Une invitation à la supraconductivité

Benoît Douçot

doucot@lpthe.jussieu.fr

Octbre 2001

Contents

Chapter 1

Introduction

La physique de la matière condensée se consacre à l'étude d'objets le plus souvent macroscopiques, c'est à dire constitués d'un nombre d'atomes N très supérieur à l'unité (typiquement, $N \simeq 10^{23}$). L'information que nous avons sur ces systèmes provient pour l'essentiel de situations expérimentales où l'on impose une perturbation par des sondes contrôlées de l'extérieur. Ceci induit une réaction du système qui est alors analysée en mesurant diverses quantités physiques. Notons que cette démarche est aussi celle de l'expérience quotidienne, selon laquelle un solide est "ce qui fait mal quand on tape dessus". Dans ce cas précis, on cherche à imposer une déformation qui induit alors dans le milieu des forces élastiques qui s'opposent à la perturbation imposée de l'extérieur. Parmi les sondes les plus couramment utilisées figurent les champs électro-magnétiques auquel on peut soumettre un matériau. Dans ce cas, la réponse du milieu matériel est souvent étudiée en mesurant par exemple les courants électriques induits par le champ extérieur. L'importance de cet exemple, outre bien sûr le champ immense des applications pratiques, provient du fait que la plupart des phénomènes à l'échelle macroscopique sont en dernier ressort gouvernés par les interactions électromagnétiques. Par exemple, un des aspects de la physique des solides consiste à rendre compte de propriétés mécaniques (compressibilité, résistance au cisaillement, propagation du son, etc) à partir de modèles microscopiques dont les données de base sont les structures cristallines. La mécanique quantique (le plus souvent sa version non-relativiste suffit), et les lois de Coulomb pour décrire les interactions dans le système combiné des électrons et des noyaux, permettent en principe de calculer le spectre des phonons et par conséquent les propriétés de l'élasticité macroscopique, ceci d'autant mieux que la structure cristalline est simple. Ces exemples illustrent l'idée que ces "fonctions de réponse", liant un type de perturbation extérieure et une observable physique caractérisant la réaction du milieu à cette perturbation, sont au coeur du lien entre expérience et description théorique.

Pour préciser ce lien, on peut imaginer la situation très idéalisée d'une expérience réalisée à température nulle. Nous supposons donc que le milieu matériel avant perturbation se trouve dans son état quantique fondamental. La perturbation extérieure a en général pour effet de provoquer des transitions du système vers des états excités. La nature de ces états excités influe alors sur les résulats des mesures faites après le branchement de la perturbation. On voit que la fonction de réponse correspondante est sensible à trois types de données microscopiques: [1]

- les éléments de matrice entre l'état fondamental et les états excités de l'opérateur (noté par exemple A) qui décrit la perturbation extérieure
- le spectre en énergie des états excités atteints sous l'action de la perturbation décrite par l'opérateur A
- dans le cas où l'on étudie la réponse *linéaire* en mesurant une observable physique décrite par l'opérateur B, la valeur de B dans l'état final perturbé fait intervenir les éléments de matrice de B entre les états excités créés par la perturbation A et le fondamental.

Pour résumer, nous voyons que la fonction de réponse associée à une perturbation A et une observable mesurée B contient des informations sur le spectre des états quantiques excités du milieu, avec une certaine sélectivité provenant du fait que les états mis en jeu sont couplés par l'intermédiaire des opérateurs A ou B au fondamental. Notons que cette sélection des états excités est très sévère: en effet, l'espace des états quantiques d'un système ayant un nombre macroscopique N de particules élémentaires est de dimension gigantesque (en gros une fonction exponentielle de N). Or, la plupart des sondes mises en jeu dans les expériences usuelles sont décrites par des opérateurs

[1] Ce point est justifié dans la section 4.5

modifiant l'état quantique *d'une seule particule à la fois* dans le système. C'est le cas de l'opérateur décrivant la densité locale d'électrons dans un solide, ou de celui associé à la densité de courant locale transportée par ces mêmes électrons. Ces opérateurs interviennent dans l'expression microscopique du tenseur de conductivité électrique. Dans ce cas, l'ensemble des états excités sous l'action d'une telle perturbation *et* contribuant à la réponse linéaire est extrêmement réduit par rapport à l'espace complet des états du système à N particules. Du coup, chaque sonde a la possibilité de révéler un aspect particulier du spectre quantique complet.

Au cours des cinquante dernières années, un concept important s'est dégagé en physique de la matière condensée, grâce à une grande moisson de résulats expérimentaux sur des systèmes aussi variés que les semi-conducteurs, les métaux, qu'ils soient ordinaires, magnétiques ou supraconducteurs, les superfluides, les isolants comme les oxydes de métaux de transition, les polymères conducteurs, les gaz d'électrons confinés à un interface sous fort champ magnétique, etc... C'est le concept d'*excitation élémentaire*. De manière simplifée, il s'agit d'une modification essentiellement *locale* du fondamental quantique d'un système à N particules, vérifiant deux conditions:

Faiblesse des interactions résiduelles: Ces excitations pouvant être localisées (par exemple au sens habituel de paquets d'onde superposant linéairement des états périodiques de vecteurs d'onde différents), on suppose qu'il est possible d'en créer plusieurs, et que dans la limite où on peut les considérer comme *diluées*, l'énergie d'une telle configuration est essentiellement proportionnelle au nombre de ces excitations. Ceci traduit l'idée que comprendre un phénomène en physique consiste souvent à identifier les bonnes variables pour lesquelles la dynamique se simplifie. R. Feynman avait ainsi ironisé sur le fait qu'une bonne partie de la physique consiste en des variations sur le thème de l'oscillateur harmonique, qui reste l'exemple par excellence du cas limite simple. Il faut noter toutefois des progrès récents qui permettent d'aller un peu au delà d'un monde d'oscillateurs harmoniques faiblement perturbés. Tout d'abord, il existe des modèles *unidimensionnels* dits intégrables, sur lesquels il est par exemple possible d'obtenir beaucoup d'informations sur le spectre des états de basse énergie (comme la relation énergie-quantité de mouvement et les nombres quantiques des excitations élémentaires, ainsi que leurs interactions résiduelles). Ces résultats sont remarquables et conduisent à une physique très riche (dont certains aspects ont pu être testés expérimentalement), mais pour l'instant, il semble difficile de lever la limitation mathématique à un monde certes fascinant, mais...unidimensionnel. L'autre progrès concerne l'étude des systèmes chaotiques, où par définition, il n'y a a priori plus de jeu de bonnes variables permettant de simplifier le problème. Toutefois, il faut noter que le chaos ne semble s'instaurer qu'à des énergies d'excitation assez élevées. Le problème de savoir si ce que l'on appelle chaos peut devenir pertinent pour certains systèmes jusqu'à proximité immédiate du niveau fondamental reste, je crois, pour l'essentiel ouvert. La question a néanmoins été posée récemment dans le contexte de modèle d'électrons dans un régime de très fortes interactions coulombiennes, comme ceux que l'on utilise pour modéliser les supraconducteurs dits à haute température critique.

Bon couplage à une sonde locale: Rappelons que par sonde locale, nous entendons une perturbation décrite par un opérateur modifiant l'état quantique d'un petit nombre de particules à la fois. La notion est en effet utile pour l'expérimentateur s'il sait exciter de manière privilégiée un type donné d'états au moyen d'une sonde appropriée. Notons toutefois qu'il existe des exemples assez récents (dans la physique des liquides d'électrons bidimensionnels sous fort champ magnétique, en régime dit d'effet Hall quantique fractionnaire) où il semble fructueux d'introduire des excitations élémentaires (appelées ici "fermions composites"), qui ne se couplent pas bien au fondamental sous l'action de sondes locales. La motivation pour introduire de tels objets vient de la première condition: si ces objets interagissent peu, et si leurs combinaisons en nombre variable d'objets décrivent bien la totalité du spectre du système à N particules (au moins à basse énergie), on peut alors construire un modèle très simple pour la thermodynamique d'un tel système (au moins dans la limite de basse température).

Cette notion d'excitation élémentaire joue donc un rôle essentiel (lorsque l'on sait l'expliciter, ce qui pour certains systèmes s'avère difficile) dans la physique de la matière condensée actuelle. Son intérêt réside dans le fait qu'il n'y a pas nécessairement un lien simple entre les constituants microscopiques d'un milieu condensé et la nature des excitations élémentaires du système avec N de ces constituants. Pour les électrons dans un métal, on pense depuis Landau que ces excitations élémentaires sont de deux types: les "*quasiparticules*" et les "*modes collectifs*". Les premières ressemblent aux électrons ou aux trous du gaz d'électrons libres, en ce sens que ce sont des fermions, portant une charge électrique égale en valeur absolue à celle d'un électron, et un spin $1/2$. On peut les créer en injectant un électron "nu" dans ce métal, par exemple à l'aide d'une pointe tunnel, ou en bombardant le métal par un faisceau d'électrons (technique de photoémission inverse). Un tel électron injecté de l'extérieur interagit ensuite avec ceux du métal, et s'entoure d'une sorte de sillage quantique. Le point essentiel est que cet "habillage" de l'électron incident par les interactions ne modifie pas les nombres quantiques de cette excitation. Ceci permet, comme Landau a été le premier à le comprendre, de décrire notamment la thermodynamique d'un tel métal à partir de celle du gaz de fermions sans interaction, à condition de remplacer la masse "nue" de l'électron par une masse effective, qui tient compte des interactions entre électrons ainsi qu'avec le réseau cristallin. Landau a aussi montré comment prendre en compte les interactions résiduelles entre ces quasiparticules, par un jeu de paramètres phénoménologiques que l'on peut déduire de certaines expériences. Cette théorie s'est développée pour devenir ce que l'on appelle souvent la théorie des "liquides de Fermi normaux". Les "modes collectifs" eux peuvent s'imaginer comme des états liés de type électron-trou, donc portant une charge nulle, un spin entier (0 ou 1), et leur statistique est essentiellement celle de bosons. Ceci justifie leur dénomination. En effet, il est alors possible de fabriquer des superpositions cohérentes de tels états qui correspondent à des ondes de densité de charge ou de spin du système d'électrons. Nous verrons que ces modes collectifs jouent un rôle essentiel dans l'apparition de propriétés nouvelles comme la supraconductivité. Pour revenir à la discussion générale du début de ce paragraphe, la physique des solides s'est enrichie de situations où les excitations élémentaires portent des nombres quantiques très différents de ceux des constituants élémentaires. L'exemple le plus spectaculaire est sans doute celui de l'effet Hall quantique fractionnaire. Il s'agit d'un état corrélé complexe d'un fluide d'électrons bidimensionnel sous fort champ magnétique. Les expériences ont montré que tout se passe comme si les états de basse énergie d'un tel système étaient séparés du fondamental par un gap d'énergie et portaient une charge électrique localisée quantifiée comme multiple entier d'une charge élémentaire fractionnaire (en unité de la charge de l'électron). Il ne faut pas interprêter ceci comme la possibiliter de "casser" un électron en plusieurs constituants plus microscopiques encore: ceci n'a pour l'instant jamais été observé. Mais le mouvement corrélé de N électrons dans ce régime de l'effet Hall quantique fractionnaire offre la possibilité de redistributions spatiales inhabituelles de la densité de charge, dont le résultat global est de déplacer *en moyenne* une fraction de charge électronique. Cette notion n'a donc de sens que pour une population de N électrons.

La discussion de ce dernier paragraphe montre finalement que la description d'un milieu condensé dépend très sensiblement de l'échelle d'énergie à laquelle on se place. Pour reprendre l'exemple de l'effet Hall quantique fractionnaire, un électron habituel de charge $-e$ est un objet de "haute énergie" pour un tel système. En effet, au voisinage du fondamental du système à N électrons, les états stables sont construits à partir des états de charge fractionnaire déjà mentionnés. Un des intérêts de la physique des solides est que l'on connait beaucoup de choses au niveau microscopique (des "hautes" énergies): la structure cristalline, les liaisons entre atomes voisins, etc, ce qui typiquement implique des énergies de l'ordre de l'électron-volt (soit des températures de l'ordre de $10^4 K$). La physique au niveau macroscopique (des basses énergies) est elle souvent bien explorée expérimentalement. Les énergies mises en jeu peuvent être alors de l'ordre du milli-électron-volt, car on a en gros la correspondance 300 Kelvin donne 25 milli-électron-volt. Toute la difficulté est de rendre compte de l'évolution des propriétés physiques, et donc de celle des excitations élémentaires lorsque l'on perd plusieurs ordres de grandeur en énergie. L'étude de telles questions dépasse l'ambition de ce cours. C'est typiquement la raison d'être du *groupe de renormalisation* qui sera abordé dans d'autres cours. Notre but ici sera plus modestement de montrer différents types de comportements de systèmes condensés macroscopiques, du point de vue de leurs propriétés électroniques.

Nous insisterons sur les liens qui relient les changements qualitatifs de l'état fondamental d'un système à N électrons, à ceux portant sur la nature et le spectre des excitations élémentaires de basse énergie. Souvent, on constate un lien profond entre les propriétés de symétrie du fondamental, et le type d'excitations élémentaires pouvant se propager dans le milieu étudié. Les changements qualitatifs en question sont donc souvent liés à une modification des symétries de l'état fondamental, et l'on parle de *transition de phase*. Une des façons les plus simples d'observer de telles transitions est d'abaisser la température. En général, les phases situées aux plus basses températures présentent une forme plus ordonnée que celles situées à plus haute température où l'agitation thermique favorise l'entropie par rapport à l'énergie. Très souvent l'ordre requiert de choisir entre différents états macroscopiques *distincts* de même énergie et reliés entre eux par une symétrie de la dynamique. On parle alors de *brisure spontanée de symétrie*, l'exemple le plus connu étant celui de la formation d'une aimantation macroscopique dans un aimant permanent, à des températures suffisamment basses. Il existe des cas où la mise en ordre à basse température brise une symétrie un peu moins intuitive que l'invariance par translation dans l'espace ambiant dans le cas de la formation d'un cristal ou par rotation dans l'espace interne du spin dans le cas de l'aimant juste mentionné. L'exemple le plus frappant est celui de la supraconductivité, où la symétrie spontanément brisée est l'invariance de jauge électromagnétique globale. Une grande partie de ce cours est consacrée à une analyse plus détaillée de ce phénomène. Ce qui joue le rôle de l'aimantation dans ce cas est la phase de l'état quantique dans lequel condensent les paires de Cooper. La dynamique de cette phase donne lieu à des phénomènes appelés *effets Josephson* parfois très spectaculaires dans la mesure où la variable conjuguée de la phase est le nombre d'électrons.

Comme nous l'avons indiqué plus haut, toute modification qualitative de la nature et du spectre des excitations élémentaires se répercute sur les fonctions de réponse macroscopiques qui sont en général les quantités accessibles à l'observation. Nous avons choisi ici de mettre l'accent sur les propriétés électromagnétiques, pour les raisons indiquées au début de cette introduction. Le concept important et général qui se dégage alors est celui d'*écrantage*: lorsqu'un champ extérieur agit sur un milieu matériel, celui-ci réagit (se polarise) d'une manière à induire des champs qui se superposent au champ extérieur et le plus souvent atténuent son effet. Ce cours débutera donc par l'analyse de plusieurs mécanismes d'écrantage d'un champ électrique puis d'un champ magnétique. Le principal outil formel sera l'expression générale des fonctions de réponse électromagnétiques en fonction du spectre et des états propres de l'Hamiltonien microscopique pour un système de N électrons non-relativistes. Nous avons rassemblé toutes les informations utiles à ce sujet dans le dernier chapitre. Des indications bibliographiques seront données directement dans le texte.

Chapter 2

La notion d'écrantage

2.1 Ecrantage d'un champ électrique

2.1.1 Ecrantage d'un champ électrique longitudinal dans un métal

Dans un métal, la conduction d'un courant électrique est assurée par un système d'électrons périphériques, faiblement liés aux noyaux supposés occuper les nœuds d'un cristal régulier. Ces électrons sont délocalisés au sens où les fonctions d'onde correspondantes ne sont pas attachées à un site particulier du réseau.

Ces électrons délocalisés, appelés aussi électrons de conduction présentent des propriétés collectives très particulières, qui ont représenté un défi pour les théoriciens jusqu'à l'avènement de la mécanique quantique. En particulier, la thermodynamique à basse température de ces électrons de conduction posait de gros problèmes si l'on cherchait à l'interprêter par des modèles purement classiques.

Le comportement de la susceptibilité (paramagnétique) était particulièrement étrange: contrairement au cas de spins localisés sans interaction pour lesquels $\chi(T) \sim \dfrac{1}{T}$ (loi de Curie), on observe une saturation de $\chi(T)$ vers une valeur constante lorsque $T \to 0$.

En des termes classiques, on serait tenté d'y voir des effets d'interactions entre les spins. Cependant, la plupart des métaux n'ont pas d'état magnétique ordonné à basse température.

De même, contrairement aux phonons qui donnent une chaleur spécifique proportionnelle à T^3 à basse température, les électrons de conduction apportent une contribution à la chaleur spécifique proportionnelle à T, donc dominante par rapport aux phonons à basse température.

La mécanique quantique naissante des années 1920-1930 a très vite permis de montrer que ces propriétés découlaient très simplement de deux ingrédients:

- la délocalisation des électrons de conduction dans la totalité du cristal;

- le principe de Pauli.

Le modèle le plus simple présentant ces deux ingrédients est celui du gaz d'électrons libres. Dans ce modèle, les états propres d'un électron sont des ondes planes $|k\rangle$ repérées par leur vecteur d'onde k. L'énergie d'un tel état est $\varepsilon(k) = \dfrac{\hbar^2 k^2}{2m}$, où m est la masse de l'électron. Le principe de Pauli impose que l'état fondamental est une mer de Fermi, comprenant N électrons occupant toutes les ondes planes telles que $|k| \leq k_F$. Le spin 1/2 de l'électron est pris en compte en créant une mer de Fermi pour les spins $\uparrow$ et une pour les spins $\downarrow$, toutes deux de rayon k_F en l'absence de champ magnétique extérieur. Le vecteur d'onde k_F fixe la densité totale d'électrons:

$$N = \underbrace{2}_{\text{spin}} \times \frac{4}{3}\pi k_F^3 \times \frac{V}{8\pi^3}\,, \quad \text{d'où} \quad n = \frac{N}{V} = \frac{k_F^3}{3\pi^2}\,.$$

A température nulle, le nombre moyen d'occupation d'un état est

$$\begin{cases} n_k = 1 & \text{si} \quad |k| \leq k_F\,, \\ n_k = 0 & \text{si} \quad |k| \geq k_F\,. \end{cases}$$

Le potentiel chimique μ est alors égal à $\varepsilon(k_F)$. A température $T \neq 0$, il existe des états excités thermiquement, que l'on peut décrire par des états à une particule vides pour $|k| \leq k_F$ ("trous") ou occupés pour $|k| \geq k_F$ ("particules"). Dans ce cas, la distribution n_k n'est plus discontinue, mais régulière au voisinage de k_F. Elle est donnée par la distribution de Fermi-Dirac:

$$n(k) = \frac{1}{\exp[\beta(\varepsilon(k) - \mu)] + 1}, \quad \text{où} \quad \beta = \frac{1}{k_B T}, \quad \text{et} \quad k_B \quad \text{est la constante de Boltzmann.}$$

Cette fonction a l'allure suivante donnée par la figure 2.1.

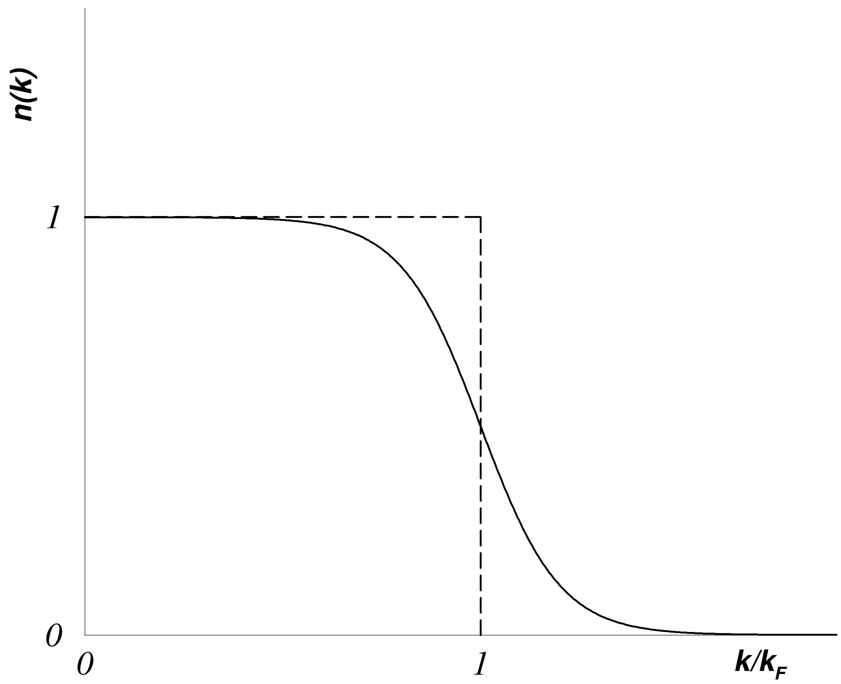

Figure 2.1: Distribution de Fermi-Dirac

Seuls les particules et les trous dont l'énergie diffère de $\varepsilon(k_F)$ d'une quantité d'ordre k_BT sont excités. On obtient alors une énergie interne proportionnelle à T^2, et comme $C_V = \left(\frac{\partial U}{\partial T}\right)_V$, C_V est proportionnelle à T.
Le comportement de la susceptibilité à basse température s'obtient simplement en disant que le couplage Zeeman $-g\mu_B\vec{S}\cdot\vec{H}$ au champ extérieur modifie l'énergie d'une onde plane d'une quantité constante $\pm\frac{\hbar}{2}g\mu_BH$ indépendante de k. Ici, μ_B est le rapport gyromagnétique d'un électron classique $\mu_B = \frac{e}{2m}$. Ceci est représenté sur la figure 2.2.
A l'équilibre, $\mu_\uparrow = \mu_\downarrow = \mu = \frac{\hbar^2 k_{F\uparrow}^2}{2m} - \frac{\hbar}{2}g\mu_BH = \frac{\hbar^2 k_{F\downarrow}^2}{2m} + \frac{\hbar}{2}g\mu_BH$.
On en déduit que pour des faibles champs H, $k_{F\uparrow} - k_{F\downarrow}$ est proportionnel à H, donc l'aimantation totale $N_\uparrow - N_\downarrow$ est proportionnelle à H (on s'est placé à $T = 0$). Il existe donc une susceptibilité finie à température nulle. La relative difficulté qu'il y a à polariser le système est donc une manifestation directe du principe de Pauli: les électrons polarisés le long du champ ont une énergie cinétique plus élevée en moyenne que ceux de la mer de Fermi non polarisée.

Dans un métal, l'énergie de Fermi des électrons de conduction est de l'ordre de l'électronvolt. Comme $k_BT = 0,025$ eV si $T = 300$ K, l'énergie de Fermi correspond à une température typique de 10^4 à 10^5 K. Donc pour un métal ordinaire, du point

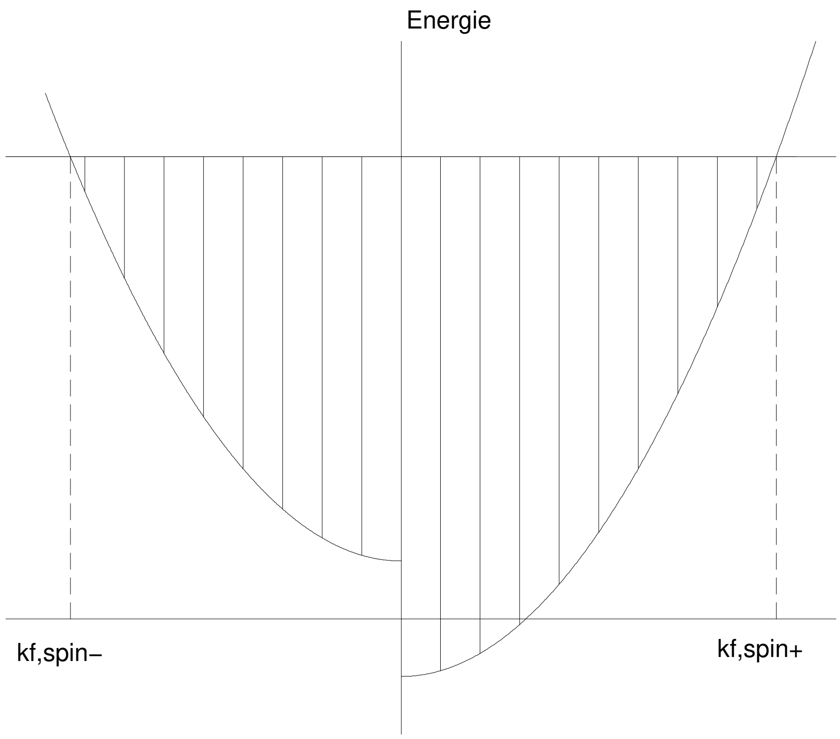

Figure 2.2: Mer de Fermi dans un champ magnétique extérieur

de vue des électrons de conduction (mais donc pas toujours des phonons!), on se trouve à basse température: seule une petite fraction de la mer de Fermi au voisinage de la surface de Fermi peut donner lieu à des excitations thermiques.

Une question que pose toutefois le succès de ce modèle d'électrons indépendants est la suivante : dans quelle mesure peut-on réellement négliger l'effet des interactions Coulombiennes entre les électrons de conduction?

La réponse ne se trouve **pas** dans un argument d'ordre de grandeur: dans un métal, l'ordre de grandeur de l'énergie d'interaction Coulombienne entre les électrons est *comparable* à celui de leur énergie cinétique. Ceci résulte du fait que les distances interatomiques dans un cristal sont de l'ordre de grandeur du rayon de Bohr a_0 de l'atome d'hydrogène. Par conséquent, la distance typique entre deux électrons voisins (qui régule la valeur de l'énergie Coulombienne), et la longueur d'onde de Fermi (donnant l'énergie cinétique moyenne) sont toutes deux de l'ordre de a_0. Or a_0 est justement définie par l'équilibrage d'une énergie électrostatique et une énergie cinétique (via le principe d'incertitude):

$$\frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 a_0} = \frac{\hbar^2}{m a_0^2} .$$

La notion importante permettant d'envisager une solution à ce problème est celle

d'écrantage de l'interaction Coulombienne. De quoi s'agit-il?

Supposons que l'on introduise une charge électrique extérieure statique dans un métal. Cette charge induit un champ électrique extérieur

$$\vec{E}_{\text{ext}}(\vec{r}) = \frac{Ze}{4\pi\varepsilon_0}\frac{\vec{r}}{|\vec{r}|^3}\,,$$

en appelant Z la charge supposée placée en $\vec{r} = 0$. Les électrons de conduction réagissent à ce champ extérieur, en créant une accumulation d'électrons au voisinage de l'origine si $Z > 0$ et une déplétion si $Z < 0$. Cette modification de la densité électronique crée alors un champ électrique *induit* qui clairement s'oppose au champ extérieur.

Nous allons montrer que la charge électronique déplacée est exactement $-Ze$, ceci sur une longueur très courte que l'on appelle longueur d'écran (λ_e). Par conséquent un électron à une distance $|\vec{r}| \gg \lambda_e$ de la charge extérieure est soumis à un champ électrique *local* qui est la somme du champ extérieur et du champ induit. Ce champ local est pratiquement nul dès que $|\vec{r}| \gg \lambda_e$: c'est ce que l'on traduit en disant que le gaz d'électrons écrante complètement la charge extérieure.

Nous avons le schéma général suivant:

$$\begin{tikzcd}
\boxed{\text{Champ extérieur}} \arrow[r] \arrow[d] & \boxed{\text{Polarisation du milieu}} \arrow[d, "\text{(équations de Maxwell)}"] \\
\boxed{\text{Champ local}} \arrow[ur, shift left] \arrow[ur, shift right] & \boxed{\text{Champ induit}} \arrow[l]
\end{tikzcd}$$

Dans ce schéma, le champ extérieur est supposé connu. Il y a donc trois quantités inconnues: le champ local, le champ induit, et la polarisation du milieu. Il nous faut trois équations. Tout d'abord, la connaissance de la polarisation du milieu permet de calculer le champ induit par les équations de Maxwell. Par ailleurs, nous avons:

$$\vec{E}_{\text{local}} = \vec{E}_{\text{ext}} + \vec{E}_{\text{induit}}\,.$$

Il nous reste à préciser quelle est la réponse du milieu au champ local, ce que nous avons représenté par la $\rightrightarrows$ sur le schéma précédant. En toute rigueur, il faudrait traiter le problème complet du gaz d'électrons placé dans le champ extérieur, en prenant explicitement en compte les interactions Coulombiennes entre les électrons. Il s'agit d'un problème pour lequel nous ne disposons pas de solution analytique, et cette situation semble devoir durer encore longtemps!

Un schéma d'approximation très utilisé (dans ce contexte, et dans bien d'autres domaines de la physique) consiste à dire que l'effet principal des interactions est pris en compte par le champ induit qui résulte de la polarisation. Dans un tel schéma, nous faisons alors l'hypothèse que la réponse du gaz d'électrons au champ local est celle du gaz des électrons sans interaction. Cette approximation entre dans la classe de ce qu'on appelle souvent "approximation de champ moyen". L'idée générale de ces approximations consiste à remplacer un problème compliqué à cause d'interactions ou de non-linéarités par un problème simplifié où chaque particule évolue indépendamment des autres dans un champ moyen. Ce champ moyen prend en compte l'effet des interactions provenant de $N-1$ particules sur la particule supposée libre que l'on étudie. Ces approximations sont souvent appelées "auto-cohérentes", car le champ moyen et le mouvement des particules supposées indépendantes se déterminent mutuellement.

Pour le gaz d'électrons, en l'absence de champ extérieur, nous avons un système invariant par translation. Par conséquent, l'état de champ moyen correspondant est la même mer de Fermi, construite sur les états d'ondes planes, que celle envisagée au début de cette section. En présence d'un champ extérieur (comme celui de la charge statique considérée plus haut), la situation est en général plus compliquée, si bien que le champ moyen est modifié par la présence du champ induit. Le champ moyen correspond à ce que nous avons appelé ici champ local.

La prise en compte de la déformation du champ local sous l'effet de la polarisation du milieu est l'idée de base de l'approximation connue sous le nom de "RPA" (pour "Random Phase Approximation"). Une présentation claire et détaillée, dans le contexte du gaz d'électrons dans un métal est donnée au dernier chapitre du livre de D. Pines et P. Nozières[1]. Nous utiliserons souvent cette approximation dans ce cours, car elle est simple à mettre en œuvre, et l'expérience a montré qu'elle donne des résultats assez

[1] D. Pines and P. Nozières, *The theory of quantum liquids*, vol.I *Normal Fermi liquids*, Advanced Book Classics, Addison Wesley (1966)

raisonnables (notamment lorsque l'on s'intéresse à la physique aux grandes longueurs d'onde et aux basses fréquences $(\vec{q};\omega) \to (0;0)$).

Pour revenir au problème de l'écrantage, il nous faut donc préciser la réponse du gaz d'électrons au champ local. Appelons $\delta\rho(r)$ la variation de la densité électronique locale sous l'effet de la charge extérieure. Nous supposons que cette perturbation est suffisamment faible pour pouvoir être traitée au premier ordre. Ceci revient donc à poser:

$$\delta\rho(r) = -\int d^3r' K^{00}(r-r')V_{\text{loc}}(r') .$$

Cette équation est plus commode en transformée de Fourier:

$$\delta\widetilde{\rho}(\vec{q}) = -\widetilde{K}^{00}(\vec{q})\widetilde{V}_{\text{loc}}(\vec{q}) .$$

Par ailleurs:

$$\widetilde{V}_{\text{loc}}(\vec{q}) = \widetilde{V}_{\text{ext}}(\vec{q}) + \widetilde{V}_{\text{ind}}(\vec{q}) .$$

En outre, nous avons $\vec{\nabla}\cdot\vec{E}_{\text{ind}} = \dfrac{\delta\rho}{\varepsilon_0}$, ce qui donne:

$$\vec{\nabla}^2 V_{\text{ind}} + \frac{\delta\rho}{\varepsilon_0} = 0 .$$

D'où: $\widetilde{V}_{\text{ind}}(\vec{q}) = \dfrac{\delta\widetilde{\rho}(\vec{q})}{\varepsilon_0 q^2}$. Ceci permet d'éliminer $\widetilde{V}_{\text{ind}}(\vec{q})$ des équations précédentes, et d'obtenir:

$$\widetilde{V}_{\text{loc}}(\vec{q}) = \widetilde{V}_{\text{ext}}(\vec{q}) + \frac{\delta\widetilde{\rho}(\vec{q})}{\varepsilon_0 q^2} ,$$

et

$$\delta\widetilde{\rho}(\vec{q}) = -\widetilde{K}^{00}(\vec{q})\left\{\widetilde{V}_{\text{ext}}(\vec{q}) + \frac{\delta\widetilde{\rho}(\vec{q})}{\varepsilon_0 q^2}\right\} .$$

On obtient donc:

$$\delta\widetilde{\rho}(\vec{q}) = -\frac{\widetilde{K}^{00}(\vec{q})}{1+\dfrac{\widetilde{K}^{00}(\vec{q})}{\varepsilon_0 q^2}}\,\widetilde{V}_{\text{ext}}(\vec{q}) ;$$

$$\widetilde{V}_{\text{loc}}(\vec{q}) = \frac{1}{1+\dfrac{\widetilde{K}^{00}(\vec{q})}{\varepsilon_0 q^2}}\,\widetilde{V}_{\text{ext}}(\vec{q}) .$$

Ces formules sont typiques de l'approximation RPA. Nous en verrons plusieurs autres exemples dans ce cours.

Nous allons nous intéresser au comportement de la réponse à grande distance, donc à la limite $q \to 0$. La propriété importante du gaz d'électrons libres (et par extension de tout métal) est que la fonction de réponse en densité $\widetilde{K}^{00}(\vec{q})$ admet une limite non-nulle finie lorsque $q \to 0$. De plus, on peut montrer que:

$$\lim_{q\to 0} \widetilde{K}^{00}(\vec{q}) = e^2\nu(0) ,$$

où $\nu(0)$ est la densité d'états à un électron au niveau de Fermi. Ce résultat est dérivé en détail en section **4.7.3**. Mais il est presque évident intuitivement. Si le potentiel local varie peu, on peut l'interpréter comme induisant une variation du potentiel chimique de sorte qu'il existe un vecteur d'onde de Fermi local. En effet, l'équilibre thermodynamique requiert:

$$\varepsilon(k_F(r)) - eV_{\text{loc}}(r) = \mu = Const .$$

Si V_{loc} est faible, on peut poser $k_F(r) = k_F^{(0)} + \delta k_F(r)$, ce qui correspond à une modulation spatiale de la densité électronique: $n(r) = n^{(0)} + \delta n(r)$. Comme $\nu(0)$ est la densité d'états à une particule au niveau de Fermi, nous pouvons supposer $\dfrac{\delta n(r)}{\delta\varepsilon(k_F(r))} = \nu(0)$. Si $\delta\varepsilon(k_F(r)) = eV_{\text{loc}}(r)$, on obtient:

$$\delta n(r) = e\nu(0)V_{\text{loc}}(r) \quad \text{soit} \quad \delta\rho(r) = -e^2\nu(0)V_{\text{loc}}(r) .$$

Si l'on introduit la quantité $q_{TF}^2 = \dfrac{e^2\nu(0)}{\varepsilon_0}$, les formules générales deviennent, dans la limite $q \to 0$:

$$\left\{ \begin{array}{rcl} \delta\widetilde{\rho}(\vec{q}) & = & -\dfrac{\varepsilon_0 q_{TF}^2 q^2}{q^2 + q_{TF}^2} \quad \widetilde{V}_{\text{ext}}(\vec{q}) , \\ \widetilde{V}_{\text{loc}}(\vec{q}) & = & -\dfrac{q^2}{q^2 + q_{TF}^2} \quad \widetilde{V}_{\text{ext}}(\vec{q}) . \end{array} \right.$$

Dans le cas d'une charge extérieure ponctuelle:

$$\vec{\nabla}^2 V_{\text{ext}} + \frac{Ze}{\varepsilon_0}\,\delta(r) = 0 .$$

Donc $\widetilde{V}_{\text{ext}}(\vec{q}) = \dfrac{Ze}{\varepsilon_0 q^2}$. Nous en tirons:

$$\left\{ \begin{array}{rcll} \delta\widetilde{\rho}(\vec{q}) & = - & Ze & \dfrac{q_{TF}^2}{q^2 + q_{TF}^2} , \\ \widetilde{V}_{\text{loc}}(\vec{q}) & = & \dfrac{Ze}{\varepsilon_0} & \dfrac{1}{q^2 + q_{TF}^2} . \end{array} \right.$$

On voit immédiatement que la charge électronique déplacée est égale à $-Ze$. En effet:

$$\int d^3r\,\delta\rho(\vec{r}) = \delta\widetilde{\rho}(\vec{q} = 0) = -Ze .$$

Ensuite, on peut vérifier que cette charge d'écran apparaît sur une longueur finie q_{TF}^{-1}.
En effet:

$$\begin{cases} \delta\tilde{\rho}(\vec{r}) & = - \quad Ze q_{TF}^2 \quad \dfrac{e^{-q_{TF}\, r}}{4\pi r} \,, \\ \\ \tilde{V}_{\mathrm{loc}}(\vec{r}) & = \qquad \dfrac{Ze}{4\pi\varepsilon_0} \quad \dfrac{e^{-q_{TF}\, r}}{r} \,. \end{cases}$$

Ici q_{TF} porte le nom de vecteur d'onde de Thomas-Fermi. La longueur caractéristique d'écran est très petite. En effet, avec $\nu(0) = \dfrac{k_F m}{\pi^2 \hbar^2}$, nous obtenons: $(a_0 q_{TF})^2 = \dfrac{4}{\pi} k_F a_0$, où a_0 est le rayon de Bohr. Comme $k_F a_0$ est de l'ordre de l'unité, q_{TF}^{-1} est également de l'ordre de a_0. L'écrantage dans un métal est donc très efficace! Dans beaucoup de situations, tout se passe comme si l'interaction Coulombienne, après écrantage, devenait une interaction à courte portée. Ceci explique en partie le succès des modèles fondés sur le gaz d'électrons libres. La suite de l'explication nous entraînerait au-delà du sujet de ce cours. C'est le but de la théorie, dite des liquides de Fermi, développée initialement par Landau. Le lecteur est renvoyé au livre de D. Pines et P. Nozières, déjà cité ou encore aux chapitres 1 et 4 du livre de A. Abrikosov, L. Gorkov et I. Dzyaloshinskii[2] .

En plus de cet écrantage statique, un métal est bien sûr caractérisé par la propriété de pouvoir conduire un courant électrique. En fait, notre modèle du gaz d'électrons libres possède même celle de pouvoir conduire sans dissiper d'énergie. Autrement dit, sa résistance électrique est nulle et sa conductivité infinie!
On peut voir ceci sur les équations du mouvement classiques d'un électron dans un champ oscillant $\vec{E}(t) = \vec{E}_0 \exp(-i\omega t)$:

$$m\frac{d^2\vec{r}}{dt^2} = -e\vec{E}_0 e^{-i\omega t} \,.$$

D'où

$$\frac{d\vec{r}}{dt} = \left.\frac{d\vec{r}}{dt}\right|_{t=0} + \frac{e\vec{E}_0}{im\omega}\left(e^{-i\omega t} - 1\right) \,.$$

Ce qui correspond à une densité de courant:

$$\vec{J}(t) = \vec{J}(0) + \frac{ine^2}{m\omega}\left(e^{-i\omega t} - 1\right)\vec{E}_0 \,.$$

[2] A. Abrikosov, L. Gorkov et I. Dzyaloshinskii, *Methods of quantum field theory in statistical physics*, Dover Books (1963)

La conductivité uniforme à fréquence ω est donc:

$$\widetilde{\sigma}(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{i}{\omega} \, .$$

Le caractère non-dissipatif du système se traduit par le fait que $\widetilde{\sigma}(\omega)$ est purement imaginaire: le courant et le champ extérieur sont alors déphasés de $\dfrac{\pi}{2}$, ce qui donne une puissance dissipée nulle en moyenne.

Le lecteur est invité à vérifier, en section **4.7.3** qu'un calcul quantique de cette fonction de réponse sur le modèle du gaz d'électrons libres donne bien le même résultat. Ce système, est-il alors un supraconducteur? Pas vraiment, et pour deux raisons. Tout d'abord, il est très sensible aux impuretés qui existent toujours dans un échantillon réel. Un modèle phénoménologique simple, appelé modèle de Drude, consiste à dire que l'accélération d'un électron est stoppée au bout du temps τ, qui est le temps moyen de collision d'un électron sur les impuretés. Dans ce cas:

$$\widetilde{\sigma}(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{i}{i\tau^{-1}+\omega} = \frac{ne^2}{m}\frac{\tau}{1-i\omega\tau} \, .$$

La conductivité admet alors une partie réelle non-nulle qui donne de la dissipation. L'autre raison, plus intrinsèque, sera étudiée en détail par la suite. Elle porte sur la façon qu'a ce système d'écranter un champ magnétique extérieur.

Cette accélération libre dans un champ extérieur (ou dans le champ local) a une autre conséquence intéressante physiquement: l'existence de modes collectifs qui consistent en une oscillation de la densité de charge locale autour de sa valeur d'équilibre. Pour le montrer, il nous faut évaluer la fonction de réponse $\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega)$ à fréquence finie. Il existe une relation simple entre la conductivité longitudinale $\sigma_{||}(\vec{q};\omega)$ et $\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega)$. Pour le montrer, nous posons $\widetilde{J}(\vec{q};\omega) = \widetilde{\sigma}_{||}(\vec{q};\omega)\widetilde{E}(\vec{q};\omega)$.
Le champ $\widetilde{E}(\vec{q};\omega)$ est supposé longitudinal, c'est à dire que $\widetilde{E}(\vec{q};\omega) \parallel \vec{q}$. Dans ce cas, on peut écrire E sous la forme $-\vec{\nabla}V$, soit:

$$\widetilde{E}(\vec{q};\omega) = -i\vec{q}\,\widetilde{V}(\vec{q};\omega) \, .$$

Donc $\widetilde{J}(\vec{q};\omega) = -i\vec{q}\,\widetilde{\sigma}_{||}(\vec{q};\omega)\widetilde{V}(\vec{q};\omega)$. Par ailleurs, la conservation de la charge entraîne l'équation

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} + \vec{\nabla}\cdot\vec{J} = 0$$

soit

$$-i\omega\widetilde{\rho}(\vec{q};\omega) + i\vec{q}\cdot\widetilde{J}(\vec{q};\omega) = 0\,.$$

On obtient donc

$$\widetilde{\rho}(\vec{q};\omega) = -i\frac{\vec{q}^2}{\omega}\widetilde{\sigma}_{\|}(\vec{q};\omega)\widetilde{V}(\vec{q};\omega)\,.$$

La relation est donc $\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega) = i\frac{q^2}{\omega}\widetilde{\sigma}_{\|}(\vec{q};\omega)$. Il est possible de montrer que la conductivité $\widetilde{\sigma}_{\|}(\vec{q},\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{i}{\omega}$, lorsque les deux conditions: $v_F q \ll \omega$ et $q \ll 2k_F$ sont réunies $\left(v_F = \frac{\hbar k_F}{m}\right)$. Ceci provient de la forme du spectre des excitations particule-trou pour le modèle du gaz d'électrons libres (voir Figure 2.3)

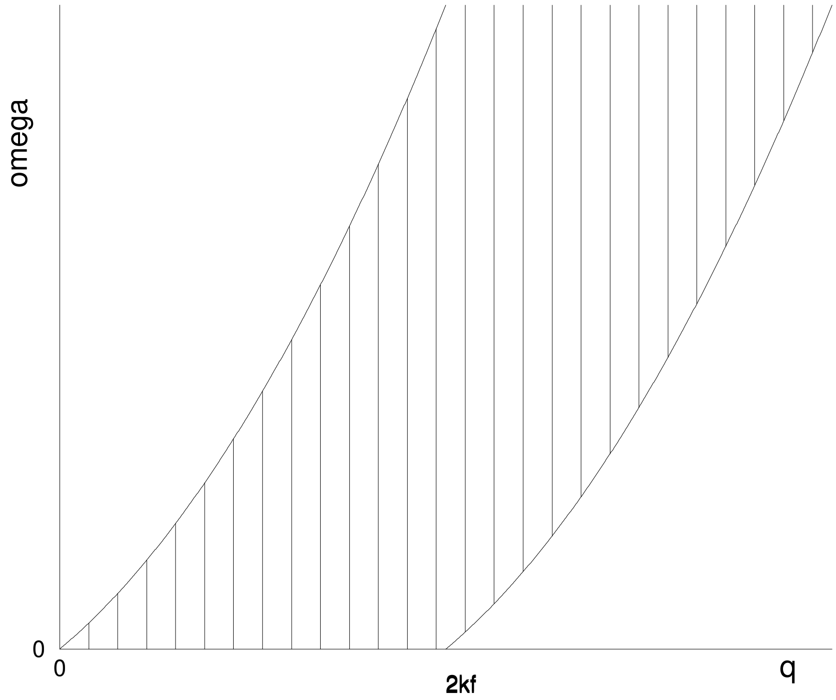

Figure 2.3: Continuum d'excitations particule-trou

La densité d'états en énergie pour ces paires est, lorsque $q \ll 2k_F$:

$$\nu(E,q) = \frac{1}{2}\nu(0)\frac{E}{\hbar v_F q} \qquad \text{pour} \qquad 0 \leq E \leq \hbar v_F q\,.$$

Cette densité d'états particule-trou intervient dans la fonction de réponse:

$$\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega) = -e^2\int_0^\infty dE\,\nu(E,q)\left(\frac{1}{\hbar\omega - E + i\eta} - \frac{1}{\hbar\omega + E + i\eta}\right)$$

Lorsque $\omega \geq v_F q$, la densité spectrale $\nu(\hbar\omega, q)$ s'annule, et l'on obtient le résultat indiqué plus haut pour $\widetilde{\sigma}_{\|}(\vec{q};\omega)$. La réponse densité-densité correspondante est:

$$\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega) = -\frac{q^2}{\omega^2}\frac{ne^2}{m}\,.$$

Par conséquent, la quantité $1+\frac{\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega)}{\varepsilon_0 q^2}$ qui intervient au dénominateur dans les expressions de $\delta\widetilde{\rho}$ et $\widetilde{V}_{\text{loc}}$ s'écrit:

$$1-\frac{ne^2}{m\varepsilon_0}\frac{1}{\omega^2}=1-\frac{\omega_p^2}{\omega^2}\,.$$

Lorsque $\omega=\omega_p$ et $q\to 0$ ce dénominateur s'annule. Ceci correspond à la possibilité d'avoir $\delta\rho\neq 0$ et $V_{\text{loc}}\neq 0$, mais $V_{\text{ext}}=0$. Il s'agit donc d'excitations du système, indépendamment d'un champ extérieur. Dans ce cas, on les appelle plasmons. Ce sont eux qui sont activés lorsque l'on fait brusquement apparaître une charge extérieure statistique et que le nuage d'écran doit se constituer. Il serait possible, en détaillant davantage la dépendance en q de la fonction $\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega)$, de calculer précisément la dispersion de ces plasmons. On trouverait:

$$\omega_p(q)=\omega_p(1+\frac{3}{10}(\frac{v_F q}{\omega_p})^2+...)$$

Il est intéressant de noter que la branche des plasmons est pour $|\vec{q}|$ assez petit au-dessus du continuum particule-trou. Il s'agit donc d'une excitation bien définie.

2.1.2 Ecrantage diélectrique: exemple des semi-conducteurs

Si l'on reste dans le cadre de modèles d'électrons indépendants, il est possible d'observer des modifications qualitatives très importantes de la réponse électromagnétique si l'on tient compte du fait que ces électrons "voient" le potentiel périodique créé par le réseau des ions chargés positivement.

L'existence de ce potentiel périodique n'est pas anodine. De manière générale, le spectre d'une particule libre dans un potentiel périodique est organisé en bandes d'énergie. Pour un système unidimensionnel, ces bandes d'énergie sont séparées par des gaps (c'est à dire des intervalles qui ne contiennent aucune valeur propre du spectre d'énergie à une particule). En dimension supérieure, ces bandes d'énergie peuvent se recouvrir partiellement, mais la possibilité qu'il existe des gaps reste bien réelle.

Rappelons brièvement sur l'exemple unidimensionnel comment ces bandes et ces gaps apparaissent. Considérons un potentiel périodique, de période a: $V(x+a)=V(x)$.

Ce potentiel se représente par une série de Fourier:

$$V(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \widetilde{V}_m e^{i\frac{2\pi}{a}mx} \ ,$$

$$\widetilde{V}_m = \frac{1}{a}\int_{-\frac{a}{2}}^{\frac{a}{2}} dx V(x) e^{-i\frac{2\pi}{a}mx} \ .$$

Par conséquent, si $|k\rangle$ désigne l'onde plane $x \to e^{ikx}$,

$$V|k\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} \widetilde{V}_m |k + \frac{2\pi}{a}m\rangle \ .$$

Donc l'onde $|k\rangle$ n'est couplée par V qu'à un réseau discret d'ondes planes. La périodicité de ce réseau dans l'espace réciproque est $\frac{2\pi}{a}$. Le problème de la résolution de l'équation de Schrödinger se ramène à la diagonalisation de blocs indépendants, chaque bloc correspondant à un réseau unidimensionnel d'ondes planes de la forme $|k + \frac{2\pi}{a}m\rangle$, $m \in \mathbb{Z}$. On obtient tous les réseaux possibles d'ondes planes, et chacun est obtenu une seule fois, si k est restreint à parcourir l'intervalle $\left]-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$ qui est appelé dans ce contexte la première zone de Brillouin. La matrice représentant l'Hamiltonien d'un électron libre, restreinte à un tel bloc, prend la forme:

$$\begin{matrix}
\ddots\, \varepsilon_0\left(k - \frac{4\pi}{a}\right) & \ddots\, \widetilde{V}_{-1} & \ddots\, \widetilde{V}_{-2} & \ddots\, \widetilde{V}_{-3} & \ddots\, \widetilde{V}_{-4} \ddots \\
\ddots\, \widetilde{V}_1 & \varepsilon_0\left(k - \frac{2\pi}{a}\right) & \widetilde{V}_{-1} & \widetilde{V}_{-2} & \widetilde{V}_{-3} \ddots \\
\ddots\, \widetilde{V}_2 & \widetilde{V}_1 & \varepsilon_0\left(k\right) & \widetilde{V}_{-1} & \widetilde{V}_{-2} \ddots \\
\ddots\, \widetilde{V}_3 & \widetilde{V}_2 & \widetilde{V}_1 & \varepsilon_0\left(k + \frac{2\pi}{a}\right) & \widetilde{V}_{-1} \ddots \\
\ddots\, \widetilde{V}_4 \ddots & \widetilde{V}_3 \ddots & \widetilde{V}_2 \ddots & \widetilde{V}_1 \ddots & \varepsilon_0\left(k + \frac{4\pi}{a}\right) \ddots
\end{matrix}$$

Ici, nous avons posé $\varepsilon_0(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$.

Les états propres d'un tel bloc sont indexés par un entier α et satisfont:

$$\mathcal{H}(k)|\psi_\alpha(k)\rangle = \varepsilon_\alpha(k)|\psi_\alpha(k)\rangle, \qquad k \in \left]-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right] \ .$$

On suppose par exemple $\varepsilon_0(k) \leq \varepsilon_1(k) \leq \varepsilon_2(k) \leq \cdots$ Par ailleurs, les $|\psi_\alpha(k)\rangle$ se mettent sous la forme:

$$\langle x|\psi_\alpha(k)\rangle = \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_{\alpha,m}(k)\langle x|k + \frac{2\pi}{a}m\rangle \equiv e^{ikx}u_{\alpha k}(x)$$

avec $u_{\alpha k}(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} c_{\alpha,m}(k) e^{i\frac{2\pi}{a}mx}$. Donc $u_{\alpha k}(x+a) = u_{\alpha k}(x)$.

Cette représentation des fonctions d'onde propres porte le nom de **théorème de Bloch**. Elle traduit simplement le fait que l'on puisse diagonaliser à la fois l'Hamiltonien et la translation de vecteur $\vec{a}$. Lorsque le potentiel V est faible, il est tentant de le traiter comme une perturbation. Ceci requiert l'étude d'éventuelles dégénérescences de la forme:

$$\varepsilon_0\left(k + \frac{2\pi}{a}m\right) = \varepsilon_0\left(k + \frac{2\pi}{a}n\right) .$$

Ceci implique que: $m = n$, ou $k = -\frac{\pi}{a}(m+n)$. Il est parlant de tracer pour $k \in \left]-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right]$ l'ensemble des $\varepsilon_0\left(k + \frac{2\pi}{a}m\right)$ lorsque $m \in \mathbb{Z}$. Nous obtenons la figure 2.4.

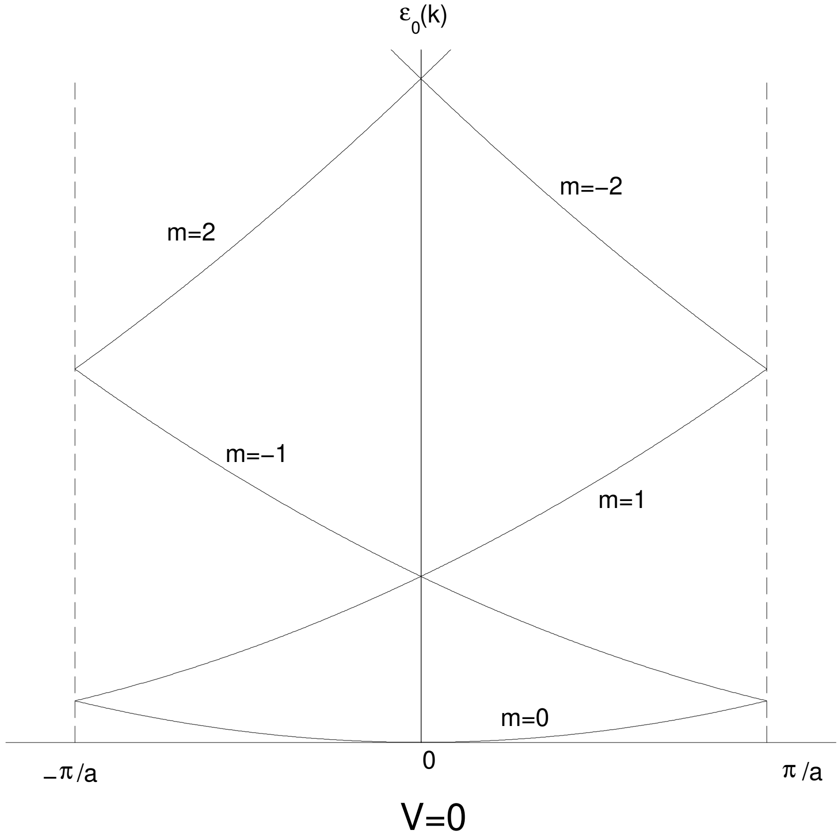

Figure 2.4: Spectre d'une particule libre

En général une perturbation a tendance à lever les dégénérescences, ce qui donne qualitativement le spectre de la figure 2.5.

Le spectre s'organise donc en bandes d'énergies, séparées par des gaps. Ce genre d'analyse se transporte en grande partie aux dimensions supérieures. Le point de départ

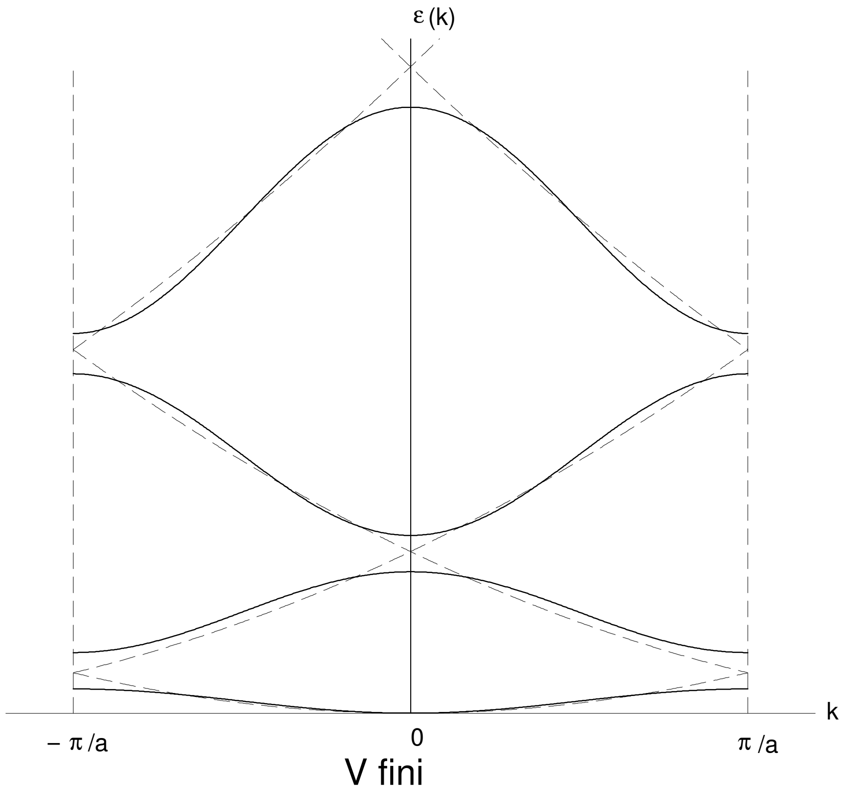

Figure 2.5: Spectre d'une particule dans un potentiel périodique

est toujours la décomposition de V.

$$\begin{cases} V(\vec{r}) & = & \sum_{\vec{G}} \widetilde{V}_{\vec{G}}\, e^{i\vec{G}\cdot\vec{r}} \\ \widetilde{V}_{\vec{G}} & = \dfrac{1}{\Omega} & \displaystyle\int_{CE} d^3\vec{r}\, V(\vec{r})\, e^{-i\vec{G}\cdot\vec{r}} \end{cases}$$

Ici la $\sum_{\vec{G}}$ désigne la somme sur tous les vecteurs du réseau réciproque, c'est à dire les vecteurs $\vec{G}$ tels que pour toute période $\vec{R}$ de la fonction V, $\exp(i\vec{G}\cdot\vec{R}) = 1$. De même $\int_{CE} d^3\vec{r}$ désigne l'intégrale sur une cellule élémentaire du réseau direct, et Ω le volume d'une telle cellule. Le vecteur $\vec{k}$ est restreint à une cellule élémentaire du réseau réciproque, par exemple la première zone de Brillouin.

L'analyse de la position des dégénérescences des ondes planes peut par contre devenir assez vite compliquée si on s'intéresse à de grandes valeurs de m. Ceci étant précisé, il existe un cas physiquement très intéressant, car il correspond aux semi-conducteurs: lorsque la densité électronique est telle que l'on remplit complètement un nombre entier de bandes, et que toutes les autres bandes sont vides. Par conséquent, les états à une particule occupés sont séparés par un gap en énergie Δ des états vides. Pour un tel système, la réponse à un champ électronique est très différente de celle d'un métal: la réponse est de nature *diélectrique*, tant que la fréquence ω est telle que $\hbar\omega \leq \Delta$.

Une première façon de le voir est de montrer que la partie réelle de la conductivité s'annule pour $\hbar\omega \leq \Delta$. Reprenons la relation établie plus haut:

$$\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega) = i\frac{q^2}{\omega}\widetilde{\sigma}_{\|}(\vec{q};\omega) .$$

Donc, $\mathrm{Re}\,\widetilde{\sigma}_{\|}(\vec{q};\omega) = \frac{\omega}{q^2}\mathrm{Im}\,\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega)$. Il est encore possible d'écrire une représentation spectrale pour la fonction de réponse $\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega)$:

$$\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega) = -e^2\int_0^\infty dE\,\nu(E,q)\Big(\frac{1}{\hbar\omega - E + i\eta} - \frac{1}{\hbar\omega + E + i\eta}\Big) .$$

Supposons $\omega > 0$. Alors: $\mathrm{Im}\,\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega) = \pi e^2\nu(\hbar\omega,\vec{q})$. Par conséquent:

$$\mathrm{Re}\,\widetilde{\sigma}_{\|}(\vec{q};\omega) = \pi e^2\frac{\omega}{q^2}\nu(\hbar\omega,\vec{q}) .$$

Ceci établit le lien entre la partie réelle de la conductivité et la dissipation: $\nu(\hbar\omega,\vec{q}) \neq 0$ implique que l'excitation extérieure peut produire des transitions réelles vers des états excités de type particule-trou, d'après la règle d'or de Fermi. Donc, si $|\hbar\omega| \leq \Delta$, la densité spectrale correspondante est nulle, ainsi que la partie dissipative de la conductivité.

En toute rigueur, ceci n'exclut pas un conducteur parfait, pour lequel également la dissipation s'annule (lorsque $\omega > v_F q$). Il est alors intéressant de considérer la réponse à une charge extérieure statique.

Dans le cas de la réponse statique, le phénomène important est que $\lim_{q\to 0}\widetilde{K}^{00}(\vec{q};0) = 0$. Plus précisément, $\widetilde{K}^{00}(\vec{q};0) \sim \varepsilon_0\alpha q^2 \quad (q \to 0)$. Ceci diffère du cas métallique où $\widetilde{K}^{00}(\vec{q};0)$ tend vers une valeur non nulle lorsque $q \to 0$.

Lorsque l'on reporte ce comportement dans les formules générales pour la polarisation $\delta\rho$ du milieu, et pour le champ local, nous obtenons:

$$\begin{cases} \delta\widetilde{\rho}(\vec{q}) = & -\varepsilon_0 q^2\dfrac{\alpha}{1+\alpha}\widetilde{V}_{\mathrm{ext}}(\vec{q}) , \\[2ex] \widetilde{V}_{\mathrm{loc}}(\vec{q}) = & \dfrac{1}{1+\alpha}\widetilde{V}_{\mathrm{ext}}(\vec{q}) . \end{cases}$$

Le champ local est donc réduit d'un facteur multiplicatif par rapport au champ extérieur. Ce comportement est caractéristique d'un milieu diélectrique.

En électromagnétisme des milieux continus, il est traditionnel d'introduire le champ $\vec{D}$ défini par: $\vec{\nabla} \cdot \vec{D} = \rho_{\text{ext}}$, où ρ_{ext} désigne la distribution des charges extérieures au système. Avec nos notations $\vec{D} = \varepsilon_0 \vec{E}_{\text{ext}}$, et $\vec{E}$ désigne le champ local. La constante diélectrique ε est alors définie par: $\vec{D} = \varepsilon \vec{E}$, soit $\vec{E}_{\text{loc}} = \dfrac{\varepsilon_0}{\varepsilon} \vec{E}_{\text{ext}}$.

Nous voyons donc que: $\varepsilon = (1+\alpha)\varepsilon_0$. Lorsque:

$$\widetilde{V}_{\text{ext}}(\vec{q}) = \frac{Ze}{\varepsilon_0 q^2}, \qquad \delta\widetilde{\rho}(\vec{q}) = -\frac{\alpha}{1+\alpha} Ze\,.$$

Dans l'espace réel, ceci correspond à une distribution $\delta\rho(\vec{r}) = -\dfrac{\alpha}{1+\alpha} Ze\delta^{(3)}(\vec{r})$, qui est là encore typique d'un comportement diélectrique.

D'où vient ce comportement de la fonction $\widetilde{K}^{00}$?

La réponse requiert une analyse un peu plus détaillée de la densité spectrale $\nu(E, \vec{q})$ dans le cas d'un semi-conducteur. Il faut pour cela remonter à l'expression générale de la fonction de réponse en densité pour un tel système:

$$\widetilde{K}^{00}(r, r'; \omega) = -e^2 \sum_{\alpha \notin F; \beta \in F} \sum_{k,\, k'} \left\{ \frac{\langle 0|n(r)|\alpha k; \beta k'\rangle\langle \alpha k; \beta k'|n(r')|0\rangle}{\hbar\omega - \varepsilon_\alpha(k) + \varepsilon_\beta(k') + i\eta} - \frac{\langle 0|n(r')|\alpha k; \beta k'\rangle\langle \alpha k; \beta k'|n(r)|0\rangle}{\hbar\omega + \varepsilon_\alpha(k) - \varepsilon_\beta(k') + i\eta} \right\}.$$

Dans cette formule, α désigne une bande vide, et β une bande occupée, et k et k' appartiennent à la première zone de Brillouin. Le fait que le niveau de Fermi se trouve dans un gap du spectre à une particule entraîne donc que dans la somme ci-dessus, α et β soient nécéssairement distincts.

L'état $|\alpha k; \beta k'\rangle$ est une excitation particule-trou pour laquelle l'état à une particule $|\psi_\alpha(k)\rangle$ est occupé et l'état $|\psi_\beta(k')\rangle$ est vide. Ici $|0\rangle$ désigne la mer de Fermi du semi-conducteur. Comme le lecteur est invité à le vérifier, les éléments de matrice de la forme $\langle \alpha k; \beta k'|n(r)|0\rangle$ entre états à N particules sont égaux aux éléments de la matrice $\langle \psi_\alpha(k)|n(r)|\psi_\beta(k')\rangle$ entre états à une particule.

Par ailleurs:

$$\langle \psi_\alpha(k)|n(r)|\psi_\beta(k')\rangle = \langle \psi_\alpha(k)|r\rangle\langle r|\psi_\beta(k')\rangle = e^{i(k'-k)\cdot r} u^*_{\alpha k}(r) u_{\beta k'}(r)\,.$$

Nous obtenons ainsi:

$$\widetilde{K}^{00}(r, r'; \omega) = -e^2 \sum_{\alpha \notin F; \beta \in F} \sum_{k,\, k'} \left\{ e^{i(k-k')(r-r')} \frac{u^*_{\beta k'}(r) u_{\alpha k}(r) u^*_{\alpha k}(r') u_{\beta k'}(r')}{\hbar\omega - \varepsilon_\alpha(k) + \varepsilon_\beta(k') + i\eta} - e^{-i(k-k')(r-r')} \frac{u^*_{\beta k'}(r') u_{\alpha k}(r') u^*_{\alpha k}(r) u_{\beta k'}(r)}{\hbar\omega + \varepsilon_\alpha(k) - \varepsilon_\beta(k') + i\eta} \right\}$$

Contrairement à ce qui se passe pour un système invariant par translation continue, cette fonction dépend de r et de r'. La seule chose que l'on puisse dire, c'est que si $\vec{R}$ est une période du potentiel V, alors:

$$\widetilde{K}^{00}(\vec{r}+\vec{R},\vec{r}'+\vec{R};\omega)=\widetilde{K}^{00}(\vec{r},\vec{r}';\omega)\,.$$

Considérons la double transformée de Fourier:

$$\frac{1}{V}\int d^3r\int d^3r'\,\widetilde{K}^{00}(r,r';\omega)e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}'-\vec{r})}\,,$$

si la fonction de réponse était complètement invariante par translation, cette quantité serait égale à $\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega)$. Nous avons à considérer des intégrales de la forme

$$I=\int d^3r\int d^3r'\,e^{i(k-k'-q)(r-r')}u^*_{\beta k'}(r)u_{\alpha k}(r)u^*_{\alpha k}(r')u_{\beta k'}(r')\,.$$

On utilise alors la périodicité des fonctions u pour décomposer l'intégrale selon un ensemble de N_c cellules élémentaires du réseau. Ceci revient à écrire $r=\varrho+R$, où ϱ varie dans une cellule élémentaire et R parcourt l'ensemble des vecteurs de translation laissant le réseau invariant.

La somme $\sum\limits_{R,R'} e^{i(k-k'-q)(R-R')}=N_c^2$, si $k-k'-q$ est élément du réseau réciproque et s'annule autrement. Si k et k' sont dans la première zone de Brillouin, la connaissance de k' et de q ainsi que la contrainte $k-k'-q$ appartient au réseau réciproque déterminent univoquement k. En pensant à la limite $q\to 0$, on voit que pour presque tous les k' dans la zone de Brillouin, $k=k'+q$. Nous poserons donc par la suite $k=k'+q$ pour simplifier les notations. Pour $k-k'-q=0$, I devient:

$$\begin{aligned} I &= N_c^2\int\limits_{CE} d^3\varrho\, u^*_{\beta k'}(\varrho)u_{\alpha k}(\varrho)\int\limits_{CE} d^3\varrho'\, u^*_{\alpha k}(\varrho')u_{\beta k'}(\varrho')\,,\\ I &= N_c^2|\langle u_{\beta k'}|u_{\alpha k}\rangle|^2\,, \end{aligned}$$

où les recouvrements entre deux fonctions u sont calculés comme indiqués par l'intégrale sur une cellule élémentaire du réseau.

Nous obtenons donc:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{V}\int d^3r\int d^3r'\,\widetilde{K}^{00}(r,r';\omega)e^{i\vec{q}\cdot(\vec{r}'-\vec{r})}=\\ &-e^2\frac{N_c^2}{V}\sum_{\alpha\notin F,\beta\in F}\sum_k\left\{\frac{|\langle u_{\beta,k-\frac{q}{2}}|u_{\alpha,k+\frac{q}{2}}\rangle|^2}{\hbar\omega-\varepsilon_\alpha(k+\frac{q}{2})+\varepsilon_\beta(k-\frac{q}{2})+i\eta}\right.\\ &\left.-\frac{|\langle u_{\beta,k+\frac{q}{2}}|u_{\alpha,k-\frac{q}{2}}\rangle|^2}{\hbar\omega+\varepsilon_\alpha(k-\frac{q}{2})-\varepsilon_\beta(k+\frac{q}{2})+i\eta}\right\}. \end{aligned}$$

Nous voyons ici un exemple de situation où le comportement de la fonction spectrale est dominé par les *éléments de matrice*. En effet, comme les bandes α et β sont distinctes:

$$\lim_{q\to 0} \langle u_{\beta,k-\frac{q}{2}} | u_{\alpha,k+\frac{q}{2}} \rangle = 0 \ .$$

Comme le vecteur d'onde intervient de façon régulière dans l'équation différentielle (obtenue à partir de l'équation de Schrödinger) déterminant les $u_{\alpha k}$:

$$\left\{ \frac{1}{2m} \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} + \hbar \vec{k} \right)^2 + V(\vec{r}) \right\} u_{\alpha k}(r) = \varepsilon_\alpha(k) u_{\alpha k}(r)$$

il est légitime de conclure que le comportement générique de $\langle u_{\beta,k-\frac{q}{2}} | u_{\alpha,k+\frac{q}{2}} \rangle$ est d'ordre 1 par rapport à $\vec{k} \cdot \vec{q}$. Ceci permet donc d'en déduire:

$$\frac{1}{V} \int d^3r \int d^3r' \, \widetilde{K}^{00}(r, r'; \omega) \, e^{i\vec{q} \cdot (\vec{r}' - \vec{r})} = \mathcal{O}(q^2) \ , \qquad \text{si} \qquad q \to 0 \ .$$

2.2 Ecrantage d'un champ magnétique

2.2.1 Le diamagnétisme de Landau d'un métal normal

La question que nous allons étudier maintenant est la transposée au cas d'un champ magnétique de celle abordée jusqu'ici: comment un milieu matériel écrante-t-il un champ magnétique extérieur?

Comme dans le cas du champ électrique, nous verrons qu'il existe une certaine variété de comportements possibles. Pour simplifier, nous commencerons cette étude, comme pour le cas du champ électrique, par le gaz d'électrons libres. Supposons que nous établissons à l'aide d'une source de courant extérieure $\vec{J}_{\text{ext}}(\vec{r})$ statique, un champ magnétique $\vec{B}_{\text{ext}}(\vec{r})$. Ce champ magnétique agit sur les électrons de notre gaz. Dans une description classique, cette action est donnée par la force de Lorentz $\vec{f}_L$ s'exerçant sur un électron de vitesse $\vec{v}$ au point $\vec{r}$: $\vec{f}_L = -e\vec{v} \wedge \vec{B}$.

De façon générale, on s'attend à l'apparition de courants induits, notés $\vec{J}_{\text{ind}}(\vec{r})$. Ces courants créent un champ magnétique statique que nous noterons $\vec{B}_{\text{ind}}$. Ce champ $\vec{B}_{\text{ind}}$ satisfait les équations de Maxwell :

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}_{\text{ind}} = 0 \qquad \text{et} \qquad \vec{\nabla} \wedge \vec{B}_{\text{ind}} = \mu_0 \vec{J}_{\text{ind}} \, .$$

Comme nous l'avons fait dans le cas du champ électrique, nous faisons l'hypothèse qu'une bonne description de la réponse du gaz d'électrons est obtenue en supposant que celui-ci réagit comme un système de fermions sans interactions au champ magnétique *local* $\vec{B}_{\text{loc}} = \vec{B}_{\text{ext}} + \vec{B}_{\text{ind}}$.

Comme précédemment, ceci constitue un traitement approché des interactions courant-courant médiées dans le gaz d'électrons par le champ magnétique. Là encore, nous admettons que cette approximation (RPA) est légitime.

Comme nous décrivons une situation statique $\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{\text{ext}} = \vec{\nabla} \cdot \vec{J}_{\text{ind}} = 0$, si bien que ces deux champs sont transverses, c'est à dire :

$$\tilde{J}_{\text{ext}}(\vec{q}) \cdot \vec{q} = \tilde{J}_{\text{ind}}(\vec{q}) \cdot \vec{q} = 0 \, .$$

Il est alors commode de choisir une jauge où les potentiels vecteurs sont également transverses. Avec ce choix de jauge, notre hypothèse sur la réponse du gaz d'électrons se traduit par:

$$\widetilde{J}_{\text{ind}}(\vec{q}) = -\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q}) \left(\widetilde{A}_{\text{ext}}(\vec{q}) + \widetilde{A}_{\text{ind}}(\vec{q})\right) .$$

Par ailleurs, l'équation d'Ampère donne $\widetilde{A}_{\text{ind}}$ en fonction de $\widetilde{J}_{\text{ind}}$:

$$\widetilde{A}_{\text{ind}}(\vec{q}) = \frac{\mu_0}{q^2} \widetilde{J}_{\text{ind}}(\vec{q}) .$$

Ceci, substitué dans l'équation précédente permet d'exprimer $\widetilde{J}_{\text{ind}}(\vec{q})$:

$$\boxed{\widetilde{J}_{\text{ind}}(\vec{q}) = -\frac{\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q})}{1 + \frac{\mu_0}{q^2}\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q})} \widetilde{A}_{\text{ext}}(\vec{q})}$$

Pour évaluer l'intensité de l'écrantage, il est plus parlant d'exprimer le champ local en fonction du champ extérieur:

$$\widetilde{A}_{\text{loc}}(\vec{q}) = \frac{1}{1 + \frac{\mu_0}{q^2}\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q})} \widetilde{A}_{\text{ext}}(\vec{q}) .$$

Une autre façon également parlante est de comparer $\widetilde{J}_{\text{ind}}$ et $\widetilde{J}_{\text{ext}}$:

$$\widetilde{J}_{\text{ind}}(\vec{q}) = -\frac{\frac{\mu_0}{q^2}\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q})}{1 + \frac{\mu_0}{q^2}\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q})} \widetilde{J}_{\text{ext}}(\vec{q}) .$$

Dans le cas du gaz d'électrons libres, le calcul de la réponse transversale est détaillé en section **4.7.4**. Le résultat est: $\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q}) = \frac{ne^2}{m}\frac{q^2}{4k_F^2}$, dans la limite où $q \ll 2k_F$. Cette réponse se comporte donc différemment de la réponse de charge qui tend vers une limite finie lorsque $q \to 0$. On voit que la réponse à un champ magnétique statique est beaucoup plus faible, car $\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q})$ tend vers zéro lorsque $q \to 0$. Dans la limite des grandes longueurs d'onde, nous avons donc:

$$\widetilde{J}_{\text{ind}}(\vec{q}) = -\frac{\frac{ne^2}{m}\frac{\mu_0}{4k_F^2}}{1 + \frac{ne^2}{m}\frac{\mu_0}{4k_F^2}} \widetilde{J}_{\text{ext}}(\vec{q}) .$$

Le courant induit s'oppose au courant extérieur: il y a donc un écrantage partiel du champ magnétique extérieur. Le système est alors qualifié de diamagnétique. Toutefois, il est intéressant de remarquer que ce diamagnétisme est faible. En effet, dans un métal, la distance entre deux électrons voisins est de l'ordre de la distance interatomique, qui est de l'ordre du rayon de Bohr a_0 . Donc l'ordre de grandeur de la quantité $\frac{ne^2}{m}\frac{\mu_0}{4k_F^2}$

est $\dfrac{e^2}{\varepsilon_0 a_0}\dfrac{1}{mc^2}$ (nous avons utilisé la relation $\varepsilon_0\mu_0 c^2 = 1$). Cette quantité est le rapport entre l'énergie de Rydberg et l'énergie de masse de l'électron. Ce rapport est de l'ordre de α^2, où $\alpha = \dfrac{1}{137}$ est la constante de structure fine.
On s'attend donc à ce que $|\vec{j}_{\mathrm{ind}}|/|\vec{j}_{\mathrm{ext}}|$ soit de l'ordre de 10^{-4} dans un métal ordinaire. Ceci reflète le fait que la vitesse typique d'un électron de conduction est de l'ordre αc. Les interactions courant-courant sont donc d'ordre α^2 par rapport aux interactions électrostatiques.

Pourquoi ce diamagnétisme, au lieu d'un écrantage complet, comme dans le cas d'une charge électrique statique? On peut s'en faire une image intuitive, en considérant le mouvement des électrons en présence d'un champ magnétique local uniforme. Un tel problème peut se ramener au cas bidimentionnel, car la force de Lorentz subie par un électron est perpendiculaire à la direction du champ magnétique. Dans une description quantique, si $\vec{B}$ est le long de $\hat{z}$, la composante $\hbar k_z$ de l'impulsion d'un électron est un bon nombre quantique. Considérons le mouvement dans le plan (xy). Nous utiliserons la jauge de Landau $\vec{A} = (-By; 0; 0)$. L'équation de Schrödinger pour une particule s'écrit:

$$\frac{1}{2m}\left[\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x} - eBy\right)^2 + \left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\right)^2\right]\Psi(x,y) = E\Psi(x,y)\,.$$

Il est naturel d'utiliser l'invariance par translation le long de x du potentiel vecteur dans cette jauge:

$$\Psi(x,y) = e^{ikx}g(y)\,.$$

Posons $y_0(k) = \dfrac{\hbar k}{eB}$ et $\omega_c = \dfrac{eB}{m}$. Nous obtenons:

$$\left\{\frac{1}{2m}\left(\frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial y}\right)^2 + \frac{1}{2}m\omega_c^2\Big(y - y_0(k)\Big)^2\right\}g(y) = Eg(y)\,.$$

Il existe une échelle de longueur naturelle dans le problème l_0. On l'obtient comme d'habitude en équilibrant l'énergie cinétique et l'énergie potentielle:

$$\frac{1}{m}\left(\frac{\hbar}{l_0}\right)^2 = m\omega_c^2 l_0^2 \qquad \text{soit} \qquad l_0 = \left(\frac{\hbar}{eB}\right)^{1/2}.$$

On voit que le flux magnétique traversant un cercle de rayon l_0 est (à un facteur 2 près): $2\pi l_0^2 B = \dfrac{h}{e} = \Phi_0$, le quantum de flux. Ici Φ_0 reviendra souvent lors de la discussion sur la supraconductivité. Posant $y = y_0(k) + ul_0$ et $g(y) = h(u)$, il vient:

$$\left(-\frac{1}{2}\frac{d^2}{du^2} + \frac{1}{2}u^2\right)h(u) = \frac{E}{\hbar\omega_c}h(u)\,,$$

les fonctions propres sont donc les mêmes que pour un oscillateur harmonique:

$$h_n(u)\alpha\left(-\frac{d}{du}+u\right)^n \exp\left(-\frac{1}{2}u^2\right) \quad \text{et} \quad E_n=\hbar\omega_c\left(n+\frac{1}{2}\right).$$

Le spectre est donc quantifié, par des niveaux régulièrement espacés: les niveaux de Landau. Quel est le courant transporté par ces états?

La densité de courant moyenne au point r est[3]:

$$\langle\vec{J}(r)\rangle=-\frac{e}{m}\left\{\frac{1}{2}\left(\Psi^*\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\Psi\right)-\Psi\left(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}\Psi^*\right)\right)+e\vec{A}(\vec{r})\Psi^*\Psi\right\}.$$

Il est facile de montrer que ce courant est proportionnel à $(-(y-y_0(k))|g(y)|^2;0;0)$. La circulation du courant se fait sur une bande de largeur l_0 autour de la droite $y=y_0(k)$ (Figure 2.6).

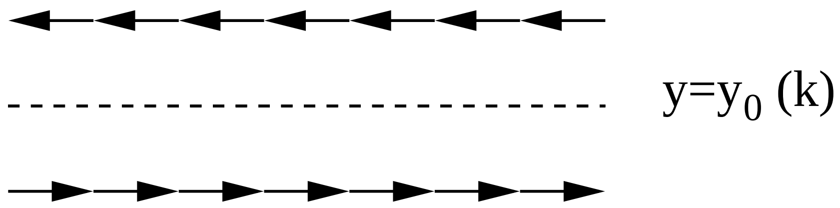

Figure 2.6: Profil du courant pour un état propre

Par parité $\int_{-\infty}^{\infty} dy\, J_x(x,y)=0$.

Prenons un échantillon homogène, avec des conditions aux limites périodiques le long de x, $(\Psi(x+L,y)=\Psi(x,y))$, mais avec des bords ouverts en $y=0$ et $y=L_y$. Si $L_y\gg l_0$, on voit que l'échantillon supposé homogène ne portera de courant que sur ses bords (Figure 2.7):

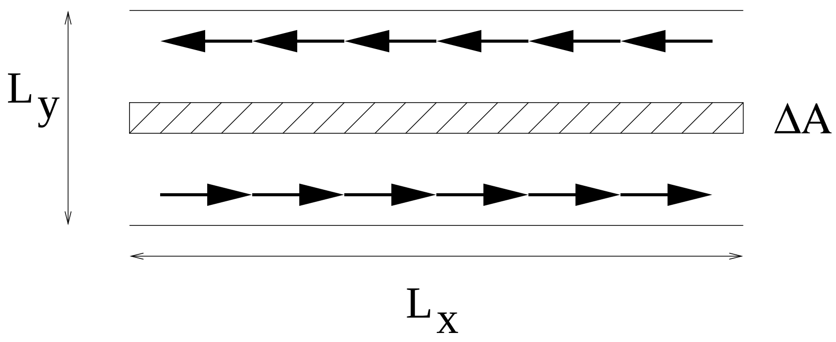

Figure 2.7: Profil du courant dans un échantillon

[3]Ce point est rappelé en section 4.2

En effet, pour un niveau d'énergie donnée (donc l'entier n est fixé), il existe une grande dégénérescence liée au choix de k, qui doit être un multiple entier de $\frac{2\pi}{L_x}$. Pour deux niveaux successifs $\Delta k = \frac{2\pi}{L_x}$, donc $\Delta y_0(k) = \frac{\hbar}{eB}\frac{2\pi}{L_x}$. Tout se passe comme si chaque état propre occupait, dans l'espace réel une aire:

$$\Delta A = L_x \Delta y_0(k) = \frac{h}{eB}\,.$$

Le flux à travers cette aire ΔA est encore le quantum de flux $\Phi_0 = \frac{h}{e}$. Considérons un point situé loin des bords à la coordonnée y. Dans ce cas, les contributions au courant total des états tels que $y_0(k) > y$ et des états $y_0(k) < y$ vont se compenser. Par contre si y est situé à moins de l_0 du bord inférieur, on va avoir un déficit d'états tels que $y_0(k) < y$ par rapport aux états $y_0(k) > y$ ce qui va entraîner l'existence d'un courant dirigé le long de l'axe x vers les x croissants.

Remarque: en toute rigueur, pour des niveaux de Landau excités, l'échelle l_0 doit être remplacée dans le raisonnement précédant par la taille typique de l'orbite cyclotron classique d'énergie $n\hbar\omega_c$, soit $\sqrt{n}\, l_0$.

Nous avons figuré sur nos dessins le sens de parcours des électrons. Le courant électrique induit circule en sens opposé (à cause de la charge négative de l'électron). On voit qu'il a tendance à produire un champ magnétique de direction opposée à celle du champ extérieur, d'où l'existence de ce diamagnétisme, qui est faible par ailleurs. L'absence d'écrantage total du champ magnétique dans un métal parfait provient donc du fait que, contrairement au cas du champ électrique, sa source n'est pas un scalaire (la densité de charge), mais un vecteur (la densité de courant). Les boucles de courant induites par le champ extérieur ont donc tendance à se compenser entre elles.

2.2.2 Ecrantage parfait: l'effet Meissner dans un supraconducteur

Le phénomène de la supraconductivité a été découvert en 1911 , dans le groupe dirigé par Kamerlingh Onnes à Leyde. L'expérience originale a consisté à mesurer la résistance électrique du mercure jusqu'à des températures autour du degré Kelvin. Ceci était devenu possible, grâce à la découverte des procédés permettant d'utiliser l'Helium

4 liquide. La courbe de résistance présente l'allure caractéristique montrée en figure 2.8

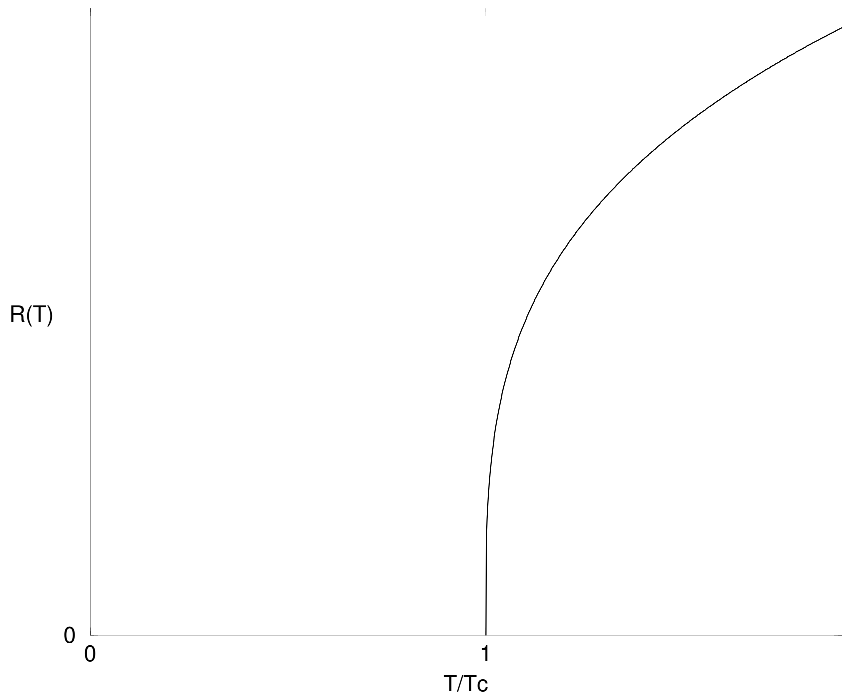

Figure 2.8: Allure de la résistance en fonction de la température pour un supraconducteur

La chute de résistance est très brutale, et se produit à une température de transition supraconductrice T_c, qui pour le mercure est environ 4,25 K. Pour les températures inférieures à T_c, la résistance n'est pas mesurable, et elle est donc considérée comme nulle.

Cette propriété très spectaculaire a été confirmée par des expériences réalisées sur des anneaux supraconducteurs. Elles ont montré qu'un courant peut persister sans amortissement sur des durées très grandes, en l'absence de source de tension. Ceci confirme que la dissipation liée au passage d'un courant est extrêmement faible dans un supraconducteur. Typiquement, dans une telle expérience, on place un anneau de matériau supraconducteur dans un champ magnétique. Puis on abaisse la température en dessous de T_c. Enfin, on supprime le champ extérieur. La variation temporelle de B induit un courant dans l'anneau qui ne se dissipe pas. Ces courants ont été observés sur des durées de l'ordre de 1 an, et il a été possible de montrer que leur durée de vie est supérieure à 10^5 ans! On est donc en présence d'une conductivité infinie.

Toutefois, une autre signature très remarquable des supraconducteurs consiste plutôt dans leur réponse à un champ magnétique extérieur. Un supraconducteur parvient en effet, lorsque le champ magnétique $\vec{B}_{\text{ext}}$ n'est pas trop fort, à réaliser un écrantage parfait de ce champ. Ceci se traduit par le fait que le champ $\vec{B}_{\text{loc}}$ s'annule à l'intérieur de l'échantillon. Ce phénomène remarquable est appelé **effet Meissner**. Il a été découvert par Meissner et Ochsenfeld en 1933. On peut l'illustrer par le fait que les lignes de champ du champ $\vec{B}_{\text{loc}}$ ont tendance à rester à l'extérieur de l'échantillon.

Il s'avère que la compréhension de l'origine microscopique de cet effet a été historiquement la ligne de recherche la plus fructueuse. Cet effort a été couronné par la théorie microscopique exposée dans un article célèbre publié en 1957 par Bardeen, Cooper, et Schrieffer (BCS). Comme l'étude du diamagnétisme des électrons libres le suggère, cet effet requiert un mécanisme conduisant à la formation d'un état quantique dans lequel les électrons sont maintenant fortement corrélés. L'approche suivie dans ce cours consistera à établir des modèles phénoménologiques permettant de rendre compte d'un grand nombre de propriétés expérimentales des supraconducteurs, plutôt que d'entrer dans la description détaillée des phénomènes microscopiques sous-jacents.

Avant d'aborder ce programme, il est utile de formuler ces propriétés remarquables des supraconducteurs en termes de contraintes sur la fonction de réponse électromagnétique $\widetilde{K}^{\mu\nu}(\vec{q};\omega)$. L'effet Meissner est une propriété statique. Nous nous plaçons par conséquent dans la limite $\omega \to 0$. En reprenant l'analyse du diamagnétisme de la section précédente, nous avons:

$$\widetilde{J}_{\text{ind}}(\vec{q}) = -\frac{\frac{\mu_0}{q^2}\widetilde{K}_\perp(\vec{q};0)}{1+\frac{\mu_0}{q^2}\widetilde{K}_\perp(\vec{q};0)}\widetilde{J}_{\text{ext}}(\vec{q})\,.$$

L'ecrantage total est obtenu si dans la limite des grandes longueurs d'onde, ($q \to 0$): $\widetilde{J}_{\text{ind}}(\vec{q}) = -\widetilde{J}_{\text{ext}}(\vec{q})$. Ceci suggère que l'on doit avoir:

$$\lim_{q\to 0}\frac{1}{q^2}\widetilde{K}_\perp(\vec{q};0) = \infty\,.$$

Une condition suffisante pour satisfaire cette contrainte est que:

$$\lim_{q\to 0}\widetilde{K}_\perp(\vec{q};0) = \frac{1}{\mu_0\lambda_L^2} > 0\,.$$

En effet, si cette condition est satisfaite:

$$\widetilde{J}_{\text{ind}}(\vec{q}) = -\frac{1}{1+q^2\lambda_L^2}\widetilde{J}_{\text{ext}}(\vec{q})$$

dans la limite où $q \to 0$.

Une autre conséquence de cette hypothèse est:

$$\tilde{A}_{\text{loc}}(\vec{q}) = \frac{q^2}{q^2 + \dfrac{1}{\lambda_L^2}} \tilde{A}_{\text{ext}}(\vec{q}) \,,$$

qui tend bien vers 0 lorsque $q \to 0$, en accord avec l'idée de l'effet Meissner.

La quantité λ_L a la dimension d'une longueur, et est appelée *longueur de pénétration de London*. Une façon parlante de montrer sa signification physique consiste à étudier un milieu supraconducteur semi-infini. Le système est plongé dans un champ $\vec{B}_{\text{ext}}$ uniforme. Dans le supraconducteur circulent des courants induits déterminés par le champ local $\vec{B}_{\text{loc}}$. Notre hypothèse pour la fonction de réponse $K_\perp$, traduite dans l'espace réel (pour la réponse à des champs lentement variables) est:

$$\tilde{J}_{\text{ind}}(\vec{q}) = -\frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \tilde{A}_{\text{loc}}(\vec{q}), \qquad \text{(à l'intérieur du supraconducteur).}$$

Rappelons que cette formule suppose que l'on se place dans la jauge $\vec{\nabla}.\vec{A}_{\text{loc}} = 0$. Par ailleurs, ce courant induit crée un champ induit $\vec{B}_{\text{ind}}$ tel que:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{B}_{\text{ind}} = 0 \qquad \text{et} \qquad \vec{\nabla} \wedge \vec{B}_{\text{ind}} = \mu_0 \vec{J}_{\text{ind}} = -\frac{1}{\lambda_L^2} \vec{A}_{\text{loc}} \,.$$

Or $\vec{B}_{\text{loc}} = \vec{B}_{\text{ext}} + \vec{B}_{\text{ind}}$, mais $\vec{\nabla} \wedge \vec{B}_{\text{ext}} = 0$ car $\vec{B}_{\text{ext}}$ est supposé constant. Donc $\vec{\nabla} \wedge \vec{B}_{\text{loc}} = -\frac{1}{\lambda_L^2} \vec{A}_{\text{loc}}$, ce qui entraîne:

$$\vec{\nabla}\left(\vec{\nabla} \cdot \vec{A}_{\text{loc}}\right) - \vec{\nabla}^2 \vec{A}_{\text{loc}} = -\frac{1}{\lambda_L^2} \vec{A}_{\text{loc}} \,.$$

Le potentiel vecteur obéit donc à l'équation de Laplace $\vec{\nabla}^2 \vec{A}_{\text{loc}} = \frac{1}{\lambda_L^2} \vec{A}_{\text{loc}}$. En prenant le rotationnel, nous avons également $\vec{\nabla}^2 \vec{B}_{\text{loc}} = \frac{1}{\lambda_L^2} \vec{B}_{\text{loc}}$. A l'extérieur du supraconducteur, $\vec{B}_{\text{loc}} = \vec{B}_{\text{ext}} = Const$. A l'intérieur du supraconducteur, $\vec{B}_{\text{loc}}$ ne dépend que de la coordonnée z normale a l'interface (pour lequel $z = 0$), et l'on trouve:

$$\vec{B}_{\text{loc}}(z) = \vec{B}_{\text{ext}} \exp(-z/\lambda_L) \,.$$

Ici λ_L est donc la longueur caractéristique au-delà de laquelle le champ magnétique extérieur est complément écranté par le supraconducteur. Pour un supraconducteur au voisinage du zéro absolu, un ordre de grandeur typique pour λ_L est autour de 0,1 μm. En résumé, nous prendrons comme critère pour l'effet Meissner:

- la condition: $\lim_{q\to 0}\lim_{\omega\to 0}\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q};\omega)$ est finie et non nulle. Notons que l'ordre des limites est en général très important, car les deux limites $\lim_{q\to 0}$ et $\lim_{\omega\to 0}$ ne commutent pas le plus souvent.

- l'autre condition: $\lim_{\omega\to 0}\lim_{q\to 0}\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q};\omega)$ est finie et non nulle s'interprète plutôt comme un critère pour avoir une conductivité infinie. En effet, si cette condition est satisfaite, nous avons aussi $\lim_{\omega\to 0}\lim_{q\to 0}\widetilde{K}_{\|}(\vec{q};\omega)$ est non-nulle. Ceci parce que: $\lim_{q\to 0}\widetilde{K}_{\|}(\vec{q};\omega) = \lim_{q\to 0}\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q};\omega)$.

Lorsque $\vec{q}$ s'annule, il devient impossible de distinguer une polarisation transverse d'une polarisation longitudinale. Mais nous pouvons lier $\widetilde{K}_{\|}(\vec{q};\omega)$ et la conductivité longitudinale $\widetilde{\sigma}_{\|}(\vec{q};\omega)$ par la relation:

$$\widetilde{\sigma}_{\|}(\vec{q};\omega) = \frac{i}{\omega}\widetilde{K}_{\|}(\vec{q};\omega)$$

Dans la limite où $q \to 0$, l'exemple du gaz d'électrons libres montre qu'il est raisonnable de supposer $\widetilde{K}_{\|}(\vec{q};\omega)$ réelle, car l'énergie maximale des états accessibles depuis le fondamental par l'opérateur courant est vraisemblablement une fonction croissante de $|\vec{q}\,|$ qui s'annule si $\vec{q}\to 0$.

Dans ce cas, l'analyse déjà faite pour les électrons libres s'applique, et l'on a un conducteur parfait, dans lequel le courant est déphasé de $\frac{\pi}{2}$ par rapport au champ extérieur, ce qui correspond a une *accélération* des porteurs de charge par le champ. Il n'y a donc pas de dissipation liée au passage d'un courant.

Chapter 3

Le phénomène de Higgs-Anderson et la supraconductivité

3.1 Un modèle simple pour l'effet Meissner

3.1.1 Contraintes sur les états de basse énergie d'un système présentant l'effet Meissner

Il est utile de revenir au cas des électrons libres, et d'analyser plus en détail l'origine du faible diamagnétisme et de l'absence d'effet Meissner dans ce système.
En section **4.7**, nous calculons les densités spectrales $\nu_{2\|}(E,q)$ et $\nu_{2\perp}(E,q)$ qui interviennent dans les expressions de $\widetilde{K}_{\|}(\vec{q};\omega)$ et $\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q};\omega)$ pour un gaz d'électrons libres.

La densité spectrale $\nu_{2\|}(E,q)$ est contrainte par l'invariance de jauge: pour un potentiel vecteur statique longitudinal de la forme $\vec{A}=\vec{\nabla}\lambda$, où λ est une fonction quelconque, et si $V=0$, il ne doit pas y avoir de courant induit dans le système, parce que les champs $\vec{E}$ et $\vec{B}$ correspondants sont nuls. Ceci implique:

$$\widetilde{K}_{\|}(\vec{q};0)=0\,,$$

ou encore

$$2v_F^2\int_0^\infty \frac{dE}{E}\,\nu_{2\|}(E,q)=\frac{n}{m}\,.$$

Cette relation est en fait très générale, tant que l'expression du courant est donnée par:

$$\vec{J}(r,t)=-\frac{e}{2m}\sum_{j=1}^{N}\left\{\vec{P}_j\delta(r-r_j)+\delta(r-r_j)\vec{P}_j+2e\vec{A}(r_j,t)\delta(r-r_j)\right\}\,.$$

(voir la section **4.6**).

Bien sûr, la densité spectrale $\nu_{2\|}(E,q)$ dépend du système étudié, à travers le choix des interactions. A priori, la densité spectrale $\nu_{2\perp}(E,q)$ associée au courant transverse n'est pas contrainte de la sorte. Toutefois, pour des électrons libres, on assiste à une compensation entre ces deux densités spectrales, de sorte que:

$$\lim_{q\to 0}\lim_{\omega\to 0}\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q};\omega) = 2e^2 v_F^2 \lim_{q\to 0}\int_0^{\infty}\frac{dE}{E}\,\Big(\nu_{2\|}(E,q)-\nu_{2\perp}(E,q)\Big) = 0\,.$$

Ceci suggère une stratégie possible pour créer de l'effet Meissner:

– réduire la densité spectrale transverse $\nu_{2\perp}(E,q)$ par rapport aux excitations longitudinales;

– une autre façon de le dire est qu'il est trop facile d'exciter des excitations portant un courant transverse pour des électrons libres: il y a trop états disponibles a basse énergie.

Nous commençons donc à voir que pour "fabriquer" un supraconducteur, il est nécessaire de réduire la prolifération des états de basse énergie par rapport au cas des électrons libres, ceci en pénalisant particulièrement les états contribuant à la densité spectrale $\nu_{2\perp}(E,q)$. Nous allons essayer maintenant de construire un modèle phénoménologique pour décrire les états de basse énergie d'un supraconducteur, ainsi que les éléments de matrice de l'opérateur courant entre le fondamental et ces états excités de basse énergie.

Une façon radicale d'éliminer les excitations transverses consiste à supposer qu'il existe des degrés de liberté de basse énergie purement longitudinaux, c'est à dire que le courant $\vec{J}$ est proportionnel au gradient d'un champ Φ. Soit $\vec{J_0}=\vec{\nabla}\Phi$ (en l'absence de champ extérieur).

La densité ρ s'exprimera aussi d'une façon restant à déterminer en fonction du champ Φ. La contrainte à satisfaire est l'équation de continuité:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t}+\vec{\nabla}^2\Phi = 0$$

Nous voyons que c'est l'équation d'évolution du champ Φ qui doit assurer l'équation de continuité.

En attendant, il est important de préciser comment ce champ Φ se couple à un champ électromagnétique. Pour cela, il est utile de considérer l'expression du courant transporté par un électron dans un état quantique Ψ.

$$\langle \vec{J}(r) \rangle = -\frac{e}{2m} \left\{ \Psi^*(r) \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \Psi(r) \right) - \Psi \left(\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla} \Psi^*(r) \right) + 2e\Psi^*(r)\Psi(r)\vec{A}(r) \right\} .$$

Ecrivons la fonction d'onde Ψ en faisant apparaître explicitement l'amplitude et la phase $\Psi = |\Psi| \exp(i\Theta)$:

$$\langle \vec{J}(r) \rangle = -e\frac{\hbar}{m}|\Psi|^2 \left(\vec{\nabla}\Theta + \frac{e}{\hbar}\vec{A} \right) .$$

Lorsque $\vec{A} = 0$ et si $|\Psi|^2$ est constante, ce courant est longitudinal. Ceci suggère que la partie purement longitudinale du courant doit être modifiée d'un terme proportionnel à $\vec{A}$ en présence de champ extérieur.

Nous ferons donc l'hypothèse que $\vec{J} = \vec{\nabla}\Phi + c\vec{A}$ et que cette combinaison est invariante de jauge. La question qui se pose maintenant est: quel est le spectre des états de basse énergie obtenus par actions successives du champ Φ sur l'état fondamental? Nous introduisons ce sous-espace de l'espace complet des états quantiques à N électrons, car il contient toute l'information utile pour construire les fonctions de réponse électromagnétiques, comme le montre la formule de Kubo, équation 4.20 en section **4.6**.

Pour progresser, il est fructueux de revenir à la propriété caractéristique des supraconducteurs: leur capacité à transporter un courant permanent sans dissipation de ce courant. Il existe un argument très général dû à Landau qui contraint le spectre des excitations de basse énergie d'un supraconducteur ou d'un superfluide. Nous reprenons cet argument dans le contexte où il a été pour la première fois développé, à savoir l'écoulement d'un superfluide He^4 dans un tube capillaire.

On suppose que le superfluide est en mouvement stationnaire uniforme à vitesse $\vec{v}$ par rapport au capillaire. Plaçons-nous dans le référentiel animé d'une vitesse $\vec{v}$ par rapport au capillaire. Dans ce référentiel, le liquide est au repos et le capillaire défile à la vitesse $-\vec{v}$.

Par la suite des interactions entre le liquide et les parois du capillaire, le liquide a tendance à être entraîné par les parois. D'un point de vue quantique, ceci correspond à créer des excitations élémentaires d'impulsion p et d'énergie $\varepsilon(p)$ (toujours dans le référentiel mobile).

L'excitation de ces états se fera spontanément si dans le référentiel où le capillaire est fixe, l'énergie d'excitation de ces états est négative. Pourquoi ce statut particulier du référentiel où le capillaire est fixe? Tout simplement parce que dans ce référentiel, l'Hamiltonien ne dépend pas du temps et l'énergie totale est donc conservée. L'argument de Landau consiste à donner une contrainte sur le spectre des excitations élémentaires de sorte que l'état à vitesse uniforme v soit localement stable. Dans le référentiel où le capillaire est au repos, l'énergie du système en présence de l'excitation p est: $E_v(p) = \varepsilon(p) + pv + \frac{1}{2}Mv^2$.

La condition de stabilité de l'écoulement superfluide est que $\varepsilon(p) + pv > 0$ pour tout p .
Ceci entraîne que $\left.\frac{d\varepsilon}{dp}\right|_{p\to 0} \neq 0$. En effet, si $\left.\frac{d\varepsilon}{dp}\right|_{p\to 0} = 0$, la courbe $\varepsilon(p)$ a l'allure montrée en figure 3.1.

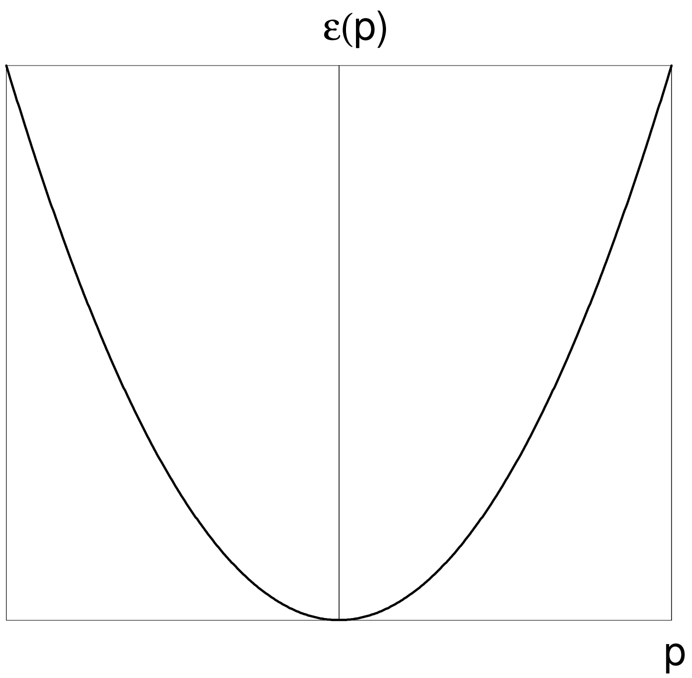

Figure 3.1: Spectre d'un système qui ne satisfait pas le critère de Landau: $v = 0$

Par conséquent, en présence d'un mouvement uniforme à vitesse v, le spectre se déforme de la manière suggérée par la figure 3.2, sur laquelle la zone hachurée correspond à des états pouvant être excités spontanément.

On voit de la même façon que le continuum des excitations particule-trou d'un gaz

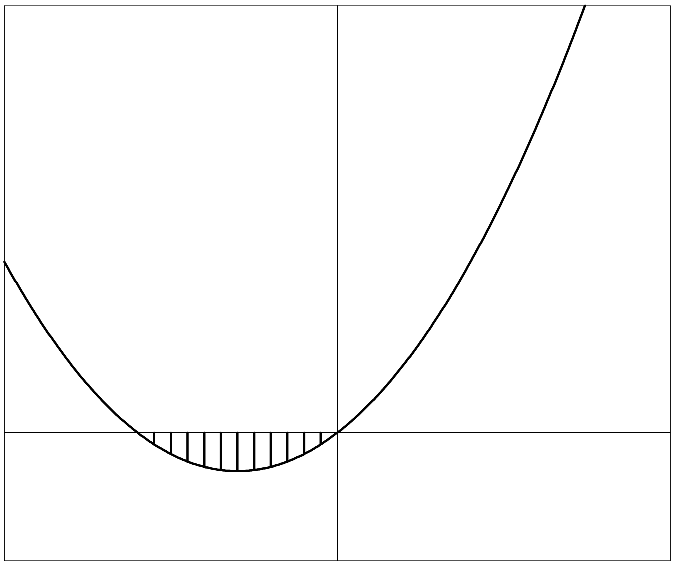

Figure 3.2: Spectre d'un système qui ne satisfait pas le critère de Landau: $v \neq 0$

d'électrons libres ne peut pas satisfaire ce critère comme l'indique la figure 3.3.
Un exemple de spectre d'excitations satisfaisant le critère de stabilité de l'écoulement superfluide de Landau est le spectre des fluctuations de densité de l'He^4 qui présente l'allure typique de la figure 3.4.
Pour un tel système, il est instructif de tracer la fonction $p \to \varepsilon(p) + pv$, en fonction de la valeur relative de v par rapport à v_c, voir figure 3.5.

Donc, lorsque $v < v_c$, l'état fondamental entraîné à vitesse uniforme v est métastable, et même *globalement* stable. Si $v > v_c$, le fondamental à vitesse v peut rester *localement* stable. Mais il existe des états contenant des excitations élémentaires (donc excités du point de vue du référentiel mobile à vitesse v) dont l'énergie est plus basse (du point de vue du référentiel dans lequel l'Hamiltonien est indépendant du temps, c'est à dire le référentiel pour lequel le capillaire est fixe).

3.1.2 Présentation du modèle du champ de phase

Nous essayerons de traduire les considérations de la section précédente dans un modèle aussi simple que possible dont le but est de décrire la réponse électromagnétique d'un supraconducteur dans la limite $(\vec{q};\omega) \to (\vec{0};0)$. La contrainte que le courant $\vec{J}_0$ en l'absence de champ extérieur soit purement longitudinal nous suggère que cette

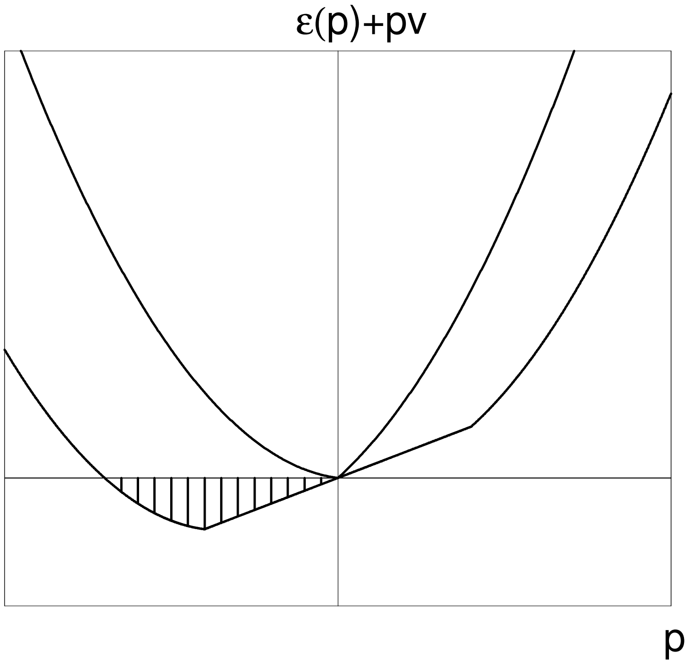

Figure 3.3: Spectre d'un système qui ne satisfait pas le critère de Landau: continuum particule-trou d'un gaz d'électrons libres

physique de basse énergie peut être contrôlée par un champ réel Φ tel que $\vec{J_0} = \vec{\nabla}\Phi$. De plus, la discussion du critère de Landau montre que l'état fondamental doit rester globalement stable en présence d'un courant uniforme à vitesse $\vec{v}$. Pour cela, il est nécessaire que la dispersion des excitations élémentaires contribuant au courant présente un point anguleux au voisinage du minimum. Nous supposons cette dispersion: $\hbar\omega(p) = v_s|p|$, comme pour des ondes acoustiques longitudinales.

La dynamique du champ Φ, dans sa version classique obéit donc à une équation de propagation:

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial t^2} - v_s^2\vec{\nabla}^2\Phi = 0\,.$$

Cette équation peut se déduire du Lagrangien (ou plutôt de la densité de Lagrangien):

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2}\left(\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)^2 - \frac{1}{2}v_s^2\left(\vec{\nabla}\Phi\right)^2\,.$$

En passant à l'Hamiltonien (ou à sa densité $\mathcal{H}$), il faut d'abord construire le moment conjugué Π au champ Φ selon

$$\Pi = \frac{\partial\mathcal{L}}{\partial(\partial_t\Phi)} = \frac{\partial\Phi}{\partial t}\,.$$

Ensuite, on construit $\mathcal{H}$ par une transformation de Legendre:

$$\mathcal{H} = \Pi\frac{\partial\Phi}{\partial t} - \mathcal{L}(\Phi,\partial_t\Phi) = \frac{1}{2}\Pi^2 + \frac{1}{2}v_s^2\left(\vec{\nabla}\Phi\right)^2\,.$$

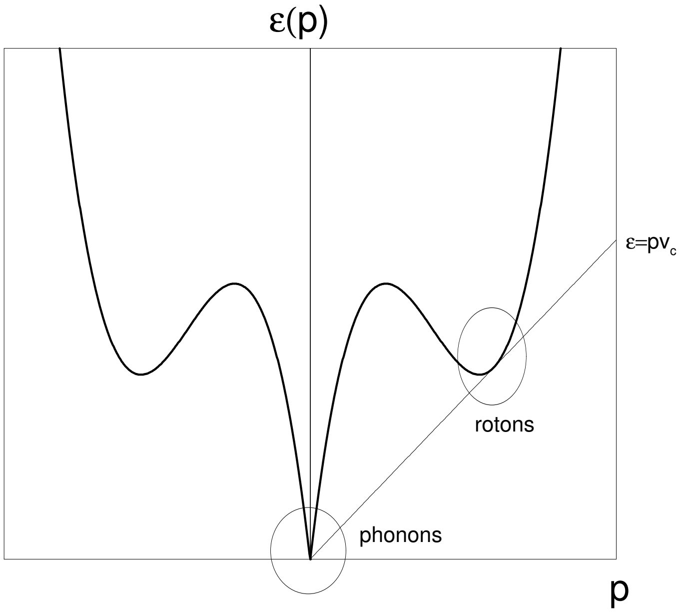

Figure 3.4: Spectre d'un système superfluide

Ces considérations classiques servent de guide pour construire une description quantique. Nous allons travailler dans la représentation de Schrödinger pour laquelle les opérateurs $\Phi(r)$ et $\Pi(r)$ ne dépendent pas explicitement du temps. Nous postulons que ces champs satisfont des relations de commutation canoniques:

$$\left[\Phi(r), \Phi(r^{'})\right] = 0 = \left[\Pi(r), \Pi(r^{'})\right] \qquad \text{et} \qquad \left[\Phi(r), \Pi(r^{'})\right] = i\delta(r - r^{'})\ .$$

Remarque: nous modifions légèrement la règle habituelle voulant que $\left[\Phi(r), \Pi(r^{'})\right] = i\hbar\delta(r-r^{'})$. Comme nous le verrons plus tard, c'est parce que le champ Π a une interprétation physique simple. Notre choix dans la définition de Π est donc motivée par cette interprétation. Le prix à payer (somme toute modeste) est que l'Hamiltonien quantique pour un système décrit par un champ libre (Φ, Π) et avec une vitesse de propagation v_s présente des coefficients numériques différents pour les termes en Π^2 et $(\vec{\nabla}\Phi)^2$.

Nous supposons donc que l'Hamiltonien, en l'absence de champ électromagnétique est donné par:

$$H_0 = \frac{1}{2}\int d^3r\ \left(a\Pi^2(r) + b\vec{\nabla}^2\Phi(r)\right)\ .$$

Comment choisir a et b pour retrouver une vitesse de propagation v_s pour les excitations de basse énergie? Nous considérons les équations d'évolution pour les valeurs moyennes $\langle M\rangle_t \equiv \langle\Psi(t)|M|\Psi(t)\rangle$, où M est une observable et $|\Psi(t)\rangle$ est l'état du

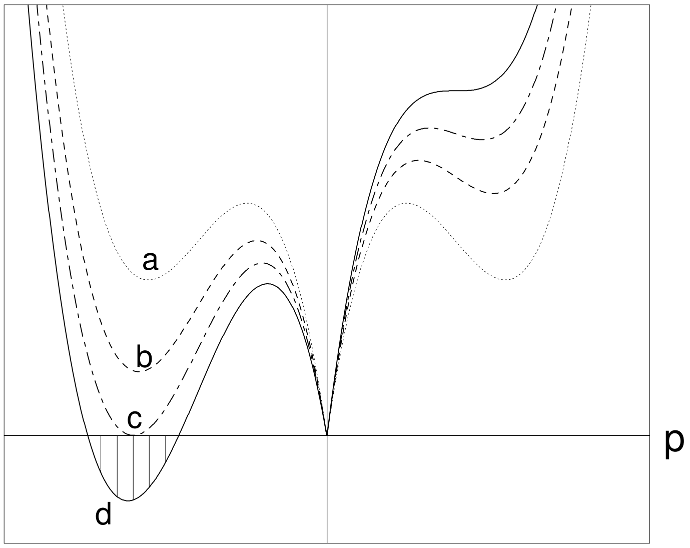

Figure 3.5: Spectre d'un système superfluide en mouvement: $v = 0$ (courbe a), $v < v_c$ (courbe b), $v = v_c$, (courbe c), $v > v_c$ (courbe d)

système, qui suit l'équation de Schrödinger:

$$i\hbar \frac{\partial |\Psi\rangle}{\partial t} = H_0 |\Psi(t)\rangle \,.$$

Donc:

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \langle M \rangle_t = \langle\, [M, H_0]\, \rangle_t \,.$$

En particulier, nous avons:

$$\begin{cases} [\Phi(r), H_0] & = ia\Pi(r) \\ [\Pi(r), H_0] & = ib\vec{\nabla}^2 \Phi(r) \end{cases}$$

Montrons explicitement la seconde équation:

$$\begin{aligned} [\Pi(r), H_0] &= \frac{b}{2} \int d^3r' \left[\Pi(r), \left(\vec{\nabla}_{r'} \Phi(r') \right)^2 \right] \\ &= b \int d^3r' \left[\Pi(r), \vec{\nabla}_{r'} \Phi(r') \right] \cdot \vec{\nabla}_{r'} \Phi(r') \\ &= -ib \int d^3r' \left(\vec{\nabla}_{r'} \delta(r - r') \right) \cdot \vec{\nabla}_{r'} \Phi(r') \\ &= ib \int d^3r' \, \delta(r - r') \vec{\nabla}^2_{r'} \Phi(r') = ib \vec{\nabla}^2 \Phi(r) \,. \end{aligned}$$

Nous obtenons donc:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial}{\partial t} \langle \Phi(r) \rangle_t & = \dfrac{a}{\hbar} \langle \Pi(r) \rangle_t \,, \\ \\ \dfrac{\partial}{\partial t} \langle \Pi(r) \rangle_t & = \dfrac{b}{\hbar} \langle \vec{\nabla}^2 \Phi(r) \rangle_t \,. \end{cases}$$

En éliminant $\langle \Pi(r) \rangle_t$, nous obtenons:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} \langle \Phi(r) \rangle_t - \frac{ab}{\hbar^2} \langle \vec{\nabla}^2 \Phi(r) \rangle_t = 0 \, .$$

La vitesse de propagation des excitations élémentaires d'un tel système est:

$$v_s = \frac{\sqrt{ab}}{\hbar} \, .$$

Nous voyons que ceci fixe la valeur du produit ab, mais pas leur valeur relative a/b. Pour l'instant, cette valeur relative a/b ne joue pas de rôle. Mais nous serons progressivement amenés à reconsidérer cette question, qui est à l'origine de phénomènes physiques très intéressants. En fait, dans certaines situations, le rapport a/b contrôle une transition de phase entre un état fondamental isolant et un état fondamental supraconducteur!

Venons-en maintenant à la question centrale: comment représenter le couplage de ce modèle quantique phénoménologique, supposé décrire les états de basse énergie d'un supraconducteur, à un champ électromagnétique extérieur?

Rappelons la discussion précédente: nous voulons que le courant en présence d'un champ *local* $\vec{A}$ soit décrit par $\vec{J}$ proportionnel à $\left(\vec{\nabla}\Phi + c\vec{A}\right)$. Dans la version quantique, ces quantités sont des opérateurs agissant dans l'espace des états d'un système de N électrons. La combinaison $\left(\vec{\nabla}\Phi + c\vec{A}\right)$ joue un rôle particulier. Il est donc naturel de remplacer le terme en $\left(\vec{\nabla}\Phi\right)^2$ par la combinaison $\left(\vec{\nabla}\Phi + c\vec{A}\right)^2$ en présence d'un champ. On voit qu'au premier ordre dans le champ extérieur, notre terme de couplage s'écrit $2c\vec{A} \cdot \vec{\nabla}\Phi$. Il est donc naturel de supposer qu'il existe un couplage linéaire entre les parties "temporelles" correspondantes, soit V et Π. Nous proposons donc, qu'en présence d'un champ électromagnétique *local* décrit par les potentiels $\vec{A}(r,t)$ et $V(r,t)$, le supraconducteur soit représenté par:

$$H_{A,V} = \int d^3r \left\{ \frac{a}{2}\Pi^2(r) + \frac{b}{2}\left(\vec{\nabla}\Phi(r) + c\vec{A}(r,t)\right)^2 + d \cdot \Pi(r)V(r,t) \right\} \, .$$

Cet Hamiltonien dépend explicitement du temps si les champs $\vec{A}$ et V en dépendent. Notons que la dynamique du champ (Φ, Π) reste intégrable, même en présence du champ extérieur $\vec{A}$, V, car la densité d'Hamiltonien est un polynôme de degré 2 en Φ et Π. Le supraconducteur est alors décrit par une population d'oscillateurs (un par vecteur d'onde $\vec{q}$) forcés linéairement par le champ local. Nous restons donc dans un schéma d'approximation du type RPA: la réponse électromagnétique à un champ *extérieur* sera obtenue en prenant pour réponse au champ *local* celle du système d'oscillateurs décrit par l'Hamiltonien $H_{A,V}$.

Que pouvons-nous dire sur les coefficients c et d? Il est important de noter qu'ils **ne** sont **pas** indépendants. Plus précisément:

$$\boxed{d = \hbar\, c}$$

Cette relation s'obtient en imposant que le système quantique décrit par $H_{A,V}(t)$ soit invariant de jauge. Plus précisément, une transformation de jauge associée à la fonction $\lambda(r,t)$ agit selon:

$$\begin{cases} \vec{A} \longrightarrow \vec{A} + \vec{\nabla}\lambda = \vec{A}' \\ \vec{V} \longrightarrow V - \dfrac{\partial \lambda}{\partial t} = V' \end{cases}$$

Nous montrons en section 4.3 que notre système d'électrons non-relativistes décrit par la fonction d'onde $|\Psi(t)\rangle$ doit subir une transformation unitaire $U(\lambda)$ pour préserver la forme de l'équation de Schrödinger après transformation de jauge. Ceci signifie que:

$$\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_{A',V'}(t)\right)U(\lambda,t)|\Psi(t)\rangle = U(\lambda,t)\left(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} - H_{A,V}(t)\right)|\Psi(t)\rangle \, .$$

Cette équation sera satisfaite si l'on a :

$$H_{A,V}(t) = U^{-1}(\lambda,t)H_{A',V'}(t)U(\lambda,t) - i\hbar U^{-1}(\lambda,t)\frac{\partial U}{\partial t}(\lambda,t) \, . \tag{1}$$

Sur les fonctions d'onde à N électrons, cette transformation de jauge $U(\lambda,t)$ est la multiplication par un facteur de phase:

$$U(\lambda,t)\Psi(r_1,\ldots,r_N,t) = \exp\left\{ -i\frac{e}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\lambda(r_j,t)\right\}\Psi(r_1,\ldots,r_N,t) \, . \tag{2}$$

Ce résultat est établi en section 4.3.

La question qui se pose maintenant est de trouver l'effet d'une telle transformation sur les champs Φ et Π. Nous devons avoir, d'après l'équation (1) ci-dessus:

$$U^{-1}(\lambda,t)\Phi(r,t)U(\lambda,t) = \Phi(r,t) - c\lambda(r,t) \, , \tag{3}$$

$$U^{-1}(\lambda,t)\Pi(r,t)U(\lambda,t) = \Pi(r,t) \, . \tag{4}$$

L'équation (3) montre que la quantité: $\vec{\nabla}\Phi + c\vec{A}(r,t)$ est bien invariante de jauge, comme on le souhaite pour l'interpréter comme un courant. En effet:

$$U^{-1}(\lambda,t)\vec{\nabla}\Phi(r)U(\lambda,t) + c\vec{A}'(r,t) = \vec{\nabla}\Phi(r) + c\vec{A}(r,t) \, .$$

L'invariance de jauge implique une dernière équation:

$$d\int d^3r\,\Pi(r)\frac{\partial\lambda}{\partial t}(r,t) + i\hbar U^{-1}(\lambda,t)\frac{\partial U}{\partial t}(\lambda,t) = 0 \, . \tag{5}$$

Pour exploiter cette équation, il faut préciser l'opérateur $U(\lambda,t)$. Nous voulons traduire sa définition (par son action sur les fonctions d'onde à N électrons) dans le langage des opérateurs Φ et Π.

Pour cela, nous remarquons que d'après (3) et (4), $U(\lambda,t)$ déplace la phase Φ en laissant la variable conjuguée Π invariante. Par analogie avec la mécanique quantique d'une particule (Φ jouant le rôle de la position et Π celui de l'impulsion $P \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$), cet opérateur de translation est donné explicitement par:

$$U(\lambda,t) = \exp\left\{i\gamma\int d^3r\lambda(r,t)\Pi(r)\right\} \, , \tag{6}$$

à un facteur de phase près. En effet, avec cette forme proposée pour $U(\lambda,t)$ les relations de commutation canoniques entraînent:

$$U^{-1}(\lambda,t)\Phi(r)U(\lambda,t) = \Phi(r) + U^{-1}(\lambda,t)\,[\Phi(r),U(\lambda,t)] = \Phi(r) - \gamma\lambda(r,t) \, .$$

En comparant avec l'équation (3), nous voyons que $\boxed{\gamma = c}$

En injectant l'expression de $U(\lambda,t)$ donnée par (6) dans l'équation (5), et en tenant compte de $\gamma = c$, nous obtenons la relation annoncée à savoir: $d = \hbar c$.

3.1.3 La phase est une variable périodique

Il est tentant de comparer la forme microscopique de l'opérateur $U(\lambda,t)$ donnée par l'équation (2), avec sa forme "phénoménologique" de l'équation (6), qui fait intervenir le champ conjugué $\Pi(r)$. Prise littéralement, cette comparaison nous donne:

$$c\int d^3r\,\lambda(r,t)\Pi(r) = -\frac{e}{\hbar}\sum_{j=1}^{N}\lambda(r_j,t) \, ,$$

soit encore:

$$\Pi(r) = -\frac{e}{\hbar c}\sum_{j=1}^{N}\delta(r-r_j) = -\frac{e}{\hbar c}n(r)^4 ,$$

où $n(r)$ est la densité locale d'électrons. Il convient d'être prudent dans cette identification, car dans sa forme phénoménologique, l'opérateur $U(\lambda,t)$ est défini à une phase globale indépendante du temps près, c'est à dire que l'on pourrait changer $U(\lambda,t)$ en $\exp(i\chi)U(\lambda,t)$, χ indépendant de t, tout en satisfaisant l'équation (1) traduisant l'invariance de jauge.

Par contre les *différences* de la forme $\langle\Psi|\Pi(r)|\Psi\rangle - \langle\Psi'|\Pi(r)|\Psi'\rangle$ où $|\Psi\rangle$ et $|\Psi'\rangle$ sont deux états quantiques distincts ne sont pas entachées de cet arbitraire. Ceci nous conduit à une propriété remarquable: le spectre de $\Pi(r)$ doit être un spectre *discret*.

En effet, si $|\Psi\rangle$ et $|\Psi'\rangle$ sont deux états propres de $\Pi(r)$, ce sont aussi des états propres de $n(r)$. Or la charge (ou le nombre d'électrons) est quantifiée: le nombre de particules au point r est entier. Par conséquent, nous sommes conduits à supposer que le spectre de $\Pi(r)$ est lui aussi discret, avec des niveaux voisins équidistants.

Qu'est-ce qu'il en résulte pour le champ Φ ?

A nouveau, l'analogie avec la mécanique quantique d'une particule est éclairante. Si l'on fait jouer à $\Pi(r)$ le rôle de l'impulsion P, le caractère discret du spectre de P et l'équidistance des niveaux voisins signifie que l'on quantifie un système *périodique*. En effet, si x et $x+a$ sont équivalents, on va travailler avec des fonctions d'onde de période a, se décomposant sur la base de Fourier:

$$\Psi(x) = \sum_{m=-\infty}^{\infty}\tilde{\Psi}_m e^{i\frac{2\pi}{a}mx}$$

Comme $P \equiv \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial x}$, les valeurs propres possibles de P sont de la forme $\frac{h}{a}m$, m entier. Comme la définition de Φ et Π laisse la liberté de choisir l'échelle des champs (une transformation $\Phi\to u\Phi$ et $\Pi\to u^{-1}\Pi$ préserve la forme de $H_{A,V}$, ainsi que les relations de commutation canoniques), nous faisons le choix que Φ est un champ *périodique*, de période 2π.

Il convient ici de faire une petite pause, pour préciser ce que signifie cette notion de champ scalaire Φ périodique. Il s'agit d'un objet en fin de compte plus compliqué que

[4] Rappelons ici que le coefficient c de notre Hamiltonien phénoménologique n'a rien à voir avec la vitesse de la lumière!

la notion usuelle d'un champ scalaire libre (ce dernier étant équivalent à une population d'oscillateurs harmoniques indépendants). Pour en saisir le sens, il est utile d'imaginer qu'en chaque point de l'espace, on "attache" un "rotateur plan", c'est à dire un système à un degré de liberté contraint à se déplacer sur un cercle. Ce rotateur au point r est donc décrit par une coordonnée polaire Φ_r définie à un multiple entier de 2π près. La fonction d'onde de ce rotateur notée $\Psi(\Phi_r)$ est donc 2π-périodique:

$$\Psi(\Phi_r + 2\pi) = \Psi(\Phi_r) \, .$$

Dans cette image, le champ Π_r n'est rien d'autre que l'opérateur $\frac{1}{i}\frac{\partial}{\partial \Phi_r}$ agissant sur cette fonction d'onde, c'est à dire le moment angulaire du rotateur plan attaché au point r. La périodicité de Φ_r entraîne que ce moment angulaire est quantifié par valeurs entières m. L'état propre $\Psi(\Phi_r)$ correspondant s'écrit:

$$\Psi_m(\Phi_r) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}} \exp(im\Phi_r) \, .$$

Pour passer de la description d'un rotateur isolé, à celle d'un champ de rotateurs défini en chaque point de l'espace, on peut imaginer une fonction d'onde Ψ dépendant d'une infinité de variables (une pour chaque point de l'espace). A chaque configuration spatiale du champ Φ (c'est à dire une application $r \to \Phi(r)$), cette fonction d'onde associe un nombre complexe $\Psi\{\Phi\}$ qui représente l'amplitude de probabilité de trouver le champ Φ dans la configuration donnée $r \to \Phi(r)$. La périodicité du champ signifie que pour une autre configuration spatiale $r \to \chi(r)$ telle que pour tout r: $\chi(r) - \Phi(r) = 2\pi n_r$, où n_r est entier, alors nécessairement $\Psi\{\Phi\} = \Psi\{\chi\}$.

Sous des aspects relativement innocents, cette périodicité du champ Φ se trouve avoir des conséquences physiques profondes, que nous analyserons progressivement dans ce cours. Dans un certain sens, on peut dire que cette périodicité transforme la théorie décrite par $H_{A,V}$ (libre en apparence) en une théorie avec des interactions! Pour le voir, imaginons l'espace discrétisé, avec en chaque point d'un réseau cubique un degré de liberté périodique Φ_r. Ceci modélise d'ailleurs une situation qui, dans sa version bidimensionelle, a été l'objet de très nombreuses réalisations et études expérimentales, ce que l'on appelle les réseaux de jonctions Josephson. Nous reviendrons sur la physique de ces réseaux un peu plus loin. Appelons $\Omega = l^3$ le volume de la cellule élémentaire cubique de ce réseau, et considérons l'Hamiltonien:

$$\begin{aligned}\widetilde{H}_{A,V,\Omega}(t) &= \Omega\Big\{\sum_r \frac{a}{2}\Pi_r^2 + \frac{b}{2l^2}\sum_r\sum_\tau(1-\cos[\Phi(r+\tau)-\Phi(r)\\ &\quad + c\int_r^{r+\tau} dr'\vec{A}(r',t)]) + \sum_r d\cdot V(r,t)\Pi_r\Big\}\end{aligned}$$

Dans cette somme τ est un vecteur joignant deux sites voisins sur le réseau. Faisons tendre le pas de discrétisation l vers zéro. Si nous nous plaçons au voisinage du fondamental, l'énergie totale doit être petite, donc il semble raisonnable de développer le terme en cosinus.

Nous obtenons, à l'ordre non-trivial le plus bas en l:

$$\sum_\tau\Big\{1-\cos\Big[\Phi(r+\tau)-\Phi(r)+c\int_r^{r+\tau} dr'\vec{A}(r',t)\Big]\Big\} \simeq l^2\left(\vec{\nabla}\Phi + c\vec{A}\right)^2\Big|_{(r,t)}.$$

Dans ce cas, la somme dans l'équation (7) est une somme de Riemann, qui à la limite $l\to 0$ tend vers l'intégrale qui définit $H_{A,V}$.

Nous montrerons plus loin (section **3.2.3**) qu'une telle approximation est souvent légitime. Dans ce cas, et en ce qui concerne ses propriétés de basse énergie (le voisinage de l'état fondamental), le modèle libre non-périodique avec l'Hamiltonien $H_{A,V}$ est une bonne approximation du modèle discrétisé et périodique décrit par $\widetilde{H}_{A,V,\Omega}$. Ceci correspond à la situation où les fluctuations quantiques (et thermiques, si l'on se place à une température non-nulle) de la phase restent faibles. Physiquement, la phase est globalement homogène dans le matériau, et celui-ci est dans l'état supraconducteur. Par contre, les réseaux de jonctions Josephson ont permis d'observer des régimes où cette image simple est complètement invalide. Il s'agit notamment de systèmes décrits par l'Hamiltonien sur réseau $\widetilde{H}_{A,V,\Omega}$ et pour lesquels les fluctuations quantiques de point zéro de la phase sont grandes, même à température nulle. Le principe d'incertitude s'applique en effet ici et implique que $\langle\Delta\Pi_r\Delta\Phi_r\rangle \sim 2\pi$. Dans certains réseaux de jonctions Josephson, on sait réaliser des coefficients a très grands qui imposent $\langle\Delta\Pi_r\rangle \ll 1$. Dans ce cas, l'incertitude $\langle\Delta\Phi_r\rangle$ sur la phase est telle que le système change globalement de propriétés: on observe un comportement *isolant* dans la limite des très basses températures, au lieu d'un supraconducteur.

Nous allons montrer maintenant que la propriété de périodicité du champ de phase Φ apporte de nouvelles restrictions très plausibles au coefficient c du modèle phénoménologique

$H_{A,V}$. Considérons l'opérateur $\exp(i\Phi_r)$. Agissant sur l'état m du rotateur attaché au point r , il produit l'état $m+1$ de ce même rotateur. Ceci résulte simplement de:

$$\exp(i\Phi_r)\exp(im\Phi_r) = \exp(i(m+1)\Phi_r) \ .$$

Or, nous avons vu que $\Pi_r|\Psi_m\rangle_r = m|\Psi_m\rangle_r$, et que les variations de Π_r sont proportionnelles aux variations du nombre d'électrons $n(r)$ au point r . Donc l'opérateur $\exp(i\Phi_r)$ a pour effet de changer le nombre de particules au site r . Physiquement, il est raisonnable de supposer que cette variation locale du nombre de particules est un nombre entier noté ici $-p$. Une telle affirmation aurait semble évidente jusqu'au début des années 1980, où la découverte de l'effet Hall quantique fractionnaire (récompensée par le prix Nobel en 1998) a mis en évidence la possibilité de créer des excitations collectives dans un fluide d'électrons corrélés, qui correspondent à un déplacement moyen d'un nombre non-entier électrons, localisé sur une région de taille microscopique. Pour l'instant, même après la découverte de l'effet Hall quantique fractionnaire, il nous suffit de noter que l'hypothèse p entier est assez plausible. Nous verrons qu'un grand nombre de résultats expérimentaux convergent sans aucune ambiguïté vers la valeur $p=2$. L'opérateur $\exp(i\Phi_r)$ détruit donc une paire d'électrons au point r . C'est ce que l'on appelle une "paire de Cooper", en référence à l'article célèbre de L. Cooper publié en 1956.[5] Tant que nous développerons un modèle phénoménologique pour décrire des excitations de basse énergie, la valeur précise de p ne joue pas un grand rôle, à l'exception importante d'applications de la supraconductivité en métrologie (nous y reviendrons en étudiant l'effet Josephson). Par contre, une des ambitions d'une véritable théorie microscopique (comme celle de Bardeen, Cooper et Schrieffer[6]) est précisément de prédire la valeur de p .

Pour donner une analogie avec un autre domaine de la physique, c'est un peu comme la possibilité de décrire un objet visible à basse énergie (du point de vue de la physique des particules) comme le proton, en faisant appel à un état lié de 3 quarks, ces derniers étant des particules quasi-libres à très haute énergie. Dans beaucoup de situations de la physique nucléaire, il est difficile de "voir" la structure du proton. De même,

[5] L. N. Cooper, Physical Rewiew, vol. 104, p. 1189 (1956)

[6] J. Bardeen, L. N.Cooper, and J. R. Schrieffer, Physical Review, vol. 108, p. 1175 (1957)

un assez grand nombre d'expériences macroscopiques faites sur un supraconducteur ne portent plus la trace de la structure interne des paires de Cooper. Heureusement, certaines expériences, utilisant des sondes plus microscopiques comme l'effet tunnel, ou la résonance magnétique nucléaire permettent d'accéder à cette structure.
Toutefois, et c'est un des aspects étonnants de la supraconductivité, il existe aussi des manifestations thermodynamiques sensibles à la valeur de p, notamment lorsqu'un supraconducteur dans lequel on a creusé des "trous" (un anneau par exemple) réagit à un champ magnétique extérieur. Nous aborderons ces expériences un peu plus loin.

Pour l'instant, soulignons que si $p \neq 1$, on s'attend à ce que des structures "composites" mettant en jeu p électrons jouent un rôle essentiel dans le spectre des excitations de basse énergie d'un supraconducteur. Ces structures microscopiques sont a priori d'extension spatiale limitée, avec une longueur caractéristique que nous noterons ξ. A priori, ξ dépend de la température. L'existence de cette longueur doit nous avertir que le modèle $H_{A,V}$ n'a plus vraiment de sens pour des échelles de longueur inférieures ou comparables à ξ. Il est bien sûr commode mathématiquement de supposer que le champ $\Phi(r)$ est une fonction continue et même différentiable de la position r. Mais l'extrapolation des résultats de ce modèle pour des échelles de longueur plus petites que ξ n'aurait pas grand sens physiquement. Du point de vue physique, il serait en fait très raisonnable de partir d'un modèle discret, semblable à celui de l'équation $\widetilde{H}_{A,V,\Omega}$, avec un pas de discrétisation l de l'ordre de ξ. Dans le régime supraconducteur, où le champ de phase Φ est ordonné aux grandes échelles, les deux modèles donnent qualitativement les mêmes prédictions, lorsque l'on regarde des longueurs bien supérieures à ξ.

Revenons maintenant à l'Hamiltonien phénoménologique $H_{A,V}$. L'opérateur $\exp(i\Phi(r))$ induit une variation $\langle \Delta\Pi(r)\rangle$ d'une unité. Par ailleurs, il induit une variation $\langle \Delta N(r)\rangle$ du nombre d'électrons au voisinage immédiat (au sens de ξ) de r supposée égale à $-p$. Or au début de cette section, nous avons montré que $\langle \Delta\Pi(r)\rangle = -\dfrac{e}{\hbar c}\langle \Delta N(r)\rangle$. Nous en déduisons que:

$$\boxed{c = \frac{pe}{\hbar}}$$

En tenant compte de ce que $d = \hbar c$, et $a = v_s^2 \dfrac{\hbar^2}{b}$, et en utilisant la forme traditionnelle pour $b = \dfrac{n_s}{m^*}\hbar^2$, nous obtenons:

$$H_{A,V}(t) = \int d^3r \left\{ \frac{1}{2}\frac{m^* v_s^2}{n_s}\Pi^2(r) + \frac{1}{2}\frac{n_s}{m^*}\left(\hbar\vec{\nabla}\Phi + pe\vec{A}\right)^2 + pe\Pi(r)V(r,t) \right\} . \qquad (8)$$

La quantité n_s a la dimension d'une densité de particules par unité de volume et m^* celle d'une masse. Il est temps maintenant d'étudier le modèle "minimal" défini par l'équation (8). Pour l'instant, nous commencerons par ignorer tout effet de la périodicité de la phase. Cette périodicité sera réintroduite en **3.2**, où nous analyserons quelques effets spectaculaires qui en résultent.

3.1.4 Conductivité uniforme infinie et effet Meissner dans le modèle du champ de phase

Remarque historique: ce modèle du champ de phase a pour l'essentiel été proposé par les frères London[7] en 1935. Dans leur version, la phase n'était cependant pas envisagée comme une variable périodique (donc la quantification de la charge électrique n'était pas vraiment prise en compte dans leur modèle). Il me semble que le premier à avoir sérieusement abordé les conséquences physiques de la périodicité de Φ ait été B. Josephson[8] en 1962.

Ecrivons les équations du mouvement issues de (8). En généralisant la procédure de 3.1.2, nous obtenons:

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\Phi(r)\rangle_t = \frac{m^* v_s^2}{n_s\hbar}\langle\Pi(r)\rangle_t + \frac{pe}{\hbar}V(r,t) , \qquad (9)$$

$$\frac{\partial}{\partial t}\langle\Pi(r)\rangle_t = \frac{n_s}{m^*}\vec{\nabla}_r\langle\hbar\vec{\nabla}\Phi(r) + pe\vec{A}(r,t)\rangle_t . \qquad (10)$$

La seconde équation a la signification d'une équation de conservation pour la charge. En effet, en accord avec l'analyse faite en **3.1.3**, $\langle\delta n(r)\rangle = -p\langle\Pi(r)\rangle$, donc

$$\boxed{\langle\delta\rho(r)\rangle = pe\langle\Pi(r)\rangle}$$

L'équation (10) nous permet donc d'identifier le membre de droite à la divergence du courant:

$$\boxed{\langle J(r,t)\rangle = -pe\frac{n_s}{m^*}\langle\hbar\vec{\nabla}\Phi(r) + pe\vec{A}(r,t)\rangle}$$

[7] F. London, H. London, Proc. Roy. Soc., Lond., A 149, 71 (1935)

[8] B. Josephson, Physics Letters, 1, 251 (1962)

Notons que, comme nous le souhaitions en **3.1.1**, ce courant est purement longitudinal en l'absence de champ.

Etudions maintenant la réponse au champ *local* décrit par les potentiels $\vec{A}(r,t)$ et $V(r,t)$. Il est utile d'expliciter la définition du courant juste donnée, en transformée de Fourier. Nous simplifierons les notations, en omettant d'indiquer qu'il s'agit de valeurs moyennes.

$$\widetilde{J}(\vec{q};\omega) = -pe\frac{n_s}{m^*}\left\{i\hbar\widetilde{\Phi}(\vec{q};\omega)\vec{q} + pe\widetilde{A}(\vec{q};\omega)\right\}$$

Nous décomposons comme d'habitude chaque vecteur en composante longitudinale (parallèle à $\vec{q}$) et transversale (perpendiculaire à $\vec{q}$).

Nous obtenons:

$$\widetilde{J}_{\|} = -pe\frac{n_s}{m^*}\left\{i\hbar\widetilde{\Phi}(\vec{q};\omega)\vec{q} + pe\widetilde{A}_{\|}(\vec{q};\omega)\right\}\ , \tag{11}$$

$$\widetilde{J}_{\perp} = -(pe)^2\frac{n_s}{m^*}\widetilde{A}_{\perp}(\vec{q};\omega)\ . \tag{12}$$

L'équation (12) montre immédiatement que ce système présente de l'effet Meissner. En effet:

$$\boxed{\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q},\omega) = (pe)^2\frac{n_s}{m^*}}$$

Comme dans ce modèle $\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q};\omega)$ est indépendant de $\vec{q}$ et ω, notre critère pour l'effet Meissner:

$$\lim_{q\to 0}\lim_{\omega\to 0}\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q};\omega) = \frac{1}{\mu_0\lambda_L^2} \neq 0$$

est bien satisfait. Dans ce modèle la longueur de pénétration du champ magnétique est:

$$\lambda_L = \frac{1}{pe}\sqrt{\frac{m^*}{\mu_0 n_s}}\ .$$

Elle diverge lorsque $n_s \to 0$, qui signale donc la disparition de l'effet Meissner.

La réponse longitudinale est celle d'un conducteur parfait. Pour le voir, nous nous servons de l'équation (11) pour exprimer $\widetilde{\Phi}(\vec{q};\omega)$ que l'on injecte dans l'équation (9). De même, l'équation de conservation permet d'exprimer $\widetilde{\Pi}(\vec{q};\omega)$, que l'on injecte également dans l'équation (9). Multiplions l'équation (11) par $i\vec{q}$, il vient:

$$\widetilde{\Phi}(\vec{q};\omega) = \frac{m^*}{\hbar n_s pe}\,i\,\frac{\vec{q}\cdot\widetilde{J}_{\|}(\vec{q};\omega)}{q^2} + \frac{pe}{\hbar}\,i\,\frac{\vec{q}\cdot\widetilde{A}_{\|}(\vec{q};\omega)}{q^2}\ .$$

Par ailleurs, l'équation de conservation de la charge implique:

$$\omega\delta\widetilde{\rho}(\vec{q};\omega) = \vec{q}\cdot\widetilde{J}_{\|}(\vec{q};\omega)\ .$$

Or, comme $\delta\rho = pe\langle\Pi\rangle$:

$$\widetilde{\Pi}(\vec{q};\omega) = \frac{1}{pe}\frac{\vec{q}\cdot\widetilde{J}_{\|}(\vec{q};\omega)}{\omega} .$$

L'équation (9) s'écrit, en transformée de Fourier:

$$-i\omega\widetilde{\Phi}(\vec{q};\omega) = \frac{m^* v_s^2}{\hbar n_s}\widetilde{\Pi}(\vec{q};\omega) + \frac{pe}{\hbar}\widetilde{V}(\vec{q};\omega) ,$$

$$\frac{m^*}{\hbar n_s pe}\,\omega\,\frac{\vec{q}\cdot\widetilde{J}_{\|}(\vec{q};\omega)}{q^2} + \frac{pe}{\hbar}\,\omega\,\frac{\vec{q}\cdot\widetilde{A}_{\|}(\vec{q};\omega)}{q^2} = \frac{m^* v_s^2}{\hbar n_s pe}\frac{\vec{q}\cdot\widetilde{J}_{\|}(\vec{q};\omega)}{\omega} + \frac{pe}{\hbar}\widetilde{V}(\vec{q};\omega) .$$

Multiplions cette équation par $\vec{q}$, nous obtenons:

$$\frac{m^*}{\hbar n_s pe}\left(\omega - \frac{v_s^2 q^2}{\omega}\right)\widetilde{J}_{\|}(\vec{q};\omega) = \frac{pe}{\hbar}\left(\vec{q}\widetilde{V}(\vec{q};\omega) - \omega\widetilde{A}_{\|}(\vec{q};\omega)\right) ,$$

or, comme $\vec{E} = -\vec{\nabla}V - \dfrac{\partial\vec{A}}{\partial t}$, $\quad \widetilde{E} = -i\vec{q}\widetilde{V} + i\omega\widetilde{A}$.
En particulier: $i\widetilde{E}_{\|}(\vec{q};\omega) = \vec{q}\widetilde{V}(\vec{q};\omega) - \omega\widetilde{A}(\vec{q};\omega)$.

Finalement:

$$\widetilde{J}_{\|}(\vec{q};\omega) = \frac{(pe)^2 n_s}{m^*}\frac{i\omega}{\omega^2 - v_s^2 q^2}\widetilde{E}_{\|}(\vec{q};\omega) \tag{12}$$

Ce résultat est bien invariant de jauge, puisqu'il fait intervenir les potentiels à travers le champ électrique.

Nous vérifions que la réponse longitudinale est celle d'un conducteur parfait (dans la limite $\omega \gg v_s q$). Nous pouvons déduire de l'équation précédente (12) la valeur de $\widetilde{K}_{\|}$:

$$\boxed{\widetilde{K}_{\|}(\vec{q};\omega) = \frac{(pe)^2 n_s}{m^*}\frac{\omega^2}{\omega^2 - v_s^2 q^2}}$$

Comme nous nous y attendons $\lim\limits_{q\to 0}\widetilde{K}_{\|}(q;\omega) = \lim\limits_{q\to 0}\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q};\omega)$. Par contre, dans la limite statique $(\omega \ll v_s|\vec{q}\,|)$ les deux fonctions sont distinctes: $\lim\limits_{\omega\to 0}\widetilde{K}_{\|}(\vec{q};\omega) = 0$, comme requis par l'invariance de jauge, et $\lim\limits_{\omega\to 0}\widetilde{K}_{\perp}(\vec{q};\omega) = \dfrac{(pe)^2 n_s}{m^*}$.

Enfin, on peut vérifier que ce modèle donne lieu à un écrantage d'une charge extérieure statique: en utilisant l'équation de continuité: $\delta\widetilde{\rho}(\vec{q};\omega) = \dfrac{\vec{q}\cdot\widetilde{J}_{\|}(\vec{q};\omega)}{\omega}$,
d'où: $\delta\widetilde{\rho}(\vec{q};\omega) = \dfrac{(pe)^2 n_s}{m^*}\dfrac{1}{\omega^2 - v_s^2 q^2}\left[q^2\widetilde{V}(\vec{q};\omega) - \omega\vec{q}\cdot\widetilde{A}_{\|}(\vec{q};\omega)\right]$.
En particulier:

$$\boxed{\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega) = \frac{(pe)^2 n_s}{m^*}\frac{q^2}{v_s^2 q^2 - \omega^2}}$$

Dans la limite statique $(\omega \to 0)$, la réponse en densité tend vers une valeur limite non-nulle:

$$\lim_{\omega\to 0} \widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega) = \frac{(pe)^2 n_s}{m^*}\frac{1}{v_s^2}\,.$$

Dans le modèle des électrons libres (cas des ondes planes), nous avions trouvé:

$$\lim_{q\to 0}\lim_{\omega\to 0} \widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega) = e^2\nu(0) = \frac{3ne^2}{mv_F^2}\,.$$

Si n_s, m^* et v_s sont respectivement du même ordre de grandeur que n, m et v_F, ce qui est en pratique assez raisonnable, on voit que l'écrantage d'un champ électrique longitudinal se fait de manière très semblable dans ce modèle de supraconducteur, à celle d'un métal pur.

Pour l'instant, nous avons étudié la réponse à un champ *local*. Comme les fonctions de réponse au champ local peuvent se calculer exactement, pour ce modèle simple, il est intéressant de regarder un peu plus en détail la réponse à un champ extérieur.

En reprenant l'analyse faite pour l'écrantage dans un métal:

$$\delta\widetilde{\rho}(\vec{q};\omega) = -\frac{\dfrac{\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega)}{\varepsilon_0 q^2}}{1+\dfrac{\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega)}{\varepsilon_0 q^2}}\widetilde{\rho}_{\mathrm{ext}}(\vec{q};\omega)\,.$$

$$\widetilde{E}_{\mathrm{loc},\|}(\vec{q};\omega) = \frac{1}{1+\dfrac{\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega)}{\varepsilon_0 q^2}}\widetilde{E}_{\mathrm{ext}}(\vec{q};\omega)\,.$$

Posons: $\omega_0^2 = \dfrac{(pe)^2 n_s}{m^*\varepsilon_0}$ et $\widetilde{K}^{00}(\vec{q};\omega) = \varepsilon_0\omega_0^2\dfrac{q^2}{v_s^2q^2-\omega^2}$.

D'où

$$\boxed{\begin{aligned}\delta\widetilde{\rho}(\vec{q};\omega) &= -\frac{\omega_0^2}{\omega_0^2-\omega^2+v_s^2q^2}\,\widetilde{\rho}_{\mathrm{ext}}(\vec{q};\omega)\\[2ex] \widetilde{E}_{\mathrm{loc},\|}(\vec{q};\omega) &= \frac{v_s^2q^2-\omega^2}{\omega_0^2-\omega^2+v_s^2q^2}\,\widetilde{E}_{\mathrm{ext},\|}(\vec{q};\omega)\end{aligned}}$$

On obtient bien un écrantage efficace tant que $|\omega| \ll \omega_0$ et $v_s|\vec{q}\,| \ll \omega_0$. Les pôles dans la fonction de réponse au champ extérieur s'interprètent comme pour le gaz d'électrons libres: ce sont des plasmons, dont la relation de dispersion est donnée par:

$$\omega_p^2 = \omega_0^2 + v_s^2q^2$$

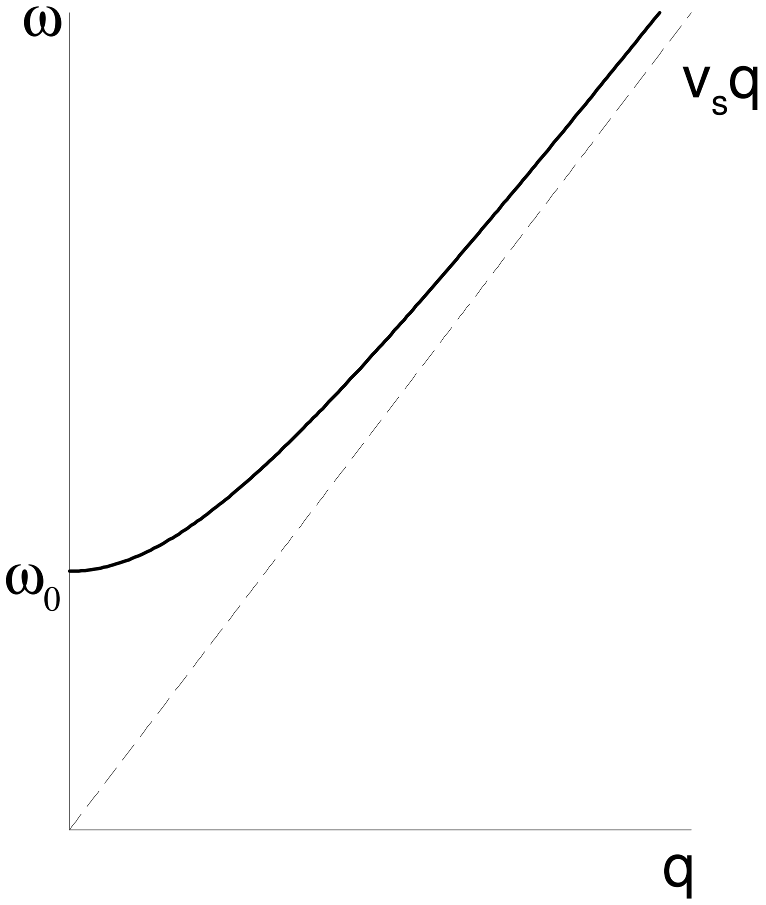

Figure 3.6: Spectre des modes longitudinaux

Cette relation est illustrée sur la figure 3.6.

On peut faire la même chose pour la réponse transverse, en généralisant l'analyse de la section **2.2** à une fréquence finie.

Nous repartons de l'équation (12):

$$\widetilde{J}_\perp(\vec{q};\omega) = -\frac{1}{\mu_0\lambda_L^2}\widetilde{A}_{\mathrm{loc},\perp}(\vec{q};\omega)\,.$$

L'équation de Maxwell-Ampère s'écrit :

$$\vec{\nabla}\times\vec{B}_{\mathrm{ind}} = \mu_0\vec{J} + \frac{1}{c^2}\frac{\partial\vec{E}_{\mathrm{ind}}}{\partial t}\,.$$

(Ici, c désigne bien la vitesse de la lumière!)

Passons en transformée de Fourier, et projetons sur le plan orthogonal à $\vec{q}$:

$$\widetilde{A}_{\mathrm{ind},\perp}(\vec{q};\omega) = \frac{\mu_0}{q^2 - \dfrac{\omega^2}{c^2}}\widetilde{J}_\perp(\vec{q};\omega)\,.$$

Il a fallu utiliser pour cela le fait que $\vec{E}_{\text{ind}} = -\vec{\nabla} V_{\text{ind}} - \dfrac{\partial \vec{A}_{\text{ind}}}{\partial t}$. Donc, en particulier: $\widetilde{E}_{\text{ind},\perp}(\vec{q};\omega) = i\omega \widetilde{A}_{\text{ind},\perp}(\vec{q};\omega)$. La relation ainsi obtenue généralise celle donnée en section **2.2.2** dans le cas statique ($\omega = 0$). Nous avons aussi:

$$\widetilde{A}_{\text{loc},\perp}(\vec{q};\omega) = \widetilde{A}_{\text{ext},\perp}(\vec{q};\omega) + \frac{\mu_0}{q^2 - \dfrac{\omega^2}{c^2}} \widetilde{J}_{\perp}(\vec{q};\omega) \,.$$

En injectant ceci dans l'équation (12):

$$\widetilde{J}_{\perp}(\vec{q};\omega) = -\frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2} \left\{ \widetilde{A}_{\text{ext},\perp}(\vec{q};\omega) + \frac{\mu_0}{q^2 - \dfrac{\omega^2}{c^2}} \widetilde{J}_{\perp}(\vec{q};\omega) \right\} .$$

Nous obtenons donc:

$$\widetilde{J}_{\perp}(\vec{q};\omega) = -\frac{1}{\mu_0} \frac{q^2 - \omega^2/c^2}{1 + \lambda_L^2 (q^2 - \omega^2/c^2)} \widetilde{A}_{\text{ext},\perp}(\vec{q};\omega) \,.$$

L'interprétation est, comme d'habitude, un peu plus aisée, si l'on compare le courant induit avec le courant J_{ext} qui crée le champ extérieur:

$$\boxed{\begin{array}{rcl} \widetilde{J}_{\perp}(\vec{q};\omega) & = & -\dfrac{1}{1 + \lambda_L^2 (q^2 - \omega^2/c^2)} \widetilde{J}_{\text{ext},\perp}(\vec{q};\omega) \\[3em] \widetilde{A}_{\text{loc},\perp}(\vec{q};\omega) & = & \dfrac{\lambda_L^2 (q^2 - \omega^2/c^2)}{1 + \lambda_L^2 (q^2 - \omega^2/c^2)} \widetilde{A}_{\text{ext},\perp}(\vec{q};\omega) \end{array}}$$

Ces formules ont exactement la même structure que celles pour la réponse longitudinale! Il y a néanmoins quelques différences entre les deux situations:

- dans le cas longitudinal, le milieu supraconducteur, avant couplage au champ électromagnétique, possède un mode dispersif, à vitesse v_s. Le champ, lui, n'a pas de mode longitudinal propagatif. Le champ longitudinal est fixé par le milieu matériel via la loi de Gauss:

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{E}_{\|} = \frac{\rho}{\varepsilon_0} \,,$$

- dans le cas transversal, on échange le rôle des deux systèmes. Avant couplage au milieu supraconducteur, le champ électromagnétique possède deux modes transverses (photons) se propageant à la vitesse de la lumière. Le milieu supraconducteur n'a pas de mode transversal propagatif, au moins à basse énergie. Le courant transversal est fixé par le champ électromagnétique via la fonction de réponse du modèle du champ de phase:

$$\vec{J}_\perp = -\frac{1}{\mu_0 \lambda_L^2}\vec{A}_\perp \, .$$

Donc, pour résumer:

Avant couplage: matière supra/champ EM	$\rightarrow$	Après couplage
1 mode longitudinal, vitesse v_s	$\rightarrow$	plasmon, avec fréquence de
(onde sonore)		coupure ω_0^2 : $\omega^2 = \omega_0^2 + v_s^2 q^2$
2 modes transversaux, vitesse c	$\rightarrow$	2 photons massifs,
(photons)		$\omega^2 = c^2/\lambda_L^2 + c^2 q^2$

Notons que l'acquisition d'une masse, pour les modes transverses, ne se fait pas au détriment de l'invariance de jauge. Ce mécanisme aboutissant à rendre les modes transverses massifs est très utile aussi en physique des particules. Il porte donc le nom de mécanisme de Higgs-Anderson, les deux noms faisant respectivement allusion au contexte de la physique des particules et de la supraconductivité. En physique des particules, ce mécanisme joue un rôle crucial dans le modèle standard, pour rendre les bosons de jauge du groupe $SU(2)$ associé à l'interaction faible massifs. Ce sont les bosons $W^\pm$ et Z^0.

En physique des particules, le champ Φ est étroitement relié à ce que l'on appelle le champ de Higgs. Plus précisément, le champ de Higgs, dans sa version la plus simple (adaptée au cas $U(1)$ du couplage matière-champ électromagnétique) est un champ complexe $\Psi(r) = \Phi_1(r) + i\Phi_2(r)$.

Considérons le Lagrangien classique $\mathcal{L} = \frac{1}{2}\left(\partial_\mu \Phi_1 \partial^\mu \Phi_1 + \partial_\mu \Phi_2 \partial^\mu \Phi_2\right) - \frac{1}{2}V\left(\Phi_1^2 + \Phi_2^2\right)$.

Ce Lagrangien est invariant de Lorentz, et invariant par rotation dans l'espace "interne"
$\begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix} \longrightarrow \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha \\ \sin\alpha & \cos\alpha \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \end{pmatrix}$ pour tout α. Cette rotation correspond à $\Psi \rightarrow \Psi e^{i\alpha}$. On peut encore écrire: $\mathcal{L} = \frac{1}{2}\partial_\mu \Psi^* \partial^\mu \Psi - \frac{1}{2}V\left(\Psi^*\Psi\right)$.

L'équation du mouvement s'écrit: $\partial_\mu \left(\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial_\mu \Phi_a)}\right) = \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \Phi_a}$ soit: $\partial_\mu \partial^\mu \Phi_\alpha = -V'(\Phi_\alpha)\Phi_\alpha$.

ou encore $\boxed{\partial_\mu \partial^\mu \Psi = -V'(\Psi^*\Psi)\Psi}$

L'invariance par rotation $\Psi \to \Psi e^{i\alpha}$ dans l'espace interne entraîne l'existence d'un courant conservé: $\partial_\mu J^\mu = 0$, avec:

$$J^\mu = \Phi_1 \partial^\mu \Phi_2 - \Phi_2 \partial^\mu \Phi_1 = \frac{1}{2i}\Big(\Psi^* \left(\partial^\mu \Psi\right) - \left(\partial^\mu \Psi^*\right) \Psi\Big)$$

Supposons que le potentiel V présente un minimum unique pour une valeur non-nulle de $\Psi^*\Psi$. V a l'allure suivante montrée sur la figure 3.7.

Figure 3.7: Potentiel avec minimum non trivial

Comme Ψ est un nombre complexe et en tenant compte du degré de liberté de phase, on voit que l'ensemble des minima du potentiel est le cercle $|\Psi| = u_0$. Il est alors naturel d'utiliser des coordonnées polaires: $\Psi = ue^{i\Phi}$. Dans ces variables:

$$\begin{cases} \mathcal{L} & = \frac{1}{2}\partial_\mu u \partial^\mu u + \frac{1}{2}u^2 \partial_\mu \Phi \partial^\mu \Phi - \frac{1}{2}V(u^2) \, , \\ J^\mu & = u^2 \partial^\mu \Phi \, . \end{cases}$$

Les équations du mouvement s'écrivent:

$$\begin{aligned} \frac{1}{u}\partial_\mu \partial^\mu u &= \partial_\mu \Phi \partial^\mu \Phi - V^{'}(u^2)\,, \\ \partial_\mu \left(u^2 \partial^\mu \Phi\right) &= 0\,. \end{aligned}$$

La deuxième équation est simplement la conservation du courant.

Etudions les petites oscillations au voisinage d'une configuration uniforme minimisant l'énergie. Comme le système est invariant par rotation, on peut par une telle rotation se ramener au cas où $\Phi = 0$ dans l'état de base. Par conséquent: $u = u_0 + v$, avec v et Φ considérées comme de petites corrections. En linéarisant les équations du mouvement par rapport à v et Φ, nous avons:

$$\begin{cases} \partial_\mu \partial^\mu v &= -\lambda^2 u_0^2 v\,, \\ \partial_\mu \partial^\mu \Phi &= 0\,. \end{cases}$$

Nous avons choisi: $V(u^2) = \dfrac{\lambda^2}{4}\left(u^2 - u_0^2\right)^2$.
Le mode radial $(v \neq 0)$ et le mode de phase, appelé dans ce contexte mode de Goldstone se découplent. Le premier est massif, avec une masse égale à $m = \lambda u_0$, et le second est de masse nulle. Ce mode de masse nulle est lié à ce que l'on appelle ici une *brisure spontanée de symétrie*: c'est le fait que l'état fondamental "choisit" une valeur arbitraire de la phase Φ. Donc un état fondamental n'est pas invariant par rotation, contrairement à ce qui se passe pour l'Hamiltonien. Par contre une rotation d'angle α envoie le fondamental Φ sur le fondamental $\Phi + \alpha$. La symétrie brisée se manifeste donc par la dégénérescence des fondamentaux. A son tour, cette dégénérescence est à l'origine du mode de Goldstone de masse nulle.

Remarque: cette analyse est classique pour l'essentiel. Nous essaierons de préciser un peu plus loin le sens de cette notion de symétrie spontanément brisée dans un contexte complètement quantique. Cette question fera l'objet de la section **3.2.3**

Que se passe-t-il lorsque l'on couple un tel système à un champ électromagnétique? Au vu de l'expérience passée, il est naturel d'envisager un Lagrangien de la forme:

$$\begin{aligned} \mathcal{L} &= \frac{1}{2}|(\partial_\mu - iA_\mu)\Psi|^2 - \frac{1}{2}V(\Psi^*\Psi)\,, \\ \mathcal{L} &= \frac{1}{2}(\partial_\mu u)^2 + \frac{1}{2}u^2(\partial_\mu \Phi - A_\mu)^2 - \frac{1}{2}V(u^2) \end{aligned}$$

Les équations du mouvement correspondantes sont:

$$\begin{cases} \dfrac{1}{u}\partial_\mu\partial^\mu u = (\partial_\mu\Phi - A_\mu)^2 - V^{'}(u^2) \\ \partial_\mu \left\{u^2(\partial^\mu\Phi - A^\mu)\right\} = 0\,. \end{cases}$$

Ceci suggère que $J^\mu = u^2(\partial^\mu\Phi - A^\mu)$.

Dans la limite des petites oscillations, le terme en $(\partial_\mu\Phi - A_\mu)^2$ est du second ordre, donc négligeable par rapport aux autres termes dans l'équation d'évolution de l'amplitude u. Donc le mode radial se découple comme précédemment.

Les modes de phase se couplent aux modes du champ électromagnétique via les fluctuations du courant J^μ.

Les équations de Maxwell s'écrivent: $\partial_\nu\partial^\nu A^\mu - \partial^\mu\partial_\nu A^\nu = J^\mu$.

En transformée de Fourier: $-k^2\widetilde{A}^\mu + \left(k\cdot\widetilde{A}\right)k^\mu = \widetilde{J}^\mu = u_0^2\left(ik^\mu\widetilde{\Phi} - \widetilde{A}^\mu\right)$.

En prenant la divergence de cette équation, on obtient que le courant est conservé.

Fixons k^μ. On a deux cas de figure:

(i): $\widetilde{A}^\mu$ proportionnel à k^μ. Dans ce cas, le membre de gauche s'annule. Donc celui de droite également: le courant est nul. On a une transformation de jauge pure: $A^\mu = \partial^\mu\Phi$.

(ii): $\widetilde{A}^\mu$ et k^μ sont linéairement indépendants. Dans ce cas:

$$\begin{cases} k^2 &= u_0^2 \\ k\cdot\widetilde{A} &= iu_0^2\widetilde{\Phi} \end{cases}$$

Si la condition $k^2 = u_0^2$ est satisfaite, on peut choisir $\widetilde{A}$ dans tout l'espace $\mathbb{R}^4$. Deux choix de $\widetilde{A}$ différents séparés par un multiple de k correspondent à une transformation de jauge. Donc on a trois modes indépendants *massifs*, avec une masse u_0.

On a donc le bilan:

Avant couplage entre Ψ et le champ électromagnétique	$\longrightarrow$	Après couplage
Mode radial: masse = λu_0	$\longrightarrow$	Mode radial: masse = λu_0 (particule de Higgs)
Mode de Goldstone: masse=0 2 photons transverses: masse=0	$\longrightarrow$	3 modes massifs masse=u_0

Remarque: il est intéressant de noter la différence entre ce tableau et celui établi pour le modèle du champ de phase.

Dans ce modèle du champ de phase décrivant le supraconducteur, nous n'avons que *trois* modes indépendants, et de plus, après couplage au champ électromagnétique, la dispersion des modes transverses est différente de celle du mode longitudinal. Comment peut-on comprendre cette différence? Une façon simple de voir les choses consiste à dire que le modèle décrivant le supraconducteur n'est pas invariant de Lorentz. La réduction d'une unité du nombre de modes associées au champ de matière Ψ peut s'obtenir si le Lagrangien est du premier ordre en $\dfrac{\partial}{\partial t}$, au lieu d'être du deuxième ordre. Posons:

$$\mathcal{L}_{NR} = \frac{i}{2}\left(\Psi^*\frac{\partial\Psi}{\partial t} - \Psi\frac{\partial\Psi^*}{\partial t}\right) - \frac{1}{2}\vec{\nabla}\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \frac{1}{2}V(\Psi^*\Psi)\,.$$

Comme précédemment, les équations du mouvement les plus commodes vont s'exprimer dans les variables u et Φ (rappelons que $\Psi = u\exp(i\Phi)$).

$$\mathcal{L}_{NR} = -u^2\frac{\partial\Phi}{\partial t} - \frac{1}{2}\vec{\nabla}u\cdot\vec{\nabla}u - \frac{1}{2}u^2\vec{\nabla}\Phi\cdot\vec{\nabla}\Phi - \frac{1}{2}V(u^2)\,.$$

Par rapport à $\mathcal{L}$, nous avons seulement modifié la partie du Lagrangien qui fait intervenir des dérivées temporelles. Plus précisément, nous avons remplacé la quantité

$$\frac{1}{2}u^2\left(\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)^2 + \frac{1}{2}\left(\frac{\partial u}{\partial t}\right)^2 \qquad \text{par} \qquad -u^2\left(\frac{\partial\Phi}{\partial t}\right)\,.$$

Ecrivons alors l'expression du moment conjugué Π de Φ.

$$\Pi \equiv \frac{\partial\mathcal{L}_{NR}}{\partial\left(\dfrac{\partial\Phi}{\partial t}\right)} = -u^2 = -|\Psi|^2\,.$$

Donc, dans cette version non-relativiste, le mode radial perd son indépendance par rapport au mode de phase, à cause du caractère conjugué de Φ et de l'amplitude $|\Psi|^2$. Comme nous le verrons un peu plus tard, cette conjugaison est à l'origine de phénomènes physiques remarquables, comme l'effet Josephson.

La densité d'Hamiltonien $\mathcal{H}_{NR}$ correspondant à $\mathcal{L}_{NR}$ est obtenue selon la procédure habituelle:

$$\mathcal{H}_{NR} = \Pi \frac{\partial \Phi}{\partial t} - \mathcal{L}_{NR} = \frac{1}{2}\left(\vec{\nabla}\sqrt{-\Pi}\right)^2 - \frac{1}{2}\Pi\left(\vec{\nabla}\Phi\right)^2 + \frac{1}{2}V(-\Pi)\,.$$

L'Hamiltonien de phase peut donc se comprendre comme un développement de $\mathcal{H}_{NR}$ au voisinage des fondamentaux classiques caractérisés par $\Pi_0 = -u_0^2$. De plus, nous n'avons pas inclus dans le modèle de l'équation (8) de terme en $\vec{\nabla}\Pi$.

Le Lagrangien $\mathcal{L}_{NR}$ est souvent appelé Lagrangien de Schrödinger non-linéaire ou encore Lagrangien de Ginzburg-Landau dépendant du temps. La seconde dénomination, fréquente en physique des systèmes non-linéaires peut prêter à quelques confusions en supraconductivité. En effet, il existe aussi un modèle de Ginzburg-Landau qui *formellement* s'écrit comme $\mathcal{L}_{NR}$ (avec les termes en $\frac{\partial \Psi}{\partial t}$ en moins). Mais ce modèle n'a pas pour but de décrire la *dynamique* au voisinage de $T = 0$. Il a été construit par Ginzburg et Landau pour décrire la *thermodynamique* d'un supraconducteur au voisinage de la température critique T_c. Par manque de temps, nous ne discuterons pas ici cette théorie qui a eu beaucoup d'applications très importantes. Une des raisons de ce choix est aussi qu'il existe d'excellents livres sur le sujet comme celui de M. Tinkham[9], ou encore celui de P. G. De Gennes[10]. La connexion entre les deux situations (dynamique à $T \to 0$ et thermodynamique d'équilibre lorsque $T \to T_c$) n'est pas facile à préciser si l'on travaille uniquement au niveau phénoménologique, comme nous l'avons fait jusqu'ici. En effet, la description des fluctuations thermiques au voisinage de T_c prend en compte *toutes* les excitations du système d'électrons supraconducteur, et la théorie microscopique de BCS nous montre qu'il existe un ensemble d'excitations *distinct* des états accessibles par l'action répétée des opérateurs de création a^+ associés aux champs Φ et Π. Ces excitations supplémentaires, non-décrites par le modèle de

[9] M. Tinkham, *Introduction to superconductivity*, McGraw-Hill (1996)

[10] P. G. De Gennes, *Superconductivity in metals and alloys*, Benjamin, New York (1966)

phase (Φ, Π), mais essentielles au voisinage de T_c sont souvent appelées “quasiparticules” ou “quasitrous”. La théorie BCS montre que pour $T > T_c$ ces excitations deviennent identiques aux excitations de type ”particule” ou ”trou” d'un métal. Par contre, dans la limite des basses températures, ces excitations sont séparées du fondamental par un gap d'énergie Δ.

A la différence d'un semi-conducteur, ce gap Δ est ici purement dû aux interactions responsables de la supraconductivité. De même, contrairement au cas d'un semi-conducteur, ce gap pour l'excitation des quasiparticules ne fait pas disparaître le caractère métallique du système (caractérisé par l'écrantage parfait d'une charge extérieure statique, ou la conductivité infinie lorsque $q \to 0$). En effet, le supraconducteur présente à basse énergie la branche d'excitations élémentaires décrite par le modèle de phase (Φ, Π). En toute rigueur, il convient de noter que si l'on quantifie l'Hamiltonien $\mathcal{H}_{NR}$, on obtient un système avec des non-linéarités notamment en $\Pi \left(\vec{\nabla}\Phi\right)^2$. Ce système quantifié peut se comprendre comme un système de *bosons* chargés non-relativiste.

Le lecteur est donc convié à vérifier que les relations de commutation canoniques pour les variables d'amplitude $|\Psi|^2$ et de phase Φ, soit :

$$\left[\Psi^*(r)\Psi(r); \Psi^*(r')\Psi(r')\right] = 0; \quad \left[\Phi(r), \Phi(r')\right] = 0; \quad \left[\Psi^*(r)\Psi(r); \Phi(r')\right] = i\delta(r - r'),$$

sont équivalentes à des relations de commutation exprimées directement sur les champs $\Psi(r)$ et $\Psi(r')$, soit:

$$\left[\Psi(r), \Psi(r')\right] = \left[\Psi^*(r), \Psi^*(r')\right] = 0\,; \quad \left[\Psi(r), \Psi^*(r')\right] = i\delta(r - r').$$

avec

$$\begin{cases} \Psi^*(r) & = (\Psi^*(r)\Psi(r))^{1/2}\, e^{-i\Phi(r)}, \\ \\ \Psi(r) & = e^{i\Phi(r)}\, (\Psi^*(r)\Psi(r))^{1/2}. \end{cases}$$

Le lien entre ces deux jeux de relations se fait notamment par le biais de:

$$\left[\Psi^*(r)\Psi(r); e^{i\Phi(r')}\right] = -\delta(r - r')e^{i\Phi(r)},$$

exprimant le fait que l'opérateur $e^{i\Phi(r)}$ détruit un boson au point r.

L'opérateur $\Psi^*(r)\Psi(r)$ donne la densité locale de ces bosons. Ceci est confirmé par les équations du mouvement issues de $\mathcal{L}_{NR}$. Au niveau classique, nous avons:

$$\begin{cases} \dfrac{\partial \Phi}{\partial t} = \dfrac{1}{2u}\vec{\nabla}^2 u - \dfrac{1}{2}\left(\vec{\nabla}\Phi\right)^2 - \dfrac{1}{2}V'(u^2) \;, \\ \\ \dfrac{\partial}{\partial t}\left(u^2\right) + \vec{\nabla}\cdot\left(u^2\vec{\nabla}\Phi\right) = 0 \end{cases}$$

La seconde de ces équations entraîne la conservation de $\int d^3r\, u^2(r)$.

La densité d'Hamiltonien $\mathcal{H}_{NR}$ pour ce modèle de bosons non-relativiste s'écrit encore:

$$\mathcal{H}_{NR} = \frac{1}{2}\vec{\nabla}\Psi^*(r)\cdot\vec{\nabla}\Psi(r) + \frac{1}{2}V\left(\Psi^*(r)\Psi(r)\right) \;.$$

L'existence d'interactions, notamment en $\Pi(\vec{\nabla}\Phi)^2$ entraîne que contrairement au modèle harmonique (non-périodique) de l'équation (8), ce système de bosons en interaction présente aussi une transition de phase continue à une température T_c. Quelles sont alors les excitations dont la prolifération induit la disparition de l'état supraconducteur? En première approximation, on peut voir le fondamental comme un condensat de Bose, et les excitations responsables de la perte supraconductivité comme résultant de l'excitation individuelle d'un boson hors du condensat macroscopique. La transition et le voisinage de T_c pour le modèle de bosons chargé non-relativiste est alors décrite par une théorie de Ginzburg-Landau thermodynamique formellement analogue à celle pour le fluide d'électrons supraconducteur, bien que les excitations de haute énergie de ces deux systèmes soient de natures très différentes. Ceci parce que le comportement d'un système au voisinage d'une transition de phase continue est essentiellement donné par le changement de symétrie au passage de la température T_c et la dimension de l'espace[11]. Il est intéressant de noter que la forme de $\mathcal{L}_{NR}$ est fortement contrainte, non pas par l'invariance de Lorentz, mais par une propriété d'invariance sous le groupe des transformations de Galilée. La transformation de Galilée entre 2 référentiels dans lesquels les coordonnées sont notées (x,t) et (x',t'), et se déplaçant en translation

[11] La compréhension de cette propriété d'universalité résulte des travaux de K. Wilson, L. Kadanoff, A. Migdal, M. Fisher et de nombreux autres chercheurs dans la période 1965-1975. Pour une introduction à ce vaste sujet, on pourra regarder *Modern theory of critical phenomena* par Shang-Keng Ma, "Frontiers in Physics" Vol. 46, (1976)

uniforme à vitesse v l'un par rapport à l'autre s'écrit:

$$\left\{\begin{array}{ll} x' & = x - vt \\ \\ t' & = t \end{array}\right. \qquad \text{ce qui entraîne:} \qquad \left\{\begin{array}{ll} \dfrac{\partial}{\partial t} & = \dfrac{\partial}{\partial t'} - v\dfrac{\partial}{\partial x'} \\ \\ \dfrac{\partial}{\partial x} & = \dfrac{\partial}{\partial x'}\,. \end{array}\right.$$

L'ensemble de ces transformations forme un groupe. La question que l'on peut se poser est: quels sont les Lagrangiens $\mathcal{L}\left(\Phi_a, \dfrac{\partial \Phi_a}{\partial t}, \dfrac{\partial \Phi_a}{\partial x}\right)$ formés à partir d'un champ à N composantes $\Psi \equiv (\Phi_1, \Phi_2, \ldots, \Phi_N)$ et invariants dans les transformations $(x,t) \to (x', t')$? Pour contraindre les choses, on suppose aussi ce Lagrangien invariant par les rotations *globales* (i.e. indépendantes de x et t) du champ $(\Phi_1, \Phi_2, \ldots, \Phi_N)$. Ceci est utile, car dans une transformation de Galilée, on peut s'autoriser à faire subir au champ une rotation: $\Phi_a(x,t) = R_{ab}(x', t')\chi_b(x', t')$, où R_{ab} est une matrice de rotation. La transformation de Galilée pour ce système est donc la correspondance $\Phi(x,t) \to \chi(x', t')$. On veut donc que:

$$\boxed{\mathcal{L}\left(\Phi, \frac{\partial \Phi}{\partial t}, \frac{\partial \Phi}{\partial x}\right)\Big|_{x,t} = \mathcal{L}\left(\chi, \frac{\partial \chi}{\partial t'}, \frac{\partial \chi}{\partial x'}\right)\Big|_{x',t'}}$$

Il s'avère qu'avec le groupe de Galilée, il est beaucoup plus difficile de réaliser une telle invariance qu'avec le groupe de Lorentz. On peut donner des arguments de plausibilité indiquant que $\mathcal{L}_{NR}$ avec N=2, d'où $\Psi = \Phi_1 + i\Phi_2$, est pratiquement la seule possibilité pour réaliser l'invariance de Galilée. En effet:

$$\begin{aligned} \frac{\partial \Phi_a}{\partial t}(x,t) &= R_{ab}(x', t')\left\{\frac{\partial \chi_b}{\partial t'}(x', t') - v\frac{\partial \chi_b}{\partial x'}(x', t')\right\} \\ &+ \left\{\frac{\partial R_{ab}}{\partial t'}(x', t') - v\frac{\partial R_{ab}}{\partial x'}(x', t')\right\}\chi_b(x', t') \\ \frac{\partial \Phi_a}{\partial x}(x,t) &= R_{ab}(x', t')\frac{\partial \chi_b}{\partial x'}(x', t') + \frac{\partial R_{ab}}{\partial x'}(x', t')\chi_b(x', t')\,. \end{aligned}$$

Concentrons-nous sur les termes dans lesquels les dérivées $\dfrac{\partial}{\partial t'}$ et $\dfrac{\partial}{\partial x'}$ agissent sur les champs transformés. Supposons que $\mathcal{L}$ contienne un polynôme de degré 2 en $\dfrac{\partial \Phi}{\partial x}$ et $\dfrac{\partial \Phi}{\partial t}$. L'invariance par rotation dans l'espace interne $(\Phi_1, \Phi_2, \ldots, \Phi_N)$ implique:

$$\mathcal{L}_{\text{cin}} = \frac{a}{2}\frac{\partial \Phi_i}{\partial t}\frac{\partial \Phi_i}{\partial t} + b\frac{\partial \Phi_i}{\partial t}\frac{\partial \Phi_i}{\partial x} + \frac{c}{2}\frac{\partial \Phi_i}{\partial x}\frac{\partial \Phi_i}{\partial x}, \quad (\text{on somme sur} \quad i \in \{1, 2, \ldots, N\})\,.$$

Après transformation de Galilée, et en utilisant le fait que R est une rotation, le terme cinétique pour le champ χ devient:

$$\mathcal{L}'_{\text{cin}} = \frac{a}{2}\frac{\partial \chi_m}{\partial t'}\frac{\partial \chi_m}{\partial t'} + (b - av)\frac{\partial \chi_m}{\partial t'}\frac{\partial \chi_m}{\partial x'} + \frac{1}{2}(c - 2bv + av^2)\frac{\partial \chi_m}{\partial x'}\frac{\partial \chi_m}{\partial x'} \; .$$

(on ne s'occupe pas pour l'instant des termes qui ne contiennent qu'une seule ou aucune dérivée pour χ). On voudrait que $\mathcal{L}_{\text{cin}} = \mathcal{L}'_{\text{cin}}$ pour toute valeur de la vitesse relative v. Ceci impose $a = b = 0$. Pour que le système soit physiquement intéressant, il faut au moins des termes de degré un en $\dfrac{\partial \Phi}{\partial t}$. Nous sommes donc amenés à considérer la famille de Lagrangiens:

$$\mathcal{L} = M^{ab}\Phi_a \frac{\partial \Phi_b}{\partial t} + \frac{1}{2}\frac{\partial \Phi_a}{\partial x}\frac{\partial \Phi_a}{\partial x} - \frac{1}{2}V\left(\sum_{a=1}^{N}\Phi_a^2\right) .$$

La matrice M doit être antisymétrique.

En effet, une composante symétrique $S^{ab}\Phi_a \dfrac{\partial \Phi_b}{\partial t}$ s'écrit $\dfrac{\partial}{\partial t}\left(\dfrac{1}{2}S^{ab}\Phi_a\Phi_b\right)$, et ajouter une dérivée totale par rapport au temps dans le Lagrangien ne modifie pas les équations du mouvement! Par ailleurs, l'invariance par rotation globale implique que M commute avec toutes les rotations R. Ceci est vrai en particulier pour toute rotation infinitésimale $R = \mathbb{I} + \varepsilon$, avec ε antisymétrique. Donc M commute avec toute matrice antisymétrique ε! Un peu d'algèbre montre que ceci n'arrive qu'en dimension $N = 2$, avec $M = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$. Dans ce cas, toute matrice antisymétrique ε est proportionnelle à M.

Si $N = 2$, il est commode de poser $\Psi = \Phi_1 + i\Phi_2$ comme nous l'avons fait, et il est facile de voir que:

$$-\frac{1}{2i}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\right) = -\Phi_1\frac{\partial \Phi_2}{\partial t} + \Phi_2\frac{\partial \Phi_1}{\partial t} \; .$$

Nous retrouvons donc $\mathcal{L}_{NR}$! Il reste à montrer que ce Lagrangien possède bien une invariance de Galilée. L'équivalent de la rotation $R_{ab}(x', t')$ est la multiplication par un facteur de phase $\exp\left(if(x', t')\right)$. Posons donc: $\Psi(x, t) = \exp\left(if(x', t')\right)\chi(x', t')$, où $f(x', t')$ est réelle.

Le terme potentiel ne pose pas de problème! $V(\Psi^*\Psi) = V(\chi^*\chi)$. Nous avons:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2i}\left(\Psi^*\frac{\partial \Psi}{\partial t} - \Psi\frac{\partial \Psi^*}{\partial t}\right) &= \frac{1}{2i}\left(\chi^*\frac{\partial \chi}{\partial t'} - \chi\frac{\partial \chi^*}{\partial t'}\right) - \frac{v}{2i}\left(\chi^*\frac{\partial \chi}{\partial x'} - \chi\frac{\partial \chi^*}{\partial x'}\right) \\ &+ \left(\frac{\partial f}{\partial t'} - v\frac{\partial f}{\partial x'}\right)\chi^*\chi \; . \end{aligned}$$

De même :

$$\frac{\partial \Psi^*}{\partial x}\frac{\partial \Psi}{\partial x} = \frac{\partial \chi^*}{\partial x'}\frac{\partial \chi}{\partial x'} + \frac{1}{i}\left(\chi^*\frac{\partial \chi}{\partial x'} - \chi\frac{\partial \chi^*}{\partial x'}\right)\frac{\partial f}{\partial x'} + \left(\frac{\partial f}{\partial x'}\right)^2 \chi^*\chi \, .$$

L'invariance de $\mathcal{L}_{NR}$ est obtenue si et seulement si:

$$\frac{\partial f}{\partial x'} = v \qquad \text{et} \qquad \frac{\partial f}{\partial t'} = \frac{1}{2}v^2 \, .$$

On a donc : $\Psi(x,t) = \exp\left\{i\left(vx' + \frac{1}{2}v^2 t'\right)\right\}\chi(x',t')$.

Si l'on forme le courant $\vec{J} = \frac{1}{2i}\left(\Psi^*\vec{\nabla}\Psi - \Psi\vec{\nabla}\Psi^*\right)$; $\vec{J} = \vec{J}' + |\Psi|^2\vec{v}$ comme on s'y attend, compte tenu de ce que $|\Psi|^2$ a l'interprétation d'une densité de particules dans les deux référentiels. $\vec{J}'$ est défini de la même façon que $\vec{J}$ en replaçant Ψ par χ et $\frac{\partial}{\partial x}$ par $\frac{\partial}{\partial x'}$.

3.2 Quelques effets physiques intéressants

3.2.1 L'effet Josephson

Le modèle du champ de phase, dans sa version périodique, a reçu une confirmation expérimentale remarquable à travers ce que l'on appelle l'effet Josephson.
Considérons deux supraconducteurs mis en courant par une fine couche isolante. Schématiquement, nous avons ceci (figure 3.8):

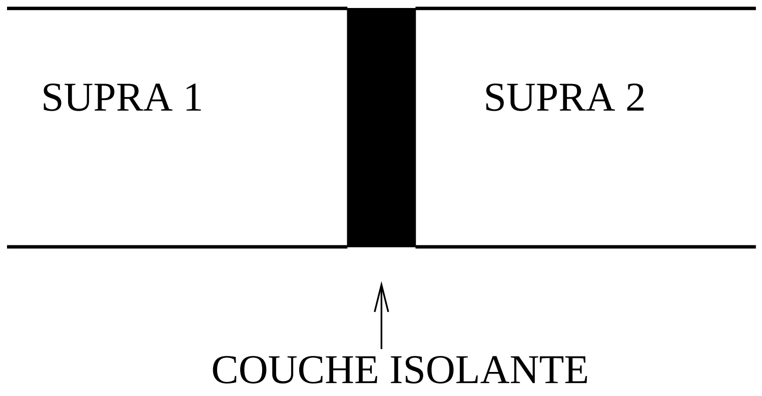

Figure 3.8: Géométrie d'une jonction Josephson

Lorsque la température est supérieure à la température critique des supraconducteurs nous avons deux métaux normaux. Si l'on applique une différence de potentiel électrique entre les deux conducteurs, on observe un courant proportionnel à la différence de potentiel. Ce courant est interprété comme la résultante du passage par effet tunnel quantique des électrons à travers la jonction. Dans ce régime, une théorie due à Landauer permet de relier la conductance G de la jonction à la probabilité de transmission T d'un électron à travers la barrière de potentiel modélisant la couche isolante:

$$G = \frac{I}{V} = \frac{e^2}{\hbar} T \, .$$

Le coefficient de transmission T est compris entre 0 et 1. Dans le régime de l'effet tunnel, $T \ll 1$. Que se passe-t-il lorsque les deux côtés de la jonction sont supraconducteurs?
Deux phénomènes remarquables ont été prédits par B. Josephson en 1962, et observés ensuite:

1) Un courant peut passer à travers la jonction, même lorsque la tension appliquée est nulle. L'intensité maximale de ce courant sans dissipation est appelée courant critique de la jonction. Nous le noterons I_c.

2) Lorsque l'on applique une faible tension V indépendante, on observe un courant *alternatif* d'amplitude I_c et dont la fréquence ν est donnée par la relation de Josephson:

$$\boxed{\nu = 2\frac{eV}{\hbar}}$$

Cette relation permet la détermination la plus précise du rapport $\dfrac{e}{\hbar}$. Par conséquent, l'effet Josephson est maintenant utilisé en métrologie pour la définition du Volt, en fixant la valeur de ν pour une tension appliquée de $1V$.

Ces deux phénomènes se comprennent naturellement dans le cadre du modèle du champ de phase dont il a été question dans les paragraphes précédents. Nous supposons que chaque côté de la jonction est décrit par une phase Φ_1 ou Φ_2 pouvant dépendre du temps, mais homogène de part et d'autre de la jonction. Nous précisons un peu plus loin cette idée d'ordre à longue portée de la variable de phase, liée à la notion de brisure spontanée de symétrie déjà évoquée. En s'inspirant du modèle de l'équation (7), ce système est modélisé par l'Hamiltonien simplifié:

$$\mathcal{H}_J = peV_1\Pi_1 + peV_2\Pi_2 - E_J\cos(\Phi_1 - \Phi_2)\,.$$

Nous avons: $\dot{\Phi}_i = \dfrac{1}{\hbar}\dfrac{\partial \mathcal{H}_J}{\partial \Pi_i}$ et $\dot{\Pi}_i = -\dfrac{1}{\hbar}\dfrac{\partial \mathcal{H}_J}{\partial \Phi_i}$.

$$\begin{cases} \dot{\Phi}_1 &= \dfrac{1}{\hbar}peV_1; & \dot{\Phi}_2 &= \dfrac{pe}{\hbar}V_2\,, \\ \\ \dot{\Pi}_1 &= -\dfrac{E_J}{\hbar}\sin(\Phi_1 - \Phi_2); & \dot{\Pi}_2 &= \dfrac{E_J}{\hbar}\sin(\Phi_1 - \Phi_2)\,. \end{cases}$$

Remarque: comme d'habitude, ces équations ont le statut d'équations d'évolution des valeurs *moyennes* portant sur les opérateurs correspondants. Nous ne mettons pas les $<\ \ >$ pour alléger les notations.

Posons $\Phi \equiv \Phi_1 - \Phi_2$. Le courant I traversant la jonction est donné par $I = \dfrac{d}{dt}(Q_2 - Q_1)$, où Q_i est la charge électrique totale du côté i de la jonction. Mais nous avons $Q_i = ep\Pi_i$. Donc

$$\boxed{I = \frac{pe}{\hbar} E_J \sin(\Phi_1 - \Phi_2) = I_c \sin\Phi} \qquad \left(I_c = \frac{peE_J}{\hbar} \right)$$

Nous obtenons donc la première prédiction de Josephson:

> Un courant passe à travers la jonction séparant deux supraconducteurs en l'absence de tension appliquée, dès qu'il existe une différence de phase Φ à la traversée de la jonction. Ce courant est une fonction 2π-périodique de la différence de phase Φ.

Par ailleurs,

$$\boxed{\frac{d\Phi}{dt} = \frac{pe}{\hbar}(V_1 - V_2) = \frac{pe}{\hbar} V}$$

Ceci correspond à la deuxième prédiction de Josephson:

> En présence d'une tension appliquée V aux bornes de la jonction, la différence de phase Φ aux bornes de la jonction présente une variation temporelle proportionnelle à V.

En combinant les deux relations, nous voyons qu'une tension appliquée indépendante du temps donne naissance à un courant alternatif!

En effet, $\Phi(t) = \Phi_0 + \frac{pe}{\hbar} Vt$ donc $I(t) = I_c \sin\left(\Phi_0 + \frac{pe}{\hbar} Vt\right)$. La fréquence d'oscillation du courant est

$$\boxed{\nu = \frac{peV}{\hbar}}.$$

Ceci donne accès à la valeur de p! Expérimentalement, on trouve sans aucune ambiguïté que $\boxed{p = 2}$.

Josephson était parti de la théorie microscopique de Bardeen, Cooper et Schrieffer, dans laquelle $p = 2$ par construction (formation de "paires de Cooper"). L'effet Josephson permet donc de tester un des aspects fondamentaux de la théorique microscopique de BCS.

Remarque: compte tenu de la forme de l'Hamiltonien de phase écrit sous la forme (7) ou (8), nous pourrions écrire plutôt $\mathcal{H}_J$ sous la forme :

$$\widetilde{\mathcal{H}}_J = \frac{1}{2} a^{'} \Pi_1^2 + \frac{1}{2} a^{'} \Pi_2^2 + peV_1 \Pi_1 + peV_2 \Pi_2 - E_J \cos\left(\Phi_1 - \Phi_2\right) .$$

Les équations du mouvement prendraient l'allure un peu modifiée:

$$\frac{d\Phi}{dt} = \frac{pe}{\hbar}(V_1 - V_2) + \frac{a^{'}}{\hbar}(\Pi_1 - \Pi_2)$$

en désaccord apparent avec la deuxième équation de Josephson!

Il s'avère que dans ce cas, le membre de droite doit être interprété comme $\frac{pe}{\hbar}V$, où V est bien la différence de potentiel électrochimique, mesurée par un voltmètre! En effet, si l'on fait passer une charge δq du côté 2 au côté 1, il faut fournir un travail $W = V\delta q$.

Ce processus correspond à $\delta\Pi_1 = \frac{\delta q}{pe} = -\delta\Pi_2$. Si le transport de charge s'effectue de manière adiabatique, la variation d'énergie totale du système doit être égale à W. Donc,

$$\begin{aligned}
\left(a'\Pi_1 + peV_1\right)\delta\Pi_1 \quad &+ \quad \left(a'\Pi_2 + peV_2\right)\delta\Pi_2 &= V\delta q\,, \\
\left(a'(\Pi_1 - \Pi_2) \quad\right. &+ \quad \left. pe(V_1 - V_2)\right)\frac{\delta q}{pe} &= V\delta q\,.
\end{aligned}$$

Donc, $V_1 - V_2 + \frac{a'}{pe}(\Pi_1 - \Pi_2) = V$.

Ceci appelle une précision sur la signification des deux contributions $\frac{1}{2}a'\Pi_i^2$ et $peV_i\Pi_i$ à l'énergie de charge du système. Ici V_i décrit l'interaction électrostatique entre les charges du supraconducteur du côté i et des charges extérieures imposées (ce que l'on devrait noter $V_{i,\mathrm{ext}}$), ainsi que l'interaction électrostatique éventuelle entre les charges au sein du supraconducteur (ce que nous appellerions $V_{i,\mathrm{int}}$). La partie $\frac{1}{2}a'\Pi_i^2$ décrit d'autres contributions à l'énergie dont l'origine est plus microscopique: par exemple, la façon dont le niveau de Fermi varie avec la densité d'élections, comme nous l'avons vu en discutant l'approche de Thomas-Fermi pour l'écrantage électrostatique dans un métal normal. Un voltmètre est alors sensible à l'énergie d'extraction totale d'une charge à partir de son milieu d'origine.

Pour rendre la discussion un peu plus concrète, il est utile de présenter un modèle phénoménologique qui rend mieux compte du comportement de “vraies” jonctions Josephson. Pour une “vraie” jonction, deux effets importants viennent modifier cette image idéale:

- en présence d'un champ extérieur appliqué, donc d'une différence de potentiel aux bornes de la jonction, on s'attend à un déplacement de charges électriques au voisinage de la jonction. Cet effet est modélisé par une capacité placée en *parallèle* de la jonction;

- une tension appliquée peut entraîner le passage d'un courant dissipatif porté par des électrons excités "hors de l'état supraconducteur". Ces excitations source de dissipation ne sont pas prises en compte par le modèle phénoménologique du champ de phase. Il faut pour cela construire une théorie plus microscopique, comme la théorie BCS. Dans le cadre de cette théorie, ces états excités portent le nom de "*quasiparticules*". Leur nom suggère qu'ils ressemblent aux états de particules du gaz d'électrons libres. Mais les interactions responsables de la condensation dans l'état supraconducteur (ici les interactions électron-phonon) ont pour effet de créer un gap d'énergie entre le fondamental et ces états excités. A température nulle, ce gap noté $\Delta(0)$ est relié à la température critique T_c. Dans le cadre de la théorie BCS (qui repose sur une approximation de champ moyen): $\Delta(0) = 1,764 \;\; k_B T_c$. Notre modèle du champ de phase ne prend donc pas en compte l'existence de ces quasiparticules qui sont excitées thermiquement lorsque $0 < T \leq T_c$. Ces quasiparticules vont être à l'origine d'un courant dissipatif. Ce courant est modélisé par une résistance R placée également en parallèle avec la jonction.

Nous obtenons le schéma équivalent, sur lequel la croix symbolise la jonction Josephson idéale (figure 3.9).

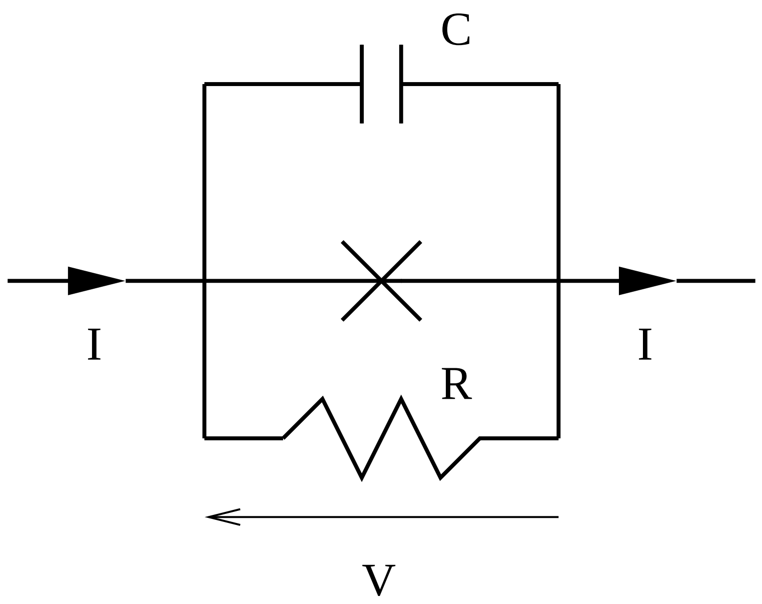

Figure 3.9: Schéma équivalent pour une jonction Josephson "réelle"

Ce système est modélisé par:

$$\begin{cases} I & = I_c \sin\Phi + \dfrac{V}{R} + C\dfrac{dV}{dt} \,, \\ \dfrac{d\Phi}{dt} & = \dfrac{2eV}{\hbar} \qquad \text{(nous prenons le cas réaliste} \qquad p=2) \,. \end{cases}$$

En éliminant V au profit de la phase Φ, nous obtenons:

$$I = I_c \sin\Phi + \frac{\hbar}{2eR}\frac{d\Phi}{dt} + \frac{C\hbar}{2e}\frac{d^2\Phi}{dt^2} \,.$$

Il est commode de se ramener à des quantités sans dimension: posons: $\omega_p = \left(\dfrac{2eI_c}{\hbar C}\right)^{1/2}$.
Ici ω_p est la fréquence caractéristique des petites oscillations libres de ce système en l'absence de courant $I = 0$ et de dissipation $(R \to \infty)$.

La dissipation conduit à un amortissement de ces oscillations avec un temps caractéristique RC. La dissipation est faible si $RC\omega_p \gg 1$, ce qui conduit à introduire la quantité $Q = \omega_p RC$ appelée comme d'habitude coefficient de qualité. Enfin, le temps dimensionné t est remplacé par une variable non dimensionnée $\tau = \omega_p t$.

Dans ces variables, nous avons:

$$\boxed{\frac{d^2\Phi}{d\tau^2} + Q^{-1}\frac{d\Phi}{d\tau} + \sin\Phi = \frac{I}{I_c}}$$

On reconnaît l'équation d'un pendule amorti et entraîné par une force extérieure constante (le terme en I/I_c). Cette équation se comprend aussi sous la forme d'un bilan d'énergie:

$$\frac{d}{d\tau}\Bigg\{\underbrace{\frac{1}{2}\left(\frac{d\Phi}{d\tau}\right)^2}_{\substack{\uparrow \\ \text{énergie} \\ \text{cinétique}}} \underbrace{- \cos\Phi - \frac{I}{I_c}\Phi}_{\substack{\uparrow \\ \text{énergie} \\ \text{potentielle}}}\Bigg\} = \underbrace{-Q^{-1}\left(\frac{d\Phi}{d\tau}\right)^2}_{\substack{\uparrow \\ \text{dissipation}}}$$

Le potentiel $U(\Phi) = -\cos\Phi - \dfrac{I}{I_c}\Phi$ a l'allure illustrée sur les figures 3.10 et 3.11.

Ces dessins montrent que si $|I| < I_c$, il existe des solutions indépendantes du temps, donc telles que $V(t) = 0$. La dissipation est donc nulle. Par ailleurs, il existe en général des solutions stationnaires du type $\Phi(\tau + \tau_0) = \Phi(\tau) + 2\pi$. Pour de telles solutions, la tension est une fonction périodique du temps, avec une valeur moyenne non-nulle. En effet, la deuxième relation de Josephson donne:

$$V = \frac{\hbar\omega_p}{2e}\frac{d\Phi}{d\tau} \qquad \text{donc} \qquad \langle V \rangle = \frac{\hbar\omega_p}{2e}\frac{1}{\tau_0}\int_{\tau}^{\tau+\tau_0} d\tau \frac{d\Phi}{d\tau} = \frac{2\pi}{\tau_0}\frac{\hbar\omega_p}{2e} \,.$$

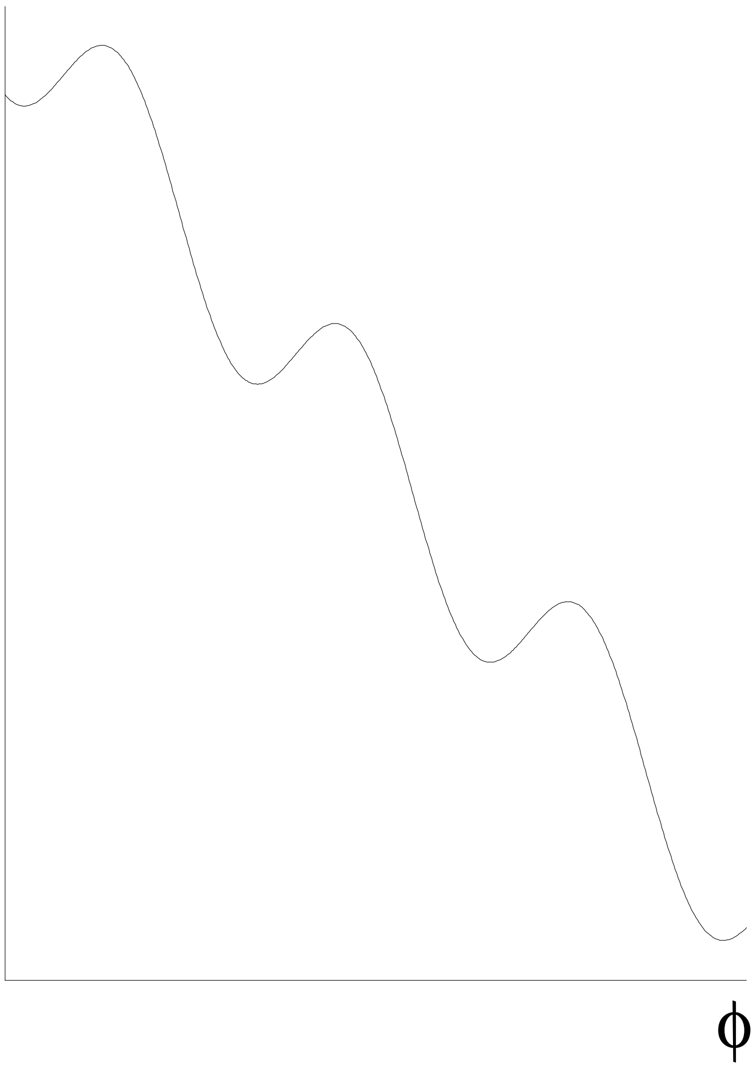

Figure 3.10: Potentiel effectif pour $I < I_c$

- Dans le cas *sur-amorti* $(Q \ll 1)$, on peut montrer que cette solution dépendante du temps mais stationnaire n'existe que si $|I| > I_c$. Dans ce cas, la caractéristique $\langle V \rangle$ en fonction de I de la jonction est donnée par la courbe de la figure 3.12. Dans la limite $Q \to 0$, on peut négliger le terme en $\dfrac{d^2\Phi}{d\tau^2}$, et l'équation différentielle s'intègre facilement. On peut alors montrer que $\langle V \rangle = R\,(I^2 - I_c^2)^{1/2}$.

- Dans le cas *sous-amorti* $(Q > 1)$, on peut montrer qu'il existe aussi une solution dépendante du temps et stationnaire lorsque $I_r \le |I| \le I_c$. Le courant I_r est appelé courant de repiégeage. Cette solution est obtenue lorsque la différence d'énergie potentielle $U\,(\Phi(\tau + \tau_0)) - U\,(\Phi(\tau))$ est égale à la puissance dissipée

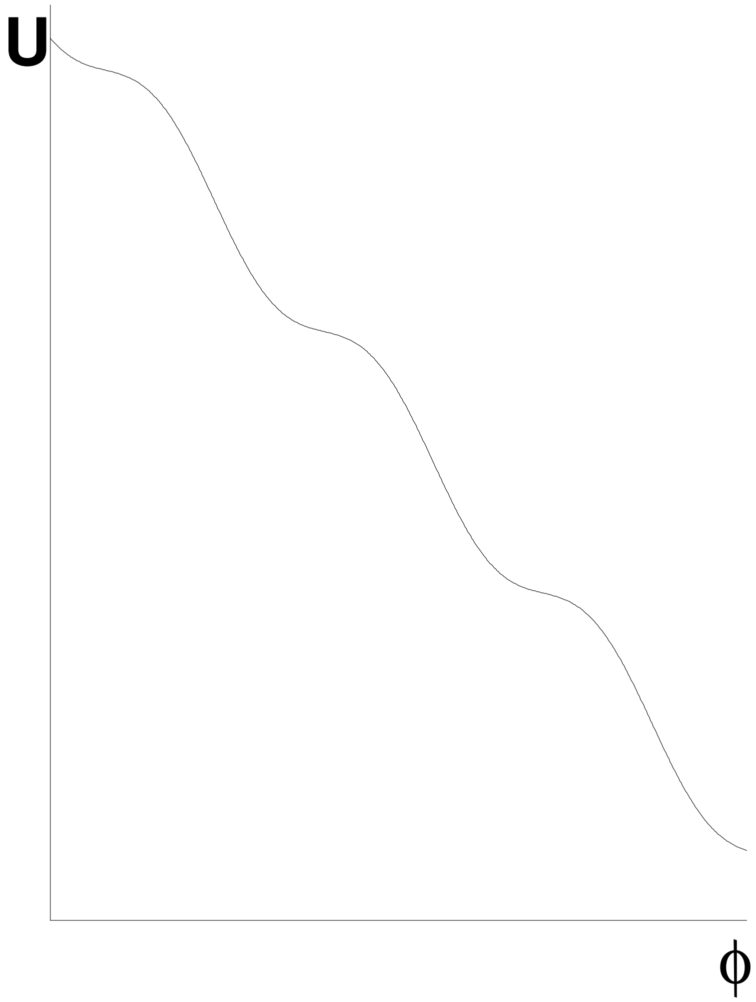

Figure 3.11: Potentiel effectif pour $I > I_c$

dans la résistance.

$$U\left(\Phi(\tau+\tau_0)\right) - U\left(\Phi(\tau)\right) = U\left(\Phi(\tau)+2\pi\right) - U\left(\Phi(\tau)\right) = -2\pi\frac{I}{I_c}\,.$$

La puissance dissipée est $-Q^{-1}\int\limits_{\tau}^{\tau+\tau_0} d\tau'\left(\frac{d\Phi}{d\tau'}\right)^2$. On doit donc avoir

$$\int\limits_{\tau}^{\tau+\tau_0} d\tau'\left(\frac{d\Phi}{d\tau'}\right)^2 = 2\pi Q\,\frac{I}{I_c}\,.$$

La résolution de cette équation demande que l'on sache résoudre l'équation différentielle correspondante.

Nous ne discuterons pas ceci en détail ici. Le lecteur est renvoyé au chapitre 6 du livre de M. Tinkham *Introduction to Superconductivity* déjà cité. De manière générale, plus la dissipation est faible, plus cette solution peut subsister pour de faibles courants. On

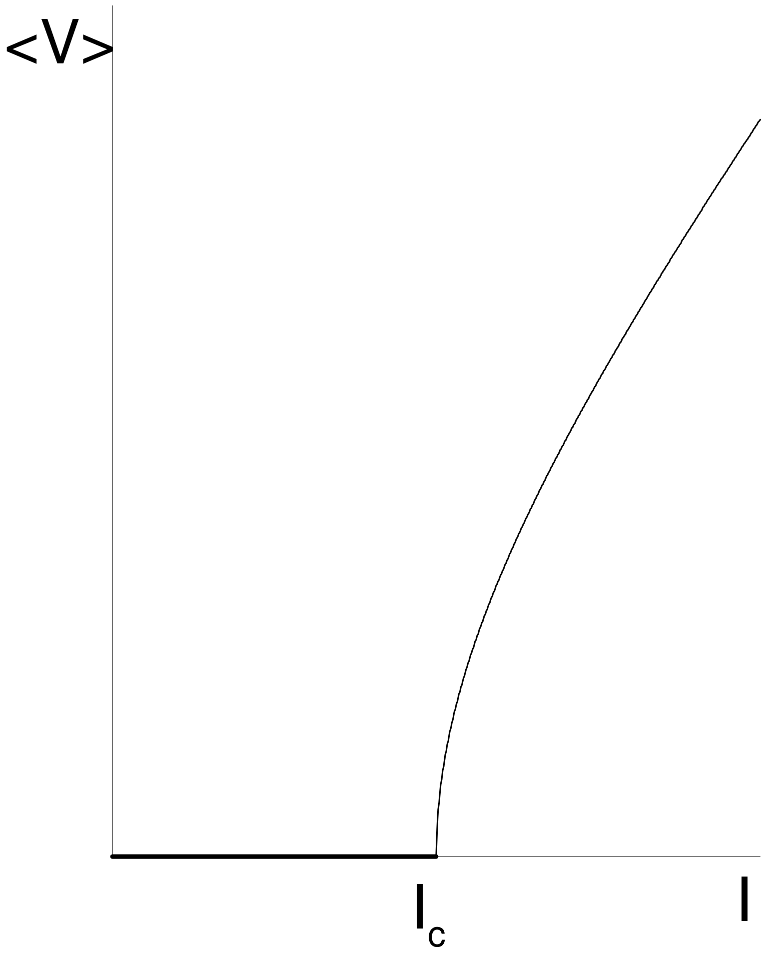

Figure 3.12: Caractéristique courant-tension dans le cas suramorti

peut montrer que, dans la limite $Q \gg 1$, $I_r \sim I_c/Q$. La caractéristique $\langle V \rangle$ fonction de I est donc multivaluée, ce qui correspond à un comportement hystérétique d'une telle jonction (voir la figure 3.13).

Donc, de manière un peu contre-intuitive, les applications pratiques des jonctions Josephson font souvent appel au premier régime, le régime sur-amorti, de façon à éviter les difficultés liées à cet hystérésis du régime sous-amorti.

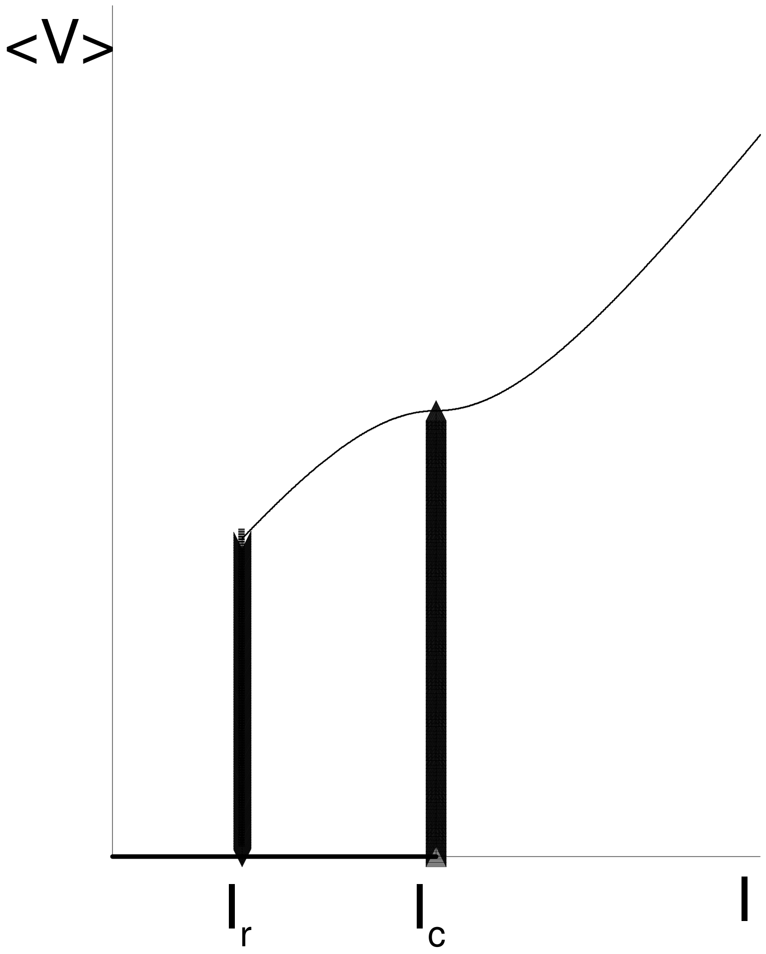

Figure 3.13: Caractéristique courant-tension dans le cas suramorti

3.2.2 Les SQUID d-c

Note: SQUID =Superconducing Quantum Interference Device.

Une des applications des jonctions Josephson réside dans la détection de très faibles champs magnétiques. La géométrie est la suivante (figure 3.14):

On réalise un anneau supraconducteur coupé par deux jonctions Josephson 1 et 2. Soit Φ le flux magnétique à travers l'anneau. Montrons que ce flux affecte d'une manière très sensible la caractéristique $\langle V \rangle$ fonction de I de l'ensemble, ce qui permet la détection de très faibles flux.

Comme la notation Φ est utilisée pour le flux magnétique, la phase supraconductrice dans le matériau sera notée Θ ici, pour éviter toute confusion!

Reprenons notre modèle du champ de phase, que nous continuons à traiter comme un modèle classique. A l'équilibre, il s'agit de minimiser l'énergie:

$$E = \int d^3r\, \frac{1}{2} \frac{n_s}{m^*} \left(\hbar \vec{\nabla} \Theta + pe\vec{A} \right)^2 .$$

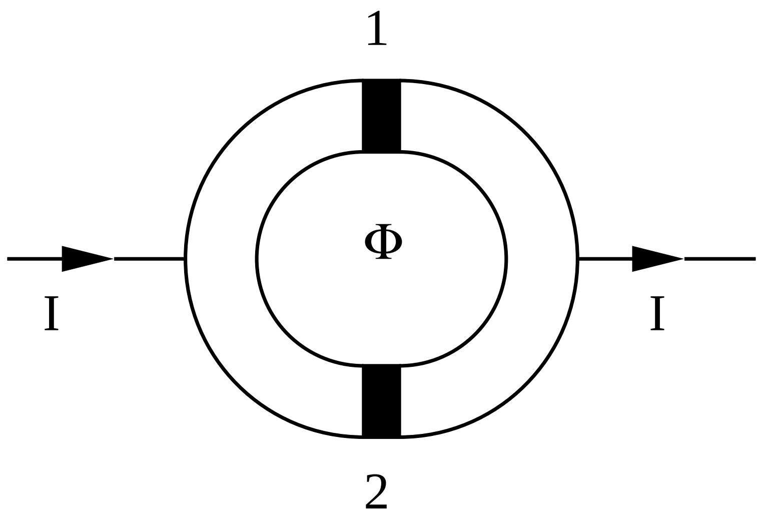

Figure 3.14: Géométrie du SQUID DC

(on oublie pour l'instant les deux jonctions, cette contribution porte donc sur le volume supraconducteur).

Oublions aussi pour l'instant l'écrantage magnétique, et supposons que $\vec{A} = \vec{A}_{\text{ext}}$. Si l'anneau est étroit, on peut supposer le courant $\vec{J} = -pe\frac{n_s}{m^*}\left(\hbar\vec{\nabla}\Theta + pe\vec{A}\right)$ radial autour de l'anneau et constant sur une section de l'anneau. La conservation du courant implique que son intensité est constante autour de l'anneau. La propriété de périodicité du champ de phase supraconductrice Θ impose que lorsque l'on fait un tour complet de l'anneau, cette phase varie d'un nombre entier de fois 2π. Appelons m ce nombre entier. Nous avons: $|\vec{J}|$ proportionnelle à

$$\oint_{\text{anneau}} \left(\vec{\nabla}\Theta + \frac{pe}{\hbar}\vec{A}\right) \cdot d\vec{r} = 2\pi m + \frac{pe}{\hbar}\Phi \, .$$

Posons $\Phi_0^* = \frac{h}{pe}$ (rappelons que nous avons déjà introduit $\Phi_0 = \frac{h}{e}$ dans la discussion du diamagnétisme d'un gaz d'électrons libres). Nous avons $|\vec{J}\,| \propto \left(m + \frac{\Phi}{\Phi_0^*}\right)$. Par conséquent l'énergie correspondante $E_m(\Phi)$ est proportionnelle à

$$E_m(\Phi) \propto \left(m + \frac{\Phi}{\Phi_0^*}\right)^2 \, .$$

On obtient plusieurs configurations qui sont des minima locaux de l'énergie E, indexées par un entier m, qui encore une fois compte le nombre de tours effectué par $\exp(i\Theta)$ lorsque l'on tourne autour de l'anneau. Ceci est représenté sur la figure 3.15.

On voit que le minimum de l'énergie est obtenu en prenant une valeur de m qui est une fonction en escalier de Φ/Φ_0^*, comme l'indique la figure 3.16.

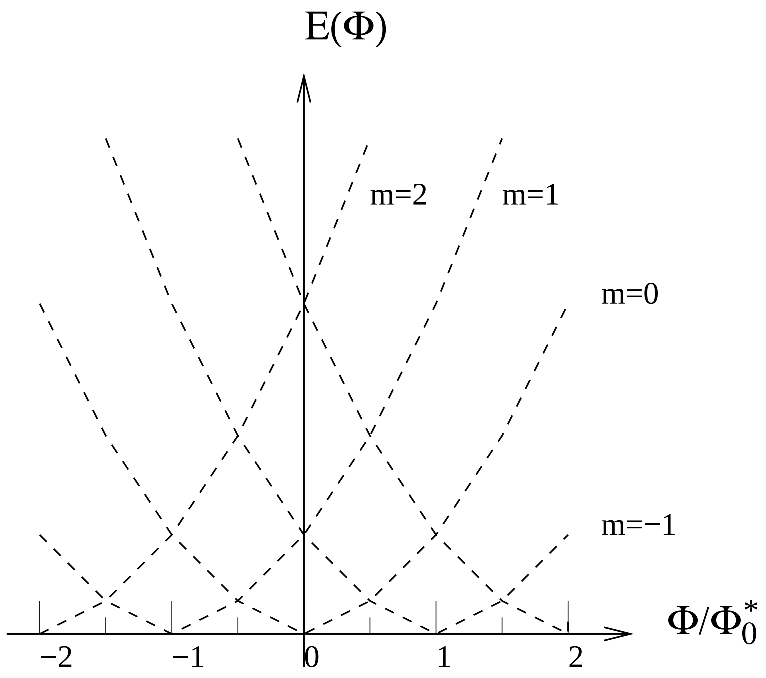

Figure 3.15: Energie en fonction du flux réduit

Par contre cette énergie de l'état fondamental est une fonction périodique en Φ, de période Φ_0^*. Ce résultat est très général: pour un supraconducteur en forme de l'anneau (ou de long tube) traversé par un flux Φ, les propriétés thermodynamiques sont une fonction périodique en Φ, de période Φ_0^*. Ceci nous donne par conséquent une nouvelle détermination de p, puisque $\Phi_0^* = \Phi_0/p$.

Ce phénomène de "quantification du flux magnétique" a été confirmé expérimentalement, notamment à travers l'expérience de Little et Parks (1962). Cette expérience consistait à mesurer l'effet d'un flux magnétique sur la valeur de la température de transition supraconductrice. Le raisonnement précédant montre que l'énergie de l'état supraconducteur est minimale lorsque $\Phi = m\Phi_0^*$. On s'attend donc à ce que $T_c(\Phi)$ soit maximale pour $\Phi = m\Phi_0^*$. Un calcul utilisant le modèle de Ginzburg-Landau thermodynamique montre que la variation de température critique $\Delta T_c(\Phi)$ est proportionnelle à $-E_m(\Phi)$ où $E_m(\Phi) \propto \left(m + \dfrac{\Phi}{\Phi_0}\right)^2$. On obtient donc une courbe dont l'allure est celle de la figure 3.17.

Dans l'expérience originale, des films minces supraconducteurs étaient déposés autour de filaments organiques d'un diamètre de l'ordre de $1\ \mu m$. L'amplitude des variations de T_c est de l'ordre de $1\ mK$, ce qui est observable! Pour un anneau de cette taille, la

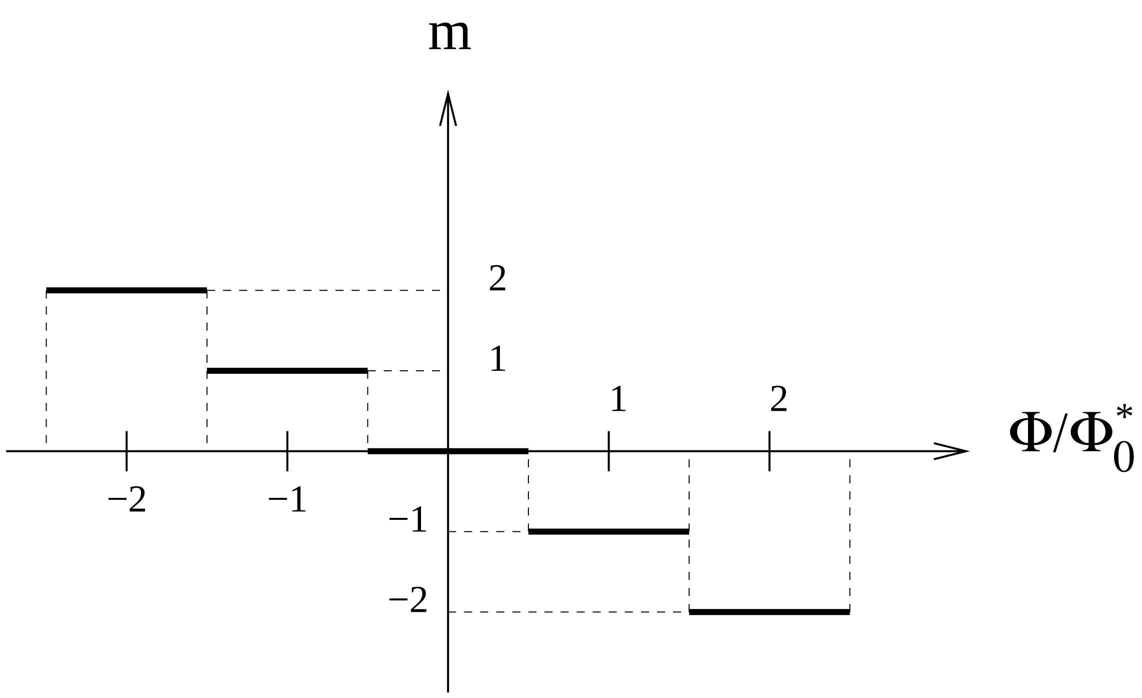

Figure 3.16: Choix de m minimisant l'énergie en fonction du flux réduit

périodicité dans le champ magnétique est donnée par $\Phi_0^*/\pi R^2 \simeq 15G$ (1 Gauss= 10^{-4} Tesla). R est bien sûr le rayon du tube cylindrique. On retrouve par cette expérience $\boldsymbol{p=2}$!

Cette sensibilité au flux magnétique est exploitée dans le fonctionnement du SQUID d-c. Reprenons la géométrie de l'anneau avec les notations de la figure 3.18.
Dans la partie supraconductrice, l'énergie est minimisée en supposant que $\hbar\vec{\nabla}\Theta+pe\vec{A}=0$.
Donc $\vec{\nabla}\Theta=-\dfrac{2\pi}{\Phi_0^*}\vec{A}$. Il est possible d'imposer ceci car chaque morceau supraconducteur est simplement connexe, c'est à dire ne contient pas de "trou". On peut toujours imposer cette propriété localement, mais pas toujours globalement.
Par conséquent: $\Theta_{1B}-\Theta_{2B}+\Theta_{2A}-\Theta_{1A}=-2\pi\Phi/\Phi_0^*$,
d'où: $(\Theta_{2A}-\Theta_{2B})-(\Theta_{1A}-\Theta_{1B})=-2\pi\dfrac{\Phi}{\Phi_0^*}$. Posons $\Theta_i=\Theta_{iA}-\Theta_{iB}$, $\quad i\in\{1,2\}$. Ici Θ_i est donc la différence de phase à la traversée de la jonction i. Le point important est que Θ_1 et Θ_2 ne sont pas indépendantes, mais reliées par la relation:

$$\boxed{\Theta_1-\Theta_2=2\pi\frac{\Phi}{\Phi_0^*}}$$

Ceci traduit ce que l'on peut appeler la cohérence de phase du supraconducteur: une variation de Θ_{1A} se répercute sur Θ_{2A}. L'ordre à longue portée de la phase permet donc de "transporter" de l'information sur de longues distances: une analogie de cela

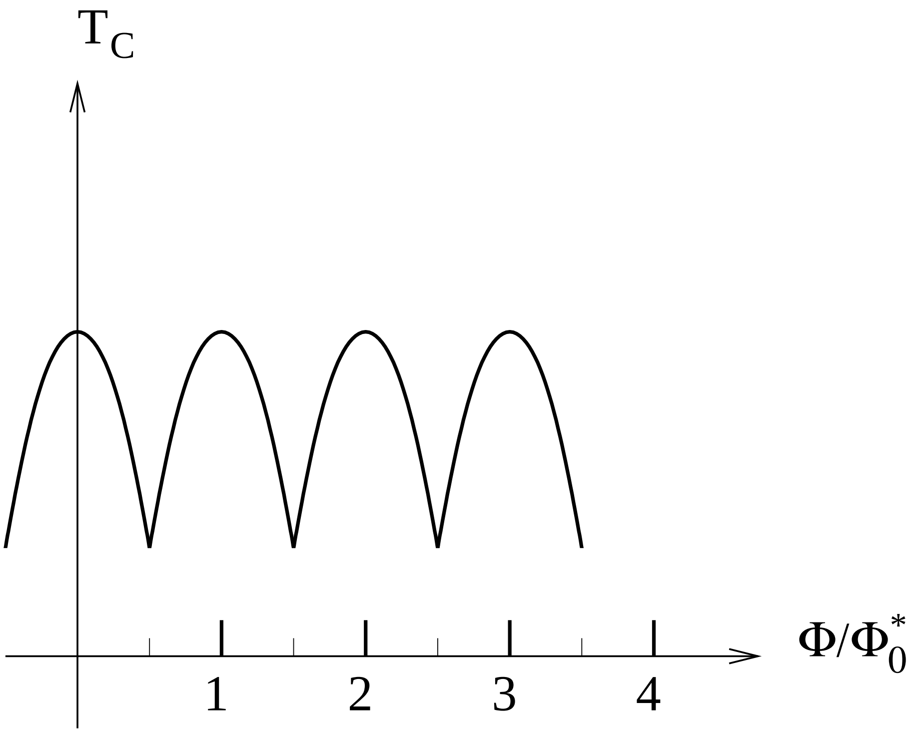

Figure 3.17: Variation de la température critique en fonction du flux

est donnée par les configurations spatiales d'un solide: considérons une règle solide, d'extrémités x_1 et x_2. (On se place en dimension 1 pour simplifier, voir la figure 3.19).

Le caractère solide du système se manifeste par le fait que sa longueur est conservée lorsque l'on déplace x_1 en $x_1^{'}$:

$$x_2 - x_1 = x_2' - x_1'$$

Appelons $\Theta \equiv \dfrac{\Theta_1 + \Theta_2}{2}$ la différence de phase moyenne entre les supraconducteurs A et B. L'énergie Josephson s'écrit (en supposant les deux jonctions identiques):

$$\begin{aligned} E &= -E_J \left\{ \cos\left(\Theta + \pi \frac{\Phi}{\Phi_0^*}\right) + \cos\left(\Theta - \pi \frac{\Phi}{\Phi_0^*}\right) \right\}, \\ E &= -2E_J \cos\left(\pi \frac{\Phi}{\Phi_0^*}\right) \cos\Theta \,. \end{aligned}$$

d'où un courant Josephson:

$$I = 2I_c \cos\left(\pi \frac{\Phi}{\Phi_0^*}\right) \sin\Theta \,,$$

on a donc un courant critique du SQUID:

$$\boxed{I_{c,SQUID} = 2I_c |\cos\left(\pi \frac{\Phi}{\Phi_0^*}\right)|}$$

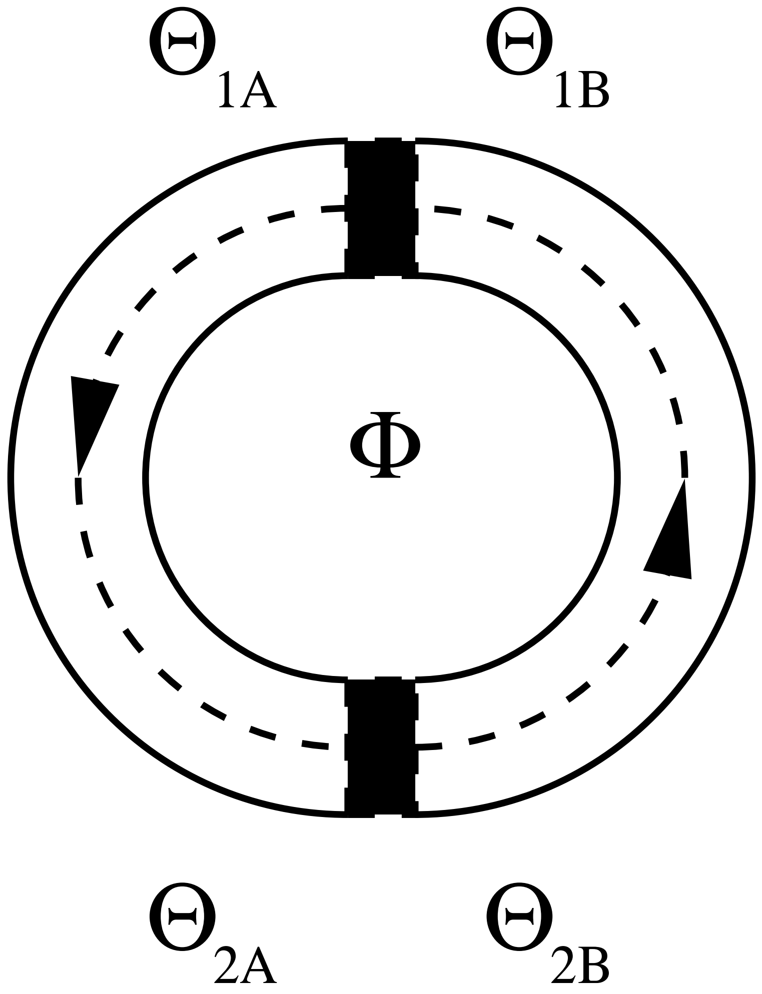

Figure 3.18: Géométrie du SQUID DC

Cet effet est particulièrement spectaculaire, puisque le courant critique du SQUID est une fonction périodique de Φ, de période Φ_0^*, qui s'annule lorsque $\Phi = \Phi_0^* \left(m + \frac{1}{2}\right)$, m entier.

En pratique, on utilise ce SQUID avec des jonctions suramorties pour éviter l'hystéresis. La mesure de la caractéristique $\langle V \rangle$ fonction de I permet d'obtenir $I_{c,SQUID}$ et donc de remonter au flux Φ. Dans une description un peu plus réaliste, il est nécessaire de tenir compte de la correction au flux extérieur dûe au flux induit par les courants supraconducteurs circulant dans l'anneau (figure 3.20).

Posons $\Phi = \Phi_{\text{ext}} + \Phi_{\text{ind}}$, où Φ est le flux total vu par une paire de Cooper effectuant un tour complet autour de l'anneau. Le courant supraconducteur I_s circulant autour de l'anneau est: $I_s = \frac{1}{2}(I_2 - I_1)$. Par ailleurs, en utilisant la conservation du courant:

$$I_1 \quad = \quad I/2 - I_s$$

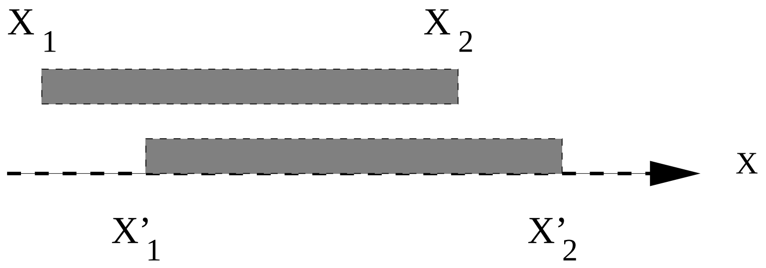

Figure 3.19: Le mouvement d'une règle rigide

$$I_2 \;=\; I/2 + I_s$$

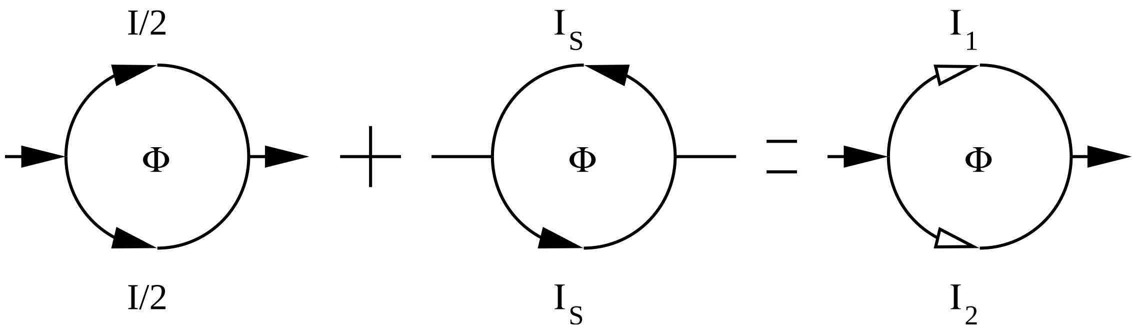

Figure 3.20: Courants circulant dans le SQUID DC

La première relation de Josephson nous donne: $I_s = \frac{I_c}{2}\left(\sin\Theta_2 - \sin\Theta_1\right)$. Par ailleurs, si L désigne le coefficient d'auto-inductance de la boucle, nous avons:

$$\Phi_{\text{ind}} = L I_s \,.$$

Nous gardons la contrainte imposée par la minimisation de l'énergie dans les 2 parties supraconductrices $\Theta_1 - \Theta_2 = 2\pi \frac{\Phi}{\Phi_0^*}$. En appelant comme plus haut $\Theta = \frac{\Theta_1 + \Theta_2}{2}$, nous obtenons:

$$I_s = -I_c \cos\Theta \sin\left(\pi \frac{\Phi}{\Phi_0^*}\right) .$$

D'où:

$$\Phi_{\text{ext}} = \Phi + L I_c \cos\Theta \sin\left(\pi \frac{\Phi}{\Phi_0^*}\right) .$$

A Φ_{ext} et Θ données, cette équation détermine implicitement $\Phi(\Phi_{\text{ext}}, \Theta)$. La connaissance de $\Phi(\Phi_{\text{ext}}, \Theta)$ donne alors le courant total:

$$I = 2 I_c \cos\left(\pi \frac{\Phi(\Phi_{\text{ext}}, \Theta)}{\Phi_0^*}\right) \sin\Theta \,.$$

Pour un bon fonctionnement du SQUID, il faut éviter que Φ soit une fonction multi-valuée de Φ_{ext} et Θ. Ceci est assuré pour toute valeur de Θ si la fonction $\Phi \to \Phi_{\text{ext}}$ est strictement croissante. Cette condition implique que $\frac{\pi L I_c}{\Phi_0^*} \leq 1$. .
On peut établir d'autres conditions sur les paramètres I_c, R et C pour que le SQUID fonctionne bien:

- condition de sur-amortissement: $Q \lesssim 1$ donc $2\pi I_c R^2 C / \Phi_0^* \lesssim 1$;
- faiblesse des fluctuations thermiques de la phase: $k_B T \lesssim E_J = \frac{\hbar I_c}{pe}$;
- faiblesse des fluctuations thermiques du flux: $k_B T \lesssim \frac{\Phi_0^{*2}}{L}$.

Le choix des paramètres se fait en tenant compte de ces quatre contraintes, et en cherchant à maximiser la sensibilité du dispositif donnée par $|\left(\frac{\partial V}{\partial \Phi_{\text{ext}}}\right)_I|$. Pour plus de détails, nous renvoyons le lecteur au livre de M. Tinkham déjà cité, pages 227-229.

3.2.3 Notion de brisure spontanée de symétrie

Dans notre traitement de l'effet Josephson, nous avons supposé la phase Φ homogène dans chaque supraconducteur. L'idée physique qui sous-tend cette façon de procéder est que la supraconductivité résulte d'une mise en ordre du système des électrons de conduction d'un métal, lorsque l'on abaisse la température.

Cette mise en ordre est souvent accompagnée, lors d'une transition de phase continue (comme c'est le cas pour la transition supraconductrice en l'absence de champ extérieur) d'une brisure spontanée de symétrie.
Prenons l'exemple du modèle de Schrödinger non-linéaire, où de Ginzburg-Landau dynamique déjà étudié, dans ses versions relativiste et invariante sous le groupe de Galilée. L'énergie potentielle de ce modèle s'écrit $V(\Psi^*\Psi)$. Cette énergie est invariante dans la transformation: $\Psi \to \Psi e^{i\alpha}$ soit $\Phi \to \Phi + \alpha$, où α est constante spatialement. L'énergie provenant des termes en gradients est également invariante dans cette transformation. Ceci est vrai aussi bien dans la version relativiste que la version non-relativiste.

Dans le cas le plus simple, le potentiel $V(\Psi^*\Psi)$ a un minimum unique, pour $\Psi^*\Psi = 0$. Dans ce cas, l'état fondamental classique est donné par $\Psi(r,t) = 0$. En conséquence, il est clairement invariant pour toutes les transformations $\Psi \to \Psi e^{i\alpha}$. Un tel état décrit assez naturellement une phase désordonnée. En effet, rappelons que si V est minimum pour $|\Psi| = u_0$, le courant $\vec{J}$ est proportionnel à $u_0^2\left(\vec{\nabla}\Phi - \vec{A}\right)$, dans la limite classique.

Remarque: ce que l'on appelle limite classique, pour ce genre de système est obtenu en supposant que Φ et Π peuvent être tous deux déterminés avec une précision infinie, donc que le principe d'incertitude ne joue pas de rôle essentiel. Ceci revient donc à poser que $[\Phi(r), \Pi(r')] = 0$ au lieu de $i\delta(r - r')$. De manière équivalente, ceci revient à supposer que les champs $\Psi(r)$ et $\Psi^*(r')$ commutent toujours.

Par contre, lorsque $u_0 \neq 0$, les fondamentaux classiques sont donnés par:

$$\Psi(r,t) = u_0 e^{i\Phi}$$

où Φ est une constante arbitraire. On parle de brisure spontanée de symétrie car chaque fondamental n'est pas invariant dans une transformation $\Psi \to \Psi e^{i\alpha}$. L'action d'une telle opération de symétrie sur un fondamental classique donne un fondamental différent. De manière schématique, nous avons donc les deux cas de figure au niveau classique (voir figure 3.21):

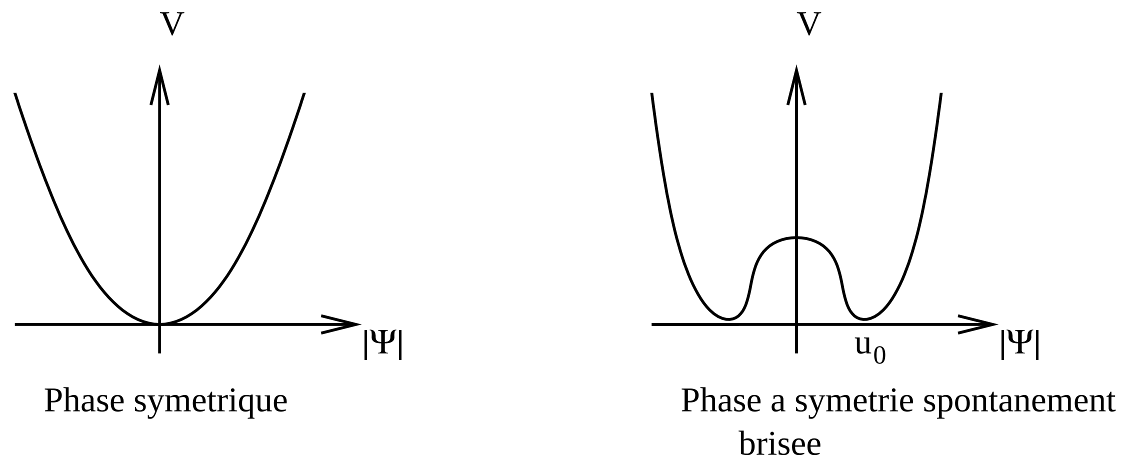

Figure 3.21: Potentiel en fonction du module du paramètre d'ordre supra

Dans le cas où le modèle classique présente une brisure spontanée de symétrie, nous pouvons nous poser deux questions:

1) Quelle est la signification d'une telle dégénérescence des fondamentaux classiques sur la version quantique du modèle?

2) Quels sont les effets des fluctuations quantiques et thermiques?

Qualitativement, les fluctuations, qu'elles soient d'origine quantique ou thermique ont tendance à limiter la précision avec laquelle on peut déterminer la phase Φ d'un état macroscopique. Lorsque la fluctuation typique de la phase $\left(\langle\Phi^2(r)\rangle - \langle\Phi(r)\rangle^2\right)^{1/2}$ devient comparable à 2π, le système aura tendance à perdre les manifestations de la brisure spontanée de symétrie. Avant d'analyser de manière plus quantitative ces fluctuations, abordons la première question.

En ce qui concerne la première question, deux observations sont essentielles.

(i) Posons $\Phi \equiv \frac{1}{\Omega}\int d^3r\Phi(r)$, où Ω est le volume total du système et $N \equiv \int d^3r\Psi^*(r)\Psi(r)$ est l'opérateur donnant le nombre total de bosons. La relation locale $[\Psi^*(r)\Psi(r); \Phi(r)] = i\delta(r-r^{'})$ entraîne que:

$[N,\Phi] = i$ soit encore $[N, e^{i\Phi}] = -e^{i\Phi}$.

(ii) La variable N commute avec l'Hamiltonien H, où

$$H = \int d^3r \left\{\frac{\hbar^2}{2m}\vec{\nabla}\Psi^*(r)\cdot\vec{\nabla}\Psi(r) + V\left(\Psi^*(r)\Psi(r)\right)\right\}.$$

Donc, on s'attend de façon générale à ce que le nombre total de bosons N soit un bon nombre quantique. Par contre, à cause de la conjugaison entre Φ et N, Φ est alors mal définie si N est diagonalisé. Comment réconcilier cela avec l'idée que Φ est la bonne variable pour paramétriser un état fondamental de basse énergie?

Ce point a été particulièrement bien discuté par P. W. Anderson, tout d'abord dans le contexte des matériaux dits antiferromagnétiques, dans un article important publié en 1952 (Physical Review **86**, p. 694). L'idée a ensuite été transposée dans le contexte des superfluides et supraconducteurs au début des années 1960, à l'époque des travaux de B. Josephson. Un exposé très clair est donné par P. W. Anderson dans son livre *"Basic notions of condensed matter physics"*, collection *"Frontiers in Physics"*, volume 55, (1983), pages 229 à 248.

Appelons $|N\rangle$ l'état fondamental normalisé à N particules. Ici, le mot de "particules" fait référence aux états liés à p électrons dont il a été question en section 3.1.3.

$$[N, e^{i\Phi}] = -e^{i\Phi} \quad \text{suggère que} \quad e^{i\Phi}|n\rangle = |n-1\rangle$$

Soit $|\varphi\rangle$ tel que $\Phi|\varphi\rangle = \varphi|\varphi\rangle$. Donc $e^{i\Phi}|\varphi\rangle = e^{i\varphi}|\varphi\rangle$. Développons $|\varphi\rangle$ sur la base des états $|n\rangle$.

$$\begin{aligned} |\varphi\rangle &= \sum_n a_n(\varphi)|n\rangle \,, \\ e^{i\Phi}|\varphi\rangle &= e^{i\varphi}|\varphi\rangle = \sum_n a_n(\varphi)e^{i\varphi}|n\rangle \,, \\ \text{et} \qquad e^{i\Phi}|\varphi\rangle &= \sum_n a_n(\varphi)|n-1\rangle = \sum_n a_{n+1}(\varphi)|n\rangle \,. \end{aligned}$$

Donc: $a_{n+1}(\varphi) = e^{i\varphi}a_n(\varphi)$. A un facteur constant près $a_n(\varphi) = e^{in\varphi}$

Donc: $|\varphi\rangle = \sum_n e^{in\varphi}|n\rangle$ et inversement:

$$|n\rangle = \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi e^{-in\varphi}|\varphi\rangle \,.$$

Donc, comme $N|n\rangle = n|n\rangle$, $\qquad N \equiv i\dfrac{\partial}{\partial\varphi}$. Un état de phase bien définie est donc une superposition cohérente d'états avec un nombre de particules variable!

La brisure spontanée de symétrie est possible si les états propres $|n\rangle$ de H deviennent quasiment dégénérés à la limite thermodynamique $\Omega \to \infty$. Si c'est le cas, les états $|\varphi\rangle$ deviennent eux aussi des états propres dégénérés.

En pratique, la densité de particules moyenne $\dfrac{N}{\Omega}$ est fixée par des considérations électrostatiques. Mais comme N est très grand, de l'ordre de 10^{23}, il suffit d'une fluctuation relative ΔN très faible pour permettre de définir la phase φ avec une très bonne précision. Par exemple, la fonction d'onde microscopique construite par BCS donne un ΔN typique de l'ordre de 10^9.

Considérons un tel paquet d'ondes: $|\tilde{\varphi}\rangle = \sum_{n=N-\Delta N}^{N+\Delta N} e^{in\varphi}|n\rangle$.

$$\begin{aligned} |\tilde{\varphi}\rangle &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi' \sum_{n=N-\Delta N}^{N+\Delta N} e^{in(\varphi-\varphi')}|\varphi'\rangle \,, \\ |\tilde{\varphi}\rangle &= \frac{1}{2\pi}\int_{-\pi}^{\pi} d\varphi' e^{iN(\varphi-\varphi')} \frac{\sin[(\Delta N + \frac{1}{2})(\varphi-\varphi')]}{\sin[\frac{1}{2}(\varphi-\varphi')]}|\varphi'\rangle \,. \end{aligned}$$

Ici $|\tilde{\varphi}\rangle$ est donc un paquet d'ondes centré autour de $|\varphi\rangle$ avec une largeur de l'ordre de $1/\Delta N$, en accord avec le principe d'incertitude.

Venons-en maintenant à la question des fluctuations.

De manière générale, il convient à ce stade de distinguer entre les superfluides chargés, comme les supraconducteurs, et les superfluides neutres comme He_4 (superfluidité de bosons) ou He_3 (superfluidité de fermions). Dans le cadre des systèmes chargés, nous avons vu que les fluctuations longitudinales acquièrent un gap à la fréquence $\omega_0 = pe\left(\frac{n_s}{m^*\varepsilon_0}\right)^{1/2}$. Dans un métal supraconducteur, cette fréquence du mode plasmon varie peu lorsque l'on passe de l'état normal à l'état supraconducteur.

L'énergie $\hbar\omega_0$ est *très élevée*, de l'ordre de l'énergie de Rydberg, donc typiquement une dizaine d'eV. En effet, $(\hbar\omega_0)^2$ est de l'ordre de $\frac{\hbar^2 e^2}{m\varepsilon_0 a_0^3}$, où a_0 est le rayon de Bohr. Mais a_0 est précisément déterminé par un argument d'équilibre entre énergie cinétique et énergie potentielle:

$$E_R \sim \frac{e^2}{\varepsilon_0 a_0} \sim \frac{\hbar^2}{m a_0^2}$$

(dans ces formules, nous ne cherchons pas à donner les coefficients numériques)

Donc, $E_R^2 \sim \frac{\hbar^2 e^2}{m\varepsilon_0 a_0^3}$.

Or, le gap supraconducteur est de l'ordre de $k_B T_c$, soit de l'ordre de 10^{-3} eV pour T_c autour de 10 K.

Donc, typiquement $\frac{\hbar\omega_0}{\Delta} \sim 10^4$.

Ce rapport gigantesque fait qu'en toute rigueur les modes longitudinaux de type plasmon pour un métal supraconducteur devraient sortir du cadre de validité du modèle phénoménologique du champ de phase. Il faudrait en principe revenir à une description plus microscopique de l'ensemble des électrons de conduction qui participent à l'oscillation de type plasmon. Ce genre d'étude a notamment été menée par P. W. Anderson[12] qui a généralisé le traitement des modes plasmons dans l'approximation RPA (esquissé en section 2.1.1) au cas d'un supraconducteur décrit par une théorie de champ moyen de type BCS. Ce traitement confirme l'existence des modes de plasma dans un supraconducteur chargé, avec un gap comparable à celui du métal. La prédiction du modèle du champ de phase est donc qualitativement correcte.

Dans un métal supraconducteur, les seules excitations de basse énergie correspondent donc aux modes uniformes (à $q = 0$) du champ de phase Φ. Ces états sont quasiment dégénérés à la limite $\Omega \to \infty$, comme nous venons de le voir. Ce sont eux qui engendrent la dynamique très particulière de l'effet Josephson, lorsque deux supraconducteurs macroscopiques sont couplés entre eux par une jonction tunnel.

La situation est différente pour un réseau de jonctions Josephson, où chaque îlot est

[12] P. W. Anderson, Physical Review, **112**, 1900, (1958)

décrit par une variable de Φ (correspondant au mode uniforme sur l'îlot en question). Dans ce cas, on peut trouver des modes collectifs longitudinaux dont l'énergie d'excitation à q assez petit est inférieure à Δ. Le modèle du champ de phase est donc légitime si on assigne un degré de liberté de phase à chaque îlot supraconducteur. On pourra consulter à ce sujet l'article de T.P. Orlando, J.E. Mooij, H.S.J van der Zant *Phenomenological model of vortex dynamics in arrays of Josephson junctions*, Phys Rev **B 43** , 10 218 (1991).

Une autre situation où le modèle du champ de phase, considéré comme système à grand nombre de degrés de liberté garde bien un statut de modèle effectif à basse énergie est celui des superfluides constitués de particules neutres (bosons ou fermions). Dans ce cas, il n'y a pas d'interaction Coulombienne à longue portée, si bien que les fluctuations longitudinales correspondantes décrivent bien une onde sonore se propageant à une vitesse v_s dans le superfluide. C'est dans ce cadre que nous allons nous placer pour analyser les fluctuations quantiques et classiques de la phase Φ.
Considérons donc l'Hamiltonien de phase:

$$H = \int \left(\frac{1}{2}a\Pi^2 + \frac{1}{2}b\vec{\nabla}\Phi \cdot \vec{\nabla}\Phi\right) dr\,.$$

On peut voir cette expression comme une linéarisation de l'Hamiltonien de bosons non-relativiste autour de u_0, avec $V\left(\Psi^*\Psi\right) = \frac{1}{2}a\left(\Psi^*\Psi - u_0^2\right)^2$.
Pour que l'on ait brisure spontanée de symétrie, il faut deux conditions:

1) Les fluctuations de la phase doivent être faibles, ce qui se traduit par:

$$\lim_{|r-r'|\to\infty} \langle (\Phi(r) - \Phi(r'))^2 \rangle^{1/2} \ll 2\pi\,.$$

2) La forme linéarisée doit rester valable, ce qui implique que:

$$\langle \Pi^2(r) \rangle^{1/2} \ll u_0^2\,.$$

Le calcul de ces quantités se fait facilement sur la forme approchée harmonique.

Rappelons brièvement comment diagonaliser H. La première chose à faire est d'exploiter l'invariance par translation de cet Hamiltonien en passant en transformée de Fourier. En anticipant sur la forme du résultat, nous savons que Φ et Π s'expriment linéairement en fonction des opérateurs de création et d'annihilation de "phonons" a_q^+ et a_q.

Nous supposons le système dans une boîte de volume fini Ω, si bien que les modes q sont discrets. Les relations de commutation des a et a^+ sont: $\left[a_q, a_{q'}^+\right] = \delta_{qq'}$.
Ecrivons:

$$\begin{aligned}
\Phi(r) &= \frac{1}{\sqrt{2\Omega}} \sum_q \left(\lambda_q e^{iqr} a_q + \lambda_q^* e^{-iqr} a_q^+\right) , \\
\Pi(r) &= \frac{1}{\sqrt{2\Omega}} \sum_q \left(-i\mu_q e^{iqr} a_q + i\mu_q^* e^{-iqr} a_q^+\right) .
\end{aligned}$$

Les relations de commutation canoniques pour Φ et Π imposent que:

$$|\lambda_q| = |\lambda_{-q}|, \quad |\mu_q| = |\mu_{-q}|, \quad \lambda_q\mu_q^* + \lambda_{-q}\mu_{-q} = 2$$

(Nous utilisons le fait que $\delta(r) = \frac{1}{\Omega}\sum_q e^{iqr}$).
En substituant ces expressions pour Φ et Π dans H, nous obtenons:

$$\begin{aligned}
H &= \frac{1}{4}\sum_q \left(a|\mu_q|^2 + bq^2|\lambda_q|^2\right)\left(a_q^+ a_q + a_q a_q^+\right) \\
&+ \frac{1}{4}\sum_q \left(-a\mu_q\mu_{-q} + bq^2\lambda_q\lambda_{-q}\right) a_q a_{-q} + \text{h.c.}
\end{aligned}$$

On peut prendre λ_q et μ_q fonctions réelles et paires de $\vec{q}$. Ceci donne: $\mu_q^2 = \sqrt{\frac{b}{a}}|q|$ et $\lambda_q^2 = \sqrt{\frac{a}{b}}|q|^{-1}$
On en déduit: $H = \sum_q \sqrt{ab}|q|\left(a_q^+ a_q + 1/2\right)$ soit $\hbar\omega_q = \sqrt{ab}|q|$. A température T,
$\langle a_q^+ a_q\rangle = n_q = \dfrac{1}{\exp\left(\dfrac{\hbar\omega_q}{k_B T}\right) - 1}$ (statistique de Bose-Einstein).
On en déduit les fonctions de corrélation:

$$\begin{aligned}
\langle(\Phi(r) - \Phi(0))^2\rangle &= \frac{1}{\Omega}\sum_q \sqrt{\frac{a}{b}}\frac{|1 - e^{iqr}|^2}{|q|}(n_q + 1/2) , \\
\langle\Pi^2(r)\rangle &= \frac{1}{\Omega}\sum_q \sqrt{\frac{b}{a}}|q|(n_q + 1/2) .
\end{aligned}$$

On obtient le régime des fluctuations thermiques classiques en supposant que

$\hbar\omega_q \ll k_B T$. Dans cette limite, $n_q = \dfrac{k_B T}{\sqrt{ab}|q|}$, ce qui est le résultat classique de l'équipartition de l'énergie pour un système d'oscillateurs.

$$\begin{aligned}
\langle(\Phi(r) - \Phi(0))^2\rangle_{\text{class}} &= \frac{k_B T}{b}\frac{1}{\Omega}\sum_q \frac{|1 - e^{iqr}|^2}{|q|^2} , \\
\langle\Pi^2(r)\rangle_{\text{class}} &= \frac{k_B T}{a} ,
\end{aligned}$$

où $|1 - e^{iqr}|^2 = 2\,(1 - \cos \vec{q} \cdot \vec{r})$. Ce facteur, dans la limite des $|\vec{r}|$ grands revient à couper l'intégrale pour $|\vec{q}\,| \lesssim |\vec{r}\,|^{-1}$.

Nous prenons la limite thermodynamique, ce qui donne une intégrale, et nous introduisons une coupure ultraviolette, nécessaire si la dimension d de l'espace est $\gtrsim 2$. l est typiquement la distance entre particules. Nous obtenons:

$$
\begin{aligned}
\langle (\Phi(r) - \Phi(0))^2 \rangle_{\text{class}} &\sim \frac{k_B T}{\pi^2 b} \left(\frac{1}{l} - \frac{1}{|r|} \right), & D = 3\,, \\
\langle (\Phi(r) - \Phi(0))^2 \rangle_{\text{class}} &\sim \frac{k_B T}{\pi b} \log \frac{|r|}{l}, & D = 2\,, \\
\langle (\Phi(r) - \Phi(0))^2 \rangle_{\text{class}} &\sim \frac{2 k_B T}{\pi b} \left(|r| - l \right), & D = 1\,.
\end{aligned}
$$

Si la dimension de l'espace D est inférieure ou égale à 2, les fluctuations de phase entre deux points voisins divergent lorsque la séparation entre ces points devient infinie. Par contre si $D = 3$, la fluctuation relative tend vers une valeur asymptotique finie lorsque la séparation $|r|$ devient infinie. Si la température T est assez basse, nous pouvons alors satisfaire les deux conditions 1) et 2) sur les fluctuations de Φ et Π. On est bien dans une phase où la symétrie est spontanément brisée. Selon la valeur relative de a et de b, une élévation de température induit d'abord

$$
\lim_{|r| \to \infty} \langle (\Phi(r) - \Phi(0))^2 \rangle \sim 2\pi \quad \text{ou} \quad \langle \Pi^2(r) \rangle^{1/2} \sim u_0^2\,.
$$

Dans le premier cas, on restaure une phase symétrique, et dans le second, l'Hamiltonien linéarisé n'est plus valable. Il devient possible de trouver des fluctuations telles que $\Psi^*(r)\Psi(r)$ s'annule par endroits, ce qui induit alors de fortes fluctuations locales de Φ et très probablement, la restauration d'une phase symétrique.

Le cas de la dimension $D = 2$ est très particulier, car bien que nous ayons toujours de grandes fluctuations thermiques, le système possède néanmoins un caractère supraconducteur sur une gamme de température finie $0 \leq T \leq T_{KT}$. La température T_{KT} correspond à une transition de phase propre à la dimension 2, avec une symétrie de rotation $\mathcal{O}(2)$ du paramètre d'ordre. Elle est souvent appelée transition de Kosterlitz-Thouless-Berezinskii.

En dimension $D = 1$, le système est désordonné à toute température et n'admet pas de transition de phase.

Examinons maintenant les fluctuations quantiques à $T = 0$. Dans ce cas, $n_q = 0$

pour $q \neq 0$.

$$\begin{aligned}
\langle (\Phi(r) - \Phi(0))^2 \rangle_{\text{quant}} &\sim \frac{1}{4\pi^2}\sqrt{\frac{a}{b}}\left(\frac{1}{l^2} - \frac{1}{r^2}\right), & D = 3\,, \\
\langle (\Phi(r) - \Phi(0))^2 \rangle_{\text{quant}} &\sim \frac{1}{2\pi}\sqrt{\frac{a}{b}}\left(\frac{1}{l} - \frac{1}{r}\right), & D = 2\,, \\
\langle (\Phi(r) - \Phi(0))^2 \rangle_{\text{quant}} &\sim \frac{1}{\pi}\sqrt{\frac{a}{b}}\log\frac{r}{l}, & D = 1\,.
\end{aligned}$$

L'état fondamental présente le phénomène de brisure spontanée de symétrie si $D \geq 2$ et $\sqrt{\frac{a}{b}}$ est suffisamment petit. Par contre, la dimension $D = 1$ est la dimension critique inférieure pour les fluctuations quantiques. Lorsque $D \geq 2$, il faut encore contrôler la fluctuation de Π.

$$\begin{aligned}
\langle \Pi^2(r) \rangle &\simeq \frac{1}{16\pi^2}\sqrt{\frac{b}{a}}\frac{1}{l^4} \quad D = 3\,, \\
\langle \Pi^2(r) \rangle &\simeq \frac{1}{16\pi^2}\sqrt{\frac{b}{a}}\frac{1}{l^3} \quad D = 2\,.
\end{aligned} \tag{3.1}$$

On retrouve l'expression du principe d'incertitude: lorsque la fluctuation de Φ est faible, celle de Π est grande, et vice-versa. L'Hamiltonien admet un fondamental avec brisure spontanée de symétrie si u_0 est assez grand et $\sqrt{\frac{a}{b}}$ assez petit. En changeant la valeur du rapport $\sqrt{\frac{a}{b}}$, on peut donc jouer sur la nature du fondamental et provoquer une transition supraconducteur (avec brisure spontanée de symétrie) – isolant (phase symétrique) à température nulle! Ces effets ont pu être observés dans des réseaux de jonctions Josephson.[1]

[1] Une revue récente sur ces sujets, par R. Fazio et H. van der Zant est disponible sur le serveur de preprints cond-mat, numero 0011152

Chapter 4

Fonctions de réponse électromagnétique pour un système d'électrons non relativistes

Ce chapitre est en fait une annexe qui explicite des notions et des calculs sur lesquels nous nous sommes appuyés au long de ce cours.

4.1 Cadre général

On considère un système de N particules (l'exemple principal étudié dans ce cours est celui des électrons faiblement liés aux atomes dans un solide). Chacun de ces électrons "voit" un potentiel électrostatique V_c produit par les noyaux répartis aux sommets d'un réseau cristallin régulier. A ce potentiel périodique V_c, on peut ajouter un potentiel non-périodique V_{imp} produit par les diverses impuretés présentes dans un "vrai" solide: dislocations, joints de grains, défauts chimiques, etc...Ces électrons interagissent entre eux par l'interaction Coulombienne décrite par le potentiel:

$$U(r-r') = \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0|r-r'|}$$

On suppose de plus qu'un tel système est plongé dans un champ électromagnétique extérieur (par exemple lors d'une mesure physique) décrit par des potentiels vecteur

$\vec{A}_{ext}(\vec{r},t)$ et scalaire $V_{ext}(\vec{r},t)$. L'Hamiltonien d'un tel système s'écrit:

$$H(t) = \sum_{i=1}^{N}\{\frac{1}{2m}(\vec{P}_i + e\vec{A}(r_i,t))^2 - e(V_c(r_i) + V_{imp}(r_i) + V_{ext}(r_i,t))\} + \frac{1}{2}\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i} U(r_i - r_j) \tag{4.1}$$

Dans cette équation, r_i désigne le vecteur repérant la position de la particule i. Cet Hamiltonien agit sur la fonction d'onde $\Psi(r_1,...,r_N,t)$ de ces N électrons. Pour simplifier l'écriture, nous omettrons ici le degré de liberté de spin de ces électrons. Le principe de Pauli impose alors que Ψ est complètement antisymétrique par rapport aux permutations de $(r_1,...,r_N)$. L'opérateur $\vec{P}_j$ est défini de la manière habituelle par: $\vec{P}_j = \frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_{r_j}$. Ici, e est la valeur absolue de la charge de l'électron et vaut approximativement $1.6\ 10^{-19}$ Coulomb. En l'absence de champ extérieur, $H(t)$ devient H_0, supposé indépendant du temps pour le système isolé. Notons tout de suite un point important, sur lequel nous reviendrons par la suite. Dans cette équation, le champ $\vec{A}(\vec{r},t)$ est le champ *local* agissant sur le système, du moins pour sa partie *transverse*. Il provient de la superposition du champ *extérieur* imposé par l'expérimentateur, et du champ *induit* par la réaction des électrons à cette perturbation extérieure. Ce champ local peut être déterminé si l'on connaît la densité de courant dans le milieu en résolvant les équations de Maxwell. Notons que pour la partie *longitudinale*, le champ *induit* est déjà pris en compte par le potentiel Coulombien instantané.

4.2 Définitions des opérateurs densité de charge et courant électroniques

Le but de cet appendice est de donner des formules générales permettant d'exprimer le tenseur de conductivité à partir des propriétés du spectre et des états excités de basse énergie de l'Hamiltonien H_0 décrivant le système isolé. Pour cela, il nous faut un moyen de définir la densité de courant électronique locale $\vec{J}(r,t)$. Ceci se fait comme d'habitude en partant de la densité de charge locale $\rho(r,t)$ et en écrivant que la charge totale est conservée, ce qui se traduit par:

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}(r,t) + \vec{\nabla}.\vec{J}(r,t) = 0 \tag{4.2}$$

La densité de charge locale s'écrit:

$$\rho(r,t) = -e \sum_{i=1}^{N} \prod_{j=1}^{N} \int dr_j \, \delta(r - r_i) |\Psi(r_1, ..., r_N, t)|^2 \tag{4.3}$$

Cette définition suppose la fonction d'onde Ψ normalisée à l'unité. On vérifie alors que la charge électronique totale Q est bien:

$$Q = \int dr \, \rho(r,t) = -eN \prod_{j=1}^{N} \int dr_j \, |\Psi(r_1, ..., r_N, t)|^2 = -Ne$$

comme il se doit pour un système de N électrons. En partant de la définition de ρ, nous avons:

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t}(r,t) = -e \sum_{i=1}^{N} \prod_{j=1}^{N} \int dr_j \, \delta(r - r_i)[\Psi^*(i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}) - \Psi(i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t})^*]$$

Le terme entre [...] est donné par l'équation de Schrödinger du système, évoluant selon l'Hamiltonien $H(t)$. Elle s'écrit:

$$i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t} = \sum_{j=1}^{N} \{ \frac{1}{2m} (\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_{r_j} + e\vec{A}(r_j, t))^2 - eV_{tot}(r_j, t) + \sum_{k \neq j} U(r_j - r_k) \} \Psi \tag{4.4}$$

où nous avons défini:

$$V_{tot}(r,t) = V_c(r) + V_{imp}(r,t) + V_{ext}(r,t)$$

On en tire:

$$\begin{aligned}\Psi^*(i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}) - \Psi(i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t})^* \quad = \quad & \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2m} [\Psi^* (\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j)^2 \Psi - \Psi (\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j)^2 \Psi^* + e\Psi^* \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j (\vec{A}(r_j, t) \Psi) + \\ & e\Psi \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j (\vec{A}(r_j, t) \Psi^*) + e\Psi^* \vec{A}(r_j, t). \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j \Psi + e\Psi \vec{A}(r_j, t). \frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j \Psi^*]\end{aligned}$$

Rappelons ici que l'opérateur $\vec{\nabla}_{r_j}$ agit sur toute fonction située à sa droite. Il faut ensuite mettre ce terme sous la forme d'une divergence de façon à faire apparaître le courant. On peut vérifier que:

$$\Psi^*(i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t}) - \Psi(i\hbar \frac{\partial \Psi}{\partial t})^* = \frac{\hbar}{i} \sum_{j=1}^{N} \vec{\nabla}_j \frac{1}{2m} [\Psi^* (\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j \Psi) - \Psi (\frac{\hbar}{i} \vec{\nabla}_j \Psi^*) + 2e\vec{A}(r_j, t) \Psi^* \Psi]$$

On en tire:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = e\sum_{i=1}^{N}\sum_{k=1}^{N}\prod_{j=1}^{N}\int dr_j\,\delta(r-r_i)\vec{\nabla}_k\frac{1}{2m}[\Psi^*(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_k\Psi) - \Psi(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_k\Psi^*) + 2e\vec{A}(r_k,t)\Psi^*\Psi]$$

Seuls les termes où $i = k$ subsistent après intégration, donc:

$$\frac{\partial\rho}{\partial t} = \vec{\nabla}_r\{e\sum_{i=1}^{N}\prod_{j=1}^{N}\int dr_j\,\delta(r-r_i)\frac{1}{2m}[\Psi^*(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_i\Psi) - \Psi(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_i\Psi^*) + 2e\vec{A}(r_i,t)\Psi^*\Psi]\}$$

En comparant à l'expression 4.2 définissant le courant, nous pouvons poser:

$$\vec{J}(r,t) = -e\sum_{i=1}^{N}\prod_{j=1}^{N}\int dr_j\,\delta(r-r_i)\frac{1}{2m}[\Psi^*(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_i\Psi) - \Psi(\frac{\hbar}{i}\vec{\nabla}_i\Psi^*) + 2e\vec{A}(r_i,t)\Psi^*\Psi] \quad (4.5)$$

4.3 Invariance de jauge

Il s'agit d'étendre au système quantique décrit par l'Hamiltonien 4.1 l'invariance de jauge des équations de Maxwell pour le champ électromagnétique. Les deux premières équations de Maxwell s'écrivent:

$$\begin{aligned} \nabla.B &= 0 \\ \nabla\times E &= -\frac{\partial B}{\partial t} \end{aligned}$$

On résoud ces équations en introduisant un potentiel vecteur A et un potentiel scalaire V dépendant tous deux de (r,t), de sorte que:

$$\begin{aligned} B &= \nabla\times A \\ E &= -\nabla V - \frac{\partial A}{\partial t} \end{aligned}$$

L'invariance de jauge provient de l'existence d'une assez grande liberté dans le choix des potentiels (A,V) pouvant représenter les champs (E,B) qui satisfont aux deux premières équations de Maxwell. En effet, si λ est une fonction arbitraire de (r,t), alors la transformation:

$$\begin{aligned} A\to A' &= A+\nabla\lambda \\ V\to V' &= V-\frac{\partial\lambda}{\partial t} \end{aligned}$$

laisse inchangés les champs E et B.

En mécanique quantique, la transformation de jauge λ sur les champs doit s'accompagner d'une transformation unitaire (nous la noterons $U(\lambda)$) agissant sur la fonction d'onde $\Psi(r_1, ..., r_N; t)$. Heuristiquement, cette transformation sera intéressante si:

$$\sum_{j=1}^{N}(\frac{\hbar}{i}\nabla_j + eA'(r_j,t))(U(\lambda)\Psi) = U(\lambda)\sum_{j=1}^{N}(\frac{\hbar}{i}\nabla_j + eA(r_j,t))\Psi \tag{4.6}$$

$$(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\sum_{j=1}^{N} V'(r_j,t))(U(\lambda)\Psi) = U(\lambda)(i\hbar\frac{\partial}{\partial t} + e\sum_{j=1}^{N} V(r_j,t))\Psi \tag{4.7}$$

En effet, en supposant qu'une telle transformation $U(\lambda)$ existe, nous observons que la fonction $U(\lambda)\Psi$ obéit à l'équation de Schrödinger pour la jauge (A', V') si la fonction Ψ est solution de cette équation pour la jauge (A, V) . Il est raisonnable de chercher alors $U(\lambda)$ sous la forme:

$$(U(\lambda)\Psi)(r_1, ..., r_N; t) = \exp(-i\alpha\sum_{j=1}^{N}\lambda(r_j,t))\Psi(r_1, ..., r_N; t)$$

où la valeur de α est à déterminer. Nous avons:

$$\sum_{j=1}^{N}\frac{\hbar}{i}\nabla_j(U(\lambda)\Psi) = U(\lambda)\sum_{j=1}^{N}(\frac{\hbar}{i}\nabla_j - \hbar\alpha\nabla_j\lambda(r_j,t))\Psi$$

Il faut donc pour satisfaire 4.6 que:

$$eA'(r_j,t) - \hbar\alpha\nabla_j\lambda(r_j,t) = eA(r_j,t)$$

Ceci est vrai si:

$$\alpha = \frac{e}{\hbar}$$

On vérifie simplement que la seconde condition 4.7 est également satisfaite. Notons que la transformation de jauge $U(\lambda)$ laisse invariants la densité de charge locale définie en (4.3) et le courant défini en (4.5).

4.4 Fonctions de réponse électromagnétiques

Imaginons une expérience (très idéalisée) se passant de la façon suivante. Au temps $t = 0$, début de l'expérience, le système est supposé se trouver dans son état fondamental, décrit par la fonction d'onde $|\Psi_0>$, en l'absence de tout champ extérieur. Pour simplifier l'écriture de certaines expressions, nous choisirons de mesurer les énergies par rapport à celle de $|\Psi_0>$ choisie comme référence. Ceci revient à poser: $H_0|\Psi_0>=0$. On envoie alors sur le solide en question un champ électromagnétique décrit par les potentiels $A_{ext}(\vec{r},t)$ et $V_{ext}(\vec{r},t)$. Cette perturbation induit une modification (souvent appelée *polarisation*) de la densité de charge locale $\delta\rho(\vec{r},t)$ et de la densité de courant locale $\delta\vec{J}(\vec{r},t)$. De manière très générale, cette polarisation va à son tour créer des champs électromagnétiques *induits*, qui vont se superposer aux champs imposés depuis l'extérieur, c'est à dire ceux qu'un expérimentateur peut le plus facilement contrôler. Le système réagit alors à cette superposition linéaire du champ extérieur et du champ induit que nous appelerons champ *local*. Dans l'essentiel de cette section, nous étudierons la réponse de notre système électronique au champ *local*. On suppose donc connue la configuration dans l'espace et le temps de $A_{loc}(\vec{r},t)$ et $V_{loc}(\vec{r},t)$, et ce sont eux que l'on injecte dans la partie cinétique (donc sans interaction) de l'Hamiltonien de l'équation (4.1). Pour passer de la réponse au champ local à celle à un champ imposé de l'extérieur, il faut donc connaître le champ induit par la polarisation du milieu. Nous donnons dans ce cours quelques illustrations de cette procédure, notamment pour le problème de l'écrantage d'une charge extérieure, et pour l'effet Meissner. Dans la suite, comme ci-dessus, le champ local sera noté par $\vec{A}(\vec{r},t)$ et $V(\vec{r},t)$ sans autre précision.

Bien que le système soit supposé non-relativiste, il sera commode de grouper $\delta\rho$ et $\delta\vec{J}$ dans un vecteur à quatre composantes δJ^μ tel que $\delta J^0=\delta\rho$ et $(\delta J^1,\delta J^2,\delta J^3)$ soient les composantes spatiales (sur une base orthonormée) de $\delta\vec{J}$. De la même façon, nous formons le vecteur à quatre composantes A^μ de sorte que $A^0=V$ et (A^1,A^2,A^3) soient les composantes spatiales de $\vec{A}$. Dans l'hypothèse d'une faible perturbation extérieure, la réaction du système est en général faible, si bien que l'on peut supposer la réponse linéaire par rapport au champ local A^μ. A cette hypothèse de linéarité de la réponse, nous ajoutons une contrainte assez naturelle de causalité: $\delta J^\mu(t)$ ne dépend que de la perturbation $A^\mu(t')$ aux instants t' antérieurs à t. Nous supposons donc que:

$$\delta J^\mu(r,t)=-\int d^3r\int_0^t dt'\sum_{\nu=0}^{3}K^{\mu\nu}(r,t;r',t')A^\mu(r',t') \tag{4.8}$$

La fonction $K^{\mu\nu}(r,t;r',t')$ est appelée fonction de réponse linéaire électromagnétique. Nous allons voir un peu plus loin que cette fonction ne dépend de t et t' que par leur différence $t-t'$. Ceci est vrai lorsque l'état initial est choisi parmi les états stationnaires de H_0. En général, la dépendance en $\vec{r}$ et $\vec{r'}$ peut être assez compliquée. Pour un système parfaitement invariant par une translation de vecteur quelconque, $K^{\mu\nu}$ devient aussi une fonction de $\vec{r}-\vec{r'}$. Pour un "vrai" solide, cette hypothèse n'est pas vérifiée. Tout d'abord, la présence de désordre, même faible, détruit l'invariance par translation. Ensuite, pour un cristal parfait, s'il en existait, la symétrie de translation se limite à des vecteurs appartenant à un réseau discret. Dans le cas du désordre provenant des impuretés, il est physiquement assez vraissemblable que pour des distances $|\vec{r}-\vec{r'}|$ très supérieures au libre parcours moyen l d'un électron entre deux collisions avec des impuretés, l'effet du désordre se moyenne (car un électron se propageant de $\vec{r}$ en $\vec{r'}$ subira une grande quantité de telles collisions), ce qui restaure à grande échelle l'homogénéité du système. De manière plus technique, les théoriciens dans ce cas aiment bien calculer la fonction de réponse $\bar{K}^{\mu\nu}$ moyennée sur toutes les configurations possibles des impuretés auxquelles on assigne une probabilité d'apparition. En général, cette distribution de probabilité du potentiel V_{imp} n'est que mal connue, et le choix fait par les théoriciens est alors surtout celui qui simplifie les calculs! Le plus souvent, cette distribution de probabilité du désordre est invariante par translation, si bien que: $\bar{K}^{\mu\nu}(r,t;r',t')=\bar{K}^{\mu\nu}(r-r',t-t')$. Le cas d'un cristal parfait est un petit peu plus délicat. Nous renvoyons le lecteur à la fin de la section **2.1.2** pour un exemple de ce qui se produit alors.

Supposons donc que le milieu est assez homogène, ou sondé à des échelles de longueur suffisamment grandes pour être considéré comme invariant par translation. Dans ce cas $K^{\mu\nu}(r,t;r',t')=K^{\mu\nu}(r-r',t-t')$. Il est alors naturel d'utiliser la transformation de Fourier. Rappelons ici nos conventions:

$$
\begin{aligned}
f(r,t) &= \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3}\int \frac{d\omega}{2\pi} e^{i(q.r-\omega t)}\tilde{f}(q,\omega) \\
\tilde{f}(q,\omega) &= \int d^3r \int dt e^{-i(q.r-\omega t)} f(r,t)
\end{aligned}
$$

Nous avons donc:

$$\delta\tilde{J}^{\mu} = -\tilde{K}^{\mu\nu}\tilde{A}^{\nu}(q,\omega)$$

Nous faisons ici la convention de sommer sur l'indice répété ν pour alléger l'écriture. Il est intéressant d'analyser les différentes composantes du tenseur K, afin de les relier à des quantités physiques usuelles. Auparavent, il faut noter que toutes les composantes de $\tilde{K}^{\mu\nu}$ ne sont pas indépendantes à cause de la conservation de la charge (4.2) ou, ce qui est lié, de l'invariance de jauge. En effet, la conservation de la charge donne, en transformée de Fourier:

$$\omega\delta\tilde{\rho}(q,\omega) = q.\delta\tilde{J}(q,\omega)$$

Ceci a pour conséquence, pour tout $\nu \in \{0,1,2,3\}$:

$$\omega\tilde{K}^{0\nu} = \sum_{i=1}^{3} q^i \tilde{K}^{i\nu} \tag{4.9}$$

De manière similaire, une transformation de jauge pure correspond à:

$$A^\mu = (-\frac{\partial\lambda}{\partial t}, \nabla\lambda)$$

ce qui donne en transformée de Fourier:

$$\tilde{A}^\mu(q,\omega) = i(\omega, q)\tilde{\lambda}(q,\omega)$$

On doit donc avoir, pour tout $\mu \in \{0,1,2,3\}$:

$$\tilde{K}^{\mu 0}\omega + \sum_{i=1}^{3} \tilde{K}^{\mu j} q^j = 0 \tag{4.10}$$

Dans le cas de la réponse à fréquence finie ($\omega \neq 0$), le tenseur est complètement déterminé par ses composantes d'espace $\tilde{K}^{ij}$ pour $1 \leq i,j \leq 3$. D'après les équations (4.9) et (4.10), on a:

$$\begin{aligned}
\tilde{K}^{00} &= -\frac{q^i}{\omega}\tilde{K}^{ij}\frac{q^j}{\omega} \\
\tilde{K}^{0j} &= \frac{q^i}{\omega}\tilde{K}^{ij} && (4.11) \\
\tilde{K}^{i0} &= -\tilde{K}^{ij}\frac{q^j}{\omega} && (4.12)
\end{aligned}$$

On peut ensuite supposer l'invariance par rotation dans le système. Le vecteur q détermine une direction privilégiée dans l'espace si q est non nul. Soit v un vecteur quelconque. Nous notons:

$$\begin{aligned}
v_{\|} &= \frac{v.q}{q.q}q \\
v_{\perp} &= v - v_{\|}
\end{aligned}$$

On a bien entendu $v_\perp.q = 0$. δJ et A se transforment tous deux comme des vecteurs dans une rotation ou une symétrie miroir. Supposons que l'on effectue une rotation d'angle quelconque de $\tilde{A}(q,\omega)$ autour de l'axe porté par q. L'invariance par rotation du système non perturbé implique que $\delta\tilde{J}$ subisse la même rotation. C'est un exercice laissé au lecteur de montrer que cette contrainte implique, dans le cas où $\tilde{V}(q,\omega) = 0$:

$$\begin{aligned}\delta\tilde{J}_{\|}(q,\omega) &= -\tilde{K}_{\|}(q,\omega)\tilde{A}_{\|}(q,\omega)\\ \delta\tilde{J}_{\perp}(q,\omega) &= -\tilde{K}_{\perp}(q,\omega)\tilde{A}_{\perp}(q,\omega) - \tilde{K}_{imp}(q,\omega)\frac{q\wedge\tilde{A}_{\perp}(q,\omega)}{|q|}\end{aligned}$$

Les quantités $\tilde{K}_{\|}(q,\omega)$, $\tilde{K}_{\perp}(q,\omega)$, et $\tilde{K}_{imp}(q,\omega)$ sont des fonctions qui ne dépendent en fait que de $|q|$, toujours à cause de l'invariance par rotation. Considérons maintenant la symétrie dans un plan arbitraire contenant le vecteur q. L'invariance par réflexion de l'Hamiltonien non perturbé implique que $\delta\tilde{J}$ et $\delta\tilde{A}$ subissent tous deux cette même symétrie de réflexion. Ceci implique que $\tilde{K}_{imp} = 0$. Cette conclusion tombe en défaut si l'Hamiltonien non perturbé n'est pas invariant par réflexion. Un exemple très important est donné par un gaz d'électrons bidimensionnel dans un fort champ magnétique transverse, que l'on traite comme faisant partie de l'Hamiltonien non perturbé. La réflexion par rapport à une droite contenue dans le plan ne préserve plus cet Hamiltonien, si bien que $\tilde{K}_{imp}$ ne s'annule pas. Cette fonction est directement liée à la conductance de Hall qui apparaît dans le système.

La réponse en densité, ou encore à un potentiel scalaire V_{ext} met en jeu la seule fonction $\tilde{K}_{\|}(q,\omega)$. En effet, les relations définissant $\tilde{K}_{\|}$ et $\tilde{K}_{\perp}$ impliquent que:

$$\tilde{K}^{ij}(q,\omega) = \tilde{K}_{\|}(q,\omega)\frac{q^iq^j}{q^2} + \tilde{K}_{\perp}(q,\omega)(\delta^{ij} - \frac{q^iq^j}{q^2})$$

On vérifie que, pour un vecteur longitudinal, cette formule donne:

$$\tilde{K}^{ij}(q,\omega)q^j = \tilde{K}_{\|}(q,\omega)q^i$$

et pour un vecteur transversal p^i ($p^iq^i = 0$):

$$\tilde{K}^{ij}(q,\omega)p^j = \tilde{K}_{\perp}(q,\omega)p^i$$

En reportant dans les équations (4.11) l'expression de $\tilde{K}^{ij}(q,\omega)$, nous obtenons:

$$\tilde{K}^{00}(q,\omega) = -\frac{q^2}{\omega^2}\tilde{K}_{\|}(q,\omega)$$

$$\tilde{K}^{0j}(q,\omega) = \tilde{K}_{\|}(q,\omega)\frac{q^j}{\omega}$$
$$\tilde{K}^{i0}(q,\omega) = -\frac{q^i}{\omega}\tilde{K}_{\|}(q,\omega)$$

Dans un langage plus parlant, $\tilde{K}_{\|}(q,\omega)$ donne la conductivité longitudinale du système. En effet, le champ local E s'exprime comme $E = -\nabla V - \partial A/\partial t$ soit:

$$\tilde{E}_{\|}(q,\omega) = i\omega\tilde{A}_{\|}(q,\omega) - iq\tilde{V}(q,\omega)$$

En raison des équations (4.11), le potentiel scalaire V contribue uniquement à $J_{\|}$. Plus précisément:

$$\delta\tilde{J}_{\|}(q,\omega) = -\tilde{K}_{\|}(q,\omega)\tilde{A}_{\|}(q,\omega) + \frac{q}{\omega}\tilde{K}_{\|}(q,\omega)\tilde{V}(q,\omega)$$

On en tire:

$$\delta\tilde{J}_{\|}(q,\omega) = \frac{i}{\omega}\tilde{K}_{\|}(q,\omega)\tilde{E}_{\|}(q,\omega) \tag{4.13}$$

La conductivité longitudinale $\tilde{\sigma}_{\|}(q,\omega)$ est donc égale à $(i/\omega)\tilde{K}_{\|}(q,\omega)$. Une quantité reliée est la constante diélectrique longitudinale $\tilde{\epsilon}_{\|}(q,\omega)$. Elle est définie pour un milieu matériel par la relation de proportionalité entre le champ D et le champ local E: $D = \epsilon E$. Le champ D n'est sensible qu'aux sources imposées de l'extérieur: $\nabla.D = \rho_{ext}$. Donc $D = \epsilon_0 E_{ext}$. Soit E_{ind} le champ induit par les charges $\delta\rho$ résultant de la polarisation du milieu. On a donc: $\nabla.E_{ind} = \delta\rho/\epsilon_0$, donc $\delta\rho = \epsilon_0\nabla.(E - E_{ext})$, car $E = E_{loc} = E_{ext} + E_{ind}$. On trouve alors:

$$\delta\rho = (\epsilon_0 - \epsilon)\nabla.E$$

Nous passons à la transformée de Fourier, ce qui permet de généraliser au cas d'une constante diélectrique non locale, c'est à dire dont la transformée de Fourier $\tilde{\epsilon}_{\|}(q,\omega)$ dépend explicitement de q et ω. Nous posons donc:

$$\delta\tilde{\rho}(q,\omega) = (\epsilon_0 - \tilde{\epsilon}_{\|}(q,\omega))iq.\tilde{E}(q,\omega) \tag{4.14}$$

Pour faire le lien entre cette expression et $K_{\|}$, le plus simple est d'appliquer la conservation de la charge, soit:

$$\delta\tilde{\rho}(q,\omega) = \frac{q}{\omega}.\delta\tilde{J}_{\|}(q,\omega)$$

et d'utiliser l'équation (4.13):

$$\delta\tilde{\rho}(q,\omega) = \frac{\tilde{K}_{\|}(q,\omega)}{\omega^2} iq.\tilde{E}_{\|}(q,\omega)$$

En comparant cette expression avec la précédente, nous obtenons:

$$\tilde{\epsilon}_{\|}(q,\omega) - \epsilon_0 = -\frac{\tilde{K}_{\|}(q,\omega)}{\omega^2} = \frac{i}{\omega}\tilde{\sigma}_{\|}(q,\omega)$$

Passons maintenant à l'analyse de la réponse transverse. Comme $B = \nabla \wedge A$, on voit que seule la partie transverse $A_\perp$ donne naissance à un champ magnétique non nul. On peut donc relier $K_\perp$ à la susceptibilité magnétique χ_m du système. Rappelons comment cette susceptibilité est définie d'habitude. On introduit le champ H qui est déterminé par les sources extérieures. Plus précisément:

$$\nabla \wedge H = J_{ext} + \frac{\partial D}{\partial t}$$

Donc $H = \mu_0^{-1} B_{ext}$. En électromagnétisme des milieux matériels, on pose: $B = \mu_0(H+M)$, où le vecteur M est la densité locale d'aimantation. Traditionnellement, la susceptibilité χ_m est introduite en supposant que $M = \chi_m H$. L'aimantation M correspond dans le volume du système à un courant de polarisation $\delta J_\perp = \nabla \wedge M$, du moins dans l'approximation où le temps que met la lumière à traverser l'échantillon est très petit devant les temps caractéristiques de l'excitation du système. En passant en transformée de Fourier, et en exprimant tout en fonction du champ local $A_\perp$ ($B = \nabla \wedge A_\perp$), nous avons:

$$\mu_0 \delta\tilde{J}_\perp = \frac{\tilde{\chi}(q,\omega)}{1+\tilde{\chi}(q,\omega)} q^2 \tilde{A}_\perp$$

Mais comme $\delta\tilde{J}_\perp = -\tilde{K}(q,\omega)\tilde{A}_\perp$, on a finalement:

$$\frac{\tilde{\chi}(q,\omega)}{1+\tilde{\chi}(q,\omega)} = -\frac{\mu_0 \tilde{K}(q,\omega)}{q^2}$$

4.5 Expression générale des fonctions de réponse et représentation spectrale

Nous commencerons par nous placer d'abord dans le cadre le plus général évoqué dans l'introduction de ce cours: la perturbation du système est décrite par l'opérateur A, et l'on mesure la quantité B. L'Hamiltonien décrivant un tel système est:

$$H(t) = H_0 + \lambda(t)A$$

Il sera commode de se placer dans la représentation d'interaction par rapport à l'Hamiltonien H_0. L'état du système dans cette représentation est décrit par le vecteur $|\Psi_I(t)>$ relié à l'état de la représentation de Schrödinger par:

$$|\Psi_I(t)> = e^{iH_0t}|\Psi(t)>$$

L'état $|\Psi_I(t)>$ obéit à l'équation d'évolution:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi_I(t)> = \lambda(t)e^{iH_0t}Ae^{-iH_0t}|\Psi_I(t)> = \lambda(t)A_I(t)|\Psi_I(t)> \tag{4.15}$$

L'intérêt de cette représentation est que le vecteur d'état $|\Psi_I(t)>$ reste constant égal à $|\Psi_0>$ en l'absence de perturbation extérieure. Ceci suggère de chercher à résoudre l'équation 4.15 par une itération à partir de la solution non perturbée $|\Psi_I(t)> = |\Psi_0>$. En nous arrêtant au premier ordre en λ, nous obtenons:

$$|\Psi_I(t)> = |\Psi_0> - \frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\lambda(t')A_I(t')|\Psi_0> + O(\lambda^2) \tag{4.16}$$

La valeur moyenne de l'observable B au temps t est donnée par

$$< B(t) > = < \Psi(t)|B|\Psi(t) > = < \Psi_I(t)|B_I(t)|\Psi_I(t) >$$

Au premier ordre en λ, nous avons:

$$< B(t) > = < \Psi_0|B_I(t)|\Psi_0 > = -\frac{i}{\hbar}\int_0^t dt'\lambda(t') < \Psi_0|[B_I(t), A_I(t')]|\Psi_0 > + O(\lambda^2)$$

La fonction de réponse de l'observable B à l'excitation A, que nous noterons $R_{BA}(t,t')$ est donc donnée par:

$$\begin{aligned} R_{BA}(t,t') &= -\frac{i}{\hbar} < \Psi_0|[B_I(t), A_I(t')]|\Psi_0 > \ (t \geq t') \\ R_{BA}(t,t') &= 0 \ (t \leq t') \end{aligned}$$

Cette dissymétrie entre $t \geq t'$ et $t \leq t'$ est choisie conformément à l'idée de causalité de la réponse, déjà mentionnée plus haut. Pour mieux cerner la nature de cet objet, il est utile d'introduire une base complète d'états propres de H_0:

$$H_0|\Psi_\alpha> = E_0(\alpha)|\Psi_\alpha> = \hbar\omega_0(\alpha)|\Psi_\alpha>$$

Rappelons que nous posons $E_0(0) = 0$ pour simplifier les notations. Donc $E(\alpha)$ est directement l'énergie d'excitation de l'état $|\Psi_\alpha>$ par rapport au fondamental de H_0. Si $t \geq t'$, nous avons:

$$\begin{aligned} R_{BA}(t,t') &= -\frac{i}{\hbar}\sum_\alpha\{<\Psi_0|e^{iH_0t/\hbar}Be^{-iH_0t/\hbar}|\Psi_\alpha><\Psi_\alpha|e^{iH_0t'/\hbar}Ae^{-iH_0t'/\hbar}|\Psi_0> \\ &\quad -<\Psi_0|e^{iH_0t'/\hbar}Ae^{-iH_0t'/\hbar}|\Psi_\alpha><\Psi_\alpha|e^{iH_0t/\hbar}Be^{-iH_0t/\hbar}|\Psi_0>\} \end{aligned}$$

Ceci devient:

$$\begin{aligned} R_{BA}(t,t') &= -\frac{i}{\hbar}\sum_\alpha\{<\Psi_0|B|\Psi_\alpha><\Psi_\alpha|A|\Psi_0>e^{-i\omega_0(\alpha)(t-t')} \\ &\quad -<\Psi_0|A|\Psi_\alpha><\Psi_\alpha|B|\Psi_0>e^{i\omega_0(\alpha)(t-t')}\} \end{aligned}$$

Il est intéressant d'effectuer la transformée de Fourier:

$$\tilde{R}_{BA}(\omega) = \int_0^\infty R_{BA}(t,0)e^{-\eta t}e^{i\omega t}dt$$

Dans cette équation, η est une quantité positive arbitrairement petite qui assure la convergence de l'intégrale. Finalement,

$$\tilde{R}_{BA}(\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_\alpha\{\frac{<\Psi_0|B|\Psi_\alpha><\Psi_\alpha|A|\Psi_0>}{\omega-\omega_0(\alpha)+i\eta} - \frac{<\Psi_0|A|\Psi_\alpha><\Psi_\alpha|B|\Psi_0>}{\omega+\omega_0(\alpha)+i\eta}\} \quad (4.17)$$

On voit que la fonction de réponse s'exprime simplement à partir du spectre de H_0 et des éléments de matrice des opérateurs A et B entre l'état fondamental et les états excités, d'où le nom de représentation spectrale donnée à ce genre d'expression.

On peut ensuite étudier la situation où A et B sont des opérateurs locaux, dépendant de la position dans l'espace. On est alors conduit à considérer des quantités comme:

$$\tilde{R}_{BA}(r,r';\omega) = \frac{1}{\hbar}\sum_\alpha\{\frac{<\Psi_0|B(r)|\Psi_\alpha><\Psi_\alpha|A(r')|\Psi_0>}{\omega-\omega_0(\alpha)+i\eta} - \frac{<\Psi_0|A(r')|\Psi_\alpha><\Psi_\alpha|B(r)|\Psi_0>}{\omega+\omega_0(\alpha)+i\eta}\}$$

Pour un système invariant par translation, l'impulsion totale $P \equiv \sum_j \frac{\hbar}{i}\frac{\partial}{\partial r_j}$ commute avec H_0. On peut donc classer les états excités en faisant apparaître explicitement l'impulsion totale. On suppose ainsi que $P|\Psi_\alpha>= \hbar q_\alpha|\Psi_\alpha>$. Soit $\mathcal{T}_a$ la transformation unitaire associée à la translation de vecteur a. Si $|\Psi>$ est un état à une particule, nous avons:

$$(\mathcal{T}_a\Psi)(r) =< r|\mathcal{T}_a|\Psi >= \Psi(r-a)$$

ce qui se déduit immédiatement de $\mathcal{T}_a|r>=|r+a>$. Soit maintenant une onde plane $|k>$. Comme

$$e^{ik(r-a)} = e^{-ika}e^{ikr}$$

nous avons:

$$\mathcal{T}_a|k>= e^{-ika}|k>$$

Par ailleurs, il est raisonnable physiquement de poser:

$$<\Psi|\mathcal{T}_{-a}B(r+a)\mathcal{T}_a|\Psi>=<\Psi|B(r)|\Psi>$$

Nous en déduisons donc:

$$\mathcal{T}_{-a}B(r+a)\mathcal{T}_a = B(r)$$

Appliquons ceci à un élément de matrice du type $<\Psi_\alpha|B(r)|\Psi_\beta>$. Comme $B(r) = \mathcal{T}_r B(0)\mathcal{T}_{-r}$, nous avons:

$$<\Psi_\alpha|B(r)|\Psi_\beta>=<\Psi_\alpha|\mathcal{T}_r B(0)\mathcal{T}_{-r}|\Psi_\beta>= e^{i(q_\beta - q_\alpha)r} <\Psi_\alpha|B(0)|\Psi_\beta>$$

En reportant ceci dans l'expression de la fonction de réponse:

$$\begin{aligned}\tilde{R}_{BA}(r,r';\omega) &= \frac{1}{\hbar}\sum_\alpha\{e^{iq_\alpha(r-r')}\frac{<\Psi_0|B(0)|\Psi_\alpha><\Psi_\alpha|A(0)|\Psi_0>}{\omega-\omega_0(\alpha)+i\eta} \\ &\quad - e^{iq_\alpha(r'-r)}\frac{<\Psi_0|A(0)|\Psi_\alpha><\Psi_\alpha|B(0)|\Psi_0>}{\omega+\omega_0(\alpha)+i\eta}\}\end{aligned}$$

On peut donc facilement effectuer la transformée de Fourier par rapport à $r-r'$, ce qui donne:

$$\begin{aligned}\tilde{R}_{BA}(q;\omega) &= \frac{V}{\hbar}\sum_\alpha\{\delta_{qq_\alpha}\frac{<\Psi_0|B(0)|\Psi_\alpha><\Psi_\alpha|A(0)|\Psi_0>}{\omega-\omega_0(\alpha)+i\eta} \\ &\quad - \delta_{-qq_\alpha}\frac{<\Psi_0|A(0)|\Psi_\alpha><\Psi_\alpha|B(0)|\Psi_0>}{\omega+\omega_0(\alpha)+i\eta}\}\end{aligned}$$

Ici, on suppose le système quantifié dans une boîte de volume fini V, et les modes sont donc discrets. La normalisation pour les transformations de Fourier est alors:

$$\begin{aligned}f(r) &= \frac{1}{V}\sum_q e^{iq.r}\tilde{f}(q) \\ \tilde{f}(q) &= \int_V d^3r e^{-iq.r}f(r)\end{aligned}$$

A la limite thermodynamique, chaque mode occupe un volume $(2\pi)^3/V$ dans l'espace des phases. Donc la somme sur les modes donnant $f(r)$ tend vers l'intégrale

$$\frac{1}{(2\pi)^3}\int d^3q e^{iq.r}\tilde{f}(q)$$

4.6 Application au tenseur de conductivité

Pour faire le lien entre le paragraphe **4.4** où les fonctions de réponse électromagnétiques ont été définies, et l'algorithme général donné au paragraphe précédent, notons que l'observable B mesurée dans le cas de la réponse électromagnétique est soit la densité de charge locale $\rho(r)$, soit une composante spatiale de la densité de courant $J^i(r)$. Il nous faut préciser ce qui joue le rôle de la perturbation A. Pour cela, considérons à nouveau l'Hamiltonien (4.1):

$$H(t) = H_0 + \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2m}[\vec{P}_j.(e\vec{A}(r_j,t)) + e\vec{A}(r_j,t).\vec{P}_j] - eV(r_j,t) + \sum_{j=1}^{N} \frac{e^2}{2m}\vec{A}^2(r_j,t)$$

Le dernier terme est négligeable dans le calcul de la fonction de réponse linéaire. La perturbation au premier ordre de H fait intervenir les opérateurs densité de charge locale ρ et de courant $\vec{J}_0$ associés à l'Hamiltonien non-perturbé H_0. A ce stade, il convient de préciser la définition des opérateurs ρ et $\vec{J}_0$. Les formules utilisées plus haut (4.3) et (4.5) ne donnent en effet que les *valeurs moyennes* de ces opérateurs sur un état $|\Psi>$. L'opérateur $\rho(r)$ peut se définir comme:

$$\rho(r) = -e\sum_{j=1}^{N} \delta(r - r_j) \tag{4.18}$$

Et l'on vérifie que $< \Psi(t)|\rho(r)|\Psi(t) >= \rho(r,t)$ donnée par l'équation (4.3). L'opérateur courant lui est donné par:

$$\vec{J}(r,t) = -\frac{e}{2m}\sum_{j=1}^{N}[\vec{P}_j\delta(r - r_j) + \delta(r - r_j)\vec{P}_j + 2e\vec{A}(r_j,t)\delta(r - r_j)] \tag{4.19}$$

On a donc:

$$\vec{J}(r,t) = \vec{J}_0(r) + \frac{e}{m}\rho(r)\vec{A}(r,t)$$

On vérifie également que la valeur moyenne de cet opérateur sur un état $|\Psi(t)>$ donne bien la quantité $\vec{J}(r,t)$ de l'équation (4.5).

Il est important de noter que l'opérateur courant dépend explicitement du potentiel vecteur $\vec{A}$. Ce comportement est dû au caractère non relativiste du modèle utilisé. Dans un traitement relativiste des électrons, l'opérateur courant s'écrit $J^\mu = \bar{\Psi}\gamma^\mu\Psi$ et ne fait donc pas intervenir le champ électromagnétique. Nous voyons que la correction au courant est linéaire par rapport au potentiel vecteur, donc il faudra en tenir compte dans l'expression des observables (ce que nous avons noté B de façon générique). Nous avons:

$$H(t) = H_0 + \int d^3r[\rho(r)V(r,t) - \vec{J}_0(r).\vec{A}(r,t)] + O(A^2)$$

Au premier ordre en $\vec{A}$:

$$< \Psi(t)|\vec{J}(r,t)|\Psi(t) >=< \Psi(t)|\vec{J}_0(r,t)|\Psi(t) > -\frac{ne^2}{m}\vec{A}(r,t)$$

où n désigne la densité moyenne d'électrons. On en tire:

$$K^{\mu\nu}(r-r';t-t') = \frac{i}{\hbar}g^{\mu\nu} < \Psi_0|[J^{\mu}_{0,I}(r,t); J^{\nu}_{0,I}(r',t')]|\Psi_0 > +\frac{ne^2}{m}(1-\delta^{\mu 0})\delta^{\mu\nu}\delta(r-r')\delta(t-t')$$

où $g^{\mu\nu} = 1$ si $\nu = 0$, et $g^{\mu\nu} = -1$ autrement. Il n'y a pas de sommation sur les indices μ et ν dans cette formule. On obtient finalement, en passant en transformée de Fourier:

$$\begin{aligned} \tilde{K}^{\mu\nu}(q,\omega) = -\frac{V}{\hbar}g^{\mu\nu}\sum_{\alpha}\{ \quad & \delta_{qq_\alpha} \quad \frac{< \Psi_0|J_0^{\mu}(0)|\Psi_\alpha >< \Psi_\alpha|J_0^{\nu}(0)|\Psi_0 >}{\omega - \omega_0(\alpha) + i\eta} \\ - \quad & \delta_{-qq_\alpha} \quad \frac{< \Psi_0|J_0^{\nu}(0)|\Psi_\alpha >< \Psi_\alpha|J_0^{\mu}(0)|\Psi_0 >}{\omega + \omega_0(\alpha) + i\eta}\} + \frac{ne^2}{m}(1-\delta^{\mu 0})\delta^{\mu\nu} \end{aligned} \tag{4.20}$$

Cette formule très générale est connue dans la littérature sous le nom de formule de Kubo.

4.7 Tenseur de conductivité pour des électrons libres en l'absence de désordre

4.7.1 Eléments de matrice de la densité et du courant

Pour pouvoir l'expliciter dans quelques cas très utiles pour la physique, il faut faire des hypothèses sur H_0. Considérons le cas d'un Hamiltonien d'électrons libres. Les états propres sont donc des déterminants de Slater (pour N particules) d'ondes planes. L'état $|\Psi_0 >$ est une mer de Fermi comprenant tous les états $|k >$ tels que $|\vec{k}| \leq k_F$, où k_F est le vecteur d'onde de Fermi. Quelle est l'action des opérateurs $J_0^{\mu}(0)$ sur les états de cette base? Il est naturel de la préciser d'abord sur des états à une particule $|k >$. Ces états sont supposés normalisés dans une boîte de volume V, soit

$<\vec{r}|\vec{k}>=\frac{1}{\sqrt{V}}e^{i\vec{k}.\vec{r}}$. On en déduit:

$$\begin{aligned} <k'|\rho(0)|k> &= -\frac{e}{V} \\ <k'|\vec{J}_0(0)|k> &= -\frac{e}{V}\frac{\hbar}{2m}(\vec{k}+\vec{k}') \end{aligned}$$

Lorsque l'on fait agir un J_0^μ sur un déterminant de Slater d'ondes planes, on obtient une combinaison linéaire de déterminants de Slater dans lesquels on a modifié l'état d'une seule particule par rapport au déterminant de Slater initial. Les états $|\Psi_\alpha>$ qui interviennent alors dans la formule de Kubo sont des déterminants de Slater qui correspondent à une excitation de type particule-trou. Un tel état est un déterminant de Slater dans lequel l'état à une particule $|k>$ ($|\vec{k}|\leq k_F$) a été supprimé, et remplacé par l'état $|k'>$ ($|\vec{k}'|\geq k_F$). Une telle excitation particule-trou est un état propre de l'impulsion totale avec $q=k'-k$. L'énergie de cet état, mesurée par rapport à l'état fondamental est:

$$\hbar\omega_0(k;k')=\frac{\hbar^2}{2m}(k'^2-k^2)$$

En tenant compte de l'analyse du paragraphe **5.4**, on peut se limiter à K^{00} (qui donnera $K_{\|}$) et K^{ij} (qui donnera $K_\perp$). Nous obtenons donc:

$$\tilde{K}^{00}(q,\omega)=-\frac{e^2}{V}\sum_k\frac{n^{(0)}(k-q/2)(1-n^{(0)}(k+q/2))}{\hbar\omega-\frac{\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{q}+i\eta}-\frac{n^{(0)}(k+q/2)(1-n^{(0)}(k-q/2))}{\hbar\omega-\frac{\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{q}+i\eta}$$

La fonction $n^{(0)}(k)$ est la distribution de Fermi-Dirac à température nulle: $n^{(0)}(k)=1$ si $|\vec{k}|\leq k_F$ et $n^{(0)}(k)=0$ si $|\vec{k}|\geq k_F$. On peut encore simplifier en:

$$\tilde{K}^{00}(q,\omega)=-\frac{e^2}{V}\sum_k\frac{n^{(0)}(k-q/2)-n^{(0)}(k+q/2)}{\hbar\omega-\frac{\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{q}+i\eta}$$

Le comportement de cette fonction est très lié à celui de la densité d'états d'une paire particule-trou d'impulsion q. Cette dernière quantité est définie comme:

$$\nu(E,q)=\frac{1}{V}\sum_k\delta(E-\frac{\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{q})\ n^{(0)}(k-q/2)(1-n^{(0)}(k+q/2))$$

Elle correspond bien à l'idée intuitive que l'on se fait d'une densité d'états (par unité de volume). Si on calcule $\int_E^{E+\delta E}\nu(E',q)dE'$, on obtient:

$$\frac{1}{V}\sum_k n^{(0)}(k-q/2)(1-n^{(0)}(k+q/2))\theta(\frac{\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{q}-E)\theta(E+\delta E-\frac{\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{q})$$

ce qui est précisément le nombre total de paires particule-trou d'impulsion q et d'énergie d'excitation comprise entre E et $E+\delta E$, divisé par le volume V. Cette quantité a une bonne limite lorsque V tend vers l'infini. On en déduit:

$$\tilde{K}^{00}(q,\omega) = -e^2 \int_0^{\infty} dE \nu(E,q) \{ \frac{1}{\hbar\omega - E + i\eta} - \frac{1}{\hbar\omega + E + i\eta} \} \qquad (4.21)$$

où l'on a utilisé $\nu(E,q) = \nu(E,-q)$.

De la même façon, nous avons:

$$\begin{aligned} \tilde{K}^{ij}(q,\omega) &= \frac{e^2 v_F^2}{V} \sum_k \frac{k^i k^j}{k_F^2} \{ \frac{n^{(0)}(k-q/2)(1-n^{(0)}(k+q/2))}{\hbar\omega - \frac{\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{q} + i\eta} - \frac{n^{(0)}(k+q/2)(1-n^{(0)}(k-q/2))}{\hbar\omega - \frac{\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{q} + i\eta} \} \\ &+ \frac{ne^2}{m}\delta^{ij} \end{aligned}$$

Une première chose à vérifier sur cette expression est l'invariance de jauge. Supposons que l'on applique une transformation de jauge pure indépendante du temps. Dans ce cas $V = 0$ et $A = \nabla\lambda$, où λ est indépendante de t. Donc la fréquence externe ω est nulle et $\tilde{A}_\mu(q,0) = (0, iq)\tilde{\lambda}(q,0)$. Comme cette situation équivaut à l'absence de champ extérieur, nous devons avoir $\tilde{J}(q,0) = 0$. Ceci entraîne que:

$$\sum_{j=1}^{3} \tilde{K}^{ij}(q,0) q^j = 0$$

Cette identité consiste dans le cas des électrons libres à montrer:

$$\frac{v_F^2}{V} \sum_k \frac{(\vec{k}.\vec{q})\vec{k}}{k_F^2} \{ \frac{n^{(0)}(k-q/2)(1-n^{(0)}(k+q/2))}{\frac{\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{q} - i\eta} - \frac{n^{(0)}(k+q/2)(1-n^{(0)}(k-q/2))}{\frac{\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{q} - i\eta} \} = \frac{n}{m}\vec{q}$$

Comme le terme général de la somme s'exprime comme le produit de $\vec{k}$ par un scalaire invariant par toute rotation d'axe $\vec{q}$, le résultat est bien proportionnel au vecteur $\vec{q}$. Il suffit de vérifier l'égalité:

$$\frac{v_F^2}{V} \sum_k \frac{(\vec{k}.\vec{q})^2}{k_F^2} \frac{n^{(0)}(k-q/2) - n^{(0)}(k+q/2)}{\frac{\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{q} - i\eta} = \frac{n}{m} q^2$$

La partie imaginaire est nulle, car elle met en jeu la somme d'une quantité impaire en k (car $n^{(0)}(k) = n^{(0)}(-k)$). On peut donc prendre la limite $\eta \to 0$ en ne considérant que la partie réelle, ce qui donne:

$$(\frac{m v_F}{\hbar k_F})^2 \frac{1}{V} \sum_k \vec{k}.\vec{q} (n^{(0)}(k-q/2) - n^{(0)}(k+q/2)) = nq^2$$

soit encore:

$$\frac{1}{V}\sum_k n^{(0)}(k) = n$$

ce qui est vrai!

L'intéret de ce calcul est de montrer que la réponse *longitudinale* dans la limite où $\omega \to 0$ à q fini est fortement contrainte par l'invariance de jauge. Comme nous le verrons dans l'étude du diamagnétisme, la réponse *transverse* dans cette même limite ne subit pas cette contrainte. L'effet Meissner, caractéristique essentielle de la supraconductivité, est la manifestation d'une différence marquée entre la réponse longitudinale et la réponse transverse.

Comme nous l'avons fait pour la réponse en densité, il est utile d'introduire la densité spectrale:

$$\nu_2^{ij}(E,q) = \frac{1}{V}\sum_k \frac{k^i k^j}{k_F^2} n^{(0)}(k-q/2)(1-n^{(0)}(k+q/2))\delta(E-\frac{\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{q})$$

Cette densité spectrale se décompose en une partie longitudinale et une partie transverse:

$$\nu_2^{ij}(E,q) = \nu_{2\parallel}(E,q)\frac{q^i q^j}{q^2} + \nu_{2\perp}(q,E)(\delta^{ij} - \frac{q^i q^j}{q^2})$$

Nous pouvons alors écrire:

$$\begin{aligned}
\tilde{K}_\parallel(q,\omega) &= e^2 v_F^2 \int_0^\infty dE \nu_{2\parallel}(E,q)\{\frac{1}{\hbar\omega - E + i\eta} - \frac{1}{\hbar\omega + E + i\eta}\} + \frac{ne^2}{m} \\
\tilde{K}_\perp(q,\omega) &= e^2 v_F^2 \int_0^\infty dE \nu_{2\perp}(E,q)\{\frac{1}{\hbar\omega - E + i\eta} - \frac{1}{\hbar\omega + E + i\eta}\} + \frac{ne^2}{m}
\end{aligned}$$

L'invariance de jauge implique, comme nous l'avons vu:

$$\tilde{K}_\parallel(q,\omega) = \tilde{K}_\parallel(q,\omega) - \tilde{K}_\parallel(q,0)$$

Comme on s'y attend, les densités spectrales $\nu_{2\parallel}(E,q)$ et $\nu(E,q)$ sont reliées simplement, puisqu'elles contrôlent toutes deux la réponse longitudinale:

$$\nu_{2\parallel}(E,q) = \frac{q^i \nu_2^{ij}(E,q) q^j}{q^2} = \frac{E^2}{(\hbar v_F q)^2}\nu(E,q)$$

Ceci permet de vérifier directement dans le cas des électrons libres la relation générale:

$$\tilde{K}^{00}(q,\omega) = -\frac{q^2}{\omega^2}\tilde{K}_\parallel(q,\omega)$$

Dans l'étude du diamagnétisme, on s'intéresse à la quantité

$$\lim_{\omega\to 0}\tilde{K}_\perp(q,\omega) = \lim_{\eta\to 0} e^2 v_F^2 \int_0^\infty dE(\nu_{2\parallel}(E,q) - \nu_{2\perp}(E,q))\frac{2E}{E^2+\eta^2} \tag{4.22}$$

4.7.2 Etude de la densité d'états particule-trou

On considère l'excitation qui détruit l'état $k-q/2$ et qui crée l'état $k+q/2$. Appelons F la mer de Fermi. Nous devons satisfaire les deux conditions suivantes: $k-q/2 \in F$ et $k+q/2 \notin F$. Si l'on note $F+a$ la mer de Fermi translatée d'un vecteur a, les conditions ci-dessus sont équivalentes à: $k \in F+q/2$ et $k \notin F-q/2$. Les valeurs de k permises sont obtenues par une construction graphique donnée dans la figure 4.1 ci-dessous:

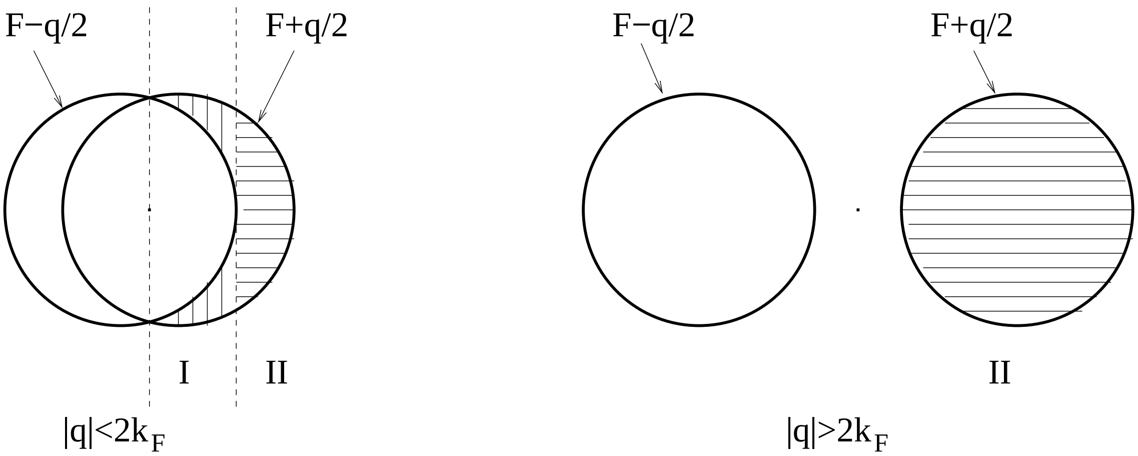

Figure 4.1: Contraintes sur le choix de k dues au principe de Pauli

Lorsque $|\vec{q}| < 2k_F$, k décrit le volume obtenu par la révolution d'une lunulle autour de $\vec{q}$, et si $|\vec{q}| > 2k_F$, k appartient à $F+q/2$ tout entière. Le spectre particule-trou est donc donné par l'intervalle $[E_{min}(q), E_{max}(q)]$ avec:

$$\begin{aligned}
E_{max}(q) &= \frac{\hbar^2}{m}(k_F+q/2)q \\
E_{min}(q) &= 0 \quad (|\vec{q}| < 2k_F) \\
E_{min}(q) &= \frac{\hbar^2}{m}(q/2-k_F)q \quad (|\vec{q}| > 2k_F)
\end{aligned}$$

Dans cet intervalle, on obtient deux comportements possibles pour la densité d'états. Dans la région I, c'est à dire lorsque $|\vec{q}| < 2k_F$ et $E < E^* = \frac{\hbar^2}{m}(k_F - q/2)q$, pour une énergie E donnée, ce qui fixe la composante $k_\|$ le long de $\vec{q}$, la composante transverse à $\vec{q}$, que nous notons $k_\perp$ varie entre $k_{\perp,1}$ et $k_{\perp,2}$ déterminés par:

$$\begin{aligned}
(k_\| + q/2)^2 + k_{\perp,1}^2 &= k_F^2 \\
(k_\| - q/2)^2 + k_{\perp,2}^2 &= k_F^2
\end{aligned}$$

On obtient donc:

$$k_{\perp,2}^2 - k_{\perp,1}^2 = (k_{\|} + q/2)^2 - (k_{\|} - q/2)^2 = 2k_{\|}q = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

La densité d'états s'obtient donc comme:

$$\nu(E,q) = \frac{1}{V}\frac{V}{8\pi^3}\frac{2\pi mE}{\hbar^2}\frac{dk_{\|}}{dE}$$

Or, comme $E = \frac{\hbar^2}{m}k_{\|}q$, $\frac{dk_{\|}}{dE} = \frac{m}{\hbar^2 q}$. D'où:

$$\nu(E,q) = \frac{m^2}{4\pi^2\hbar^4 q}E$$

Pour rendre cette expression un peu plus lisible, nous faisons intervenir la densité d'états $\nu(0)$ à une particule au niveau de Fermi:

$$\nu(0) = \frac{1}{8\pi^3}4\pi k_F^2\frac{dk_F}{d\epsilon_F}$$

Mais comme $\frac{d\epsilon_F}{dk_F} = \frac{\hbar^2 k_F}{m}$, nous avons:

$$\nu(0) = \frac{mk_F}{2\pi^2\hbar^2}$$

En utilisant $v_F = \frac{\hbar k_F}{m}$, nous obtenons:

$$\nu_I(E,q) = \frac{1}{2}\nu(0)\frac{E}{\hbar v_F q}$$

Si $|\vec{q}| > 2k_F$ ou $|\vec{q}| < 2k_F$ mais $E \geq E^*$, l'énergie E correspond toujours à fixer $k_{\|}$, mais $k_\perp$ varie de 0 à $k_{\perp,2}$ où $k_{\perp,2}$ est le même que celui déjà écrit. Dans ce cas:

$$\nu_{II}(E,q) = \frac{1}{V}\frac{V}{8\pi^3}\pi k_{\perp,2}^2\frac{dk_{\|}}{dE}$$

En explicitant la valeur de $k_{\perp,2}$, nous obtenons:

$$\nu_{II}(E,q) = \frac{m}{\pi^2\hbar^2 q}[k_F^2 - (k_{\|} - q/2)^2]$$

Soit encore:

$$\nu_{II}(E,q) = \frac{1}{4}\nu(0)\frac{k_F}{q}[1 - (\frac{E}{\hbar v_F q} - \frac{q}{2k_F})^2]$$

Lorsque $|\vec{q}| < 2k_F$, le nombre total d'états dans la région I excède de beaucoup celui dans la région II. En effet:

$$\begin{aligned}\int_0^{E^*(q)} \nu_I(E,q)dE &= \frac{1}{4}\nu(0)\hbar v_F q(1 - \frac{q}{2k_F}) \\ \int_{E^*(q)}^{E_{max}(q)} \nu_{II}(E,q)dE &= \frac{1}{4}\nu(0)\hbar v_F q\frac{q}{k_F}(1 - \frac{q}{3k_F})\end{aligned}$$

Cet exemple est instructif, car il montre comme nous le verrons à l'instant que les limites $q \to 0$ et $\omega \to 0$ ne commutent pas en général.

4.7.3 Réponse longitudinale lorsque $q << 2k_F$

Etudions d'abord le cas où $v_F q << \omega$. Dans ce cas, l'énergie $\hbar\omega$ est hors du continuum particule-trou. On peut donc faire tendre η vers 0 sans difficulté, et l'intégrale (4.21) est bien définie. On trouve alors (en faisant l'approximation de ne garder que la région I):

$$\tilde{K}^{00}(q,\omega)_{|\omega>>v_F q} = -\frac{1}{3}e^2\nu(0)(\frac{v_F q}{\omega})^2$$

Si l'on se reporte à l'analyse de la section **5.4**, ceci montre que:

$$\tilde{K}_{||}(q,\omega)_{|\omega>>v_F q} = \frac{1}{3}e^2\nu(0)v_F^2$$

Ceci correspond aussi à une conductivité longitudinale:

$$\tilde{\sigma}_{||}(q,\omega)_{|\omega>>v_F q} = \frac{1}{3}e^2\nu(0)v_F^2\frac{i}{\omega}$$

purement imaginaire à fréquence finie ω. Ceci correspond à des électrons accélérés sans dissipation par le champ électrique. En effet, la formule ci-dessus peut encore s'écrire:

$$\tilde{\sigma}_{||}(q,\omega)_{|\omega>>v_F q} = \frac{ne^2}{m}\frac{i}{\omega}$$

On a utilisé pour cela la relation entre la densité d'électrons n et le vecteur d'onde de Fermi: $n = k_F^3/6\pi^2$. Le résultat pour $\tilde{\sigma}_{||}(q,\omega)$ est donc purement *classique*. En effet, pour un électron classique accéléré dans un champ $\vec{E}$ uniforme, mais dépendant du temps,

$$\vec{v}(t) = \vec{v}(0) - \frac{e}{m}\int_0^t \vec{E}(t')dt'$$

Pour une densité n d'électrons, on a donc un courant:

$$\vec{J}(t) = \vec{J}(0) + \frac{ne^2}{m}\int_0^t \vec{E}(t')dt'$$

On peut donc définir la conductivité correspondante par:

$$\sigma_{cl}(t-t') = \frac{ne^2}{m}\theta(t-t')$$

En passant en transformée de Fourier:

$$\tilde{\sigma}_{cl}(\omega) = \frac{ne^2}{m}\frac{i}{\omega+i\eta} = \frac{ne^2}{m}[\pi\delta(\omega) + \frac{i}{\omega}]$$

On a donc un pic delta de conductivité à fréquence nulle. Le système des électrons libres est donc un conducteur parfait! Par contre, nous verrons un peu plus loin qu'il n'est pas supraconducteur, car il ne présente pas d'effet Meissner. Ce comportement de conducteur parfait est fragile. Si l'on ajoute des impuretés fixes, mais disposées aléatoirement dans le matériau, le comportement non dissipatif va disparaître lorsque la fréquence ω est suffisamment faible pour qu'un électron subisse plusieurs collisions avec des impuretés pendant une période $T = 2\pi/\omega$. Soit τ le temps typique entre deux collisions. Cette condition est équivalente à $\omega\tau << 1$. On peut qualitativement deviner que la conductivité sera approximativement donnée par la formule précédente, avec η non plus tendant vers zéro, mais η de l'ordre de $1/\tau$. Ceci constitue ce que l'on appelle le modèle de Drude:

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

Dans ce modèle , le comportement des électrons librement accélérés est retrouvé à la limite où $\omega\tau >> 1$.

Plaçons-nous maintenant dans l'autre limite, $\omega << v_F q$, et gardons pour simplifier la condition $|\vec{q}| < 2k_F$. Nous trouvons alors:

$$\tilde{K}^{00}(q,\omega)_{|\omega << v_F q} = e^2\nu(0)[1 - \frac{\omega}{2v_F q}\log(\frac{1 + \frac{\omega}{v_F q}}{1 - \frac{\omega}{v_F q}}) + i\frac{\pi}{2}\frac{\omega}{v_F q}]$$

Cette fois-ci, la limite $\omega \to 0$ est bien définie et:

$$\lim_{\omega\to 0}\tilde{K}^{00}(q,\omega)_{|\omega << v_F q} = e^2\nu(0)$$

C'est ce que nous avons supposé en utilisant l'approximation de Thomas-Fermi pour étudier l'écrantage d'une charge extérieure statique placée dans un métal. Dans cette limite, l'écrantage a lieu, car

$$\tilde{\epsilon}_{||}(q,0) - \epsilon_0 = \frac{1}{q^2}\tilde{K}^{00}(q,0) = \frac{e^2\nu(0)}{q^2} = \epsilon_0\frac{q_{TF}^2}{q^2}$$

ce qui diverge lorsque $q \to 0$. Contrairement à l'autre limite ($\omega >> v_F q$), les phénomènes mis en jeu sont de nature profondément quantique, comme en témoigne le fait que la longueur de Thomas-Fermi est contrôlée par la densité d'états au niveau de Fermi.

A fréquence finie, mais petite, la réponse admet une partie dissipative, ce qui correspond à une partie réelle de la conductivité longitudinale:

$$\Re\tilde{\sigma}_{||}(q,\omega)_{|\omega<<v_Fq} = \frac{\pi e^2\nu(0)\omega^2}{2v_Fq^3} = \frac{3\pi}{2}\frac{ne^2}{m}\frac{\omega^2}{(v_Fq)^3}$$

Physiquement, ceci signifie qu'une excitation (par exemple une onde acoustique) se propageant avec une vitesse inférieure à v_F sera amortie par le liquide de Fermi des électrons de conduction. L'amortissement consiste d'un point de vue microscopique à créer des paires particule-trou résonnantes avec la perturbation, c'est à dire d'impulsion $\hbar q$ et d'énergie $\hbar\omega$. Ce phénomène joue un grand rôle dans l'étude des modes collectifs pouvant se propager dans un liquide de Fermi. Il est souvent appelé amortissement de Landau.

4.7.4 Réponse transversale lorsque $q << 2k_F$

Si l'on se réfère à l'équation (4.22), et à l'idée qu'a priori les deux quantités spectrales $\nu_{2||}$ et $\nu_{2\perp}$ sont distinctes, on serait tenté de conclure que de manière assez générale, $\lim_{q\to 0}\lim_{\omega\to 0}\tilde{K}_\perp(q;\omega) \neq 0$. Or ceci ne se produit (presque par définition) que pour les milieux supraconducteurs. Il est donc intéressant d'examiner en détail ce qui se passe pour des électrons libres. D'après la discussion menée en **4.7.1**, il faut donc calculer la densité spectrale $\nu_{2\perp}$. Pour cela, il est commode de choisir un système de coordonnées où par exemple $\vec{q} = (q,0,0)$. Dans ce cas, on peut calculer $\nu_{2\perp}$ de la façon suivante:

$$\nu_{2\perp} = \frac{1}{V}\sum_k \frac{k^yk^y}{k_F^2}\, n^{(0)}(k-q/2)(1-n^{(0)}(k+q/2))\delta(E-\frac{\hbar^2}{m}\vec{k}.\vec{q})$$

Nous utiliserons un système de coordonnées cylindriques avec l'axe de révolution le long de l'axe x. Plus précisément, $\vec{k} = (k_{||}, k_\perp\cos\phi, k_\perp\sin\phi)$. Rappelons que $E = \frac{\hbar^2 k_{||}q}{m}$. Comme pour la densité d'états particule-trou, il convient lorsque $|\vec{q}| < 2k_F$ de distinguer deux intervalles pour l'énergie E.

Dans la région I,

$$\nu_{2\perp}(E,q) = \frac{1}{V}\frac{V}{8\pi^3}\int_{k_{1\perp}}^{k_{2\perp}} k_\perp dk_\perp \int_0^{2\pi} d\phi \frac{k_\perp^2}{k_F^2}\cos^2\phi\frac{dk_{||}}{dE}$$

Donc:

$$\nu_{2\perp}(E,q) = \frac{1}{32\pi^2}\frac{m}{\hbar^2 q}\frac{(k_{2\perp}^2-k_{1\perp}^2)(k_{2\perp}^2+k_{1\perp}^2)}{k_F^2}$$

Donc, si $0 \leq E \leq \hbar v_F q(1-\frac{q}{2k_F})$:

$$\nu_{2\perp}(E,q) = \frac{1}{4}\nu(0)\frac{E}{\hbar v_F q}[1-(\frac{E}{\hbar v_F q})^2-(\frac{q}{2k_F})^2]$$

Dans l'autre région, $k_{1\perp}=0$. Nous avons donc:

$$\nu_{2\perp}(E,q) = \frac{1}{32\pi^2}\frac{m}{\hbar^2 q}\frac{k_{2\perp}^4}{k_F^2}$$

Par conséquent, si $\hbar v_F q(1-\frac{q}{2k_F}) \leq E \leq \hbar v_F q(1+\frac{q}{2k_F})$:

$$\nu_{2\perp}(E,q) = \frac{1}{16}\nu(0)\frac{k_F}{q}[1-(\frac{E}{\hbar v_F q}-\frac{q}{2k_F})^2]^2$$

On vérifie que $\nu_{2\perp}(E,q)$ est bien continue en $E^* = \hbar v_F q(1-\frac{q}{2k_F})$. Nous avons:

$$\tilde{K}_\perp(q,\omega=0) = \frac{ne^2}{m} - 2e^2 v_F^2 \int_0^\infty \frac{dE}{E}\,\nu_{2\perp}(E,q)$$

La propriété remarquable est que dans la limite où $q \to 0$, le second terme compense exactement le premier! Ceci traduit le fait qu'il n'y a pas d'effet Meissner pour un gaz d'électrons libres. Tous calculs faits, nous obtenons:

$$\tilde{K}_\perp(q,\omega=0) = \frac{ne^2}{m}\{1-\frac{3}{2}[\frac{(1-x^2)^2}{8x}\log(\frac{1+x}{|1-x|})+\frac{5}{12}-\frac{x^2}{4}]\}$$

où $x=\frac{q}{2k_F}$. Dans la limite où $q \to 0$, on trouve:

$$\tilde{K}_\perp(q,\omega=0) \simeq \frac{ne^2}{m}x^2 = \frac{ne^2}{m}\frac{q^2}{4k_F^2}$$

4.8 Fonctions de corrélation et de réponse d'un oscillateur harmonique

Pour terminer, nous considérons un système modèle encore plus simple. Ce cas est bien sûr motivé par la forme de l'Hamiltonien de phase introduit au chapitre **3**. Dans le régime de faibles fluctuations classiques ou quantiques, nous avons vu qu'une approximation harmonique pour ce modèle est assez raisonnable. Que pouvons-nous dire des fonctions de réponse dans ce cas? Considérons l'oscillateur harmonique décrit par l'Hamiltonien habituel:

$$H = \frac{P^2}{2m} + \frac{m\omega^2}{2}X^2$$

Nous introduisons les opérateurs a et a^+ définis par:

$$a = (\frac{m\omega}{2\hbar})^{1/2}X + \frac{i}{(2\hbar m\omega)^{1/2}}P \tag{4.23}$$

$$a^+ = (\frac{m\omega}{2\hbar})^{1/2}X - \frac{i}{(2\hbar m\omega)^{1/2}}P \tag{4.24}$$

Avec ces définitions,

$$H = \hbar\omega(a^+a + \frac{1}{2})$$

Par ailleurs, a et a^+ satisfont la relation de commutation canonique $[a, a^+] = 1$. Supposons cet oscillateur préparé au temps $t = 0$ dans l'état décrit par la fonction d'onde $|\Psi_0>$. Au temps t, l'état $|\Psi(t)>$ est donné par: $|\Psi(t)>= \exp(-i\frac{Ht}{\hbar})|\Psi_0>$. Nous nous intéressons à la fonction de corrélation de l'opérateur position X entre les instants 0 et t. Avec l'état initial $|\Psi_0>$, cette corrélation est donnée par la valeur moyenne: $<\Psi(t)|X\exp(-i\frac{Ht}{\hbar})X|\Psi_0>$. Cette quantité s'écrit encore:

$$<\Psi_0|\exp(i\frac{Ht}{\hbar})X\exp(-i\frac{Ht}{\hbar})X|\Psi_0>$$

En utilisant $X = (\frac{\hbar}{2m\omega})^{1/2}(a + a^+)$, la valeur moyenne ci-dessus s'écrit donc:

$$\frac{\hbar}{2m\omega} <\Psi_0|(e^{i\omega t}a^+ + e^{-i\omega t}a)(a^+ + a)|\Psi_0>$$

Supposons maintenant l'oscillateur en équilibre thermodynamique avec un thermostat à température T. $|\Psi_0>$ est alors remplacé par un mélange statistique d'états. Si $|n>$ désigne l'état propre de l'oscillateur d'énergie $\hbar\omega(n + 1/2)$, sa probabilité dans un tel mélange statistique est donnée par:

$$p_n = Z^{-1}\exp(-\beta\hbar\omega(n + 1/2))$$

Comme d'habitude, la fonction de partition Z est déterminée en imposant que la somme des probabilités p_n soit égale a 1. On en tire:

$$p_n = \frac{\exp(-\beta\hbar\omega(n + 1/2))}{\sum_{m=0}^{\infty}\exp(-\beta\hbar\omega(m + 1/2))} = \frac{\exp(-\beta\hbar\omega n)}{\sum_{m=0}^{\infty}\exp(-\beta\hbar\omega m)}$$

La fonction de corrélation $C(t)$ pour l'oscillateur à température T est alors définie comme:

$$C(t) = \frac{\hbar}{2m\omega}(1 - \exp(-\beta\hbar\omega))\sum_{n=0}^{\infty} <n|e^{i\omega t}a^+a + e^{-i\omega t}aa^+|n> e^{-\beta\hbar\omega n}$$

Nous avons utilisé le fait que: $< n|a^+a^+|n >=< n|aa|n >= 0$ Par ailleurs, $< n|a^+a|n >= n$ et $< n|aa^+|n >= n+1$. Nous avons donc:

$$C(t) = \frac{\hbar}{2m\omega}(1 - \exp(-\beta\hbar\omega)) \sum_{n=0}^{\infty}(2n\cos(\omega t) + e^{-i\omega t})e^{-\beta\hbar\omega n}$$

Nous trouvons finalement:

$$C(t) = \frac{\hbar}{m\omega}\frac{\exp(-\beta\hbar\omega)}{1 - \exp(-\beta\hbar\omega)}\cos(\omega t) + \frac{\hbar}{2m\omega}e^{-i\omega t}$$

La limite de l'oscillateur classique est obtenue lorsque la différence d'énergie entre deux niveaux successifs $\hbar\omega$ est petite devant l'énergie thermique k_BT. Autrement dit, le nombre moyen de niveaux occupés est: $< n >= \frac{\exp(-\beta\hbar\omega)}{1-\exp(-\beta\hbar\omega)} \simeq \frac{k_BT}{\hbar\omega}$ qui est grand devant 1 lorsque $\hbar\omega << k_BT$. Dans la limite classique où $\frac{\hbar\omega}{k_BT}$ tend vers zéro, la fonction de corrélation devient

$$C(t)_{class} = \frac{k_BT}{m\omega^2}\cos(\omega t)$$

C'est le résultat que donnerait un calcul purement classique. Nous retrouvons lorsque $t = 0$ le théorème d'équipartition que l'on peut mettre sous la forme:

$$\frac{1}{2}m\omega^2 < X^2 >= \frac{1}{2}k_BT$$

Dans la limite opposée où $\frac{\hbar\omega}{k_BT}$ est très grand, l'oscillateur est essentiellement dans son état fondamental. Dans ce cas:

$$C(t)_{T=0} = \frac{\hbar}{2m\omega}e^{-i\omega t}$$

Le fait que cette quantité soit non nulle traduit l'existence des fluctuations quantiques de point zéro lorsque $\hbar \neq 0$.

L'autre quantité intéressante est la fonction de réponse de cet oscillateur. Imaginons que l'on perturbe ce système par une force constante dans l'espace, mais dépendant du temps $\lambda(t)$. On branche cette perturbation au temps $t = 0$, instant où nous supposons l'oscillateur à l'équilibre thermique à la température T. On mesure alors la position moyenne $< X(t) >$ au cours du temps. En l'absence de perturbation, $< X(t) >= 0$. En présence de la force $\lambda(t)$, $< X(t) >$ est en général non nulle, et il est souvent possible de la représenter par un développement en puissances de la force λ. Lorsque λ est faible, le premier terme suffit, et il a la forme:

$$< X(t) >= \int_0^t R(t,t')\lambda(t')dt' + O(\lambda^2)$$

La quantité $R(t,t')$ est la fonction de réponse. En supposant cette réponse causale (la conséquence arrive *après* la cause!), $R(t,t') = 0$ si $t' \geq t$.

Il est très simple de calculer $R(t,t')$ pour le système classique. En effet, en présence d'une force extérieure $\lambda(t)$, l'équation du mouvement s'écrit:

$$m\ddot{X} + m\omega^2 X = \lambda(t)$$

Comme l'équation est linéaire (avec un second membre), il suffit de l'étudier pour $\lambda(t) = \delta(t-t')$. Cette force instantannée induit une discontinuité de la vitesse au temps t' soit:

$$\dot{X}(t'+\epsilon) - \dot{X}(t'-\epsilon) = 1/m$$

Soit $X_0(t) = A\cos(\omega t) + B\sin(\omega t)$ une solution de l'équation du mouvement en l'absence de perturbation λ. En présence de $\lambda(t) = \delta(t-t')$, la nouvelle solution s'écrit:

$$\begin{aligned} X(t) &= X_0(t) + \frac{1}{m\omega}\sin(\omega(t-t'))\ (t \geq t') \\ X(t) &= X_0(t)\ (t \leq t') \end{aligned}$$

Ce choix satisfait l'exigence de causalité: il n'y a pas de modification du système avant l'instant où s'exerce la perturbation. Dans le cas général, nous pouvons écrire $\lambda(t) = \int_0^\infty \lambda(t')\delta(t-t')dt'$. La linéarité de l'équation du mouvement entraîne:

$$X(t) = X_0(t) + \int_0^t \frac{\sin(\omega(t-t'))}{m\omega}\lambda(t')dt' \tag{4.25}$$

La fonction de réponse $R(t,t')$ est donc donnée par:

$$R(t,t') = \frac{\sin(\omega(t-t'))}{m\omega}\theta(t-t') \equiv R(t-t')$$

La fonction θ est définie par $\theta(x) = 1$ si $x > 0$ et $\theta(x) = 0$ si $x < 0$. Pour un oscillateur classique, la fonction de réponse et la fonction de corrélation sont liées par la relation souvent appelée *théorème de fluctuation-dissipation*:

$$R(t) = -\frac{1}{k_B T}\frac{dC}{dt}(t)$$

Le nom de cette relation provient entre autres de la théorie du mouvement Brownien. La fonction de réponse du fluide dans lequel se meut une particule Brownienne donne la viscosité et donc l'amortissement du mouvement de la particule. La fonction de corrélation se réfère aux fluctuations thermiques des molécules du fluide qui ont pour effet de créer un force aléatoire dépendant du temps sur cette même particule. Cette relation est une propriété générale des systèmes dynamiques classiques perturbés au voisinage d'un état d'équilibre statistique. Elle se généralise aussi à des systèmes quantiques, avec toutefois quelques petites modifications.

Une propriété remarquable de l'oscillateur harmonique est que sa fonction de réponse est indépendante de la température! Ceci a une conséquence physique inportante: des sytèmes d'oscillateurs harmoniques indépendants ne peuvent donc pas avoir de transitions de phases. Les transitions de phases observées dans de nombreux systèmes physiques ayant des degrés de liberté continus sont donc nécessairement dûes à des effets d'interactions.

Il y a une propriété peut-être encore plus remarquable de la fonction de réponse R d'un oscillateur libre: elle est indépendante de $\hbar$! Pour établir ceci, considérons l'oscillateur quantique en présence de la force extérieure $\lambda(t)$. L'Hamiltonien d'un tel système s'écrit:

$$H_\lambda(t) = \frac{P^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2 X^2 - \lambda(t)X$$

Come précédemment, nous supposons l'oscillateur dans l'état $|\Psi_0>$ au temps $t=0$. Son état au temps t est donné par le ket $|\Psi_t>$ solution de l'équation de Schrödinger:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)>= H_\lambda(t)|\Psi(t)>$$

La valeur moyenne $<X(t)>$ est bien sûr définie par:

$$<X(t)>=<\Psi(t)|X|\Psi(t)>$$

Cette quantité obéit à l'équation, tirée de l'équation de Schrödinger:

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}<X(t)>=<[X,H_\lambda(t)]>$$

En utilisant la relation de commutation canonique $[X,P]=i\hbar$, nous obtenons:

$$\frac{\partial}{\partial t}<X(t)>=\frac{<P(t)>}{m}$$

De la même façon, nous avons:

$$\frac{\partial}{\partial t} < P(t) >= -m\omega^2 < X(t) > +\lambda(t)$$

En conclusion:

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2} < X(t) > +m\omega^2 < X(t) >= \lambda(t)$$

Cette équation est identique à l'équation classique du mouvement. Soit $< X_0(t) >$ la valeur moyenne de l'opérateur position dans l'état de l'oscillateur au temps t obtenu à partir de $|\Psi_0 >$ à $t = 0$, en l'absence de force extérieure. Nous avons donc:

$$< X(t) >=< X_0(t) > + \int_0^t \frac{\sin(\omega(t-t'))}{m\omega} \lambda(t')dt'$$

Cette équation, comparée à l'équation (4.25) montre que la fonction de réponse de l'oscillateur libre quantique est la même que celle de l'oscillateur classique. Ces calculs s'étendent sans difficulté à tout système composé d'oscillateurs harmoniques indépendants. En particulier, on voit que tous les calculs menés en section **3.1.4** restent valables à température finie. Par conséquent, le modèle du champ de phase *traité dans l'approximation harmonique* ne peut pas expliquer la disparition de la supraconductivité pour des températures supérieures ou égales à T_c. Pour cela, il faudrait prendre explicitement en considération toutes les non-linéarités provenant du caractère périodique de la variable de phase, ou bien encore revenir à un modèle plus microscopique d'électrons en interaction, comme dans la théorie BCS.