de gauche de l'équation d'évolution de l'action effective. Il reste maintenant à développer le membre de droite de (7.33). Dans un premier temps, chaque élément de la matrice des vertex propres est développé au 2$^{\mathrm{e}}$ ordre dans les fluctuations, puis celle-ci est inversée par un développement autour de sa diagonale comme en (7.38). Ensuite, les expressions des éléments de matrice correspondant au propagateur du photon et de l'électron sont extraites de ce développement.

7.7.2 Développement du vertex propre à deux points

Inversion de la matrice des vertex propres

Nous devons évaluer les termes du développement

$$\Gamma^{(2)}[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}] = \Gamma^{(2)}[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},u_0] + \int_z \eta(z) \left.\frac{\delta\Gamma^{(2)}[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}]}{\delta\bar{u}(z)}\right|_{\bar{u}=u_0} + \frac{1}{2}\int_z\int_{z'} \eta(z)\eta(z') \left.\frac{\delta^2\Gamma^{(2)}[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}]}{\delta\bar{u}(z)\delta\bar{u}(z')}\right|_{\bar{u}=u_0} + \cdots .$$

où $\Gamma^{(2)}$ est la matrice 3×3 de l'équation (7.25). Cela nous fait 9×2 termes à évaluer puisque les 9 premiers sont déjà connus (équations (7.35)). La matrice décrivant les termes linéaires et quadratiques en η s'écrit

$$\Gamma_{\mathrm{fl}} \equiv \int_z \eta(z) \left.\frac{\delta\Gamma^{(2)}[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}]}{\delta\bar{u}(z)}\right|_{\bar{u}=u_0} + \frac{1}{2}\int_z\int_{z'} \eta(z)\eta(z') \left.\frac{\delta^2\Gamma^{(2)}[\bar{\psi}^\dagger,\bar{\psi},\bar{u}]}{\delta\bar{u}(z)\delta\bar{u}(z')}\right|_{\bar{u}=u_0} = \begin{pmatrix} A & B & C\\ D & E & F\\ G & H & I\end{pmatrix} \quad (7.67)$$

L'inversion de la matrice des vertex propres $\Gamma^{(2)}[\bar{u}] \approx \Gamma_{\text{d}} + \Gamma_{\text{nd}} + \Gamma_{\text{fl}}$ conduit à la matrice des propagateurs exprimée sous la forme d'une série

$$
\begin{aligned}
W^{(2)} = \Gamma_{\text{d}}^{-1} - \Gamma_{\text{d}}^{-1}\Gamma_{\text{nd}}\Gamma_{\text{d}}^{-1} + \Gamma_{\text{d}}^{-1}\Gamma_{\text{nd}}\Gamma_{\text{d}}^{-1}\Gamma_{\text{nd}}\Gamma_{\text{d}}^{-1} \\
\underbrace{-\Gamma_{\text{d}}^{-1}\Gamma_{\text{fl}}\Gamma_{\text{d}}^{-1}}_{\mathfrak{W}_1} + \underbrace{\Gamma_{\text{d}}^{-1}\Gamma_{\text{fl}}\Gamma_{\text{d}}^{-1}\Gamma_{\text{fl}}\Gamma_{\text{d}}^{-1}}_{\mathfrak{W}_2} \\
+ \underbrace{\Gamma_{\text{d}}^{-1}\Gamma_{\text{nd}}\Gamma_{\text{d}}^{-1}\Gamma_{\text{fl}}\Gamma_{\text{d}}^{-1}}_{\mathfrak{W}_3} + \underbrace{\Gamma_{\text{d}}^{-1}\Gamma_{\text{fl}}\Gamma_{\text{d}}^{-1}\Gamma_{\text{nd}}\Gamma_{\text{d}}^{-1}}_{\mathfrak{W}_4} - \cdots
\end{aligned}
\tag{7.68}
$$

Nous avons introduit les notations $\mathfrak{W}_1, \mathfrak{W}_2, \mathfrak{W}_3$ et $\mathfrak{W}_4$ pour les matrices décrivant les fluctuations qui proviennent du développement de la matrice $W^{(2)}$.

Nous cherchons ici les équations d'évolution des constantes de renormalisation Z_2 et U_2 seulement ; les équations d'évolution de Z_0, Z_1 et U_1 ont déjà été obtenues à l'approximation du champ homogène. Il faut donc extraire les termes bosoniques du développement (7.68). Les matrices $\mathfrak{W}_3$ et $\mathfrak{W}_4$ peuvent déjà être omises car Γ_{nd} ne contient que des éléments de matrice fermioniques. Il reste les matrices $\mathfrak{W}_1$ et $\mathfrak{W}_2$. Dans chacune de ces matrices, il faut extraire les deux éléments de matrice associés au photon et à l'électron. Ensuite, il faut prendre la partie bosonique de ces éléments de matrice. En identifiant ces termes bosoniques à ceux de l'équation (7.66), nous obtenons une équation d'évolution au 2ᵉ ordre dans les fluctuations

$$
\begin{aligned}
-\frac{1}{2}\partial_{M^2}\sum_q (Z_2\mathbf{q}^2 + U_2^{(2)})\eta(-q)\eta(q) = \\
if'(M^2)Tr\left[\xi_{\mathbf{p}}\left[\mathfrak{W}_1 + \mathfrak{W}_2\right]^b_{2,2}\right] - \frac{i}{2}Tr\left[\left[\mathfrak{W}_1 + \mathfrak{W}_2\right]^b_{3,3}\right].
\end{aligned}
\tag{7.69}
$$

L'indice b signale l'absence des termes fermioniques.

Expressions générales des éléments de matrice de $\mathfrak{W}_1$ et $\mathfrak{W}_2$

Les éléments de matrice associés au photon sont

$$
\left[\mathfrak{W}_1\right]_{3,3} = -\frac{1}{Z_2\mathbf{p}_1^2 + U_2^{(2)}} I_{p_1,p_2} \frac{1}{Z_2\mathbf{p}_2^2 + U_2^{(2)}},
\tag{7.70}
$$

au premier ordre dans le développement de $W^{(2)}$ et

$$
\begin{aligned}
\left[\mathfrak{W}_2\right]_{3,3} = -\sum_q \frac{1}{Z_2\mathbf{p}_1^2 + U_2^{(2)}} G_{p_1,q} \frac{1}{Z_0\omega_q - Z_1\xi_{\mathbf{q}} + U_1} C_{q,p_2} \frac{1}{Z_2\mathbf{p}_2^2 + U_2^{(2)}} \\
+ \sum_q \frac{1}{Z_2\mathbf{p}_1^2 + U_2^{(2)}} H_{p_1,q} \frac{1}{Z_0\omega_q - Z_1\xi_{\mathbf{q}} + U_1} F_{q,p_2} \frac{1}{Z_2\mathbf{p}_2^2 + U_2^{(2)}} \\
- \sum_q \frac{1}{Z_2\mathbf{p}_1^2 + U_2^{(2)}} I_{p_1,q} \frac{1}{Z_2\mathbf{q}^2 + U_2^{(2)}} I_{q,p_2} \frac{1}{Z_2\mathbf{p}_2^2 + U_2^{(2)}},
\end{aligned}
\tag{7.71}
$$

à l'ordre suivant.

Les éléments de matrice associés à l'électron sont

$$
\left[\mathfrak{W}_1\right]_{2,2} = -\frac{1}{Z_0\omega_{p_1} - Z_1\xi_{\mathbf{p_1}} + U_1} E_{p_1,p_2} \frac{1}{Z_0\omega_{p_2} - Z_1\xi_{\mathbf{p_2}} + U_1}
\tag{7.72}
$$

et

$$\begin{aligned}\left[\mathfrak{W}_2\right]_{2,2} &= \sum_q \frac{1}{Z_0\omega_{p_1} - Z_1\xi_{\mathbf{p_1}} + U_1}\frac{E_{p_1,q}E_{q,p_2}}{Z_0\omega_q - Z_1\xi_{\mathbf{q}} + U_1}\frac{1}{Z_0\omega_{p_2} - Z_1\xi_{\mathbf{p_2}} + U_1} \\ &- \sum_q \frac{1}{Z_0\omega_{p_1} - Z_1\xi_{\mathbf{p_1}} + U_1}F_{p_1,q}\frac{1}{Z_2\mathbf{q}^2 + U_2^{(2)}}H_{q,p_2}\frac{1}{Z_0\omega_{p_2} - Z_1\xi_{\mathbf{p_2}} + U_1}. \qquad (7.73)\end{aligned}$$

Partie bosonique des éléments de matrice de $\mathfrak{W}_1$ et $\mathfrak{W}_2$

Contribution du photon Les termes C, F, G et H de l'équation (7.71) contiennent tous au moins un champ fermionique. Les seuls termes bosoniques se trouvent dans I. La partie bosonique de la trace de $\left[\mathfrak{W}_1\right]_{3,3}$ est

$$-Tr\left[\mathfrak{W}_1\right]^b_{3,3} = -\frac{1}{2}\sum_p \int_q \eta(-q)\frac{Z_2^{(2)}\left[\mathbf{q}^2 + \mathbf{p}^2\right] + U_2^{(4)}}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^2}\eta(q), \qquad (7.74)$$

où l'indice b signifie que seule la partie bosonique de la trace est prise. La partie bosonique de $\left[\mathfrak{W}_2\right]_{3,3}$ est

$$Tr\left[\mathfrak{W}_2\right]^b_{3,3} = -\sum_p \int_q \eta(-q)\frac{(Z_2^{(1)}\left[\mathbf{p}^2 + \mathbf{q}^2 - \mathbf{pq}\right] + U_2^{(3)})^2}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^2(Z_2(\mathbf{p}-\mathbf{q})^2 + U_2^{(2)})}\eta(q) + \mathcal{O}(\eta^3). \qquad (7.75)$$

Les termes d'ordre supérieur à η^2 sont négligés car le développement de l'action effective est tronqué à cet ordre (équation (7.65)). Pour trouver l'évolution des constantes de renormalisation Z_2 et U_2, il faut développer l'expression précédente en puissances de q. Laissant de côté la contribution des électrons pour le moment, nous identifions les parties bosoniques pour les différentes puissances de q.

À l'ordre q^0, l'identification des termes de l'équation (7.66) avec ceux des équations (7.74) et (7.75) s'écrit

$$\partial_{M^2}U_2^{p(2)} = i\int_p \frac{(Z_2^{(1)}\mathbf{p}^2 + U_2^{(3)})^2}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^3} - \frac{i}{2}\int_p \frac{Z_2^{(2)}\mathbf{p}^2 + U_2^{(4)}}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^2}. \qquad (7.76)$$

L'indice p vient des notations de l'annexe J et signifie que seule la contribution du propagateur du photon est considérée. À cet ordre en $\mathbf{q}$, le champ $\bar{u}$ est homogène et nous retrouvons la même équation d'évolution des constantes de couplage que ce qu'a donné le calcul avec le champ homogène de la section 7.6. Le calcul de la dérivée seconde par rapport au champ $\bar{u}$ du propagateur intervenant dans l'équation (7.41) montre la cohérence entre ces deux équations.

À l'ordre $\mathbf{q}$, le membre de gauche est nul, et celui de droite est

$$i\int_p \frac{Z_2^{(1)}\mathbf{p}^2 + U_2^{(3)}}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^3}\left(Z_2^{(1)} - \frac{(Z_2^{(1)}\mathbf{p}^2 + U_2^{(3)})Z_2}{Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)}}\right)\mathbf{pq} = 0.$$

Ce terme est également nul puisque l'intégrale sur l'impulsion est impaire.

À l'ordre $\mathbf{q}^2$, nous avons l'évolution de la constante de renormalisation de l'énergie cinétique du photon.

$$
\begin{aligned}
\partial_{M^2} Z_2^p = -\frac{i}{2}\int_p \frac{Z_2^{(2)}}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^2} \\
+\frac{i}{2}\int_p \frac{1}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^3}\Bigg\{ 2(Z_2^{(1)}\mathbf{p}^2 + U_2^{(3)}) + (Z_2^{(1)})^2 \mathsf{p}^2\cos^2\theta \\
-\frac{(Z_2^{(1)}\mathbf{p}^2 + U_2^{(3)})^2 Z_2}{Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)}} - 4\frac{(Z_2^{(1)}\mathbf{p}^2 + U_2^{(3)})^2 (Z_2^{(1)}U_2^{(2)} - Z_2U_2^{(3)}) Z_2\mathsf{p}^2\cos^2\theta}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^2}\Bigg\}.
\end{aligned}
\tag{7.77}
$$

Contribution de l'électron Les fluctuations de $Tr[\xi_{\mathbf{p}} W^{(2)}_{j,j^\dagger}]$ données par la trace de l'équation (7.72) multipliée par $\xi_{\mathbf{p}}$, *i.e.*

$$
-Tr\left[\xi_{\mathbf{p}}\left[\mathfrak{W}_1\right]_{2,2}\right] = \frac{1}{2}\int_p \frac{\xi_{\mathbf{p}} Z_0^{(2)}\omega_p}{(Z_0\omega_p - Z_1\xi_{\mathbf{p}} + U_1)^2}\sum_q \eta(-q)\eta(q). \tag{7.78}
$$

Les termes indépendants de ω_p dans $E_{p,p}$ donnent une contribution nulle due à l'intégration sur ω_p du carré du propagateur de l'électron. Le premier ordre dans les fluctuations de la contribution de l'électron s'écrit, de façon explicite,

$$
\begin{aligned}
if'(M^2)Tr\left[\xi_{\mathbf{p}}\left[\mathfrak{W}_1\right]_{2,2}\right] &= \frac{1}{2}f'(M^2)\frac{Z_0^{(2)}}{Z_0^2}\int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\xi_{\mathbf{p}}\Theta(-\xi_{\mathbf{p}})\sum_q \eta(-q)\eta(q) \\
&= -f'(M^2)\frac{1}{30\pi^2}\frac{Z_0^{(2)}}{Z_0^2}\frac{k_F^5}{2m}\sum_q \eta(-q)\eta(q).
\end{aligned}
\tag{7.79}
$$

L'ordre suivant dans le développement de $W^{(2)}$ donne

$$
\begin{aligned}
Tr\left[\xi_{\mathbf{p}}\left[\mathfrak{W}_2\right]^b_{2,2}\right] = \sum_p \xi_{\mathbf{p}}\int_q \eta(-q)\frac{(Z_0^{(1)}\omega_p - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p}} + U_1^{(1)})}{(Z_0\omega_p - Z_1\xi_{\mathbf{p}} + U_1)^2} \\
\times\frac{(Z_0^{(1)}(\omega_p+\omega_q) - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + U_1^{(1)})}{(Z_0(\omega_p+\omega_q) - Z_1\xi_{\mathbf{p}+\mathbf{q}} + U_1)}\eta(q).
\end{aligned}
\tag{7.80}
$$

La difficulté avec cette dernière équation est qu'elle n'est pas analytique en $q = 0$. Nous le verrons un peu plus loin, à l'approximation d'une boucle, lors du calcul du diagramme de polarisation.

7.7.3 Équations d'évolution des constantes de renormalisation du photon

Rassemblant les équations (7.66), (7.76), (7.79) et (7.80), l'équation d'évolution de U_2 s'écrit

$$\boxed{\begin{aligned}\partial_{M^2} U_2^{c(2)} = \;& i\int_p \frac{(Z_2^{(1)}\mathbf{p}^2 + U_2^{(3)})^2}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^3} - \frac{i}{2}\int_p \frac{Z_2^{(2)}\mathbf{p}^2 + U_2^{(4)}}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^2} \\ & -f'(M^2)\frac{k_F^5}{30\pi^2 m}\frac{Z_0^{(2)}}{Z_0^2} \\ & +if'(M^2)\lim_{q\to 0}\int_p \xi_{\mathbf{p}} \frac{(Z_0^{(1)}\omega_p - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p}} + U_1^{(1)})}{(Z_0\omega_p - Z_1\xi_{\mathbf{p}} + U_1)^2} \\ & \qquad\qquad \times\frac{(Z_0^{(1)}(\omega_p+\omega_q) - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p+q}} + U_1^{(1)})}{(Z_0(\omega_p+\omega_q) - Z_1\xi_{\mathbf{p+q}} + U_1)}.\end{aligned}} \tag{7.81}$$

L'équation d'évolution de Z_2 s'obtient à partir des équations (7.77) et (7.80).

$$\boxed{\begin{aligned}\partial_{M^2} Z_2 = \;& -\frac{i}{2}\int_p \frac{Z_2^{(2)}}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^2} \\ & +\frac{i}{2}\int_p \frac{1}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^3}\Bigg\{2(Z_2^{(1)}\mathbf{p}^2 + U_2^{(3)}) + (Z_2^{(1)})^2\mathsf{p}^2\cos^2\theta \\ & -\frac{(Z_2^{(1)}\mathbf{p}^2 + U_2^{(3)})^2 Z_2}{Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)}} \\ & -4\frac{(Z_2^{(1)}\mathbf{p}^2 + U_2^{(3)})^2(Z_2^{(1)}U_2^{(2)} - Z_2U_2^{(3)})Z_2\mathsf{p}^2\cos^2\theta}{(Z_2\mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^2}\Bigg\} \\ & +if'(M^2)\lim_{q\to 0}\frac{d}{d(\mathsf{q}^2)}\int_p \xi_{\mathbf{p}} \frac{(Z_0^{(1)}\omega_p - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p}} + U_1^{(1)})}{(Z_0\omega_p - Z_1\xi_{\mathbf{p}} + U_1)^2} \\ & \qquad\qquad \times\frac{(Z_0^{(1)}(\omega_p+\omega_q) - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p+q}} + U_1^{(1)})}{(Z_0(\omega_p+\omega_q) - Z_1\xi_{\mathbf{p+q}} + U_1)}.\end{aligned}} \tag{7.82}$$

7.7.4 Constantes de couplage du photon

Comme dans le cas des électrons (§ 7.6.3), ces équations d'évolution des constantes de renormalisation, données par (7.81) et (7.82), sont les génératrices des fonctions β et γ du photon. Celles-ci s'écrivent en effet

$$\beta_n^p(M^2) \equiv M^2\partial_{M^2} g_{2,n} = M^2\partial_{M^2} U_2^{c(n)}, \tag{7.83}$$

et

$$\gamma_n^p(M^2) \equiv M^2\partial_{M^2}\alpha_{2,n} = M^2\partial_{M^2} Z_2^{(n)}, \tag{7.84}$$

où l'exposant p associe ces fonctions au photon. Les équations différentielles obtenues pour le photon sont rassemblées avec les équations (7.46), (7.47) et (7.48) de l'électron pour former un système d'équations différentielles fermé. Répétons encore une fois que n est tronqué à une valeur finie pour pouvoir résoudre ce système de façon numérique. Cette troncature suppose que les constantes de couplage négligées sont inessentielles, *i.e.* se renormalisent vers 0.

7.7.5 Approximation à l'ordre d'une boucle

À l'approximation d'une boucle, les trois premiers termes de l'équation d'évolution (7.81) de U_2 sont nuls. Il ne reste que le dernier terme. Un développement en puissances de $\mathbf{q}$ permet d'évaluer l'équation d'évolution (7.69) à l'ordre d'une boucle. Mais il doit être fait seulement après intégration sur la fréquence ω_p (sinon l'équation d'évolution est celle de l'équation (7.41) et l'effet d'écran est perdu). Celle-ci est faite dans l'annexe L et conduit à

$$-\frac{1}{2}\partial_{M^2}(Z_2\mathbf{q}^2 + U_2^{(2)}) = \frac{f'(M^2)}{f(M^2)^2}\frac{me^2k_F}{4\pi^2}g\left(\frac{\mathsf{q}}{k_F}\right), \tag{7.85}$$

où la fonction g est définie par

$$g(x) = \frac{1}{2} - \frac{1}{2x}\left(1 - \frac{x^2}{4}\right)\ln\left|\frac{1-\frac{x}{2}}{1+\frac{x}{2}}\right|.$$

L'intégration sur M^2 est triviale

$$\int_{M^2_{\text{init}}}^0 d(M^2)\frac{f'(M^2)}{f(M^2)^2} = -1 + \mathcal{O}\left(\frac{1}{f(M^2_{\text{init}})}\right),$$

et permet d'écrire

$$Z_2\mathbf{q}^2 + U_2^{(2)} = \frac{me^2k_F}{4\pi^2}\left(1 - \frac{k_F}{q}\left[1 - \frac{1}{4}\left(\frac{q}{k_F}\right)^2\right]\ln\left|\frac{k_F - \mathsf{q}/2}{k_F + \mathsf{q}/2}\right|\right). \tag{7.86}$$

Nous reconnaissons la fonction de Lindhard évaluée pour une fréquence nulle[32]. Le développement du gradient implique l'identification des puissances de q dans les deux membres de l'équation d'évolution. Le membre de droite doit donc être développé en puissances de q.

– À l'ordre q^0, la constante de renormalisation U_2^c, à l'approximation d'une boucle, est

$$\frac{1}{2}U_2^{c(2)} = \frac{mk_Fe^2}{4\pi^2} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{f(M^2_{\text{init}})}\right),$$

Le terme de masse du photon est alors

$$\boxed{g_{2,2} = U_2^{(2)}(\bar{u} = 0) = \frac{mk_Fe^2}{2\pi^2}.} \tag{7.87}$$

Rappelons que nous travaillons avec des électrons sans spin. La prise en compte du spin produirait un facteur 2 devant le diagramme de polarisation doublant ainsi la masse de Thomas-Fermi ;

– À l'ordre q^2,

$$-\frac{1}{2}Z_2 = \frac{me^2}{3(4\pi)^2k_F} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{f(M^2_{\text{init}})}\right).$$

En terme des constantes de couplage, la constante de couplage de l'énergie cinétique du photon est

$$\boxed{\alpha_{2,0} = -\frac{me^2}{24\pi^2k_F}.} \tag{7.88}$$

Les autres constantes de couplage restent nulles à cet ordre d'approximation.

Les valeurs obtenues pour $g_{2,2}$ et $\alpha_{2,0}$ correspondent aux valeurs entrant dans la renormalisation du potentiel de Coulomb, à l'approximation RPA dans le modèle du gaz d'électrons [32]. La constante de couplage $g_{2,2}$ obtenue par le développement à une boucle correspond à la masse acquise par le photon, qui conduit à l'écrantage du potentiel de Coulomb.

7.8 Discussion

L'approximation du champ homogène est suffisante pour trouver les équations d'évolution des constantes de renormalisation Z_0, Z_1, U_1 de l'électron car l'identification de ces constantes de renormalisation se fait à l'aide d'un développement en puissances de $\xi_{\mathbf{q}}$ et non de $\mathbf{q}$. Il n'y a pas de problème de non-analyticité en $q = 0$. Seules les constantes de renormalisation Z_2 et U_2 du photon sont concernées par cette difficulté en $q = 0$.

Dans la méthode proposée dans ce chapitre, un point fixe signifie que les constantes de couplage sont invariantes lorsque l'action de suppression change. Cette variation de l'action de suppression n'a rien à voir avec un changement d'échelle, mais représente un changement interne du système (changement de la masse du photon et de l'énergie cinétique de l'électron). Les points fixes obtenus par cette méthode ne sont *a priori* pas les mêmes que ceux obtenus par changement d'échelle ; c.-à-d. que les constantes de couplage invariantes lors d'un changement du paramètre M n'ont pas les mêmes valeurs que les constantes de couplage invariantes d'échelle. Les points fixes infrarouges ne sont pas universels [60]. L'approche développée ici paraît donc moins appropriée que l'approche traditionnelle du groupe de renormalisation pour la recherche de points fixes. L'intérêt de cette approche se trouve dans la possibilité de dériver une action effective $\Gamma_{M=0}$ en partant de conditions initiales données $\Gamma_{M=\infty}$. Lorsque le système évolue de $M = \infty$ à $M = 0$, les fluctuations quantiques engendrées par l'interaction de Coulomb deviennent de plus en plus importantes. En partant des constantes de couplage initiales provenant de l'action microscopique, l'intégration des équations de flot conduit alors aux constantes de couplage renormalisées qui décrivent le système physique contenant toutes les fluctuations quantiques.

Durant l'évolution, la trajectoire de l'action effective peut rencontrer des bifurcations conduisant à des points fixes différents. L'évolution vers un point fixe ou un autre peut dépendre des conditions initiales de l'action. Dans le cas des systèmes d'électrons corrélés en l'absence de désordre, le système peut évoluer vers un cristal de Wigner ou vers le liquide de Fermi selon la densité d'électrons, contrôlée par le potentiel chimique μ [69]. Le cristal de Wigner apparaît lorsque la densité d'électrons est suffisamment faible pour que l'interaction de Coulomb fixe les électrons. Les électrons se repoussent mutuellement et prennent une configuration ordonnée stable selon un réseau régulier. Cette transition vers un régime où les électrons perdent leur mobilité à cause de l'interaction de Coulomb est connue sous le nom de transition de Mott [48]. L'approximation d'une boucle ne permet pas de rendre compte de l'existence ou non du cristal de Wigner, même si le potentiel chimique est très faible dans l'action initiale. Ceci se comprend aisément d'un point de vue diagrammatique, puisque la description des gaz d'électrons dilués est faite à l'aide des diagrammes en échelles [66], qui contiennent plus d'une boucle. Il est donc nécessaire d'utiliser pleinement la possibilité, qu'offre le groupe de renormalisation, d'atteindre les régimes non perturbatifs pour obtenir une description du cristal de Wigner.

Conclusion

Dans la première partie de la thèse, nous avons présenté une approche microscopique pour décrire la propagation d'une onde (acoustique, électromagnétique en dimension 2) ou d'une particule (électron, atome) dans les systèmes désordonnés constitués de centres diffuseurs de taille finie. Notre approche est basée sur le formalisme de diffusion multiple de Watson [98], qui est un développement perturbatif dans lequel chaque terme représente une séquence de diffusion particulière. La particularité essentielle de cette approche réside dans la taille finie des potentiels. Du fait de cette taille finie, la quantité fondamentale entrant dans les calculs est la matrice de diffusion $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie associée à un diffuseur individuel.

Nous avons utilisé notre approche dans l'étude de la diffusion d'un électron par un système désordonné, à 3 et à 2 dimensions, dont les diffuseurs sont modélisés par des potentiels de type sphère dure et disque dur respectivement. Pour ces types de potentiels, la matrice de diffusion $\mathbf{t}$ hors couche d'énergie est obtenue de façon analytique et permet de calculer la contribution de chaque séquence de diffusion élémentaire intervenant dans la fonction d'onde ou dans le propagateur décrivant le comportement de l'électron.

Dans un premier temps, nous nous sommes placés dans la limite où la portée du potentiel est très petite devant la longueur d'onde de l'électron. Nous avons calculé la moyenne d'ensemble du propagateur et obtenu l'énergie propre associée à ce propagateur à l'ordre 2 dans la densité des diffuseurs. La taille finie des diffuseurs conduit à une énergie propre dépendant de l'impulsion même au premier ordre en densité, alors que ce n'est pas le cas avec l'approximation des diffuseurs ponctuels. Nous avons montré que les effets hors couche d'énergie apportent une correction dans l'énergie propre du même ordre de grandeur que les corrections dues aux ondes partielles d'ordre supérieur. La prise en compte de la diffusion multiple entre deux centres diffuseurs nous a permis de montrer un comportement des corrections au libre parcours moyen élastique de Boltzmann très différent de celui obtenu avec l'approximation des diffuseurs ponctuels.

Dans un second temps, nous avons fait le lien entre l'approche perturbative de la série de Watson et l'approche KKR [22] pour les systèmes bidimensionnels. La resommation exacte de toutes les séquences de diffusion non moyennées fournit une expression analytique compacte de la fonction d'onde. Cette expression a l'avantage de permettre une étude numérique complète de la diffusion multiple dans un système particulier, et ceci quelle que soit l'énergie de l'électron, alors que la série de Watson nécessiterait une troncature dans le nombre de diffusions en plus d'une troncature dans le nombre d'ondes partielles. Nous nous sommes intéressés à la fonction d'onde et au comportement de la section efficace de diffusion de systèmes comportant un grand nombre de diffuseurs lors de la transition entre le régime balistique (peu de diffusions) et diffusif (diffusions multiples). Nous avons constaté que la taille du potentiel y joue un rôle important.

Cette approche de diffusion multiple permet différentes extensions. D'un point de vue analytique, un calcul de corrections à la conductivité des systèmes électroniques au deuxième ordre en densité est envisageable. Pour cela, les séquences de diffusion faisant intervenir deux diffuseurs doivent être resommées dans la fonction de corrélation à deux particules (comme cela a été fait pour le calcul des corrections au libre parcours moyen dues à la diffusion sur deux centres). D'un point de vue numérique, plusieurs voies sont envisageables, comme par exemple l'étude du passage du régime diffusif vers le régime localisé. L'étude des effets engendrés par les ondes partielles au-delà de l'onde s est une autre application possible. Il est également possible de généraliser le programme informatique de façon à incorporer des potentiels de hauteur finie (marches) ou de profondeur finie (puits), ces derniers étant d'autant plus intéressants qu'ils peuvent engendrer des effets de résonance. Les potentiels peuvent avoir des tailles différentes et on peut envisager de considérer des systèmes comportant un mélange de divers types de potentiels avec des tailles aléatoires.

L'utilisation de la série de Watson pour la description des systèmes désordonnés se limite essentiellement au régime diffusif et la prise en compte des interactions entre électrons par cette approche est difficilement réalisable. Une approche non perturbative est donc préférable pour étudier la transition entre le régime diffusif et le régime localisé.

La deuxième partie de la thèse est consacrée au développement de méthodes de théorie des champs capables de traiter à la fois le désordre et l'interaction entre les électrons. Cette situation de compétition entre l'interaction des électrons avec le désordre et l'interaction de Coulomb semble jouer un rôle important dans la transition métal-isolant apparaissant dans des semi-conducteurs bidimensionnels [54]. En effet, sans l'interaction de Coulomb, la théorie prédit que ces systèmes ne possèdent pas de transition et restent toujours isolants [2]. Les approches de théorie des champs et du groupe de renormalisation sont des outils puissants pour l'étude de régimes non perturbatifs et en particulier pour l'étude des transitions. Celles qui ont été développées jusqu'à maintenant se heurtent à plusieurs difficultés. Parmi ces difficultés, une première concerne la façon d'effectuer la moyenne d'ensemble, une seconde concerne l'emploi du groupe de renormalisation pour les systèmes possédant une surface de Fermi. Nous avons proposé une alternative à la façon d'aborder chacun de ces deux problèmes.

Les approches de théorie des champs appliquées aux systèmes désordonnés utilisent couramment trois façons d'effectuer la moyenne d'ensemble : la méthode des répliques, la méthode supersymétrique et la méthode de Keldysh. La première de ces méthodes semble donner de bons résultats dans certains cas, mais elle est invalidée dans d'autres cas [94]. Il n'est cependant pas encore possible de savoir *a priori* quand elle est valide. La deuxième approche n'a pas ce problème mais c'est l'introduction de l'interaction de Coulomb qui pose problème. Enfin, l'approche de Keldysh semble prometteuse car elle a l'avantage de la méthode des répliques, à savoir qu'elle peut intégrer l'interaction de Coulomb, sans avoir son inconvénient. Cependant ces trois approches sont basées sur le même modèle, qui est un modèle « sigma non linéaire » faisant intervenir des champs matriciels bi-locaux. Or les théories des champs non locales sont en général inutilisables et il est préférable d'avoir une théorie locale, en particulier pour utiliser le groupe de renormalisation.

Nous avons construit un modèle local tenant compte du désordre qui permet de calculer des moyennes d'ensemble d'une façon différente des trois méthodes précédentes. Le désordre y est modélisé par un champ de particules (impuretés) placées sur les sites d'un réseau ; le taux d'occupation moyen des sites (rapport du nombre d'impuretés sur le nombre de sites) est supposé faible afin de décrire un système désordonné. L'interaction entre les électrons et les impuretés est locale. La moyenne est obtenue par intégration fonctionnelle sur le champ d'impuretés et à l'aide d'un opérateur de projection qui fixe la densité d'impuretés. Dans cette première étape, le modèle ne tient pas compte des interactions entre électrons. L'absence de l'interaction de Coulomb nous a permis de vérifier explicitement la correspondance entre le développement perturbatif de notre modèle et le modèle d'Edwards [27], qui est un des modèles les plus simples traitant du désordre en théorie des perturbations.

Dans le but d'intégrer les interactions entre électrons dans le modèle précédent, nous avons présenté une nouvelle approche du groupe de renormalisation permettant de traiter l'interaction de Coulomb. Alors que l'approche traditionnelle du groupe de renormalisation intègre sur les degrés de liberté les moins importants et conserve les degrés de libertés effectifs décrivant la physique, l'approche que nous proposons permet de dériver une action effective en intégrant un ensemble d'équations aux dérivées partielles couplées. Cet ensemble d'équations décrit le flot des constantes de couplage qui évoluent, non pas selon la coupure, mais selon un paramètre interne à la théorie. Le modèle étudié est local et permet ainsi l'utilisation du développement du gradient qui consiste à ne conserver dans l'action effective que les termes d'interaction entre plus proches voisins. Nous l'avons testé avec le modèle de gaz d'électrons sans désordre. Bien que l'interaction de Coulomb ne soit pas locale, la localité du modèle est imposée en introduisant un champ scalaire de photons pour rendre compte de l'interaction. Les équations de flot sont obtenues en prenant pour paramètre interne la masse du champ de photons et l'énergie cinétique de l'électron. Nous avons montré qu'un développement perturbatif permet de retrouver l'approximation RPA (*Random Phase Approximation*) qui décrit les gaz d'électrons dilués.

Les perspectives offertes par ces deux modèles sont multiples. Le modèle d'impuretés statiques a été développé dans l'objectif d'avoir une théorie locale permettant l'étude de la transition localisation-délocalisation des systèmes désordonnés en présence de l'interaction de Coulomb.

Le travail présenté a consisté à établir les bases d'une nouvelle approche pour l'étude de la transition métal-isolant récemment observée. La suite de ce travail doit regrouper l'action décrivant le désordre et celle décrivant l'interaction de Coulomb en une seule action locale. La localité de la théorie est essentielle pour l'utilisation du développement du gradient dans l'approche présentée. Les équations de flot pour les constantes de couplage peuvent être obtenues par la méthode du groupe de renormalisation en faisant varier un paramètre interne lié au champ d'impuretés (en plus de l'énergie cinétique de l'électron et de la masse du photon), puis intégrées numériquement pour obtenir l'action effective physique.

Dans un premier temps, le désordre peut être négligé et les équations d'évolution des constantes de couplage, obtenues pour le gaz d'électrons, peuvent être résolues numériquement. Selon les conditions initiales du système (valeurs des constantes de couplage nues), l'action effective résultant de l'intégration numérique peut décrire un système isolant ou un système conducteur. Elle doit permettre d'étudier la transition de Mott, qui est une transition métal-isolant engendrée par l'interaction de Coulomb.

Une autre application de cette approche pourrait consister à placer le gaz d'électrons dans un champ magnétique fort pour étudier l'effet Hall quantique.

Ce modèle peut aussi s'appliquer à l'étude de la supraconductivité en mettant une interaction attractive à la place de l'interaction de Coulomb. Les systèmes quasi-unidimensionnels sont également un domaine où il serait intéressant d'appliquer cette approche du groupe de renormalisation. Ces systèmes ont en effet un comportement particulier, et il n'est pas encore clair s'ils se comportent comme un liquide de Fermi ou liquide de Luttinger.

En conclusion, cette approche du groupe de renormalisation est prometteuse puisqu'elle permet d'envisager l'étude de nombreux systèmes.

Annexes

Annexe A

Formulaire

Les différentes sources pour ce formulaire sont [39, 67, 68, 97].

A.1 Fonctions de Bessel

Définitions

Fonction de Bessel

$$J_\nu(z) = \sum_{r=0}^{\infty} \frac{(-1)^r}{r!\Gamma(\nu + r + 1)} \left(\frac{z}{2}\right)^{\nu+2r}. \tag{A.1}$$

Fonction de Neumann

$$N_m(z) = \frac{\cos(m\pi) J_m(z) - J_{-m}(z)}{\sin(m\pi)}. \tag{A.2}$$

Les variables z et ν sont des nombres complexes et m est un entier.

Fonctions de Hankel

$$H_m^{(1)}(z) = J_m(z) + iN_m(z), \tag{A.3a}$$

$$H_m^{(2)}(z) = J_m(z) - iN_m(z). \tag{A.3b}$$

Représentation intégrale

$$J_m(z) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i(z \sin\theta - m\theta)} d\theta. \tag{A.4}$$

Relations de récurrence

Des définitions (A.1) et (A.2) des fonctions de Bessel, on déduit

$$Z_{-m}(z) = (-1)^m Z_m(z), \tag{A.5}$$

où Z_m est une combinaison linéaire de J_m et N_m.

Les dérivées s'écrivent

$$Z_m(z)' = Z_{m-1}(z) - \frac{m}{z} Z_m(z), \tag{A.6a}$$
$$Z_m(z)' = \frac{m}{z} Z_m(z) - Z_{m+1}(z). \tag{A.6b}$$

Le signe $'$ représente la dérivation par rapport à l'argument.
Fonctions de Bessel d'argument $ze^{m\pi i}$

$$J_\nu(ze^{m\pi i}) = e^{m\nu\pi i} J_\nu(z). \tag{A.7a}$$

De cette expression, on déduit les suivantes

$$N_\nu(ze^{m\pi i}) = e^{-m\nu\pi i} N_\nu(z) + \frac{2i\sin(m\nu\pi)}{\tan(\nu\pi)} J_\nu(z), \tag{A.7b}$$
$$\begin{aligned} H_\nu^{(1)}(ze^{m\pi i}) &= e^{-m\nu\pi i} H_\nu^{(1)}(z) - 2e^{-\nu\pi i}\frac{\sin(m\nu\pi)}{\sin(\nu\pi)} J_\nu(z) \\ &= \frac{\sin((1-m)\nu\pi)}{\sin(\nu\pi)} H_\nu^{(1)}(z) - e^{\nu\pi i}\frac{\sin(m\nu\pi)}{\sin(\nu\pi)} H_\nu^{(2)}(z). \end{aligned} \tag{A.7c}$$

En particulier :

$$J_m(-z) = (-1)^m J_m(z), \tag{A.8a}$$
$$N_m(-z) = (-1)^m [N_m(z) + 2iJ_m(z)], \tag{A.8b}$$
$$H_m^{(1)}(-z) = (-1)^{m+1} H_m^{(2)}(z). \tag{A.8c}$$

A.2 Développements

Développements à l'origine

$$J_m(z) \sim \frac{1}{m!}(\frac{z}{2})^m \qquad m \geq 0, \tag{A.9a}$$
$$N_m(z) \sim \frac{-1}{\pi(m-1)!}(\frac{2}{z})^m \qquad m > 0, \tag{A.9b}$$
$$N_m(z) \sim \frac{2}{\pi}[\ln(\frac{z}{2}) + \gamma] \qquad m = 0, \tag{A.9c}$$

où $\gamma \simeq 0.5772$ est la constante d'Euler.

Développements asymptotiques

$$J_m(z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \cos[z - (m+1/2)\pi/2] \qquad |argz| < \pi, \tag{A.10a}$$

$$N_m(z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi z}} \sin[z - (m+1/2)\pi/2] \qquad |argz| < \pi, \tag{A.10b}$$

$$H_m^{(1)}(z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{i(z-(m+1/2)\pi/2)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (m,n)}{(2iz)^n}, \tag{A.10c}$$

$$H_m^{(2)}(z) \sim \sqrt{\frac{2}{\pi z}} e^{-i(z-(m+1/2)\pi/2)} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(m,n)}{(2iz)^n}, \tag{A.10d}$$

avec

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{(m,n)}{(2z)^n} = 1 + \frac{4m^2 - 1^2}{1!\,8z} + \frac{(4m^2-1^2)(4m^2-3^2)}{2!\,(8z)^2} + \cdots .$$

A.3 Divers

Wronskiens

Le wronskien de 2 fonctions f,g est donné par

$$W(f,g) = fg' - f'g,$$

où le signe $'$ désigne la dérivée par rapport à l'argument de la fonction.
Pour les fonctions de Bessel, on a la relation

$$W(J_m,N_m) = J_m N_{m-1} - J_{m-1} N_m = \frac{2}{\pi z}, \tag{A.11a}$$

$$W(J_m,H_m^{(1)}) = \frac{2i}{\pi z}. \tag{A.11b}$$

Primitives particulières

$$(a^2 - b^2) \int Z_m(az) Y_m(bz) z dz = bz Z_m(az) Y_{m-1}(bz) - az Z_{m-1}(az) Y_m(bz), \tag{A.12a}$$

$$\int [Z_0(az)]^2 z dz = \frac{1}{2} z^2 ([Z_0(az)]^2 + [Z_1(az)]^2), \tag{A.12b}$$

$$\int [Z_m(az)]^2 z dz = \frac{1}{2} z^2 ([Z_m(az)]^2 - Z_{m-1}(az) Z_{m+1}(az)), \tag{A.12c}$$

où Z_m et Y_m sont des combinaisons linéaires de J_m et N_m.

Théorème d'addition

Si $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r_0}$, ϕ est l'angle entre $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r_0}$ et ψ l'angle entre $\mathbf{r_0}$ et $\mathbf{R}$, alors

$$e^{i\nu\psi} Z_\nu(kR) = \sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} e^{im\phi} J_m(kr) Z_{\nu+m}(kr_0), \tag{A.13}$$

où $0 < r < r_0$; $0 < \psi < \pi/2$; ν réel ; $e^{2i\psi} = \frac{r_0 - re^{-i\phi}}{r_0 - re^{+i\phi}}$ [68, p. 1322]. Une conséquence de ce théorème est la décomposition d'une onde plane en ondes partielles :

$$e^{i\mathbf{kr}} = \sum_{m=-\infty}^{+\infty} i^m e^{im(\theta_r - \theta_k)} J_m(kr). \tag{A.14}$$

A.4 Fonctions de Bessel modifiées

Définitions

Fonction de Bessel modifiée du premier type

$$I_m(z) = \frac{J_m(iz)}{i^m}. \tag{A.15}$$

Fonction de Bessel modifiée du deuxième type

$$K_m(z) = \frac{\pi i}{2} i^m H_m^{(1)}(iz). \tag{A.16}$$

Développements asymptotiques

$$I_m(z) \sim \frac{e^z}{\sqrt{2\pi z}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n (m,n)}{(2z)^n} + \frac{e^{-z \pm (m+1/2)\pi i}}{\sqrt{2\pi z}} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(m,n)}{(2z)^n}, \tag{A.17}$$

$$K_m(z) \sim \sqrt{\frac{\pi}{2z}} e^{-z} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(m,n)}{(2z)^n}. \tag{A.18}$$

Wronskien

$$W(I_m, K_m) = -\frac{1}{z}. \tag{A.19}$$

A.5 Fonctions de Bessel sphériques

Nous utilisons les notations de Messiah [67].

Définitions

Fonction de Bessel

$$j_l(z) = \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{l+1/2}(z). \tag{A.20}$$

Fonction de Neumann

$$n_l(z) = -y_l(z) = (-1)^l \sqrt{\frac{\pi}{2z}} J_{-l-1/2}(z) = -\sqrt{\frac{\pi}{2z}} N_{l+1/2}(z). \tag{A.21}$$

z est complexe, l est entier.

Fonctions de Hankel

$$h_l^{(+)}(z) = n_l(z) + i j_l(z), \tag{A.22a}$$
$$h_l^{(-)}(z) = n_l(z) - i j_l(z), \tag{A.22b}$$
$$h_l^{(1)}(z) = j_l(z) + i y_l(z) = -i h_l^{(+)}(z), \tag{A.22c}$$
$$h_l^{(2)}(z) = j_l(z) - i y_l(z) = i h_l^{(-)}(z). \tag{A.22d}$$

Les fonctions de Hankel du premier type et du second type $h_l^{(1)}$ et $h_l^{(2)}$ sont souvent rencontrées dans la littérature. Nous indiquons ici le lien avec les définitions de Messiah.

Fonction de Bessel modifiée du premier type

$$i_l(z) = j_l(iz)/i^l. \tag{A.23}$$

Fonction de Bessel modifiée du second type

$$k_l(z) = -i^l h_l^{(1)}(iz). \tag{A.24}$$

Relations de récurrence

$$\begin{aligned} \frac{d}{dz} f_l(z) &= f_{l-1}(z) - \frac{l+1}{z} f_l(z), \\ \frac{d}{dz} f_l(z) &= -f_{l+1}(z) + \frac{l}{z} f_l(z). \end{aligned} \tag{A.25}$$

De ces relations, on montre que

$$b f_l(ax) g_{l-1}(bx) - a f_{l-1}(ax) g_l(bx) = -\, b f_l(ax) g_{l+1}(bx) + a f_{l+1}(ax) g_l(bx). \tag{A.26}$$

f_l et g_l représentent les fonctions j_l,n_l,h_l,i_l. Cette égalité permet de traiter sans difficultés le cas $l = 0$. La fonction de Bessel modifiée du second type $k_l(z)$ suit des relations de récurrence légèrement différentes.

$$\frac{d}{dz} k_l(z) = -k_{l-1}(z) - \frac{l+1}{z} k_l(z). \tag{A.27}$$

Relations de parité

$$j_l(-z) = (-1)^l j_l(z), \tag{A.28a}$$
$$n_l(-z) = (-1)^{l+1} n_l(z), \tag{A.28b}$$
$$h_l^{(+)}(-z) = (-1)^{l+1} h_l^{(-)}(z). \tag{A.28c}$$

Développements

Comportement à l'origine

$$j_l(z) \sim \frac{z^l}{(2l+1)!!}, \tag{A.29a}$$
$$n_l(z) \sim \frac{(2l+1)!!}{(2l+1)} \frac{1}{z^{l+1}}. \tag{A.29b}$$

Développements asymptotiques

$$j_l(z) \sim \frac{1}{z}\sin(z - l\pi/2), \tag{A.30a}$$
$$n_l(z) \sim \frac{1}{z}\cos(z - l\pi/2), \tag{A.30b}$$
$$h_l^{(+)}(z) \sim \frac{1}{z}e^{i(z-l\pi/2)}[1 + i\frac{l(l+1)}{2z} - \ldots], \tag{A.30c}$$
$$i_l(z) \sim \frac{e^z}{2z} \qquad \text{pour} \qquad x \gg l, \tag{A.30d}$$
$$k_l(z) \sim \frac{e^{-z}}{z}. \tag{A.30e}$$

Divers

Onde $l = 0$

$$j_0(z) = \frac{\sin z}{z} \tag{A.31a}$$
$$h_0^{(\pm)}(z) = \frac{e^{\pm iz}}{z} \tag{A.31b}$$

Wronskiens

Ils se déduisent aisément à partir des wronskiens (A.11 et A.19)

$$W(n_l,j_l) = \frac{1}{z^2}, \tag{A.32}$$
$$W(i_l,k_l) = -\frac{1}{z^2}. \tag{A.33}$$

Décomposition d'une onde plane en ondes partielles

Il existe également un théorème d'addition à trois dimensions qui permet d'écrire une onde plane sous la forme d'une série d'ondes partielles.

$$e^{i\mathbf{kr}} = 4\pi \sum_{l=0}^{+\infty} \sum_{m=-l}^{+l} i^l j_l(kr) Y_l^{m*}(\widehat{\mathbf{k}}) Y_l^m(\widehat{\mathbf{r}}). \tag{A.34}$$

Primitives particulières

$$(a^2 - b^2)\int f_l(ax)g_l(bx)x^2dx = x^2\left[bf_l(ax)g_{l-1}(bx) - af_{l-1}(ax)g_l(bx)\right], \tag{A.35a}$$
$$\int [f_l(x)]^2 x^2 dx = \frac{1}{2}x^3\left[f_l(x)^2 - f_{l+1}(x)f_{l-1}(x)\right] \tag{A.35b}$$

où f_l et g_l sont des combinaisons linéaires des fonctions de Bessel j_l et n_l.

A.6 Polynômes de Legendre et harmoniques sphériques

Écriture des polynômes de Legendre en fonction des harmoniques sphériques :

$$P_l(\cos(\widehat{\mathbf{k},\mathbf{r}})) = \frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{+l} Y_l^{m*}(\widehat{\mathbf{k}})Y_l^m(\widehat{\mathbf{r}}). \tag{A.36}$$

Relation d'orthonormalisation

$$\int d\Omega Y_{l_1}^{m_1 *}(\widehat{\Omega}) Y_{l_2}^{m_2}(\widehat{\Omega}) = \delta_{l_1,l_2}\delta_{m_1,m_2}. \tag{A.37}$$

Relation de fermeture

$$\sum_{l=0}^{+\infty}\sum_{m=-l}^{+l} Y_l^{m*}(\widehat{\Omega}) Y_l^{m}(\widehat{\Omega'}) = \delta(\Omega - \Omega'). \tag{A.38}$$

Annexe B

Génération, caractérisation et dénombrement des séquences de diffusion

Dans cet appendice, nous classons et comptons les différentes séquences de diffusion apparaissant dans la série de Watson donnée par l'équation (1.21). Nous utiliserons tout au long de cet appendice les notations symboliques (1.25) pour les opérateurs $\mathbf{t}$ introduites dans le chapitre 1. Comme nous l'avons déjà aperçu, il existe deux types de séquences de diffusion : les chaînes directes qui ne font intervenir que des diffuseurs distincts, et les chaînes indirectes qui autorisent la répétition d'indices non consécutifs.

La série de Watson peut s'écrire formellement en regroupant les termes décrivant le même nombre de diffuseurs distincts. En notation symbolique, cela donne

$$\begin{array}{rlll}
\mathcal{T} = & (i) & & \\
+ & (ij) & + & \left\{\begin{array}{l} \quad(iji) \\ +(ijij) \\ +(ijiji) \\ +\cdots \end{array}\right. \\
+ & (ijk) & + & \left\{\begin{array}{l} \quad(ijik)+(ijkj)+(ijki) \\ +(ijijk)+(ijkjk)+(ijkik)+(ijikj)+\cdots \\ +(ijkijk)+\cdots \\ +\cdots \end{array}\right. \\
+ & (ijkl) & + & \left\{\begin{array}{l} \quad(ijikl)+(ijklk)+(ijkil)+(ijklj)+(ijkjl)+(ijkli) \\ +(ijkili)+(ijkjlj)+(ijklki)+\cdots \\ +(ijkijki)\cdots \\ +\cdots \end{array}\right. \\
+ & (ijklm) & + & \quad\cdots \\
+ & \cdots & &
\end{array} \tag{B.1}$$

où la sommation sur chaque indice est implicite, et chaque lettre représente un centre diffuseur différent. Les chaînes directes forment la colonne de gauche et les chaînes indirectes celle de droite. À partir d'une chaîne directe donnée, on peut écrire une infinité de chaînes indirectes avec seulement les centres diffuseurs contenus dans la chaîne directe. Une accolade regroupe l'ensemble des chaînes indirectes générées à partir de la chaîne directe qui se trouve à gauche de l'accolade.

Chaque ligne dans l'accolade regroupe différentes chaînes indirectes ayant toutes le même nombre de diffusions (c.-à-d. le même nombre de lettres).

Dans cette annexe, nous nous proposons de compter le nombre de séquences de diffusion que contient chacune des lignes. Dans la suite, une séquence de diffusion quelconque sera représentée par une suite d'indices $(i_1,i_2,\cdots,i_n)$.

B.1 Terminologie et définitions

- *Chaîne de base* : Une chaîne de longueur m est une séquence de m indices. La *chaîne de base* est une chaîne ne comportant que des indices différents. Nous allons construire l'ensemble des chaînes à partir de chaînes de base.
- Génération : Partant d'une chaîne de base $(i_1,i_2,\dots,i_n)$, nous pouvons générer une nouvelle séquence $(i_1,i_2,\dots i_{j-1},x,i_j,\dots,i_n)$ dans laquelle l'indice ajouté x appartient à l'ensemble $\{i_1,i_2,\dots i_n\}$. Cette séquence est une chaîne indirecte que nous nommerons *chaîne de première génération* issue de la chaîne de base $(i_1,i_2,\dots,i_n)$. De façon récurrente, la séquence $(i_1,i_2,\dots x_s,i_j,i_{j+1},\dots x_{s-1},i_k,i_{k+1},\dots,x_1,i_n)$ est une *descendante* de la s^{e} génération de la chaîne de base $(i_1,i_2,\dots,i_n)$.

Toutes les séquences de diffusions de la série de Watson peuvent maintenant se construire à partir des chaînes de base.

B.2 Chaînes de la 1re génération

- **Règle I** : Quelque soit la séquence de diffusion, deux indices consécutifs ne peuvent jamais être identiques. Cela vient du fait que la matrice t résout exactement le problème à un diffuseur (cf. § 1.2).
- **Règle II** : Lors de la construction d'un descendant, si l'indice ajouté x est entre les positions j et $j+1$ (*i.e.* $(i_1,i_2,\dots i_j,x,i_{j+1},\dots,i_n)$), alors x doit appartenir à l'ensemble $\{i_1,i_2,\dots,i_{j-1}\}$. La règle I implique évidement que $x \notin \{i_j,i_{j+1}\}$. On impose que $x \notin \{i_{j+2},\dots,i_n\}$ pour éviter de compter deux fois cette chaîne. $(i_1,i_2,\dots i_j,i_n,i_{j+1},\dots,i_n)$ est en effet un descendant de la chaîne de base $(i_1,i_2,\dots i_j,i_n,i_{j+1},\dots,i_{n-1})$ qui est une chaîne de base différente de $(i_1,i_2,\dots i_j,i_{j+1},\dots,i_n)$.

Partant de la chaîne de base $(i_1,i_2,\dots,i_n)$, les descendants sont générés en ajoutant un indice x aux positions $(n+1)$, n, $(n-1)$, ... , 4 ou 3. Appliquant les règles I et II, x est choisi successivement dans les ensembles $\{i_1,i_2,\dots,i_{n-1}\}$, $\{i_1,i_2,\dots,i_{n-2}\}$, ... , $\{i_1,i_2\}$ et pour la position 3, x est identifié à i_1. Le nombre de chaînes de 1re génération ainsi créées est

$$N_1 = (n-1) + (n-2) + (n-3) + \cdots + 2 + 1 = \frac{1}{2}n(n-1) = \sum_{i=1}^{n-1} i. \tag{B.2}$$

B.3 Chaînes de la 2e génération

Pour éviter le double comptage, nous devons définir deux règles supplémentaires.

- **Règle III** : Pour chaque descendant d'une chaîne de la forme $(i_1,i_2,\cdots,i_{j-1},x,i_j,\cdots,i_n)$, le nouvel indice y doit être placé à gauche de x. Les chaînes de seconde génération seront de la forme $(i_1,i_2,\cdots,i_{k-1},y,i_k,\cdots,i_{j-1},x,i_j,\cdots,i_n)$ où $x \in \{i_1,i_2,\cdots,i_{j-2}\}$ et

$y \in \{i_1,i_2,\cdots,i_{k-2}\}$. Cette règle permet d'éviter le double comptage dû à la permutation possible de x et y.

– **Règle IV** : Dans le cas particulier où y devrait être placé juste à gauche de x, y sera en fait placé juste à droite de x. Ceci pour éviter de changer les valeurs possibles de x. En effet, $(i_1,i_2,\cdots,i_{j-1},y,x,i_j,\cdots,i_n) \Rightarrow x \in \{i_1,i_2,\cdots,i_{j-1}\}$ et $y \in \{i_1,i_2,\cdots,i_{j-2}\}$ alors que $(i_1,i_2,\cdots,i_{j-1},x,y,i_j,\cdots,i_n)$ laisse x dans l'ensemble $\{i_1,i_2,\cdots,i_{j-2}\}$ et $y \in \{i_1,i_2,\cdots,i_{j-1}\}$. Cette règle facilite le dénombrement.

Les chaînes de la 2$^{\mathrm{e}}$ génération sont construites à partir des chaînes de la 1$^{\mathrm{re}}$ génération. Partant des chaînes de la forme $(i_1,i_2,\cdots,i_{n-1},i_n,x)$ où $x \in \{i_1,i_2,\cdots,i_{n-1}\}$, les descendants sont obtenus par l'ajout de y aux positions $(n+2)$, n, $(n-1)$, ... ,4 et 3 de la chaîne $(i_1,i_2,\cdots,i_{n-1},i_n,x)$. Pour chacun de ces descendants, y est choisi dans un ensemble différent. Pour y en position $n+2$, *i.e.* $(i_1,i_2,\cdots,i_{n-1},i_n,x,y)$, $y \in \{i_1,i_2,\cdots,i_n\} - \{x\}$ donnant $(n-1)^2$ chaîne différentes. Puis y est déplacé vers la gauche. Il y a $(n-1) \times (n-2)$ possibilités de placer y en position n, *i.e.* $(i_1,i_2,\cdots,i_{n-1},y,i_n,x)$. Et ainsi de suite jusqu'à ce que y soit en position 3, où $y \in \{i_1\}$, ce qui donne $(n-1) \times 1$ chaînes différentes. Finalement, les $(n-1)$ chaînes de 1$^{\mathrm{re}}$ génération $(i_1,i_2,\cdots,i_n,x)$ génèrent $(n-1) \times \{(n-1)+(n-2)+\cdots+1\} = (n-1)^2 n/2$ descendants. Par la même procédure, les $(n-2)$ chaînes de première génération $(i_1,i_2,\cdots i_{n-2},i_{n-1},x,i_n)$ génèrent $(n-2) \times \{(n-2)+(n-3)+\cdots+1\} = (n-2)^2(n-1)/2$ descendants.
Et finalement, la chaîne $(i_1,i_2,x,\cdots,i_n)$ génère $1^2 \times 2/2 = 1$ descendant.
Regroupant toutes ces contributions, le nombre total de descendants à la 2$^{\mathrm{e}}$ génération est

$$\begin{aligned} N_2 &= \frac{1}{2}(n-1)^2 n + \frac{1}{2}(n-2)^2(n-1) + \frac{1}{2}(n-3)^2(n-2) + \cdots + \frac{1}{2}(1)^2(2) \\ &= \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{n-1} i^2(i+1) = \sum_{i=1}^{n-1} i \sum_{j=1}^{i} j. \end{aligned} \tag{B.3}$$

B.4 Nombre de chaînes de la s^{e} génération

On peut compter, par récurrence, le nombre de chaînes qui peuvent être formées à partir d'une chaîne de base $(i_1,i_2,\cdots,i_n)$ en ajoutant s indices choisis dans $\{i_1,i_2,\cdots,i_n\}$, en accord avec les règles définies ci-dessus. Notons $N_n(s)$ le nombre de descendants à la s^{e} génération d'une chaîne de base de longueur n.
On remarque d'abord que le nombre de descendants à la s^{e} génération d'une chaîne $(i_1,i_2,\cdots, i_{j-1},x,i_j,\cdots,i_n)$ est le même que le nombre de descendants à la s^{e} génération de la chaîne $(i_1,i_2,\cdots,i_{j-1},x)$ du fait de la règle III.
On suppose que le nombre de descendants à la $(s-1)^{\mathrm{e}}$ génération d'une chaîne de longueur n est donné par

$$N_n(s-1) = \sum_{l_1=1}^{n-1} l_1 \sum_{l_2=1}^{l_1} l_2 \cdots \sum_{l_{s-1}=1}^{l_{s-2}} l_{s-1}. \tag{B.4}$$

Le nombre de descendants à la s^{e} génération d'une chaîne de longueur n est la somme des chaînes descendant à la $(s-1)^{\mathrm{e}}$ génération de chaînes de la 1$^{\mathrm{re}}$ génération. Autrement dit, $N_n(s)$ est le nombre de descendants à la $(s-1)^{\mathrm{e}}$ génération des chaînes

$(i_1,i_2,\cdots,i_n,x)$ avec $(n-1)$ choix pour x dans $\{i_1,i_2,\cdots,i_{n-1}\}$
$+$ $(i_1,i_2,\cdots,i_{n-1},x,i_n)$ avec $(n-2)$ choix pour x dans $\{i_1,i_2,\cdots,i_{n-2}\}$
$+$ $(i_1,i_2,\cdots,i_{n-2},x,i_{n-1},i_n)$ avec $(n-3)$ choix pour x dans $\{i_1,i_2,\cdots,i_{n-3}\}$

$+ \ \cdots$
$+ \ (i_1,i_2,x,i_3,\cdots,i_n)$ avec le seul choix $x = \{i_1\}$.
Le nombre de descendants est donc

$$\begin{aligned} N_n(s) &= (n-1)\times N_n(s-1) + (n-2)\times N_{n-1}(s-1) + \ \cdots \ + 1\times N_2(s-1) \\ &= \sum_{m=1}^{n-1} m N_{m+1}(s-1), \end{aligned} \tag{B.5}$$

qui s'écrit, étant donné (B.4),

$$N_n(s) = \sum_{l_1=1}^{n-1} l_1 \sum_{l_2=1}^{l_1} l_2 \ \cdots \sum_{l_{s-1}=1}^{l_{s-2}} l_{s-1} \sum_{l_s=1}^{l_{s-1}} l_s. \tag{B.6}$$

La proposition (B.4) est vérifiée pour $s = 1{,}2$, et par conséquent elle vraie quelque soit n. De là, on peut en déduire la double relation de récurrence donnant le nombre total de descendants à la s^{e} génération d'une chaîne de base de longueur n.

Relations de récurrence

Nous donnons ici quelques relations de récurrence vérifiées par $N_n(s)$, et quelques conventions destinées à généraliser l'expression (B.6).

- $N_0(s) = 0 \ \forall s$. Il n'existe pas de descendant pour une chaîne de longueur nulle.
- $N_1(s) = 0 \ \forall s \geq 1$. La chaîne (i_1) n'a pas de descendant.
- $N_n(0) = 1 \ \forall n \geq 1$. La génération 0 est la chaîne de base.

Des relations (B.5) et (B.6), il vient

$$N_n(s) = N_{n-1}(s) + (n-1)N_n(s-1) \tag{B.7a}$$

$$N_n(s) = \sum_{i=0}^{s} (n-1)^{s-i} N_{n-1}(i). \tag{B.7b}$$

La formule (B.7b) découle directement de (B.7a).

B.5 Interprétation en termes de graphes

Les chaînes de base sont les chaînes directes qui servent à la resommation du propagateur moyen, et qui contribuent au premier ordre en densité à l'énergie propre de celui-ci. Les différents descendants sont des séquences de diffusion autorisant la répétition d'indices, formant des boucles dans les diagrammes de Feynman (voir la figure 1.1). La génération du descendant est reliée au nombre de boucles du graphe de Feynman associé. Le nombre $N_n(s)$ est le nombre de graphes contenant n diffuseurs distincts et s boucles, c.-à-d. décrivant $n + s$ diffusions, apparaissant dans la série de Watson. Les graphes dénombrés ne sont donc pas nécessairement irréductibles.

B.6 Nombre de chaînes de longueur n

Jusqu'ici, nous avons considéré le nombre de chaînes descendant à la s^{e} génération d'une chaîne de base $(i_1,i_2,\cdots,i_n)$. Dans un milieu composé de N diffuseurs, nous pouvons chercher à compter

le nombre u_n de chaînes de longueur n que l'on peut former à partir de N centres diffuseurs. Pour une chaîne de longueur n $(x_1,x_2,\cdots,x_n)$, il y a N choix pour x_1, $(N-1)$ choix pour x_2, ... , $(N-1)$ choix pour x_n. Ce qui donne $u_n = N(N-1)^{n-1}$ façons de construire une chaîne de longueur n avec N indices.
Nous montrons que ce nombre est retrouvé en utilisant le dénombrement des différents types de chaînes. Il y a $A_n^N = N!/(N-n)!$ façons de choisir une chaîne de base de longueur n. Mais ce ne sont pas les seules chaînes de longueur n. Les chaînes descendant à la s^{e} génération d'une chaîne de base de longueur $(n-s)$ sont aussi de longueur n. Pour celles-ci, il y a A_{n-s}^N façons de choisir la chaîne de base, ce qui donne $A_{n-s}^N \times N_{n-s}(s)$ façons de construire ces chaînes. Le nombre total de chaînes de longueur n est alors obtenu en prenant toutes les chaînes de base possibles.

$$\begin{aligned} u_n &= A_n^N + A_{n-1}^N N_{n-1}(1) + A_{n-2}^N N_{n-2}(2) + \cdots + A_2^N N_2(n-2) + A_1^N N_1(n-1) \\ &= \sum_{i=0}^{n-1} A_{n-i}^N N_{n-i}(i). \end{aligned} \tag{B.8}$$

En utilisant les relations $A_n^N = n! \times \binom{N}{n}$ et $\binom{N}{n} = \binom{N-1}{n} + \binom{N-1}{n-1}$ avec $\binom{N}{n} = \frac{N!}{(N-n)!n!}$, on a

$$\begin{aligned} u_n &= \sum_{i=0}^{n-1}(n-i)!\binom{N-1}{n-i-1}N_{n-i}(i) + \sum_{i=0}^{n-1}(n-i)!\binom{N-1}{n-i}N_{n-i}(i) \\ &= \Big\{\sum_{i=0}^{n-1}(n-i)!\binom{N-1}{n-i-1}N_{n-i-1}(i) \\ &\quad + \sum_{i=0}^{n-1}(n-i-1)(n-i)!\binom{N-1}{n-i-1}N_{n-i}(i-1)\Big\} \\ &\quad + \Big\{\sum_{i=0}^{n-1}(n-i)!\binom{N-1}{n-i}N_{n-i-1}(i) \\ &\quad + \sum_{i=0}^{n-1}(n-i-1)(n-i)!\binom{N-1}{n-i}N_{n-i}(i-1)\Big\} \end{aligned}$$

où la formule (B.7a) a été utilisée dans la dernière égalité. Après réarrangement des indices, nous obtenons finalement la réponse cherchée.

$$\begin{aligned} u_n &= (N-1)\sum_{i=0}^{n-2} A_{n-i-1}^N N_{n-i-1}(i) \\ &= (N-1)\,u_{n-1} = (N-1)^{n-1}\,u_1 = N(N-1)^{n-1}. \end{aligned} \tag{B.9}$$

C.Q.F.D.

Annexe C

Intégrales particulières

C.1 Intégrale de base

$$\boxed{I = \int_0^{+\infty} \frac{k^{d-1} dk}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \prod_{i=1}^{n} J_{\mu_i}(ka_i) J_m(kR).} \tag{C.1}$$

Cette intégrale apparaît lorsque l'on a affaire à des produits de matrices $\mathbf{t}$. La dernière fonction de Bessel est séparée en deux fonctions de Hankel à l'aide des définitions $(A.3)$. L'intégrale I peut alors s'écrire

$$I = \frac{1}{2} \int_0^{+\infty} \frac{k^{d-1} dk}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \prod_{i=1}^{n} J_{\mu_i}(ka_i) \left[H_m^{(1)}(kR) + H_m^{(2)}(kR) \right].$$

En utilisant la propriété de parité $(A.8)$ de la fonction de Hankel, on montre que

$$\int_0^{+\infty} \frac{k^{d-1} dk}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \prod_{i=1}^{n} J_{\mu_i}(ka_i) H_m^{(2)}(kR) = (-1)^{d+m+\sum_{i=1}^{n} \mu_i} \int_{-\infty}^{0} \frac{k^{d-1} dk}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \prod_{i=1}^{n} J_{\mu_i}(ka_i) H_m^{(1)}(kR).$$

Ainsi, lorsque $d + m + \sum_{i=1}^{n} \mu_i$ est un nombre pair, l'intégrale I devient

$$I = \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{k^{d-1} dk}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \prod_{i=1}^{n} J_{\mu_i}(ka_i) H_m^{(1)}(kR).$$

Le contour de la figure C.1 est utilisé pour calculer cette intégrale.

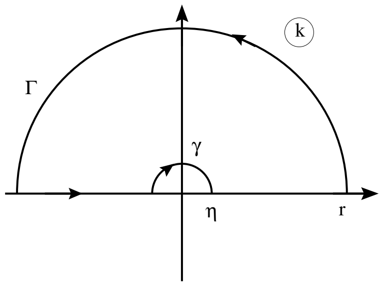


FIG. C.1 – *Contour d'intégration.*

Intégration sur Γ

Dans un premier temps, l'intégrale sur le grand demi-cercle noté Γ est évaluée ($k = re^{i\theta}$, $\theta \in [0,\pi]$ et $r \to +\infty$).

$$\int_\Gamma \frac{k^{d-1}dk}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \prod_{i=1}^{n} J_{\mu_i}(ka_i) H_m^{(1)}(kR)$$
$$= \int_0^\pi d\theta \frac{ir^d e^{id\theta}}{K^2 - r^2 e^{2i\theta} + i\epsilon} \prod_{i=1}^{n} J_{\mu_i}(ra_i e^{i\theta}) H_m^{(1)}(rRe^{i\theta}).$$

En prenant le développement asymptotique (A.10) des fonctions de Bessel et en négligeant $K^2 + i\epsilon$ le dénominateur, on obtient

$$\int_\Gamma \frac{k^{d-1}dk}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \prod_{i=1}^{n} J_{\mu_i}(ka_i) H_m^{(1)}(kR)$$
$$= i \frac{r^{d-n/2-1/2}}{\prod_{i=1}^{n} \sqrt{a_i}\sqrt{R}} (2/\pi)^{\frac{n+1}{2}} \times 1/2^n \times \int_0^\pi d\theta \frac{e^{i\theta(d-n/2-1/2)}}{-r^2 e^{2i\theta}} \times$$
$$\prod_{i=1}^{n} \left(e^{i(ra_i e^{i\theta} - \mu_i\pi/2 - \pi/4)} + e^{-i(ra_i e^{i\theta} - \mu_i\pi/2 - \pi/4)} \right) \times e^{i(rRe^{i\theta} - m\pi/2 - \pi/4)}$$
$$= const \times r^{d-n/2-1/2} \times \int_0^\pi d\theta \frac{e^{i\theta(d-n/2-5/2)}}{r^2} \times$$
$$\prod_{i=1}^{n} \left(e^{ira_i \cos\theta - ra_i \sin\theta} + e^{-ira_i \cos\theta + ra_i \sin\theta} \right) \times e^{irR\cos\theta - rR\sin\theta}$$
$$= const \times r^{d-n/2-5/2} \times \int_0^\pi d\theta e^{i\theta(d-n/2-5/2)} e^{ir\cos\theta(-\sum_{i=1}^n a_i + R) - r\sin\theta(-\sum_{i=1}^n a_i + R)}.$$

Puisque $\sin\theta > 0$ et $r \to +\infty$, cette intégrale tend vers zéro si $R > \sum_{i=1}^n a_i$. Dans le cas où $R = \sum_{i=1}^n a_i$, la contribution de ce contour reste nulle tant que $d < (n+5)/2$. À deux dimensions, cette dernière condition est toujours vérifiée.

intégration sur γ

Calculons la valeur de l'intégrale sur le petit demi-cercle γ ($k = \eta e^{i\theta}$).

$$J = \int_\gamma \frac{k^{d-1}dk}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \prod_{i=1}^{n} J_{\mu_i}(ka_i) H_m^{(1)}(kR)$$
$$= \int_\pi^0 d\theta \frac{i\eta^d e^{id\theta}}{K^2 - \eta^2 e^{2i\theta} + i\epsilon} \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\mu_i!} \left(\frac{\eta a_i e^{i\theta}}{2}\right)^{\mu_i} H_m^{(1)}(\eta R e^{i\theta}).$$

Remarquons que μ_i peut être positif ou négatif. Dans le calcul suivant, on prendra $\mu_i > 0$. Le cas où $\mu_i < 0$ fait apparaître un facteur $(-1)^{\mu_i}$. Les cas $m = 0$ et $m > 0$ sont traités séparément car le pôle de $H_m^{(1)}(z)$ en $z = 0$ est différent selon le cas.

Premier cas : $m = 0$

$$J \approx \int_\pi^0 d\theta \frac{i\eta^d e^{id\theta}}{K^2 - \eta^2 e^{2i\theta} + i\epsilon} \prod_{i=1}^{n} \frac{1}{\mu_i!} \left(\frac{\eta a_i e^{i\theta}}{2}\right)^{\mu_i} \left[1 + \frac{2i}{\pi}(\ln(\eta R e^{i\theta}/2) + \gamma)\right]$$
$$\approx const \times \eta^{d+\sum_{i=1}^n \mu_i} \times \int_\pi^0 d\theta e^{i\theta(d+\sum_{i=1}^n \mu_i)} \left[1 + \frac{2i}{\pi}(\ln(\eta R/2) + \gamma) - 2\theta/\pi\right]$$

$$\Rightarrow J \to 0 \qquad \text{si} \qquad d + \sum_{i=1}^{n} \mu_i > 0.$$

Deuxième cas : $m > 0$

$$J \approx const \times \eta^{d+\sum_{i=1}^n \mu_i} \times \int_\pi^0 d\theta e^{i\theta(d+\sum_{i=1}^n \mu_i)} \left[\frac{1}{m!}\left(\frac{\eta R e^{i\theta}}{2}\right)^m - \frac{i}{\pi(m-1)!}\left(\frac{2}{\eta R e^{i\theta}}\right)^m\right]$$
$$\approx const \times \eta^{d+\sum_{i=1}^n \mu_i - m} \times \int_\pi^0 d\theta e^{i\theta(d+\sum_{i=1}^n \mu_i - m)}$$

$$\Rightarrow J \to 0 \qquad \text{si} \qquad d + \sum_{i=1}^{n} \mu_i > m.$$

Pour finir, les cas où m ou μ_i sont négatifs imposent la relation suivante pour que l'intégrale converge vers zéro.

$$d + \sum_{i=1}^{n} |\mu_i| > |m|.$$

Résultat

De ces calculs, on déduit que l'intégration sur l'axe réel est égale à l'intégration sur le contour fermé pourvu que les conditions suivantes soient vérifiées.

$$\begin{cases} d + m + \sum_{i=1}^n \mu_i = 2p \qquad p \in \mathcal{Z} \\ R > \sum_{i=1}^n a_i \\ d + \sum_{i=1}^n |\mu_i| > |m|. \end{cases} \tag{C.2}$$

Lorsque $R = \sum_{i=1}^{n} a_i$, il faut en plus que $d < (n+5)/2$. Le théorème des résidus donne alors

$$\boxed{\int_0^{+\infty} \frac{k^{d-1}dk}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \prod_{i=1}^{n} J_{\mu_i}(ka_i) J_m(kR) = -i\frac{\pi}{2} K^{d-2} \prod_{i=1}^{n} J_{\mu_i}(Ka_i) H_m^{(1)}(KR).} \tag{C.3}$$

C.2 Autres intégrales utiles

Généralisation

Cette section donne d'autres intégrales rencontrées au cours du texte et dérivant du résultat du paragraphe précédent. Une généralisation immédiate est

$$\begin{aligned}\int_0^{+\infty} & \frac{k^{d-1}dk}{(K^2 - k^2 + i\epsilon)^q} \prod_{i=1}^{n} J_{\mu_i}(ka_i) J_m(kR) \\ =& i\pi \frac{(-1)^q}{(q-1)!} \lim_{k \to K + i\epsilon} \frac{d^{q-1}}{dk^{q-1}} \Big[\frac{k^{d-1}}{(k+K+i\epsilon)^q} \prod_{i=1}^{n} J_{\mu_i}(ka_i) H_m^{(1)}(kR) \Big],\end{aligned} \tag{C.4}$$

avec les mêmes conditions (C.2).

Autre intégrale

$$\begin{aligned}\int d\mathbf{k} \frac{e^{i\mathbf{kr} + im\theta_k}}{K^2 - k^2 + i\epsilon} J_m(ka) =& \int_0^{+\infty} \frac{kdk}{K^2 - k^2 + i\epsilon} J_m(ka) \int_0^{2\pi} d\theta_k \; e^{ikr\cos(\theta_k - \theta_r) + im\theta_k} \\ =& 2\pi e^{im(\pi/2 + \theta_r)} \int_0^{+\infty} \frac{kdk}{K^2 - k^2 + i\epsilon} J_m(ka) J_m(kr) \\ =& -i\pi^2 e^{im(\pi/2 + \theta_r)} J_m(Ka) H_m^{(1)}(Kr).\end{aligned} \tag{C.5}$$

si les conditions (C.2) sont vérifiées.

C.3 Trois dimensions

Intégrale de base

D'après les définitions (A.20), (A.21) et (A.22) des fonctions de Bessel sphériques en fonction des fonctions de Bessel cylindriques, l'intégrale

$$\int_0^{+\infty} \frac{k^{d-1}dk}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \prod_{i=1}^{n} j_{\mu_i}(ka_i) j_l(kR)$$

peut être évaluée si les conditions

$$\left\{ \begin{array}{ll} d + 1 + l + \sum_{i=1}^{n} \mu_i = 2p & p \in \mathcal{Z} \\ R \geq \sum_{i=1}^{n} a_i & \\ d - 1 + \sum_{i=1}^{n} \mu_i > l & \end{array} \right. \tag{C.6}$$

sont vérifiées, l et μ_i étant toujours positifs. Si $R = \sum_{i=1}^{n} a_i$, il faut en plus $d < n+3$. On a alors

$$\boxed{\int_0^{+\infty} \frac{k^{d-1}dk}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \prod_{i=1}^{n} j_{\mu_i}(ka_i) j_l(kR) = -\frac{\pi}{2} K^{d-2} \prod_{i=1}^{n} j_{\mu_i}(Ka_i) h_l^{(+)}(KR).} \tag{C.7}$$

Remarque : il faut utiliser $j_l(z) = (h_l^{(+)}(z) - h_l^{(-)}(z))/2i$.

Généralisation

D'une façon générale, pour les mêmes conditions, on a

$$\begin{aligned} &\int_0^{+\infty} \frac{k^{d-1}dk}{(K^2 - k^2 + i\epsilon)^q} \prod_{i=1}^{n} j_{\mu_i}(ka_i) j_l(kR) \\ &\quad = \pi \frac{(-1)^q}{(q-1)!} \lim_{k \to K + i\epsilon} \frac{d^{q-1}}{dk^{q-1}} \Big[\frac{k^{d-1}}{(k+K+i\epsilon)^q} \prod_{i=1}^{n} j_{\mu_i}(ka_i) h_l^{(+)}(kR) \Big], \end{aligned} \tag{C.8}$$

q étant un entier strictement positif.

Annexe D

Simplification du premier terme de la matrice de diffusion

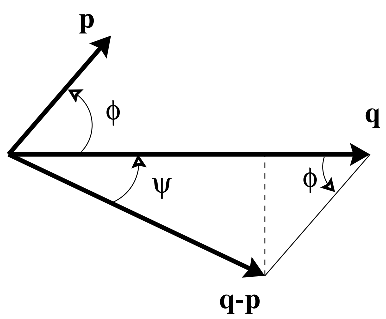
Le terme

$$\sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\phi_p-\phi_q)} \left\{ \frac{q^2-K^2}{(p^2-q^2)} (qJ_m(pa)J_{m-1}(qa) - pJ_{m-1}(pa)J_m(qa)) \right\} \tag{D.1}$$

apparaissant dans la matrice $\mathbf{t}$ à deux dimensions se met sous la forme

$$\begin{aligned} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\phi_p-\phi_q)} \frac{q^2-K^2}{a} \int_0^a J_m(pr)J_m(qr)r\,dr \\ = \frac{q^2-K^2}{a} \int_0^a r\,dr \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\phi_p-\phi_q)} J_m(pr)J_m(qr) \\ = \frac{q^2-K^2}{a|\mathbf{p}-\mathbf{q}|^2} \int_0^{|\mathbf{p}-\mathbf{q}|a} RdRJ_0(R) \\ = (q^2-K^2)\frac{J_1(|\mathbf{p}-\mathbf{q}|a)}{|\mathbf{p}-\mathbf{q}|}, \end{aligned} \tag{D.2}$$

à l'aide des relations (A.12) et (A.13).



Le théorème d'addition des fonctions de Bessel (A.13) permet d'écrire

$$\sum_{m=-\infty}^{m=+\infty} e^{im\phi} J_m(pa)J_{m-1}(qa) = -e^{-i\psi} J_1(|\mathbf{p}-\mathbf{q}|a),$$

où $\phi = \phi_p - \phi_q$ et $\psi = \phi_q - \phi_{\mathbf{q}-\mathbf{p}}$. Les relations $\cos\psi = \frac{\mathbf{q}(\mathbf{q}-\mathbf{p})}{q|\mathbf{q}-\mathbf{p}|}$ et $\sin\psi = \frac{p\sin\phi}{|\mathbf{q}-\mathbf{p}|}$ permettent d'écrire la phase sous la forme

$$-e^{-i\psi} = -\frac{\mathbf{q}(\mathbf{q}-\mathbf{p})}{q|\mathbf{q}-\mathbf{p}|} + i\frac{p\sin\phi}{|\mathbf{q}-\mathbf{p}|}. \tag{D.3}$$

Replaçant ces expressions dans la matrice $\mathbf{t}$, celle-ci se simplifie pour donner l'équation (2.18).

Annexe E

Commutation de la moyenne statistique et des sommations sur les états intermédiaires

Le but de cet appendice est de comparer les deux façons d'effectuer la moyenne d'ensemble : prendre la moyenne avant ou après la sommation sur les impulsions intermédiaires.

E.1 Commutation des intégrations

La moyenne de la séquence de diffusion (ij) s'écrit

$$\begin{aligned}\overline{(ij)} &\equiv \sum_{\mathbf{k_1}} \int \frac{d\mathbf{R}_i}{V} \int \frac{d\mathbf{R}_j}{V} \langle \mathbf{k}' | \mathbf{t}_i(E) | \mathbf{k_1} \rangle G_0^{(+)}(E,\mathbf{k_1}) \langle \mathbf{k_1} | \mathbf{t}_j(E) | \mathbf{k} \rangle \\ &= \frac{1}{V^2} \sum_{\mathbf{k_1}} \frac{\langle \mathbf{k}' | \mathbf{t}(E) | \mathbf{k_1} \rangle \langle \mathbf{k_1} | \mathbf{t}(E) | \mathbf{k} \rangle}{E - E_{k_1} + i\epsilon} \int d\mathbf{R}_i \int d\mathbf{R}_j e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k_1})\mathbf{R}_i - i(\mathbf{k_1}-\mathbf{k})\mathbf{R}_j}.\end{aligned} \tag{E.1}$$

En changeant de variables d'intégration, les intégrales sur les positions donnent

$$\begin{aligned}&\int d\mathbf{R}_{ij} \int d\mathbf{R} e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\mathbf{R} + i(2\mathbf{k_1}-\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_{ij}/2} \\ &\qquad = (2\pi)^2 \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \int_{2a}^{L} R_{ij} dR_{ij} 2\pi J_0(|\mathbf{k_1}-\mathbf{k}| R_{ij}).\end{aligned} \tag{E.2}$$

Il y a deux façons de poursuivre : passer aux limites $a \to 0$ et $L \to \infty$ maintenant ou à la fin des calculs. En prenant les limites à ce stade du calcul, nous obtenons

$$\begin{aligned}&\int d\mathbf{R}_{ij} \int d\mathbf{R} e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{k})\mathbf{R} + i(2\mathbf{k_1}-\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_{ij}/2} \\ &\qquad = (2\pi)^4 \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \delta(\mathbf{k_1}-\mathbf{k}),\end{aligned} \tag{E.3}$$

ce qui donne aussitôt

$$\overline{(ij)} = \frac{(2\pi)^2}{V} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \frac{\langle \mathbf{k} | \mathbf{t}(E) | \mathbf{k} \rangle^2}{E - E_k + i\epsilon}. \tag{E.4}$$

C'est la méthode employée par Edwards [27], Kohn et Luttinger [51] et les auteurs qui ont suivi [93, 57]. Le deuxième terme de la série de Watson moyennée de l'équation (1.29) du chapitre 1 est retrouvé. Avec cette procédure, les matrices $\mathbf{t}$ sont totalement découplées et apparaissent simplement sous forme de produits. Nous allons voir que ce n'est pas le cas si les potentiels ont une taille finie. Pour cela, il faut d'abord effectuer l'intégration de l'équation (E.2) avec un rayon a fini. En utilisant le théorème d'addition (A.13) des fonctions de Bessel, J_0 se transforme en une somme de produits de fonctions de Bessel et l'intégrale de (E.2) s'écrit

$$\begin{aligned}
&\int_{2a}^{L} R_{ij} dR_{ij} J_0(|\mathbf{k_1} - \mathbf{k}|R_{ij}) \\
&\quad = \sum_m e^{im(\theta_1-\theta)} \int_{2a}^{L} R_{ij} dR_{ij} J_m(k_1 R_{ij}) J_m(kR_{ij}) \\
&\quad = \sum_m e^{im(\theta_1-\theta)} \left[\frac{x}{k_1^2 - k^2}(kJ_m(k_1x)J_{m-1}(kx) - k_1 J_{m-1}(k_1x)J_m(kx))\right]_{x=2a}^{x=L}.
\end{aligned} \tag{E.5}$$

Remarquons que nous avons ici une expression pour la distribution de Dirac à 2D en série d'ondes partielles : en prenant les limites $a \to 0$ et $L \to \infty$, la dernière égalité donne $2\pi\delta(\mathbf{k_1} - \mathbf{k})$. Replaçant cette expression dans (E.1), la moyenne $\overline{(ij)}$ s'écrit

$$\begin{aligned}
\overline{(ij)} = {}& \frac{(2\pi)^3}{V^2}(\frac{\hbar^2}{2mV})^2 \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \sum_m \sum_{m_1} \sum_{m_2} \sum_{\mathbf{k_1}} e^{im_1(\theta-\theta_1)} e^{im_2(\theta_1-\theta)} e^{im(\theta_1-\theta)} \\
& \times \frac{\langle k|\mathbf{t}(E)|k_1\rangle_{m_1} \langle k_1|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{m_2}}{E - E_{k_1} + i\epsilon} \\
& \times \left[\frac{x}{k_1^2 - k^2}(kJ_m(k_1x)J_{m-1}(kx) - k_1 J_{m-1}(k_1x)J_m(kx))\right]_{x=2a}^{x=L}.
\end{aligned} \tag{E.6}$$

C'est ici que l'intégration angulaire sur la direction du vecteur d'onde intermédiaire $\mathbf{k_1}$ introduit la corrélation entre les ondes partielles des différentes matrices $\mathbf{t}$.

$$\begin{aligned}
\overline{(ij)} = {}& (\frac{2\pi}{V})^2 \frac{\hbar^2}{2mV} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \sum_{m_1} \sum_{m_2} \int k_1 dk_1 \frac{\langle k|\mathbf{t}(E)|k_1\rangle_{m_1} \langle k_1|\mathbf{t}(E)|k\rangle_{m_2}}{K^2 - {k_1}^2 + i\epsilon} \\
& \times \left[\frac{x}{k_1^2 - k^2}(kJ_{m_1-m_2}(k_1x)J_{m_1-m_2-1}(kx) - k_1 J_{m_1-m_2-1}(k_1x)J_{m_1-m_2}(kx))\right]_{x=2a}^{x=L} \\
= {}& (-4i)^2 (\frac{2\pi}{V})^2 (-i\frac{\pi}{2}) \frac{\hbar^2}{2mV} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \sum_{m_1} \sum_{m_2} \frac{J_{m_1}(ka)}{H^{(1)}_{m_1}(Ka)} \frac{J_{m_2}(ka)}{H^{(1)}_{m_2}(Ka)} \\
& \times \left[\frac{x}{K^2 - k^2 + i\epsilon}\Big(kH^{(1)}_{m_1-m_2}((K+i\epsilon)x)J_{m_1-m_2-1}(kx)\right. \\
& \qquad \left. -(K+i\epsilon)H^{(1)}_{m_1-m_2-1}((K+i\epsilon)x)J_{m_1-m_2}(kx)\Big)\right]_{x=2a}^{x=L}.
\end{aligned} \tag{E.7}$$

La contribution en $L \to \infty$ est nulle grâce à la prescription du $i\epsilon$. Alors

$$\begin{aligned}
\overline{(ij)} = {}& 4i(\frac{2\pi}{V})^3 \frac{\hbar^2}{2m} \delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \frac{2a}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \sum_{m_1} \sum_{m_2} \frac{J_{m_1}(ka)}{H^{(1)}_{m_1}(Ka)} \frac{J_{m_2}(ka)}{H^{(1)}_{m_2}(Ka)} \\
& \times \Big(KH^{(1)}_{m_1-m_2-1}(2Ka)J_{m_1-m_2}(2ka) - kH^{(1)}_{m_1-m_2}(2Ka)J_{m_1-m_2-1}(2ka)\Big) \\
= {}& \overline{\langle \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)|\mathbf{k}\rangle}.
\end{aligned} \tag{E.8}$$

Naturellement, le résultat obtenu en intégrant d'abord sur les états intermédiaires, puis sur les positions des diffuseurs de l'équation (4.6) est retrouvé. Les intégrations sur les impulsions et celles sur les positions peuvent donc commuter pour $a \neq 0$. Il apparaît clairement que ce résultat se généralise pour toutes les chaînes directes.
On peut constater ici que ce terme de couplage des ondes partielles provient uniquement du fait que le volume exclu est pris en compte dans l'intégration sur les positions des centres diffuseurs, et qu'il n'est donc pas dû à la présence d'une matrice $\mathbf{t}$ hors couche.

E.2 Diffuseur ponctuel

Le terme de couplage des ondes partielles devient, dans la limite $a \to 0$,

$$KaH^{(1)}_{m-1}(2Ka)J_m(2ka) - kaH^{(1)}_m(2Ka)J_{m-1}(2ka) \xrightarrow[a\to 0]{} \begin{cases} \frac{i}{\pi m!(m-1)!}\left(\frac{k}{K}\right)^m & \text{pour } m \geq 1, \\ \frac{i}{\pi} & \text{pour } m = 0. \end{cases} \tag{E.9}$$

Les ondes partielles ne se découplent pas, même dans cette limite. Mais les ondes partielles d'ordre $|m| > 0$ sont négligeables grâce au rapport des fonctions de Bessel qui devient

$$\frac{J_{m_1}(ka)}{H^{(1)}_{m_1}(Ka)} \xrightarrow[a\to 0]{} \begin{cases} \frac{i\pi}{m_1}\left(\frac{kaKa}{4}\right)^{m_1} & \text{pour } m \geq 1, \\ \frac{1}{1+\frac{2i}{\pi}(\ln\frac{Ka}{2}+\gamma)} + \mathcal{O}(a^2) & \text{pour } m = 0. \end{cases} \tag{E.10}$$

Le terme dominant est donc celui qui correspond à $m_1 = m_2 = 0$, c'est l'onde s. Dans cette limite, le couplage des ondes partielles est toujours présent, mais peut être négligé puisque seule l'onde s est importante lorsque $Ka \ll 1$. La moyenne de la séquence (ij) s'écrit alors

$$\overline{(ij)} \approx (\frac{2\pi}{V})^2 \frac{\hbar^2}{2mV} \frac{\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')}{K^2 - k^2 + i\epsilon} \left\{ \frac{-16}{[1+\frac{2i}{\pi}(\ln\frac{Ka}{2}+\gamma)]^2} + \mathcal{O}(a^2) \right\}. \tag{E.11}$$

La moyenne de la chaîne directe (ij) sans tenir compte des corrélations entre centres diffuseurs de l'équation (E.4) donne la même expression à cet ordre en a.

Cela confirme que le régime d'énergie pour lequel la théorie des centres diffuseurs ponctuels est valide est borné à $l >> K^{-1} >> a$.

Annexe F

Annulation de la contribution strictement hors couche de la matrice t

Nous montrons ici que le dernier terme de l'équation (4.11) rassemblant des quantités hors couche a une contribution nulle. L'effet d'un propagateur $[K^2 - k^2 + i\epsilon]^{-1}$ sur une fonction analytique $f(k)$ est de mettre cette fonction sur couche : $f(K)$. Par contre, le dernier terme de l'équation (4.11) fait intervenir le produit de deux propagateurs et de la fonction $f_K^{\text{off}}(k)$. Lors de la transformation de Fourier inverse pour obtenir l'expression dans l'espace réel, il y a un pôle d'ordre deux :

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \rho \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}'-i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{(K^2-k^2+i\epsilon)^2} f_K^{\text{off}}(k)\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \\
&\qquad = -\frac{4\pi a\rho m}{\hbar^2} \int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \left\{ \frac{a/2}{K^2-k^2+i\epsilon} + K \sum_m \frac{J_{m-1}(Ka)}{J_m(Ka)} \frac{J_m(ka)^2}{(K^2-k^2+i\epsilon)^2} \right\}.
\end{aligned} \tag{F.1}$$

Le premier terme dans l'accolade donne

$$-\frac{a}{2}\frac{1}{4i} H_0^{(1)}(K|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|).$$

Pour le deuxième terme, il faut évaluer

$$\begin{aligned}
\int \frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^2} e^{i\mathbf{k}(\mathbf{r}'-\mathbf{r})} \frac{J_m(ka)^2}{(K^2-k^2+i\epsilon)^2} =& \frac{1}{4\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{kdk}{(K^2-k^2+i\epsilon)^2} J_m(ka)^2 H_0^{(1)}(K|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|) \\
=& \frac{i}{2}\frac{d}{dk} \left. \frac{kJ_m(ka)^2 H_0^{(1)}(K|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|)}{(K+k+i\epsilon)^2} \right|_{k=K} \\
=& \frac{i}{8K^2} J_m(Ka) \Bigg(2KaJ_m(Ka)' \\
& - K|\mathbf{r}'-\mathbf{r}| J_m(Ka) \frac{H_1^{(1)}(K|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|)}{H_0^{(1)}(K|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|)} \Bigg) H_0^{(1)}(K|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|),
\end{aligned}$$

où l'avant-dernière ligne est obtenue par le théorème des résidus — voir (C.4) —et le $'$ indique la dérivation par rapport à l'argument. Ce résultat est ensuite inséré dans l'équation $(\text{F}.1)$ et en utilisant le théorème d'addition des fonctions de Bessel $\sum_m J_m(z)J_{m-n}(z) = \delta_{n,0}$ et la relation de récurrence $2J_m(z)' = J_{m-1}(z)J_{m+1}(z)$, on a

$$\begin{aligned}
&\left(\frac{2m}{\hbar^2}\right)^2 \rho \sum_{\mathbf{k}} \sum_{\mathbf{k}'} \frac{e^{i\mathbf{k}'\mathbf{r}'-i\mathbf{k}\mathbf{r}}}{(K^2-k^2+i\epsilon)^2} f_K^{\mathrm{off}}(k)\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \\
&= \frac{2m}{\hbar^2} 2\pi a\rho \left[-\frac{a}{8i} - \frac{i}{8K}\sum_m KaJ_{m-1}(Ka)^2\right] H_0^{(1)}(K|\mathbf{r}'-\mathbf{r}|) = 0.
\end{aligned}$$

La contribution de $f_K^{\mathrm{off}}(k)$ dans l'espace réel est donc nulle. Ce terme spurieux vient du fait que la matrice $\mathbf{t}$ est exprimée dans une base (la base des ondes planes) qui n'est pas adaptée à la symétrie de la matrice $\mathbf{t}$. Cependant, cette base est la plus pratique pour le calcul du propagateur.

Annexe G

Moyenne d'une chaîne indirecte

Nous évaluons de façon rigoureuse la première chaîne indirecte apparaissant dans la série de Watson, la séquence de diffusion (iji). L'expression non moyennée (3.5) permet d'écrire la séquence de diffusion (iji) sous la forme

$$
\begin{aligned}
&< \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_i(E)|\mathbf{k}> \\
&\quad = -4i\frac{\hbar^2}{2mV}e^{-i\mathbf{k}'\mathbf{R}_i+i\mathbf{k}\mathbf{R}_i}\sum_{m_1}\sum_{m_2}\sum_{m_3} e^{im_1\theta'-im_3\theta+i(m_1-m_2)(\pi/2-\theta_{ij})+i(m_2-m_3)(\pi/2-\theta_{ji})} \\
&\quad \times \frac{J_{m_1}(k'a)}{H_{m_1}^{(1)}(Ka)}\frac{J_{m_2}(Ka)}{H_{m_2}^{(1)}(Ka)}\frac{J_{m_3}(ka)}{H_{m_3}^{(1)}(Ka)}H_{m_1-m_2}^{(1)}(KR_{ij})H_{m_2-m_3}^{(1)}(KR_{ji}).
\end{aligned}
$$

Sachant que $R_{ji} = R_{ij}$ et que $\theta_{ji} = \theta_{ij} + \pi$, elle devient

$$
\begin{aligned}
&< \mathbf{k}'|\mathbf{t}_i(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_j(E)G_0^{(+)}(E)\mathbf{t}_i(E)|\mathbf{k}> \\
&\quad = -4i\frac{\hbar^2}{2mV}e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\mathbf{R}_i}\sum_{m_1}\sum_{m_2}\sum_{m_3} e^{im_1\theta'-im_3\theta+i(m_1-m_3)(\pi/2-\theta_{ij})-i(m_2-m_3)\pi} \\
&\quad \times \frac{J_{m_1}(k'a)}{H_{m_1}^{(1)}(Ka)}\frac{J_{m_2}(Ka)}{H_{m_2}^{(1)}(Ka)}\frac{J_{m_3}(ka)}{H_{m_3}^{(1)}(Ka)}H_{m_1-m_2}^{(1)}(KR_{ij})H_{m_2-m_3}^{(1)}(KR_{ij}).
\end{aligned}
$$

La moyenne s'obtient comme d'habitude en intégrant sur $\mathbf{R}_j$ et $\mathbf{R}_{ij} = \mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j$. La première intégration donne $(2\pi)^2\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')$ et l'intégration sur l'angle θ_{ij} conduit à $2\pi\delta_{m_1,m_3}$. Il reste alors à intégrer sur le module de $\mathbf{R}_{ij}$.

$$
\begin{aligned}
\overline{(iji)} &= -4i\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{2\pi}{V})^3\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\sum_{m_1}\sum_{m_2}\left(\frac{J_{m_1}(ka)}{H_{m_1}^{(1)}(Ka)}\right)^2\frac{J_{m_2}(Ka)}{H_{m_2}^{(1)}(Ka)} \\
&\times \int_{2a}^{L} R_{ij}dR_{ij}H_{m_1-m_2}^{(1)}(KR_{ij})H_{m_1-m_2}^{(1)}(KR_{ij}).
\end{aligned}
$$

L'intégration peut être faite exactement à l'aide de l'expression (A.12) et donne

$$
\begin{aligned}
\overline{(iji)} &= 4i\frac{\hbar^2}{2m}(\frac{2\pi}{V})^3\delta(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\sum_{m_1}\sum_{m_2}\left(\frac{J_{m_1}(ka)}{H_{m_1}^{(1)}(Ka)}\right)^2\frac{J_{m_2}(Ka)}{H_{m_2}^{(1)}(Ka)} \\
&\times 2a^2\left[(H_{m_1-m_2}^{(1)}(2Ka))^2 - H_{m_1-m_2-1}^{(1)}(2Ka)H_{m_1-m_2+1}^{(1)}(2Ka)\right].
\end{aligned}
\tag{G.1}
$$

Dans la limite du diffuseur ponctuel, ou dans la limite $Ka \to 0$, la première chaîne indirecte donne

$$\overline{(iji)} \sim -\frac{\hbar^2}{2m}\frac{8i}{\pi^2}\delta_{\mathbf{k},\mathbf{k}'}\left(\frac{1}{K^2(1+\frac{2i}{\pi}\ln\frac{Kae^\gamma}{2})^3} - \frac{a^2}{(1+\frac{2i}{\pi}\ln\frac{Kae^\gamma}{2})^2}\right) + \mathcal{O}(a^2). \qquad \text{(G.2)}$$

Annexe H

Propagateur auxiliaire pour les impuretés

H.1 Calcul du propagateur par le formalisme de la seconde quantification

Le propagateur auxiliaire de l'impureté s'écrit

$$iG_\alpha(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t') = \langle T[\phi(\mathbf{x},t)\phi^\dagger(\mathbf{x}',t')]\rangle_\alpha = \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\{n\}}\langle n|T[\phi(\mathbf{x},t)\phi^\dagger(\mathbf{x}',t')]|n\rangle \tag{H.1}$$

en représentation de Heisenberg. Le symbole T ordonne les opérateurs selon le temps. La constante $\mathcal{N}$ est une constante de normalisation qui sera évaluée plus loin. En représentation d'interaction, le propagateur devient

$$iG_\alpha(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t') = \frac{1}{\mathcal{N}}\sum_{\{n\}}\langle n|T[e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-T}^{T}dtH_\alpha(t)}\phi(\mathbf{x},t)\phi^\dagger(\mathbf{x}',t')]|n\rangle$$

où $|n\rangle$ sont les états propres de H_i, le hamiltonien libre donné en (6.6). On a alors

$$\begin{aligned}
i\mathcal{N}G_\alpha(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t') &= \sum_{\{n\}}\langle n|T[e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-T}^{T}dtH_\alpha(t)}e^{iH_it}\phi(\mathbf{x})e^{-iH_i(t-t')}\phi^\dagger(\mathbf{x}')e^{-iH_it'}]|n\rangle\\
&= \sum_{\{n\}}\theta(t-t')\langle n|e^{-i\int_t^T dt\int d\mathbf{y}\alpha\phi^\dagger(\mathbf{y},t)\phi(\mathbf{y},t)}e^{iH_it}\phi(\mathbf{x})e^{-iH_it}\\
&\quad e^{-i\int_{t'}^{t}dt\int d\mathbf{y}\alpha\phi^\dagger(\mathbf{y},t)\phi(\mathbf{y},t)}e^{iH_it'}\phi^\dagger(\mathbf{x}')e^{-iH_it'}e^{-i\int_{-T}^{t'}dt\int d\mathbf{y}\alpha\phi^\dagger(\mathbf{y},t)\phi(\mathbf{y},t)}|n\rangle\\
&\quad -\sum_{\{n\}}\theta(t'-t)\langle n|e^{-i\int_{t'}^{T}dt\int d\mathbf{y}\alpha\phi^\dagger(\mathbf{y},t)\phi(\mathbf{y},t)}e^{iH_it'}\phi^\dagger(\mathbf{x}')e^{-iH_it'}\\
&\quad e^{-i\int_{t}^{t'}dt\int d\mathbf{y}\alpha\phi^\dagger(\mathbf{y},t)\phi(\mathbf{y},t)}e^{iH_it}\phi(\mathbf{x})e^{-iH_it}e^{-i\int_{-T}^{t}dt\int d\mathbf{y}\alpha\phi^\dagger(\mathbf{y},t)\phi(\mathbf{y},t)}|n\rangle.
\end{aligned}$$

Dans le cas où la masse des impuretés est infinie, $H_i = 0$. Les états propres sont

$$|n\rangle = \prod_{\mathbf{x}}\left(a_{\mathbf{x}}^\dagger\right)^{n_{\mathbf{x}}}|0\rangle.$$

L'opérateur $a_{\mathbf{x}} \equiv a_{\mathbf{x}_n}$ est sans dimension. Le produit

$$a_s^d \phi^\dagger(\mathbf{x},t)\phi(\mathbf{x},t) = a_s^d e^{iH_it}\phi^\dagger(\mathbf{x})e^{-iH_it}e^{iH_it}\phi(\mathbf{x})e^{-iH_it} = a_s^2\phi^\dagger(\mathbf{x})\phi(\mathbf{x}) = a_{\mathbf{x}}^\dagger a_{\mathbf{x}} \equiv \hat{n}_{\mathbf{x}}$$

est l'opérateur nombre de particules en $\mathbf{x}$ en chaque instant, et vaut 0 ou 1 pour les fermions. L'opérateur $\int d\mathbf{x}\phi^\dagger(\mathbf{x},t)\phi(\mathbf{x},t) \equiv \sum_{\mathbf{x}} a_{\mathbf{x}}^\dagger a_{\mathbf{x}} \equiv \hat{n}$ donne le nombre de fermions dans le système en considération et est indépendant du temps.

A partir des relations d'anticommutation des opérateurs de création et d'annihilation des particules, on montre que $[\hat{n}_{\mathbf{x}},a_{\mathbf{y}}]_- = -\delta_{\mathbf{x},\mathbf{y}}a_{\mathbf{y}}$ et donc que $[\hat{n},a_{\mathbf{y}}]_- = -a_{\mathbf{y}}$. Ainsi, $a_{\mathbf{y}}\hat{n}^p = (\hat{n}+1)^p a_{\mathbf{y}}$ et $a_{\mathbf{y}}^\dagger\hat{n}^p = (\hat{n}-1)^p a_{\mathbf{y}}^\dagger$ pour p entier.

Lorsque $m_i = \infty$, le propagateur devient

$$\begin{aligned}
i\mathcal{N}\hat{G}_\alpha(\mathbf{x}_n,t_m;\mathbf{x}_{n'},t_{m'}) = &\sum_{\{n\}} \theta(t-t')\langle n|e^{-i\alpha\hat{n}(T-t)}a_{\mathbf{x}}e^{-i\alpha\hat{n}(t-t')}a_{\mathbf{x}'}^\dagger e^{-i\alpha\hat{n}(t'+T)}|n\rangle \\
&-\sum_{\{n\}} \theta(t'-t)\langle n|e^{-i\alpha\hat{n}(T-t')}a_{\mathbf{x}'}^\dagger e^{-i\alpha\hat{n}(t'-t)}a_{\mathbf{x}}e^{-i\alpha\hat{n}(t+T)}|n\rangle
\end{aligned}$$

où le propagateur sur réseau est donné par $\hat{G}_\alpha(\mathbf{x}_n,t_m;\mathbf{x}_{n'},t_{m'}) = a_s^d G_\alpha(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t')$.
Le premier terme s'écrit

$$\begin{aligned}
&\sum_{\{n\}} \langle n|e^{-i\alpha\hat{n}(T-t)}a_{\mathbf{x}}e^{-i\alpha\hat{n}(t-t')}a_{\mathbf{x}'}^\dagger e^{-i\alpha\hat{n}(t'+T)}|n\rangle \\
&\quad=\langle 0|e^{-i\alpha\hat{n}(T-t)}a_{\mathbf{x}}e^{-i\alpha\hat{n}(t-t')}a_{\mathbf{x}'}^\dagger e^{-i\alpha\hat{n}(t'+T)}|0\rangle \\
&\qquad+\sum_{\mathbf{z}}\langle 0|a_{\mathbf{z}}e^{-i\alpha\hat{n}(T-t)}a_{\mathbf{x}}e^{-i\alpha\hat{n}(t-t')}a_{\mathbf{x}'}^\dagger e^{-i\alpha\hat{n}(t'+T)}a_z^\dagger|0\rangle \\
&\qquad+\frac{1}{2!}\sum_{\mathbf{z}}\sum_{\mathbf{z}'}\langle 0|a_{\mathbf{z}'}a_{\mathbf{z}}e^{-i\alpha\hat{n}(T-t)}a_{\mathbf{x}}e^{-i\alpha\hat{n}(t-t')}a_{\mathbf{x}'}^\dagger e^{-i\alpha\hat{n}(t'+T)}a_z^\dagger a_{\mathbf{z}'}^\dagger|0\rangle \\
&\qquad+\cdots
\end{aligned}$$

Sachant que l'on a M sites, et que la $\sum_{\mathbf{z}}$ porte sur tous ces sites sauf le site $\mathbf{x}$ où il y a déjà une particule, on obtient, en rassemblant les opérateurs de création et annihilation du même côté,

$$\begin{aligned}
&\sum_{\{n\}} \langle n|e^{-i\alpha\hat{n}(T-t)}a_{\mathbf{x}}e^{-i\alpha\hat{n}(t-t')}a_{\mathbf{x}'}^\dagger e^{-i\alpha\hat{n}(t'+T)}|n\rangle \\
&\quad=\langle 0|e^{-i\alpha\hat{n}2T}e^{-i\alpha(t-t')}\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}|0\rangle \\
&\qquad+(M-1)\langle 0|e^{-i\alpha(\hat{n}+1)2T}e^{-i\alpha(t-t')}\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}|0\rangle \\
&\qquad+\frac{1}{2}(M-1)(M-2)\langle 0|e^{-i\alpha(\hat{n}+2)2T}e^{-i\alpha(t-t')}\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}|0\rangle \\
&\qquad+\cdots
\end{aligned}$$

Ce qui donne finalement

$$\begin{aligned}
\sum_{\{n\}} \langle n|e^{-i\alpha\hat{n}(T-t)}a_{\mathbf{x}}e^{-i\alpha\hat{n}(t-t')}a_{\mathbf{x}'}^\dagger e^{-i\alpha\hat{n}(t'+T)}|n\rangle =&e^{-i\alpha(t-t')}\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}\sum_{p=0}^{M-1}\mathcal{C}_p^{M-1}e^{-2i\alpha pT} \\
=&e^{-i\alpha(t-t')}\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}(1+e^{-2i\alpha T})^{M-1}.
\end{aligned}$$

La partie $t < t'$ du propagateur conduit de la même façon à

$$\begin{aligned}
&\sum_{\{n\}} \langle n|e^{-i\alpha\hat{n}(T-t')}a^{\dagger}_{\mathbf{x}'}e^{-i\alpha\hat{n}(t'-t)}a_{\mathbf{x}}e^{-i\alpha\hat{n}(t+T)}|n\rangle \\
&\quad=\langle 0|e^{-i\alpha\hat{n}(T-t')}e^{-i\alpha(\hat{n}-1)(t'-t)}e^{-i\alpha\hat{n}(t+T)}a^{\dagger}_{\mathbf{x}'}a_{\mathbf{x}}|0\rangle \\
&\qquad+\sum_{\mathbf{z}}\langle 0|e^{-i\alpha(\hat{n}+1)(T-t')}e^{-i\alpha\hat{n}(t'-t)}e^{-i\alpha(\hat{n}+1)(t+T)}a_{\mathbf{z}}a^{\dagger}_{\mathbf{x}'}a_{\mathbf{x}}a^{\dagger}_{z}|0\rangle \\
&\qquad+\frac{1}{2!}\sum_{\mathbf{z}}\sum_{\mathbf{z}'}\langle 0|e^{-i\alpha(\hat{n}+2)(T-t')}e^{-i\alpha(\hat{n}+1)(t'-t)}e^{-i\alpha(\hat{n}+2)(t+T)}a_{\mathbf{z}'}a_{\mathbf{z}}a^{\dagger}_{\mathbf{x}'}a_{\mathbf{x}}a^{\dagger}_{z}a^{\dagger}_{\mathbf{z}'}|0\rangle \\
&\qquad+\cdots \\
&\quad=0+\sum_{\mathbf{z}}\langle 0|e^{-i\alpha(\hat{n}+1)2T}e^{-i\alpha(t-t')}a_{\mathbf{z}}(\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}-a_{\mathbf{x}}a^{\dagger}_{\mathbf{x}'})a^{\dagger}_{z}|0\rangle \\
&\qquad+\frac{1}{2!}\sum_{\mathbf{z}}\sum_{\mathbf{z}'}\langle 0|e^{-i\alpha(\hat{n}+2)2T}e^{-i\alpha(t-t')}a_{\mathbf{z}'}a_{\mathbf{z}}(\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}-a_{\mathbf{x}}a^{\dagger}_{\mathbf{x}'})a^{\dagger}_{z}a^{\dagger}_{\mathbf{z}'}|0\rangle \\
&\qquad+\cdots \\
&\quad=e^{-i\alpha(t-t')}\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}\left[e^{-i\alpha 2T}+(M-1)e^{-i\alpha 4T}+\cdots\right],
\end{aligned}$$

que l'on peut écrire sous la forme compacte

$$\begin{aligned}
&\sum_{\{n\}} \langle n|e^{-i\alpha\hat{n}(T-t')}a^{\dagger}_{\mathbf{x}'}e^{-i\alpha\hat{n}(t'-t)}a_{\mathbf{x}}e^{-i\alpha\hat{n}(t+T)}|n\rangle \\
&\qquad=e^{-i\alpha(t-t')}\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}\sum_{p=0}^{M}(\mathcal{C}_p^M-\mathcal{C}_p^{M-1}(1-\delta_{p,M}))e^{-2i\alpha pT} \\
&\qquad=e^{-i\alpha(t-t')}\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}(1+e^{-2i\alpha T})^{M-1}e^{-2i\alpha T}.
\end{aligned}$$

Pour une particule de masse infinie, on a alors

$$i\mathcal{N}\hat{G}_\alpha(\mathbf{x}_n,t_m;\mathbf{x}_{n'},t_{m'}) = e^{-i\hat{\alpha}(m-m')}\delta_{n,n'}(1+e^{-2i\alpha T})^{M-1}\Big(\theta(t-t')-\theta(t'-t)e^{-2i\alpha T}\Big).$$

La constante de normalisation est

$$\mathcal{N}=\sum_{\{n\}}\langle n|T[e^{-\frac{i}{\hbar}\int_{-T}^{T}dtH_\alpha(t)}]|n\rangle=\sum_{p=0}^{M}\mathcal{C}_p^M e^{-2i\alpha pT}=(1+e^{-2i\alpha T})^M. \tag{H.2}$$

La constante $\mathcal{N}$ est reliée au déterminant de G_α par $\mathcal{N}=\det[iG_\alpha]^{-1}$. Ainsi,

$$i\hat{G}_\alpha(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t')=e^{-i\alpha(t-t')}\delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'}(1+e^{-2i\alpha T})^{-1}\Big(\theta(t-t'-\eta)-\theta(t'-t+\eta)e^{-2i\alpha T}\Big),$$

où le chapeau sur G signifie que le propagateur est évalué sur réseau (c'est-à-dire que $(\mathbf{x},t,\mathbf{x}',t')\equiv(\mathbf{x}_n,t_m,\mathbf{x}_{n'},t_{m'})$). Dans le continuum, il devient

$$\boxed{iG_\alpha(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t')=\delta(\mathbf{x}-\mathbf{x}')\frac{e^{-i\alpha(t-t')}}{1+e^{-2i\alpha T}}\Big(\theta(t-t'-\eta)-\theta(t'-t+\eta)e^{-2i\alpha T}\Big),} \tag{H.3}$$

où η est une quantité infinitésimale positive nécessaire à la définition du propagateur lorsque les temps t et t' sont égaux.

H.2 Approche fonctionnelle

Le propagateur de l'impureté peut s'obtenir à partir de la fonction de partition du système qui s'exprime comme une trace sur les états cohérents. Cette fonction de partition s'écrit [70, p.68], en unités $\hbar = 1$,

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_{0\alpha} =& Tr e^{-i\int_{-T}^{T} dt H_\alpha(t)} \\ =& \int_{\phi_f=-\phi_i} \prod_x d\phi^\dagger(x) d\phi(x) e^{-\int dx \phi^\dagger(x)\phi(x)} \langle \phi_f | e^{-i\int_{-T}^{T} dt H_\alpha(t)} | \phi_i \rangle,\end{aligned} \tag{H.4}$$

où $\phi_f = -\phi_i$ sont les conditions antipériodiques imposées par la trace (le signe négatif vient de la formulation fermionique). En discrétisant l'intervalle temporel, et en insérant à chaque instant discret la relation de fermeture sur les états cohérents,

$$\int \prod_{\mathbf{x}} d\phi^\dagger(\mathbf{x},t_m) d\phi(\mathbf{x},t_m) e^{-\int d\mathbf{x} \phi^\dagger(\mathbf{x},t_m)\phi(\mathbf{x},t_m)} |\phi(\mathbf{x},t_m)\rangle\langle\phi(\mathbf{x},t_m)| = 1,$$

on a, en posant $\phi_i(x) \equiv \phi(\mathbf{x},t_{-\mathcal{M}}) = -\phi_f(x) \equiv -\phi(\mathbf{x},t_{\mathcal{M}})$

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_{0\alpha} = \lim_{\mathcal{M}\to\infty} \int \prod_{m=-\mathcal{M}+1}^{\mathcal{M}} \prod_{\mathbf{x}} d\phi^\dagger(\mathbf{x},t_m) d\phi(\mathbf{x},t_m) e^{-\int d\mathbf{x} \phi^\dagger(\mathbf{x},t_m)\phi(\mathbf{x},t_m)} \\ \times \prod_{m=-\mathcal{M}+1}^{\mathcal{M}} \langle \phi(\mathbf{x},t_m) | e^{-i\tau H_\alpha(t)} | \phi(\mathbf{x},t_{m-1})\rangle.\end{aligned} \tag{H.5}$$

Un opérateur $A(\hat{\phi}^\dagger(x),\hat{\phi}'(x))$ s'exprime, dans la base des états cohérents,

$$\langle \phi' | A(\hat{\phi}^\dagger(x),\hat{\phi}'(x)) | \phi \rangle = e^{\int dx \phi^\dagger(x)\phi'(x)} A(\phi^\dagger(x),\phi'(x)), \tag{H.6}$$

où le chapeau sert à différencier les opérateurs des fonctions. Ainsi

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_{0\alpha} =& \lim_{\mathcal{M}\to\infty} \int \prod_{m=-\mathcal{M}+1}^{\mathcal{M}} \prod_{\mathbf{x}} d\phi^\dagger(\mathbf{x},t_m) d\phi(\mathbf{x},t_m) e^{-\sum_{m=-\mathcal{M}+1}^{\mathcal{M}} \int d\mathbf{x} \phi^\dagger(\mathbf{x},t_m)\phi(\mathbf{x},t_m)} \\ & \times e^{-\sum_{m=-\mathcal{M}+2}^{\mathcal{M}} \int d\mathbf{x} \phi^\dagger(\mathbf{x},t_m)(1-i\tau\alpha)\phi(\mathbf{x},t_{m-1})} e^{-\int d\mathbf{x} \phi^\dagger(\mathbf{x},t_{-\mathcal{M}+1}(1-i\tau\alpha)\phi(\mathbf{x},t_{\mathcal{M}})} \\ =& \prod_{\mathbf{x}} \left[\lim_{\mathcal{M}\to\infty} \int \prod_{m=-\mathcal{M}+1}^{\mathcal{M}} d\phi^\dagger(\mathbf{x},t_m) d\phi(\mathbf{x},t_m) e^{-\sum_{m,n=-\mathcal{M}+1}^{\mathcal{M}} \phi^\dagger(\mathbf{x},t_m) S_{mn} \phi(\mathbf{x},t_n)} \right],\end{aligned} \tag{H.7}$$

où la matrice S vaut

$$S = \begin{pmatrix} 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 & A \\ -A & 1 & 0 & \cdots & \cdots & \cdots & 0 \\ 0 & -A & 1 & 0 & \cdots & \cdots & 0 \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & -A & 1 \end{pmatrix},$$

et $A = 1 - i\tau\alpha = 1 - i\alpha\frac{2T}{2\mathcal{M}}$. Finalement,

$$\begin{aligned}\mathcal{Z}_{0\alpha} =& \prod_{\mathbf{x}} \left[\lim_{\mathcal{M}\to\infty} \det S\right] = \prod_{\mathbf{x}} \lim_{\mathcal{M}\to\infty} \left[1 + (-1)^{2\mathcal{M}}(-A)^{2\mathcal{M}}\right] \\ =& \prod_{\mathbf{x}} \lim_{\mathcal{M}\to\infty} \left[1 + \left(1 - i\alpha\frac{2T}{2\mathcal{M}}\right)^{2\mathcal{M}}\right] = \prod_{\mathbf{x}} \left(1 + e^{-2i\alpha T}\right) = \left(1 + e^{-2i\alpha T}\right)^{M}. \end{aligned} \tag{H.8}$$

Le propagateur, pour $t_m > t_n$, est donné par

$$\begin{aligned} iG_\alpha(\mathbf{x}t_m;\mathbf{x}'t_n) =& \delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'} \left(S^{-1}\right)_{mn} = \delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'} \lim_{\mathcal{M}\to\infty} \frac{A^{m-n}}{1 + A^{2\mathcal{M}}} \\ =& \delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'} e^{-i\tau\alpha(t_m - t_n)} \left(1 - \frac{1}{1 + e^{2i\alpha T}}\right), \end{aligned} \tag{H.9}$$

et, pour $t_m < t_n$, par

$$\begin{aligned} iG_\alpha(\mathbf{x}t_m;\mathbf{x}'t_n) =& \delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'} \left(S^{-1}\right)_{mn} = \delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'} \lim_{\mathcal{M}\to\infty} \frac{-A^{2\mathcal{M}+m-n}}{1 + A^{2\mathcal{M}}} \\ =& - \delta_{\mathbf{x},\mathbf{x}'} e^{-i\tau\alpha(t_m - t_n)} \frac{1}{1 + e^{2i\alpha T}}. \end{aligned} \tag{H.10}$$

Les résultats (H.2) et (H.3) obtenus à partir des opérateurs de création et d'annihilation sont donc retrouvés.

H.3 Représentation dans l'espace de Fourier

La transformée de Fourier de l'équation (H.3) donne

$$\begin{aligned} G_\alpha(\mathbf{x},\mathbf{x}',\omega) =& \int d(t - t')e^{i\omega(t-t')} G_\alpha(\mathbf{x},t;\mathbf{x}',t') \\ =& \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \lim_{\eta\to 0^+} e^{i\omega\eta} \left(\frac{1 - n_\alpha}{\omega - \alpha + i\epsilon} + \frac{n_\alpha}{\omega - \alpha - i\epsilon}\right). \end{aligned} \tag{H.11}$$

Le facteur $e^{i\omega\eta}$ contraint l'énergie physique à se trouver dans le demi-plan supérieur.

H.4 Densité d'impuretés

La densité d'impuretés est retrouvée à partir du propagateur auxiliaire (H.3) de la façon suivante.

$$\begin{aligned} -iG(\mathbf{x},0;\mathbf{x},0^+) =& - \frac{\int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{i\alpha\rho M} \det[iG_{\alpha'}]^{-1} iG_{\alpha'}(\mathbf{x},0;\mathbf{x},0^+)}{\int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{i\alpha\rho M} \langle 1\rangle_{\alpha'}} \\ =& \frac{1}{a_s^d} \frac{\int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{iN\alpha} \left(1 + e^{-i\alpha}\right)^{M-1} e^{-i\alpha}}{\int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{iN\alpha} \left(1 + e^{-i\alpha}\right)^{M}} \\ =& \frac{1}{a_s^d} \frac{\sum_p \binom{M-1}{p} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{i(N-1-p)\alpha}}{\sum_p \binom{M}{p} \int_{-\pi}^{\pi} d\alpha e^{i(N-p)\alpha}} = \frac{1}{a_s^d} \frac{\binom{M-1}{N-1}}{\binom{M}{N}} = \frac{N}{M a_s^d} = \frac{N}{V} = \rho \end{aligned} \tag{H.12}$$

avec la notation $\binom{M}{p} = \frac{M!}{(M-p)!p!}$.

Annexe I

Cohérence des équations de flot

Les équations d'évolution des constantes de renormalisation obtenues à l'approximation du champ homogène doivent être retrouvées à partir des équations d'évolution des constantes de renormalisation obtenues en incluant les fluctuations de $\bar{u}$. En effet, lorsque nous allons au-delà de l'approximation du champ homogène, nous obtenons des équations d'évolution contenant l'impulsion $\mathbf{q}$ du photon. Lorsque $\mathbf{q} = 0$, les équations d'évolution ainsi obtenues doivent être les mêmes que celles évaluées à l'approximation la plus basse, *i.e.* avec un champ homogène.

Nous avons vu que la contribution du propagateur du photon à la partie bosonique obtenue à l'équation (7.76) peut être obtenue à partir de la contribution du photon de l'équation (7.41) par dérivation seconde par rapport au champ $\bar{u}$. En ce qui concerne la contribution du propagateur de l'électron, elle donne une masse au photon (à l'ordre $\mathbf{q}^0$) lorsque le calcul inclut les fluctuations, mais elle est nulle lorsque le calcul est fait directement avec un champ homogène. Cela ne signifie pas que les équations obtenues dans les deux cas ne sont pas compatibles.

Reprenons la contribution de l'électron à l'équation (7.41). Introduisons la notation

$$\gamma^{(n)}(p) \equiv Z_0^{(n)}\omega_p - Z_1^{(n)}\xi_{\mathbf{p}} + U_1^{(n)}$$

La contribution de l'électron, notée par un indice e, à l'équation (7.41) s'écrit

$$\partial_{M^2} U_2^e = -i\hbar f'(M^2)\int_p \frac{\xi_{\mathbf{p}}}{\gamma(p)}.$$

La dérivée seconde par rapport au champ $\bar{u}$ est

$$\partial_{M^2} U_2^{e(2)} = i\hbar f'(M^2)\int_p \xi_{\mathbf{p}}\left\{\frac{\gamma^{(2)}(p)}{\gamma(p)^2} - 2\frac{\gamma^{(1)}(p)^2}{\gamma(p)^3}\right\}. \tag{I.1}$$

Ce résultat doit être comparé à ce qui a été obtenu au paragraphe 7.7.2. L'équation (7.78) s'écrit, avec la notation simplifiée $\gamma(p)$,

$$Tr\left[\xi_{\mathbf{p}}\left[\mathfrak{W}_1\right]_{2,2}\right] = -\frac{1}{2}\int_p \xi_{\mathbf{p}}\frac{\gamma^{(2)}(p)}{\gamma(p)^2}\int_q \eta(-q)\eta(q).$$

L'équation (7.80) devient

$$Tr\left[\xi_{\mathbf{p}}\left[\mathfrak{W}_2\right]^b_{2,2}\right] = \int_p \xi_{\mathbf{p}}\int_q \eta(-q)\frac{\gamma^{(1)}(p)}{\gamma(p)^2}\frac{\gamma^{(1)}(p+q)}{\gamma(p+q)}\eta(q). \tag{I.2}$$

Posant maintenant $q = 0$ dans l'équation précédente, l'équation

$$-\frac{1}{2}\partial_{M^2} U_2^{e(2)} = if'(M^2)Tr\left[\xi_{\mathbf{p}}\left[\mathfrak{W}_1 + \mathfrak{W}_2\right]_{2,2}\right]$$

redonne bien le résultat (I.1). Le fait que les résultats obtenus pour le champ homogène à l'approximation d'une boucle sont différents de ceux obtenus à partir des fluctuations vient de ce que l'équation (I.2) n'est pas analytique en $q = 0$.

Annexe J

Partie fermionique de l'équation d'évolution à l'approximation du champ homogène

Pour calculer les contributions provenant du propagateur du photon et du propagateur de l'électron séparément, il est utile d'introduire un indice p (resp. e) pour désigner la contribution du propagateur du photon (resp. de l'électron).

Ainsi, les constantes de renormalisation Z_0, Z_1^c et U_1 s'écrivent comme la somme de deux contributions $\left\{\begin{array}{ll} Z_0 = & Z_0^p + Z_0^e \\ Z_1^c = & Z_1^p + Z_1^e \\ U_1 = & U_1^p + U_1^e \end{array}\right.$. Chaque contribution de chaque constante de renormalisation vérifie alors une équation d'évolution du type

$$\partial_{M^2} Z_0^p = f^p(Z_0, Z_1, U_1, Z_2, U_2), \tag{J.1}$$

où f^p est une fonction des constantes de renormalisation obtenue uniquement à partir du propagateur du photon de l'équation (7.33). Les termes Z_0^p ou Z_0^e n'ont aucun sens pris séparément. L'équation d'évolution (J.1) est purement formelle ; seule l'équation d'évolution de Z_0 peut être interprétée physiquement. Ces notations ne sont introduites que pour une étape intermédiaire de calcul.

J.1 Contribution du propagateur du photon

L'identification des parties fermioniques des équations (7.34) et (7.39) conduit à

$$\begin{aligned} \partial_{M^2} Z_0^p \omega_q - \partial_{M^2} Z_1^p \xi_{\mathbf{q}} + \partial_{M^2} U_1^p = \frac{i\hbar}{2} \int_p \frac{1}{(Z_2 \mathbf{p}^2 + U_2^{(2)})^2} \Bigg\{ & Z_0^{(2)} \omega_q - Z_1^{(2)} \xi_{\mathbf{q}} + U_1^{(2)} \\ + (Z_0^{(1)} \omega_q - Z_1^{(1)} \xi_{\mathbf{q}} + U_1^{(1)}) \Big[& \frac{Z_0^{(1)}(\omega_p + \omega_q) - Z_1^{(1)} \xi_{\mathbf{p+q}} + U_1^{(1)}}{Z_0(\omega_p + \omega_q) - Z_1 \xi_{\mathbf{p+q}} + U_1} \\ & + \frac{Z_0^{(1)}(\omega_p - \omega_q) - Z_1^{(1)} \xi_{\mathbf{p-q}} + U_1^{(1)}}{Z_0(\omega_p - \omega_q) - Z_1 \xi_{\mathbf{p-q}} + U_1} \Big] \Bigg\}. \end{aligned} \tag{J.2}$$

L'intégration sur l'énergie est faite en premier lieu. La partie imaginaire de U_1 change de signe quand l'impulsion de l'électron passe au-dessus du niveau de Fermi et l'exponentielle de l'équation (7.52) régularisant l'intégrale est implicitement présente. Calculons d'abord

$$\begin{aligned}
&\int_p \frac{1}{(Z_2\mathbf{p}^2+U_2^{(2)})^2}\frac{Z_0^{(1)}(\omega_p\pm\omega_q)-Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p}\pm\mathbf{q}}+U_1^{(1)}}{Z_0(\omega_p\pm\omega_q)-Z_1\xi_{\mathbf{p}\pm\mathbf{q}}+U_1}\\
&=\int\frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\frac{1}{(Z_2\mathbf{p}^2+U_2^{(2)})^2}\int\frac{d\omega_p}{2\pi}\frac{Z_0^{(1)}(\omega_p\pm\omega_q)-Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p}\pm\mathbf{q}}+U_1^{(1)}}{Z_0(\omega_p\pm\omega_q)-Z_1\xi_{\mathbf{p}\pm\mathbf{q}}+U_1}\\
&=\frac{i}{Z_0^2}\int\frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\frac{(Z_0^{(1)}Z_1-Z_0Z_1^{(1)})\xi_{\mathbf{p}\pm\mathbf{q}}-(Z_0^{(1)}-Z_0)U_1^{(1)}}{(Z_2\mathbf{p}^2+U_2^{(2)})^2}\Theta(-\xi_{\mathbf{p}\pm\mathbf{q}}).
\end{aligned}$$

À l'aide du changement de variable $\mathbf{k}=\mathbf{p}\pm\mathbf{q}$ et du développement en puissances de $\xi_{\mathbf{q}}=(\mathbf{q}^2-k_F^2)/2m$, l'expression précédente devient

$$\begin{aligned}
&\frac{i}{Z_0^2}\int\frac{d\mathbf{k}}{(2\pi)^3}\frac{(Z_0^{(1)}Z_1-Z_0Z_1^{(1)})\xi_{\mathbf{k}}-(Z_0^{(1)}-Z_0)U_1^{(1)}}{\Big(Z_2\mathbf{k}^2+U_2^{(2)}+Z_2(\mathbf{q}^2\mp2\mathbf{kq})\Big)^2}\Theta(-\xi_{\mathbf{k}})\\
&=\frac{i}{2\pi^2Z_0^2}\int_0^{k_F}\mathsf{k}^2d\mathsf{k}\frac{(Z_0^{(1)}Z_1-Z_0Z_1^{(1)})\xi_{\mathbf{k}}-(Z_0^{(1)}-Z_0)U_1^{(1)}}{[Z_2(\mathsf{k}^2+\mathsf{q}^2)+U_2^{(2)}]^2-4Z_2^2\mathsf{k}^2\mathsf{q}^2}\\
&=\frac{i}{2\pi^2Z_0^2}\int_0^{k_F}\mathsf{k}^2d\mathsf{k}\frac{(Z_0^{(1)}Z_1-Z_0Z_1^{(1)})\xi_{\mathbf{k}}-(Z_0^{(1)}-Z_0)U_1^{(1)}}{[Z_2(\mathsf{k}^2+k_F^2)+U_2^{(2)}]^2-4Z_2^2\mathsf{k}^2k_F^2}\\
&\quad\times\left\{1-4mZ_2\frac{Z_2(k_F^2-\mathsf{k}^2)+U_2^{(2)}}{[Z_2(\mathsf{k}^2+{k_F}^2)+U_2^{(2)}]^2-4Z_2^2\mathsf{k}^2{k_F}^2}\xi_{\mathbf{q}}+\mathcal{O}(\xi_{\mathbf{q}}^2)\right\}.
\end{aligned}$$

Replaçant cette expression dans l'équation (J.2) et identifiant chaque terme du développement en puissances de $\xi_{\mathbf{q}}$, nous obtenons les équations d'évolution pour Z_0^p, Z_1^p et U_1^p à l'approximation du champ homogène ($\bar{u}\approx u_0$).

$$\begin{aligned}
\partial_{M^2}Z_0^p=&\frac{i\hbar}{2}\int_p\frac{Z_0^{(2)}}{(Z_2\mathbf{p}^2+U_2^{(2)})^2}\\
&-\frac{\hbar}{2\pi^2}\frac{Z_0^{(1)}}{Z_0^2}\int_0^{k_F}\mathsf{p}^2d\mathsf{p}\frac{(Z_0^{(1)}Z_1-Z_0Z_1^{(1)})\xi_{\mathbf{p}}-(Z_0^{(1)}-Z_0)U_1^{(1)}}{[Z_2(\mathsf{p}^2+{k_F}^2)+U_2^{(2)}]^2-4Z_2^2\mathsf{p}^2{k_F}^2}.
\end{aligned}\tag{J.3}$$

$$\begin{aligned}
\partial_{M^2}Z_1^p=&\frac{i\hbar}{2}\int_p\frac{Z_1^{(2)}}{(Z_2\mathbf{p}^2+U_2^{(2)})^2}\\
&-\frac{\hbar}{2\pi^2Z_0^2}\int_0^{k_F}\mathsf{p}^2d\mathsf{p}\frac{(Z_0^{(1)}Z_1-Z_0Z_1^{(1)})\xi_{\mathbf{p}}-(Z_0^{(1)}-Z_0)U_1^{(1)}}{[Z_2(\mathsf{p}^2+{k_F}^2)+U_2^{(2)}]^2-4Z_2^2\mathsf{p}^2{k_F}^2}\\
&\times\left\{Z_1^{(1)}+4mZ_2U_1^{(1)}\frac{Z_2(k_F^2-\mathsf{p}^2)+U_2^{(2)}}{[Z_2(\mathsf{p}^2+{k_F}^2)+U_2^{(2)}]^2-4Z_2^2\mathsf{p}^2{k_F}^2}\right\}.
\end{aligned}\tag{J.4}$$

et

$$\begin{aligned}
\partial_{M^2}U_1^p=&\frac{i\hbar}{2}\int_p\frac{U_1^{(2)}}{(Z_2\mathbf{p}^2+U_2^{(2)})^2}\\
&-\frac{\hbar U_1^{(1)}}{2\pi^2Z_0^2}\int_0^{k_F}\mathsf{p}^2d\mathsf{p}\frac{(Z_0^{(1)}Z_1-Z_0Z_1^{(1)})\xi_{\mathbf{p}}-(Z_0^{(1)}-Z_0)U_1^{(1)}}{[Z_2(\mathsf{p}^2+{k_F}^2)+U_2^{(2)}]^2-4Z_2^2\mathsf{p}^2{k_F}^2}.
\end{aligned}\tag{J.5}$$

J.2 Contribution du propagateur de l'électron

L'identification des parties fermioniques des équations (7.34) et (7.40) conduit à

$$\begin{aligned}
&\partial_{M^2}(Z_0^e\omega_q - Z_1^e\xi_{\mathbf{q}} + U_1^e)\\
&\quad=\hbar f'(M^2)\frac{Z_0^{(1)}}{Z_0^2}(Z_0^{(1)}\omega_q - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{q}} + U_1^{(1)})\int\frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\frac{\xi_{\mathbf{p}}}{Z_2(\mathbf{p}+\mathbf{q})^2+U_2^{(2)}}\\
&\quad=\hbar f'(M^2)\frac{Z_0^{(1)}}{Z_0^2}(Z_0^{(1)}\omega_q - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{q}} + U_1^{(1)})\int\frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\frac{1}{Z_2\mathbf{p}^2+U_2^{(2)}}\left\{\frac{\mathbf{p}^2}{2m}+\xi_{\mathbf{q}}\right\}.
\end{aligned}$$

Les équations d'évolution intermédiaires des différentes constantes de renormalisation de la partie fermionique s'en déduisent immédiatement.

$$\partial_{M^2}Z_0^e = \hbar f'(M^2)\frac{\left(Z_0^{(1)}\right)^2}{2mZ_0^2}\int\frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\frac{\mathbf{p}^2}{Z_2\mathbf{p}^2+U_2^{(2)}}, \tag{J.6}$$

$$\partial_{M^2}Z_1^e = \hbar f'(M^2)\frac{Z_0^{(1)}}{Z_0^2}\int\frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\frac{1}{Z_2\mathbf{p}^2+U_2^{(2)}}\left(Z_1^{(1)}\frac{\mathbf{p}^2}{2m}-U_1^{(1)}\right), \tag{J.7}$$

et

$$\partial_{M^2}U_1^e = \hbar f'(M^2)\frac{Z_0^{(1)}U_1^{(1)}}{2mZ_0^2}\int\frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\frac{\mathbf{p}^2}{Z_2\mathbf{p}^2+U_2^{(2)}}. \tag{J.8}$$

Notons que l'intégration sur l'impulsion $\mathbf{p}$ comporte une coupure ultraviolette Λ, nécessaire pour régulariser les intégrales.

Finalement, les deux types de contribution sont regroupés pour écrire les équations (7.43), (7.44) et (7.45).

Annexe K

Éléments de la matrice Γ_{fl}

Les éléments de la matrice Γ_{fl} sont, dans l'espace de Fourier,

$$A_{p_1,p_2} = -\frac{1}{\sqrt{VT}}(Z_0^{(1)}\omega_{p_2} - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p_2}} + U_1^{(1)})\eta(p_1 - p_2) \\ - \frac{1}{2}\int_q \eta(q)\eta(p_1 - p_2 - q)(Z_0^{(2)}\omega_{p_2} - Z_1^{(2)}\xi_{\mathbf{p_2}} + U_1^{(2)}),$$

$$B = D = 0,$$

$$C_{p_1,p_2} = -\int_q \eta(p_1 - p_2 - q)(Z_0^{(2)}\omega_q - Z_1^{(2)}\xi_{\mathbf{q}} + U_1^{(2)})\bar{\psi}(q) \\ - \frac{1}{2}(VT)^{3/2}\int_{q_1}\int_{q_2}\int_{q_3}\eta(q_1)\eta(q_2)(Z_0^{(3)}\omega_{q_3} - Z_1^{(3)}\xi_{\mathbf{q_3}} + U_1^{(3)})\bar{\psi}(q_3)\delta_{q_1+q_2+q_3-p_1+p_2},$$

$$E_{p_1,p_2} = \frac{1}{\sqrt{VT}}(Z_0^{(1)}\omega_{p_1} - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p_1}} + U_1^{(1)})\eta(p_2 - p_1) \\ + \frac{1}{2}\int_q \eta(q)\eta(p_2 - p_1 - q)(Z_0^{(2)}\omega_{p_1} - Z_1^{(2)}\xi_{\mathbf{p_1}} + U_1^{(2)}),$$

$$F_{p_1,p_2} = \int_q \eta(p_1 - p_2 + q)\bar{\psi}^\dagger(q)(Z_0^{(2)}\omega_{p_1} - Z_1^{(2)}\xi_{\mathbf{p_1}} + U_1^{(2)}) \\ + \frac{1}{2}(VT)^{3/2}\int_{q_1}\int_{q_2}\int_{q_3}\eta(q_1)\eta(q_2)\bar{\psi}^\dagger(q_3)(Z_0^{(3)}\omega_{p_1} - Z_1^{(3)}\xi_{\mathbf{p_1}} + U_1^{(3)})\delta_{q_1+q_2-q_3-p_1+p_2},$$

$$G_{p_1,p_2} = -\int_q \eta(p_2 - p_1 + q)\bar{\psi}^\dagger(q)(Z_0^{(2)}\omega_{p_2} - Z_1^{(2)}\xi_{\mathbf{p_2}} + U_1^{(2)}) \\ - \frac{1}{2}(VT)^{3/2}\int_{q_1}\int_{q_2}\int_{q_3}\eta(q_1)\eta(q_2)\bar{\psi}^\dagger(q_3)(Z_0^{(3)}\omega_{p_2} - Z_1^{(3)}\xi_{\mathbf{p_2}} + U_1^{(3)})\delta_{q_1+q_2-q_3+p_1-p_2},$$

$$H_{p_1,p_2} = \int_q \eta(p_2 - p_1 - q)(Z_0^{(2)}\omega_q - Z_1^{(2)}\xi_{\mathbf{q}} + U_1^{(2)})\bar{\psi}(q) \\ + \frac{1}{2}(VT)^{3/2}\int_{q_1}\int_{q_2}\int_{q_3}\eta(q_1)\eta(q_2)(Z_0^{(3)}\omega_{q_3} - Z_1^{(3)}\xi_{\mathbf{q_3}} + U_1^{(3)})\bar{\psi}(q_3)\delta_{q_1+q_2+q_3+p_1-p_2},$$

et enfin

$$
\begin{aligned}
I_{p_1,p_2} = (VT)^{3/2} \int_{q_1}\int_{q_2}\int_{q_3} \eta(q_1)\bar{\psi}^\dagger(q_2)(Z_0^{(3)}\omega_{q_3} - Z_1^{(3)}\xi_{\mathbf{q_3}} + U_1^{(3)})\bar{\psi}(q_3)\delta_{q_1-q_2+q_3-p_1+p_2} \\
- \frac{1}{\sqrt{VT}}\eta(p_1-p_2)\left(Z_2^{(1)}\left[(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2)^2+\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\right]+U_2^{(3)}\right) \\
+\frac{1}{2}(VT)^2\int_{q_1}\int_{q_2}\int_{q_3}\int_{q_4}\eta(q_1)\eta(q_2)\bar{\psi}^\dagger(q_3)(Z_0^{(4)}\omega_{q_4}-Z_1^{(4)}\xi_{\mathbf{q_4}}+U_1^{(4)})\bar{\psi}(q_4)\delta_{q_1+q_2-q_3+q_4-p_1+p_2} \\
-\frac{1}{2}\int_q \eta(q)\eta(p_1-p_2-q)\left(Z_2^{(2)}\left[(\mathbf{p}_1-\mathbf{p}_2-\mathbf{q})^2+\mathbf{p}_1\mathbf{p}_2\right]+U_2^{(4)}\right).
\end{aligned}
$$

Annexe L

Intégration sur la fréquence du diagramme de polarisation

Dans cette annexe, le calcul de l'intégrale sur la fréquence du dernier terme de l'équation (7.81) est effectué à l'aide du théorème des résidus d'abord de façon générale avec les différentes constantes de renormalisation, puis à l'approximation d'une boucle pour retrouver la fonction de Lindhard [32].

Écrivant $E = Z_0\omega_p$, l'intégrale à évaluer est

$$I = \int \frac{dE}{2\pi} \frac{(Z_0^{(1)}/Z_0 E - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p}} + U_1^{(1)})}{(E - Z_1\xi_{\mathbf{p}} + U_1)^2} \frac{(Z_0^{(1)}/Z_0(E + Z_0\omega_q) - Z_1^{(1)}\xi_{\mathbf{p+q}} + U_1^{(1)})}{(E + Z_0\omega_q - Z_1\xi_{\mathbf{p+q}} + U_1)}.$$

Rappelons que la partie imaginaire de U_1 change de signe selon que l'impulsion est au-dessus ou au-dessous du niveau de Fermi, de la même façon que δ_p. Le propagateur se décompose en deux parties selon l'équation (7.53). L'intégrale ci-dessus contient donc quatre termes. Les quatre pôles, dont deux sont doubles, sont répartis de façon symétrique par rapport à l'axe réel. Deux termes ont leur pôle du même côté de l'axe réel et les deux autres termes possèdent un pôle de chaque côté de l'axe réel. Puisque l'intégrand se comporte comme $1/E$ lorsque $E \to \infty$, il est nécessaire d'utiliser ici encore la régularisation de l'équation (7.52). Par conséquent, le contour d'intégration doit être choisi dans le demi-plan supérieur.

Notons que le calcul du diagramme de polarisation fait intervenir l'intégrale $\int_p G(p)G(p+q)$ où G représente le propagateur de l'électron, mais que tous les pôles de cette intégrale sont simples. De plus, cette intégrale décroît plus vite que $1/E$ à l'infini, permettant ainsi l'utilisation de contours évitant la présence de deux pôles du même côté de l'axe réel. Par ailleurs, le fait que son numérateur est indépendant de E entraîne que l'intégrale est non nulle seulement lorsque les pôles sont de chaque côté de l'axe réel.

Appelons le numérateur $h(E)$ et posons également

$$c_1 - i\delta_p = Z_1\xi_{\mathbf{p}} - U_1 \quad \text{et} \quad c_2 - i\delta_{\mathbf{p+q}} = Z_1\xi_{\mathbf{p+q}} - Z_0\omega_q - U_1.$$

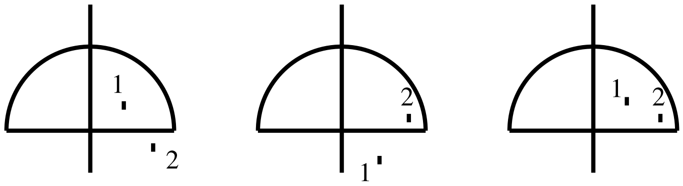
$\delta_p = \delta > 0$ pour $\xi_{\mathbf{p}} \geq 0$ et vice versa. L'intégrale I devient

$$I = \int \frac{dE}{2\pi} \frac{h(E)}{(E - c_1 + i\delta_p)^2 (E - c_2 + i\delta_{p+q})}$$

Le théorème des résidus conduit à

$$I = i\frac{h'(c_1)(c_1-c_2)-h(c_1)}{(c_1-c_2-i(\delta_p-\delta_{p+q}))^2}\Theta(-\xi_{\mathbf{p}}) + i\frac{h(c_2)}{(c_2-c_1-i(\delta_{p+q}-\delta_p))^2}\Theta(-\xi_{\mathbf{p+q}}),$$

où $h' = dh/dE$. Lorsque les deux pôles sont dans le même demi-plan (*i.e.* δ_p et δ_{p+q} de même signe), $\delta_{p+q}-\delta_p = 0$. L'intégrale I possède 4 termes correspondant aux deux possibilités de placer un seul pôle dans le demi-plan supérieur et à la solution où les deux pôles sont tous les deux dans le demi-plan supérieur (voir figure). À l'approximation d'une boucle ($Z_0 = 1$, $Z_1 = f(M^2)$



et $U_1 = eu_0$), les expressions se simplifient puisque le numérateur $h(E)$ devient indépendant de l'énergie, $h(E) = e^2$. L'intégrale I devient

$$I = ie^2\frac{-\Theta(-\xi_{\mathbf{p}})+\Theta(-\xi_{\mathbf{p+q}})}{(c_1-c_2-i(\delta_p-\delta_{p+q}))^2},$$

avec

$$c_1 - c_2 = \omega_q - \frac{Z_1}{m}\mathbf{pq} - \frac{Z_1}{2m}\mathbf{q}^2.$$

Lorsque les deux pôles sont dans le même demi-plan, I s'annule (que l'on prenne le contour dans le demi-plan supérieur ou inférieur). Ceci se traduit mathématiquement par l'écriture

$$I = ie^2\left\{-\frac{\Theta(-\xi_{\mathbf{p}})\Theta(\xi_{\mathbf{p+q}})}{(c_1-c_2+i\delta)^2} + \frac{\Theta(\xi_{\mathbf{p}})\Theta(-\xi_{\mathbf{p+q}})}{(c_1-c_2-i\delta)^2}\right\}.$$

L'intégration sur l'impulsion donne

$$Tr\left[\xi_{\mathbf{p}}\left[\mathfrak{W}_2\right]^b_{2,2}\right] = ie^2\int\frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\xi_{\mathbf{p}}\left\{\frac{-\Theta(k_F-\mathsf{p})\Theta(|\mathbf{p}+\mathbf{q}|-k_F)}{(\omega_q-\frac{Z_1}{m}\mathbf{pq}-\frac{Z_1}{2m}\mathbf{q}^2+i\delta)^2} + \frac{\Theta(\mathsf{p}-k_F)\Theta(k_F-|\mathbf{p}+\mathbf{q}|)}{(\omega_q-\frac{Z_1}{m}\mathbf{pq}-\frac{Z_1}{2m}\mathbf{q}^2-i\delta)^2}\right\}.$$

Cette expression est très proche de l'expression (12.29) de Fetter et Walecka [32] pour le diagramme de polarisation ; la différence vient des dénominateurs qui sont ici au carré.

Introduisons la notation $\xi_{\mathbf{qp}} \equiv \xi_{\mathbf{p+q}} - \xi_{\mathbf{p}}$. À l'aide du changement de variable $\mathbf{k} = -\mathbf{p}-\mathbf{q}$ et de la relation

$$-2\mathbf{pq}-\mathbf{q}^2 = \mathbf{p}^2-(\mathbf{p}+\mathbf{q})^2 = (\mathbf{k}+\mathbf{q})^2-\mathbf{k}^2 = 2\mathbf{kq}+\mathbf{q}^2 \Rightarrow -\xi_{\mathbf{qp}} = \xi_{\mathbf{qk}},$$

il vient

$$Tr\left[\xi_{\mathbf{p}}\left[\mathfrak{W}_2\right]^b_{2,2}\right] = -ie^2\int\frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3}\left\{\frac{\xi_{\mathbf{p}}\Theta(-\xi_{\mathbf{p}})[1-\Theta(-\xi_{\mathbf{p+q}})]}{(\omega_q-f(M^2)\xi_{\mathbf{qp}}+i\delta)^2} - \frac{\xi_{\mathbf{p+q}}\Theta(-\xi_{\mathbf{p}})[1-\Theta(-\xi_{\mathbf{p+q}})]}{(\omega_q+f(M^2)\xi_{\mathbf{qp}}-i\delta)^2}\right\}. \quad \text{(L.1)}$$

Le calcul de l'intégrale précédente se fait en séparant la partie réelle et la partie imaginaire.

Partie imaginaire

Pour le calcul de la partie imaginaire, il est plus facile de faire l'intégration sur M^2 avant l'intégration sur l'impulsion dans l'équation (L.1). Utilisant

$$\int_{M^2_{\text{init}}}^0 d(M^2) f'(M^2) \frac{1}{(\omega_q \pm f(M^2)\xi_{\mathbf{qp}} \mp i\delta)^2} = \mp \frac{1}{\xi_{\mathbf{qp}}} \frac{1}{\omega_q \pm \xi_{\mathbf{qp}} \mp i\delta} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{f(M^2_{\text{init}})}\right),$$

l'intégration sur M de l'équation (L.1) donne

$$\begin{aligned} i \int_{M^2_{\text{init}}}^0 & d(M^2) f'(M^2) Tr \left[\xi_{\mathbf{p}} \left[\mathfrak{W}_2\right]^b_{2,2}\right] \\ &= e^2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\Theta(-\xi_{\mathbf{p}})[1-\Theta(-\xi_{\mathbf{p+q}})]}{\xi_{\mathbf{qp}}} \left\{ \frac{\xi_{\mathbf{p}}}{\omega_q - \xi_{\mathbf{qp}} + i\delta} + \frac{\xi_{\mathbf{p+q}}}{\omega_q + \xi_{\mathbf{qp}} - i\delta} \right\}. \end{aligned}$$

La partie imaginaire des constantes de renormalisation s'écrit alors

$$\begin{aligned} \mathfrak{Im} & (Z_2 \mathbf{q}^2 + U_2^{(2)}) \\ &= -\pi e^2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\Theta(-\xi_{\mathbf{p}})\Theta(\xi_{\mathbf{p+q}})}{\xi_{\mathbf{qp}}} \left\{ \xi_{\mathbf{p}} \delta(\omega_q - \xi_{\mathbf{qp}}) - \xi_{\mathbf{p+q}} \delta(\omega_q + \xi_{\mathbf{qp}}) \right\}, \end{aligned}$$

où nous avons utilisé la représentation de la distribution de Dirac

$$\delta(x-y) = \frac{1}{\pi} \lim_{\delta \to 0} \frac{\delta}{(x-y)^2 + \delta^2}.$$

En omettant le terme de renormalisation de la fréquence du photon du type $Z_{0u}(\bar{u})\omega_q$ dans l'Ansatz choisi en (7.31), nous avons choisi de ne traiter que l'interaction statique $\omega_q = 0$. Par conséquent, on peut poser $\omega_q = 0$ dans les équations d'évolution. Il vient alors

$$\mathfrak{Im}(Z_2 \mathbf{q}^2 + U_2^{(2)}) = \pi e^2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \Theta(-\xi_{\mathbf{p}}) \Theta(\xi_{\mathbf{p+q}}) \delta(\xi_{\mathbf{qp}}).$$

Les distributions de Heaviside et de Dirac imposent les conditions suivantes sur l'impulsion $\mathbf{p}$.

$$\begin{cases} \mathbf{p}^2 \leq k_F^2, \\ \mathbf{p}^2 + 2\mathbf{pq} + \mathbf{q}^2 > k_F^2, \\ 2\mathbf{pq} = -\mathbf{q}^2. \end{cases}$$

Ces conditions ne sont jamais vérifiées. Ainsi, les constantes de renormalisation Z_2 et U_2 n'ont pas de partie imaginaire à l'ordre d'une boucle.

Partie réelle

La partie réelle de l'intégrale dans (L.1) se simplifie si l'on remarque que l'échange $\mathbf{p} \rightleftarrows \mathbf{p+q}$ permet d'annuler les produits de fonctions de Heaviside. Il reste pour la partie réelle

$$\begin{aligned} \mathfrak{Re} & \left\{ i f'(M^2) tr \left[\xi_{\mathbf{p}} \left[\mathfrak{W}_2\right]^b_{2,2}\right] \right\} \\ &= f'(M^2) e^2 \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \left\{ \frac{\xi_{\mathbf{p}} \Theta(-\xi_{\mathbf{p}})}{(\omega_q - f(M^2)\xi_{\mathbf{qp}})^2} - \frac{\xi_{\mathbf{p+q}} \Theta(-\xi_{\mathbf{p}})}{(\omega_q + f(M^2)\xi_{\mathbf{qp}})^2} \right\}. \end{aligned}$$

Lorsque $\omega_q = 0$, le terme précédent s'écrit

$$
\begin{aligned}
-e^2 \frac{f'(M^2)}{f(M^2)^2} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\Theta(-\xi_{\mathbf{p}})}{\xi_{\mathbf{qp}}} =& 2me^2 \frac{f'(M^2)}{f(M^2)^2} \int \frac{d\mathbf{p}}{(2\pi)^3} \frac{\Theta(k_F - \mathsf{p})}{2\mathbf{pq} + \mathbf{q}^2} \\
=& \frac{f'(M^2)}{f(M^2)^2} \frac{2me^2}{(2\pi)^2} \frac{1}{2\mathsf{q}} \int_0^{k_F} \mathsf{p} d\mathsf{p} \ln \left| \frac{\mathsf{p} + \mathsf{q}/2}{-\mathsf{p} + \mathsf{q}/2} \right|
\end{aligned}
$$

et permet d'écrire

$$
\begin{aligned}
-\mathfrak{Re}\big[\frac{1}{2}\partial_{M^2}(Z_2\mathbf{q}^2 + U_2^{(2)})\big] =& \frac{f'(M^2)}{f(M^2)^2} \frac{me^2 k_F}{4\pi^2} \\
& \times \left\{ \frac{1}{2} k_F + \frac{k_F^2}{2\mathsf{q}} \ln \left| \frac{k_F + \mathsf{q}/2}{-k_F + \mathsf{q}/2} \right| - \frac{\mathsf{q}}{8} \ln \left| \frac{k_F + \mathsf{q}/2}{-k_F + \mathsf{q}/2} \right| \right\}.
\end{aligned}
$$

Bibliographie

[1] R. ABOU-CHACRA, P. W. ANDERSON, et D. J. THOULESS. « A self consistent theory of localization ». *J. Phys. **C**: Solid State Phys.*, **6**:1734–1752, 1973.

[2] E. ABRAHAMS, P.W. ANDERSON, D.C. LICCIARDELLO, et T. V. RAMAKRISHNAN. « Scaling theory of localization: Absence of quantum diffusion in two dimensions ». *Phys. Rev. Lett.*, **42**:673–676, 1979.

[3] E. ABRAHAMS, S. V. KRAVCHENKO, et M. P. SARACHIK. « Metallic behavior and related phenomena in two dimensions ». `cond-mat/0006055`, 2000. À paraître dans *Rev. Mod. Phys.*.

[4] M. ABRAMOWITZ et I. A. STEGUN, éditeurs. *Handbook of mathematical functions*. Dover, New York, 9e édition.

[5] E. AKKERMANS, P. E. WOLF, R. MAYNARD, et G. MARET. « Theoretical study of the coherent backscattering of light by disordered media ». *J. Phys. France*, **49**:77–98, 1988.

[6] J. ALEXANDRE et J. POLONYI. « Renormalization group for the internal space ». hep-th/9902144, 1999. À paraître dans *Ann. Phys.*.

[7] B. L. ALTSHULER, D. L. MASLOV, et V. M. PUDALOV. « Metal-insulator transition in 2D: resistance in the critical region ». `cond-mat/0003032`, 2000.

[8] P. W. ANDERSON. « Absence of diffusion in certain random lattices ». *Phys. Rev.*, **109**:1492–1505, 1958.

[9] P. W. ANDERSON et W. L. MCMILLAN. « Multiple-scattering theory and resonances in transition metals ». Dans *Proceeding of the Int. School of Physics "Enrico Fermi" XXXVII*, pages 50–86. Academic Press, 1967.

[10] D. BELITZ et T. R. KIRKPATRICK. « The Anderson-Mott transition ». *Rev. Mod. Phys.*, **66**:261–380, 1994.

[11] D. BELITZ et T. R. KIRKPATRICK. « Theory of many-fermion systems ». *Phys. Rev. **B***, **56**:6513–6541, 1997. `cond-mat/9703164`.

[12] G. BENENTI, X. WAINTAL, et J.-L. PICHARD. « New quantum phase between the Fermi glass and the Wigner crystal in two dimensions ». *Phys. Rev. Lett.*, **83**:1826–1829, 1999. `cond-mat/9812339`.

[13] G. BENFATTO et G. GALLAVOTTI. « Renormalization-group approach to the theory of the Fermi surface ». *Phys. Rev. **B***, **42**:9967–9972, 1990.

[14] J. BERGES, N. TETRADIS, et C. WETTERICH. « Non-perturbative renormalization flow in quantum field theory and statistical physics ». `hep-ph/0005122`, 2000. À paraître dans *Phys. Rep.*.

[15] G. BERGMANN. « Weak localization in thin films ». *Phys. Rep.*, **107**:1–58, 1984.

[16] M. BERRY. « Quantizing a classically ergodic system: Sinai's billiard and the KKR method ». *Ann. Phys., N. Y.*, **131**:163–216, 1981.

[17] C. CHAMON, A. W. W. LUDWIG, et C. NAYAK. « Schwinger-Keldysh approach to disordered and interacting electron systems: Derivation of Finkelstein's renormalization-group equations ». *Phys. Rev.* ***B***, **60**:2239–2254, 1999. `cond-mat/9810282`.

[18] S. CHANDRASEKHAR. *Radiative transfer*. Dover, New York, 1960.

[19] C. C. CHANG et R. FRIEDBERG. « $\mathbf{t}$ matrix in hard-core two-body scattering in three and two dimensions ». *Phys. Rev.* ***A***, **49**:913–920, 1994.

[20] S. CORREIA, J. POLONYI, et J. RICHERT. « An effective theory for conductance by symmetry breaking ». `cond-mat/0001053`, 2000.

[21] P. de VRIES, D. V. van COEVORDEN, et Ad LAGENDIJK. « Point scatterers for classical waves ». *Rev. Mod. Phys.*, **70**:447–466, 1998.

[22] Y. DECANINI, A. FOLACCI, E. FOURNIER, et P. GABRIELLI. « Exact S-matrix for N-disc systems and various boundary conditions: I. Generalization of the Korringa-Kohn-Rostoker-Berry method ». *J. Phys.* ***A*** *: Math. Gen.*, **31**:7865–7889, 1998.

[23] Y. DECANINI, A. FOLACCI, E. FOURNIER, et P. GABRIELLI. « Exact S-matrix for N-disc systems and various boundary conditions: II. Determination and partial classification of resonances. ». *J. Phys.* ***A****: Math. Gen.*, **31**:7891–7900, 1998.

[24] V. DOBROSAVLJEVIĆ, E. ABRAHAMS, E. MIRANDA, et S. CHAKRAVARTY. « Scaling theory of two-dimensional metal-insulator transitions ». *Phys. Rev. Lett.*, **79**:455–458, 1997. `cond-mat/9704091`.

[25] E. N. ECONOMOU. *Green's Functions in Quantum Physics*. Springer-Verlag, second édition, 1990.

[26] J. T. EDWARDS et D. J. THOULESS. « Numerical studies of localization in disordered systems ». *J. Phys.* ***C***, **5**:807–820, 1972.

[27] S. F. EDWARDS. « A new method for the evaluation of electric conductivity in metals ». *Phil. Mag.*, **3**:1020–1031, 1958.

[28] S. F. EDWARDS et P. W. ANDERSON. « Theory of spin glasses ». *J. Phys. F: Metal Phys.*, **5**:965–974, 1975.

[29] K. EFETOV. *Supersymmetry in disorder and chaos*. Cambridge University Press, 1997.

[30] K. B. EFETOV. « Supersymmetry and theory of disordered metals ». *Adv. in Phys.*, **32**:53–127, 1983.

[31] P. EXNER et P. ŠEBA. « Point interaction in dimension two and three as models of small scatterers ». 1996. `cond-mat/9607016`.

[32] A. L. FETTER et J. D. WALECKA. *Quantum theory of many-paticles systems*. McGraw-Hill, 1971.

[33] A. M. FINKEL'SHTEĬN. « Influence of Coulomb interaction on the properties of disordered metals ». *Sov. Phys. JETP*, **57**:97–108, 1983.

[34] A. M. FINKEL'SHTEĬN. « Metal-insulator transition in a disordered system ». *Sov. Phys. JETP*, **59**:212–219, 1984.

[35] A. M. FINKEL'SHTEĬN. « Weak localization and Coulomb interaction in disordered systems ». *Z. Phys.* ***B***, **56**:189–196, 1984.

[36] L. L. FOLDY. « The multiple scattering of waves ». *Phys. Rev.*, **67**:107–119, 1945.

[37] P. GASPARD et S. RICE. « Exact quantization of the scattering from a classically chaotic repellor ». *J. Chem. Phys.*, **90**:2255–2262, 1989.

[38] A. M. GOLDMAN et N. MARKOVIĆ. « Superconductor-insulator transitions in the two-dimensional limit ». *Physics Today*, pages 39–44, nov 1998.

[39] I. S. GRADSHTEYN et I. M. RYZHIK. *Table of integrals, series and products*. Academic Press, 5e édition, 1994.

[40] M. B. HASTINGS, A. D. STONE, et H. BARANGER. « On the inequivalence of weak localization and coherent backscattering ». `cond-mat/9405080`, 1994.

[41] M. HENSELER, A. WIRZBA, et T. GUHR. « Quantization of hyperbolic N-sphere scattering systems in three dimensions ». *Ann. Phys.*, **258**:286–319, 1997.

[42] T. L. HILL. *An introduction to statistical thermodynamics*. Dover, 1986.

[43] T. L. HILL. *Statistical mechanics, principles and selected applications*. Dover, 1987.

[44] M. L. HORBACH et G. SCHÖN. « Dynamic nonlinear σ-model of electron localization ». *Ann. Physik*, **2**:51–78, 1993.

[45] C. ITZYKSON et J.-B. ZUBER. *Quantum field theory*. McGraw-Hill, 1985.

[46] C. J. JOACHAIN. *Quantum collision theory*. North-Holland, 3 édition, 1983.

[47] A. KAMENEV et A. ANDREEV. « Electron-electron interactions in disordered metals: Keldysh formalism ». *Phys. Rev.* ***B***, **60**:2218–2238, 1999. `cond-mat/9810191`.

[48] T. R. KIRKPATRICK et D. BELITZ. Quantum phase transitions in electronic systems. Dans N. H. MARCH, éditeur, *Electron correlation in the solid state*, pages 297–370. Imperial College Press, London, 1999. `cond-mat/9707001`.

[49] T. R. KIRKPATRICK et J. R. DORFMAN. « Divergences and long-time tails in two- and three- dimensional quantum Lorentz gases ». *Phys. Rev.* ***A***, **28**:1022–1046, 1983.

[50] C. KITTEL. *Quantum theory of solids*. Wiley, New York, 1963.

[51] W. KOHN et J. M. LUTTINGER. « Quantum theory of electrical transport ». *J. Phys.* ***A*** *: Math. Gen.*, **108**:590, 1957.

[52] W. KOHN et N. ROSTOKER. « Solution of the Schrödinger equation in periodic lattices with an application to metallic lithium ». *Phys. Rev.*, **94**:1111–1120, 1954.

[53] J. KORRINGA. « On the calculation of the energy of a Bloch wave in a metal ». *Physica*, **XIII**:392–400, 1947.

[54] S. V. KRAVCHENKO, G. V. KRAVCHENKO, J. E. FURNEAUX, V. M .PUDALOV, et M. D'IORIO. « Possible metal-insulator transition at $B = 0$ in two dimensions ». *Phys. Rev.* ***B***, **50**:8039–8042, 1994. `cond-mat/9405082`.

[55] S. V. KRAVCHENKO, W. E. MASON, G. E. BOWKER, J. E. FURNEAUX, V. M. PUDALOV, et M. D'IORIO. « Scaling of an anomalous metal-insulator transition in a two-dimensional system in silicon at $B = 0$ ». *Phys. Rev.* ***B***, **51**:7038–7045, 1995. `cond-mat/9412103`.

[56] A. LAGENDIJK et B. A. van TIGGELEN. « Resonant multiple scattering of light ». *Phys. Rep.*, **270**:143–215, 1996.

[57] J. S. LANGER et T. NEAL. « Breakdown of the concentration expansion for the impurity resistivity of metals ». *Phys. Rev. Lett.*, **16**:984–985, 1966.

[58] M. LAX. « Multiple scattering of waves ». *Rev. Mod. Phys.*, **23**:287–310, 1951.

[59] M. LAX. « Multiple scattering of waves. II. The effective field in dense systems ». *Phys. Rev.*, **85**:621–629, 1952.

[60] M. LE BELLAC. *Des phénomènes critiques aux champs de jauge*. InterEditions et Editions du CNRS, 1988.

[61] P. A. LEE et T. V. RAMAKRISHNAN. « Disordered electronic systems ». *Rev. Mod. Phys.*, **57**:287–337, 1985.

[62] D. C. LICCIARDELLO et D. J. THOULESS. « Conductivity and mobility edges for two-dimensional disordered systems ». *J. Phys.* ***C***, **8**:4157–4170, 1975.

[63] B. A. LIPPMANN et J. SCHWINGER. « Variational principles for scattering processes. I ». *Phys. Rev.*, **79**:469–480, 1950.

[64] P. LLOYD et P. V. SMITH. « Multiple scattering theory in condensed materials ». *Adv. Phys.*, **21**:69–142, 1972.

[65] G. D. MAHAN. *Many-Particle Physics*. Plenum Press, New York, second édition, 1993.

[66] R. D. MATTUCK. *A Guide to Feynman Diagrams in the Many-Body Problem*. DOVER publications, New York, seconde édition, 1992.

[67] A. MESSIAH. *Mécanique Quantique*. Dunod, Paris, 1965.

[68] P. M. MORSE et H. FESHBACH. *Methods of Theoretical Physics*. McGraw Hill, 1953.

[69] N. F. MOTT. *Metal-Insulator transitions*. Taylor and Francis, London, 1990.

[70] J.W. NEGELE et H. ORLAND. *Quantum Many-Particle Systems*. Addison-Wesley, 1988.

[71] Y.-P. PELLEGRINI, D. B. STOUT, et P. THIBAUDEAU. « Off-shell mean-field electromagnetic T-matrix of finite-size spheres and fuzzy scatterers ». *J. Phys.: Condens. Matter*, **9**:177–191, 1997.

[72] A. M. PERELOMOV et Y. B. ZEL'DOVICH. *Quantum Mechanics, Selected Topics*. World Scientific, 1998.

[73] P. PHILLIPS, Y. WAN, I. MARTIN, S. KNYSH, et D. DALIDOVICH. « Superconductivity in a two-dimensional electron gas ». *Nature*, **395**:253–257, sep 1998.

[74] D. POPOVIĆ, A. B. FOWLER, et S. WASHBURN. « Metal-insulator transition in two dimensions: effects of disorder and magnetic field ». *Phys. Rev. Lett.*, **79**:1543–1546, 1997.

[75] J. RAMMER. *Quantum Transport Theory*. Perseus Books, 1998.

[76] L. SCHÄFER et F. WEGNER. « Disordered system with n orbitals per site: Lagrange formulation, hyperbolic symmetry, and Goldstone modes ». *Z. Phys. **B***, **38**:113–126, 1980.

[77] L. H. SCHICK. « Multiple-scattering analysis of the three-body scattering problem ». *Rev. Mod. Phys.*, **33**:608–622, 1961.

[78] M. SCHICK. « Two-dimensional system of hard-core bosons ». *Phys. Rev. **A***, **3**(3):1067–1073, 1971.

[79] A. SHALGI et Y. IMRY. Localization in disordered systems. Dans *Mesoscopic Quantum Physics*, Les Houches, session LXI, pages 229–258. Elsevier Science, 1994.

[80] R. SHANKAR. « Renormalization-group approach to interacting fermions ». *Rev. Mod. Phys.*, **66**:129–192, 1994.

[81] P. SHENG. *Introduction to Wave Scattering, Localization, and Mesoscopic Phenomena*. Academic Press, 1995.

[82] P. SOVEN. « Coherent-potential model of substitutional disordered alloys ». *Phys. Rev.*, **156**:809–813, 1967.

[83] M. R. SPIEGEL. *Variables complexes*. Schaum. McGraw-Hill, 15 édition, 1973.

[84] D. W. TAYLOR. « Vibrational properties of imperfect crystals with large defect concentrations ». *Phys. Rev.*, **156**:1017–1029, 1967.

[85] D. J. THOULESS. « Electrons in disordered systems ans the theory of localization ». *Phys. Rep.*, **13C**:93–142, 1974.

[86] A. TOURIN, A. DERODE, P. ROUX, B. A. van TIGGELEN, et M. FINK. « Time-dependent coherent backscattering of acoustic waves ». *Phys. Rev. Lett.*, **79**:3637–3639, 1997.

[87] L. TSANG et A. ISHIMARU. « Backscattering enhancement of random discrete scatterers ». *J. Opt. Soc. Am. A1*, **A1**:836–839, 1984.

[88] M. P. van ALBADA et A. LAGENDIJK. « Observation of weak localisation of light in a random medium ». *Phys. Rev. Lett.*, **55**:2692–2695, 1985.

[89] H. C. van de HULST. *Multiple light scattering*. Academic Press, 1980.

[90] H. C. van de HULST. *Light scattering by small particles*. Dover, New York, 1981.

[91] M. C. W. van ROSSUM et Th. NIEUWENHUIZEN. « Multiple scattering of classical waves: microscopy, mesoscopy, and diffusion ». *Rev. Mod. Phys.*, **71**:313–372, 1999. `cond-mat/9804141`.

[92] B. A. van TIGGELEN, A. LAGENDIJK, et A. TIP. « Multiple-scattering effects for the propagation of light in 3D slabs ». *J. Phys.: Condens. Matter*, **2**:7653–7677, 1990.

[93] B. VELICKÝ. « Theory of electronic transport in disordered binary alloys: Coherent-Potential Approximation ». *Phys. Rev.*, **184**:614–627, 1969.

[94] J. J. M. VERBAARSCHOT et M. R. ZIRNBAUER. « Critique of the replica trick ». *J. Phys. A*, **18**:1093–1109, 1985.

[95] D. VOLLHARDT et P. WÖLFLE. « Anderson localization in $d \leq 2$: a self-consistent diagrammatic theory ». *Phys. Rev. Lett.*, **45**:842–846, 1980.

[96] D. VOLLHARDT et P. WÖLFLE. « Diagrammatic, self-consistent treatment of the Anderson localization problem in $d \leq 2$ ». *Phys. Rev. B*, **22**:4666–4679, 1980.

[97] G. N. WATSON. *A treatise on the theory of Bessel functions*. Cambridge University Press, 1944.

[98] K. M. WATSON. « Multiple scattering by quantum-mechanical systems ». *Phys. Rev.*, **105**:1388–1398, 1957.

[99] F. WEGNER. « The mobility edge problem: continuous symmetry and a conjecture ». *Z. Phys. B*, **35**:207–210, 1979.

[100] F. J. WEGNER et A. HOUGHTON. « Renormalization group equation for critical phenomena ». *Phys. Rev. A*, **8**:401–412, 1973.

[101] D. S. WIERSMA, P. BARTOLINI, A. LAGENDIJK, et R. RIGHINI. « Localization of light in a disordered medium ». *Nature*, **390**:671–673, 1997.

[102] K. G. WILSON et J. KOGUT. « The renormalization group and the ϵ expansion ». *Phys. Rep.*, **12**:75–200, 1974.

[103] A. WIRZBA. « Quantum mechanics and semiclassics of hyperbolic n-disk scattering systems ». *Phys. Rep.*, **309**:1–116, 1999.

[104] P.-E. WOLF et G. MARET. « Weak localization and coherent backscattering of photons in disordered media ». *Phys. Rev. Lett.*, **55**:2696–2699, 1985.

[105] J. M. ZIMAN. *Models of disorder: The theoretical physics of homogeneously disordered systems*. Cambridge University Press, 1979.

[106] M. R. ZIRNBAUER. « Another critique of the replica trick ». `cond-mat/9903338`, 1999.