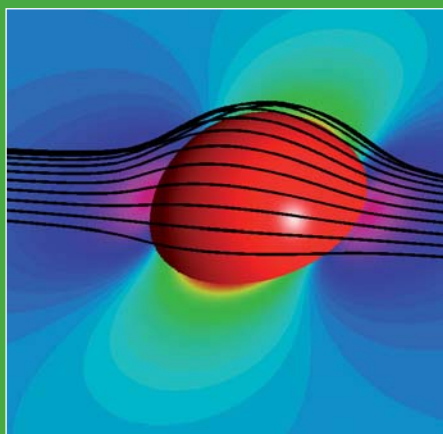


PHYSIQUE ET OUTILS MATHÉMATIQUES

MÉTHODES ET EXEMPLES



ANGEL ALASTUEY
MARC MAGRO
PIERRE PUJOL

Angel Alastuey, Marc Magro et Pierre Pujol

Physique et outils mathématiques : méthodes et exemples

S A V O I R S A C T U E L S

EDP Sciences / CNRS Éditions

Imprimé en France.

© **2008, EDP Sciences**, 17, avenue du Hoggar, BP 112, Parc d'activités de Courtaboeuf,
91944 Les Ulis Cedex A
et
CNRS ÉDITIONS, 15, rue Malebranche, 75005 Paris.

Tous droits de traduction, d'adaptation et de reproduction par tous procédés réservés pour tous pays. Toute reproduction ou représentation intégrale ou partielle, par quelque procédé que ce soit, des pages publiées dans le présent ouvrage, faite sans l'autorisation de l'éditeur est illicite et constitue une contrefaçon. Seules sont autorisées, d'une part, les reproductions strictement réservées à l'usage privé du copiste et non destinées à une utilisation collective, et d'autre part, les courtes citations justifiées par le caractère scientifique ou d'information de l'oeuvre dans laquelle elles sont incorporées (art. L. 122-4, L. 122-5 et L. 335-2 du Code de la propriété intellectuelle). Des photocopies payantes peuvent être réalisées avec l'accord de l'éditeur. S'adresser au : Centre français d'exploitation du droit de copie, 3, rue Hautefeuille, 75006 Paris. Tél. : 01 43 26 95 35.

ISBN EDP Sciences 978-2-7598-0043-8

Table des matières

Liste des exercices	vii
Préface	ix
Avant-propos	xi
Introduction	xiii
1 Réponse linéaire et analyticité	1
1.1 Propriétés générales	3
1.1.1 Position du problème	3
1.1.2 Définition de la susceptibilité	7
1.1.3 Analyticité de la susceptibilité	8
1.1.4 Propriétés de parité et dissipation	10
1.1.5 Comportement aux basses et aux grandes fréquences	11
1.1.6 Relations de Kramers-Kronig	13
1.1.7 Règles de somme	18
1.1.8 Perturbations inhomogènes	19
1.2 Applications et exemples	21
1.2.1 Admittance d'un circuit RLC	21
1.2.2 Absorption et dispersion dans un diélectrique	25
1.2.3 Écoulement oscillant dans un capillaire	31
1.2.4 Réponse d'un plasma dans l'approximation de Vlasov	38
1.2.5 Conductivité et formule de Kubo	45
1.3 Exercices	54
2 Fonctions de Green indépendantes du temps	61
2.1 Propriétés générales	63
2.1.1 Définition et propriétés des fonctions de Green	63
2.1.2 Point de vue opératoire	67
2.1.3 Opérateur Laplacien	70
2.1.4 Opérateur de Helmholtz	83
2.1.5 Opérateurs Laplacien et de Helmholtz en basse dimension	87

2.1.6	Opérateurs inhomogènes	97
2.2	Applications et exemples	104
2.2.1	Origine de la méthode des images	104
2.2.2	Boule en mouvement uniforme dans un fluide	107
2.2.3	Densité d'états d'une particule quantique	113
2.2.4	Diffusion par un potentiel répulsif	119
2.2.5	Modélisation simple du vent soufflant sur un mur	122
2.3	Exercices	128
3	Fonctions de Green dépendantes du temps	143
3.1	Propriétés générales	145
3.1.1	Fonctions de Green et causalité	145
3.1.2	Opérateurs à variables séparables	148
3.1.3	Équation de diffusion	155
3.1.4	Équation de Schrödinger	165
3.1.5	Équation de Bloch	177
3.1.6	Équation de d'Alembert	181
3.2	Applications et exemples	199
3.2.1	Diffusion dans un segment	199
3.2.2	Diffraction de Fraunhofer	203
3.2.3	Émission d'ondes sonores	209
3.2.4	Front d'onde en régime supersonique	215
3.2.5	Sur l'instantanéité de la propagation de la chaleur	221
3.2.6	Polarisabilité de l'atome d'hydrogène	227
3.3	Exercices	236
4	Méthode du Col	245
4.1	Propriétés générales	247
4.1.1	Intégrale simple	247
4.1.2	Intégrale sur un chemin du plan complexe	254
4.1.3	Cas d'une intégrale multiple	262
4.2	Applications et exemples	267
4.2.1	Formule de Stirling et facteur d'indiscernabilité	267
4.2.2	Équivalence des ensembles canonique et micro-canonique	270
4.2.3	Cristal harmonique à basse température	275
4.2.4	Modèle d'Ising	280
4.2.5	Approximation semi-classique	287
4.3	Exercices	294
A	Fonctions d'une variable complexe	301
B	Transformée de Laplace	305
C	Opérateurs différentiels à une variable	309

D	Espaces de Hilbert et notation de Dirac	313
E	Calcul d'intégrales gaussiennes	317
F	Généralités sur les transformations de coordonnées	323
G	Harmoniques sphériques	327
H	Dérivée fonctionnelle	331
I	Fonctions de Green usuelles	333
J	Solutions des exercices	337
K	Références bibliographiques	377
	Bibliographie	381
	Index	387

Liste des exercices

Chapitre premier : pages 54-58

1. Fonctions de réponse associées à des opérateurs linéaires
2. Fonction de réponse d'un circuit RLC
3. Particule brownienne chargée
4. Raie d'absorption
5. Application des relations de Kramers-Kronig en astrophysique
6. Règles de somme
7. Réponse à un bruit
8. Relations de Kramers-Kronig pour un métal
9. Propagation des signaux dans les milieux diélectriques

Chapitre 2 : pages 128-141

1. Fonction de Green G_∞ du Laplacien en 3d
2. Fonction de Green G_∞ du Laplacien en dimension $d \geq 3$
3. Fonctions de Green du Laplacien en 1d et 2d
4. Symétrie des fonctions de Green du Laplacien avec C.L. de Dirichlet homogènes
5. Fonctions de Green de Neumann spéciales du Laplacien
6. Règles de somme et résolvante
7. Plan conducteur
8. Fonctions de Green du Laplacien en coordonnées sphériques
9. Charge ponctuelle dans une sphère conductrice
10. Charge ponctuelle et sphère diélectrique
11. Fonction de Green G_∞ du Laplacien en coordonnées cylindriques
12. Tenseur d'Oseen
13. Fonction de Green en théorie de l'élasticité
14. Laplacien discret et réseau de résistances
15. Méthode des images pour un problème bidimensionnel

16. Hangar semi-cylindrique soumis au vent
17. Opérateur de Dirac
18. Avance du périhélie de Mercure
19. Oscillateur harmonique en présence d'une impureté

Chapitre 3 : pages 236-242

1. Unicité des solutions des équations de diffusion et de d'Alembert
2. Relations de réciprocité
3. Équation pour les câbles longs
4. Conditions de Neumann en théorie de la diffraction
5. Fonction de Green du d'Alembertien en dimension $2 + 1$
6. Fonction de Green du d'Alembertien en dimension $1 + 1$
7. Fonction de Green G_∞ du Laplacien en dimension $d \geq 3$
8. Diffusion de la chaleur dans une boule
9. Des conditions de Dirichlet aux conditions de Robin
10. Conditions de Robin pour l'équation de la chaleur
11. Équation de Cattaneo en 3d
12. Équation de Klein-Gordon

Chapitre 4 : pages 294-298

1. Comportement asymptotique de la fonction de Bessel J_0
2. Coefficients du binôme
3. Forme asymptotique de la fonction de Green de Helmholtz
4. Ensemble isotherme-isobare
5. Évolution d'un paquet d'ondes et vitesse de groupe
6. De la fonction de Green de Cattaneo à celle de l'équation de diffusion
7. Modèle d'Ising avec des interactions à longue portée
8. Marche aléatoire de Bernoulli
9. Oscillateur harmonique et théorie des nombres

Préface

L'enseignement des outils mathématiques nécessaires en physique est une tâche difficile. Bien qu'il existe de nombreux cours de mathématiques pour physiciens, dont certains sous la plume d'auteurs célèbres, ceux-ci ne suscitent en général pas l'enthousiasme des étudiants. Certains rechignent en effet à s'imposer le minimum de rigueur mathématique nécessaire, alors que les autres, n'ayant peut-être pas su choisir une voie la plus conforme à leurs goûts, souhaitent un enseignement toujours plus formel. Comme dans beaucoup d'autres sujets «à l'interface», il n'est donc pas rare que l'on aboutisse à un résultat qui n'intéresse aucune des deux parties en présence. Ce livre a le grand mérite d'éviter cet écueil en présentant divers outils mathématiques dans le contexte des problèmes de physique, qui bien souvent, en ont motivé l'invention. Ainsi, par exemple, les fonctions analytiques ne sont pas abordées comme une construction mathématique abstraite, isolée de tout autre contexte et dont on découvrirait dans un second temps les nombreuses applications potentielles. Au contraire, elles apparaissent naturellement comme motivées par le problème de la réponse linéaire, permettant de trouver des relations sur les susceptibilités d'un système physique et d'appréhender les conséquences des relations de causalité. Les fonctions de Green ou la méthode du col sont présentées en insistant sur la diversité de leurs applications, en soulignant ainsi les relations entre divers domaines de la physique, souvent présentés de façon isolée. Cette approche permet de dégager les concepts communs à ces différents domaines ainsi que les mécanismes généraux essentiels. J'ai eu l'occasion d'assister au développement initial de ce cours dans le cadre du DEA «Physique statistique et phénomènes non linéaires de l'ENS Lyon». J'ai pu alors constater son succès, qui a largement dépassé le cadre du DEA en attirant de nombreux étudiants des maîtrises de mathématiques et de physique ainsi qu'une bonne partie des chercheurs du laboratoire de physique. Je souhaite à ce livre un succès comparable.

Stephan FAUVE

Avant-propos

Pendant l'hiver 1994-1995, Stephan FAUVE, alors responsable du DEA de Physique Statistique et Phénomènes Non-Linéaires de l'École Normale Supérieure de Lyon, proposa à l'un d'entre nous (A.A.) de faire un cours sur des outils mathématiques particulièrement utiles aux physiciens, comme les relations de Kramers-Kronig ou les fonctions de Green. Cette suggestion partait du constat, encore d'actualité à l'heure où nous écrivons ces lignes, que ces notions sont souvent voilées de mystère. Introduites de manière ponctuelle, chaque fois qu'elles interviennent dans un domaine particulier, elles apparaissent comme trop abstraites ou absconses, et donc hors de portée parce qu'elles feraient appel à des connaissances mathématiques trop pointues. Un des objectifs essentiels du cours qui débuta à la rentrée 1995 fut donc en quelque sorte de démythifier les méthodes correspondantes, en montrant qu'elles reposent sur des outils simples comme l'analyse dans le plan complexe. De plus, il s'agissait de privilégier les arguments et autres interprétations physiques, sans pour autant perdre la rigueur mathématique indispensable. Ce cours a été successivement repris par les deux autres auteurs de cet ouvrage (P.P. puis M.M.), d'abord en tant que cours de DEA, puis comme cours de première année de Master de physique. Ainsi, tout en conservant l'esprit original, le contenu du cours a été enrichi de nouvelles méthodes de résolution ainsi que d'autres applications, tandis que sa présentation a été adaptée à des étudiants de première année de Master.

L'ouvrage réalisé reprend la démarche des cours successivement donnés par chacun d'entre nous, en incorporant des aspects pédagogiques motivés par les réactions et les difficultés des étudiants. Il consiste en un exposé général des méthodes suivi d'exemples choisis parmi différents domaines de la physique. Le niveau requis correspond à la Licence de physique. Plus précisément, le lecteur est supposé être familier avec les piliers de la physique classique que sont la mécanique, l'électromagnétisme et la thermodynamique. Pour certains exemples, une connaissance limitée de concepts élémentaires de mécanique quantique ou de physique statistique est nécessaire. Lorsque les applications pourraient faire appel à des notions d'un niveau supérieur, nous avons opté pour des présentations très simples, accessibles directement sans avoir recours à des ouvrages spécialisés. Les digressions ou prolongements vers

des problèmes plus complexes sont détachés du texte principal sous la forme de brefs commentaires. Une collection d'exercices, suivis de quelques éléments de solution, et un ensemble d'annexes complètent le corps principal du livre. Les annexes décrivent essentiellement certains compléments mathématiques, que le lecteur peut ainsi appréhender sans se perdre dans la littérature.

Le public concerné par ce livre comprend naturellement les étudiants en physique ou ingénierie, qu'ils soient en Master ou en Doctorat. Le caractère transversal de la présentation devrait les conduire à se détacher des particularités propres à chaque domaine pour identifier des propriétés essentielles communes. Passer d'un domaine à un autre, comme de la mécanique quantique à l'électromagnétisme par exemple, devrait les aider dans la synthèse de connaissances souvent éparpillées. L'ouvrage est également conçu comme un manuel, dont une lecture plus ponctuelle, en relation avec un problème concret, est possible. Dans ce but, les diverses situations physiques traitées sont répertoriées dans l'index. Ainsi, il devrait aussi être utile aux chercheurs, enseignants et ingénieurs.

Soulignons que l'approche et le style de ce livre le démarquent des ouvrages habituels de mathématiques pour la physique. Ici, il n'est point nécessaire de se mettre dans la peau d'un mathématicien, d'adopter sa tournure d'esprit et de maîtriser son langage... Pour l'ensemble des lecteurs concernés, l'apprentissage des méthodes devrait ainsi être plus efficace, notamment à travers les nombreuses applications traitées en détail. Nous espérons que ce livre contribuera à diffuser ces méthodes très utiles et simples d'emploi lorsqu'elles sont bien comprises.

L'idée d'écrire ce livre nous vint dans le courant de l'année 2002. Conçu au départ comme une simple transcription de nos notes de cours, le projet fut progressivement enrichi de nouveaux exemples et exercices. Il fut aussi l'occasion de discussions animées, chacun de nous trois ayant à cœur la réalisation d'un ouvrage le plus pédagogique possible. Il peut paraître difficile, voire frustrant, pour un chercheur ou un enseignant-chercheur de consacrer son temps à l'écriture d'un ouvrage didactique dont les résultats ne sont pas vraiment originaux. Cette contribution à la diffusion d'un savoir d'intérêt tout à fait actuel nous apporte finalement autant de plaisir qu'une découverte, bien que les méthodes exposées soient au demeurant fort anciennes !

Nous remercions Stephan FAUVE qui, après avoir été en quelque sorte à l'origine de cet ouvrage, nous a fait le plaisir et l'honneur d'en écrire la préface. Nous sommes reconnaissants à François DELDUC pour sa disponibilité, sa sagacité et ses suggestions, qui nous ont été utiles à maintes reprises. Merci aussi à Emmanuel LÉVÊQUE, qui a eu la gentillesse de réaliser l'illustration de la page de couverture. Merci enfin au rapporteur anonyme pour ses suggestions et ses critiques, ainsi qu'à Michèle LEDUC et Michel LE BELLAC pour leur confiance.

Lyon, Potsdam, Toulouse
Avril 2008

Introduction

Le but de ce livre est de présenter quelques méthodes générales pour résoudre des problèmes physiques variés. Les méthodes choisies relèvent de l'exploitation des propriétés analytiques des susceptibilités en réponse linéaire, de l'application des fonctions de Green à la résolution d'équations aux dérivées partielles, et de la méthode du col pour l'estimation d'intégrales de tout type.

Comme illustré par la diversité des exemples traités, ces méthodes s'appliquent avec succès à de nombreux problèmes d'électromagnétisme, de mécanique classique ou quantique, de physique statistique ou de théorie des champs, etc. En fait, dresser un inventaire des applications reviendrait à énumérer presque tous les domaines. Ce large éventail d'applications possibles a inspiré une présentation transversale de ces méthodes, dans un cadre général qui ne soit pas spécifique à une branche ou un domaine particulier. Ce point de vue unificateur détermine la structure de chaque chapitre : la première partie est consacrée à l'exposé de propriétés générales qui mettent en lumière le caractère universel de certains mécanismes ; des exemples variés sont présentés dans la deuxième partie ; ces exemples enrichissent la compréhension des mécanismes généraux en suggérant des connexions entre problèmes différents ; bien entendu, ils présentent également un intérêt et une motivation qui leur sont propres. Les exercices proposés en troisième partie, et pour lesquels nous donnons des indications de solutions, complètent chaque chapitre. La présentation adoptée ici donne la préférence aux arguments et aux exemples physiques, sans masquer pour autant les difficultés et les subtilités mathématiques.

Au-delà de leur intérêt pour la résolution de problèmes concrets, ces méthodes présentent des caractéristiques remarquables qui sont discutées en détail dans chaque chapitre. Nous présentons ici quelques-unes d'entre elles, qui nous semblent particulièrement importantes. Les propriétés analytiques des susceptibilités sont peu dépendantes de la complexité plus ou moins grande de la dynamique intrinsèque du système considéré. Par exemple, un pôle dans l'admittance d'un circuit RLC est en quelque sorte identique à un pôle dans la constante diélectrique d'un milieu matériel. Cette structure analytique commune ouvre la voie à des modélisations simples.

Les singularités de la susceptibilité d'un système soumis à un faible forçage monochromatique s'identifient aux modes propres du système. Leur amortissement est contrôlé par des mécanismes dissipatifs. Cette présence de dissipation implique que le forçage doit fournir de l'énergie pour entretenir des oscillations. Dans certains systèmes, la dissipation est explicitement introduite dans les équations du mouvement, comme la viscosité en hydrodynamique. Dans les systèmes conservatifs à l'équilibre thermodynamique, elle est induite par des mécanismes subtils. Néanmoins, dans tous les cas, sa signature analytique est identique ! Soulignons qu'en l'absence de dissipation, une absorption d'énergie est également possible *via* des effets résonants.

En vertu de la linéarité des équations aux dérivées partielles considérées, les fonctions de Green statiques et dynamiques constituent les briques élémentaires qui permettent de construire la solution générale par superposition. Les fonctions de Green causales présentent aussi un double caractère. D'une part, elles peuvent être interprétées comme des fonctions de réponse. D'autre part, elles décrivent la diffusion et/ou la propagation de certaines quantités physiques.

Pour définir univoquement la solution d'une équation aux dérivées partielles, il est essentiel d'imposer des conditions aux limites sur la quantité recherchée. Il faut garder à l'esprit que des conditions aux limites voisines peuvent conduire à des solutions extrêmement différentes. De plus, ces conditions aux limites doivent être ajustées de sorte à incorporer les caractéristiques physiques du problème considéré. Par exemple, dans un problème de diffusion dans une boîte, l'évolution de la densité de particules dépend de manière cruciale de la nature réfléchissante ou absorbante des parois, qui se traduit par des conditions de bord distinctes.

Les propriétés de symétrie jouent un rôle important dans la résolution des équations aux dérivées partielles. Soulignons que ces propriétés doivent être analysées en examinant à la fois l'opérateur en jeu, la forme des frontières et la nature des conditions aux limites.

Les fonctions de Green associées aux résolvantes sont extrêmement utiles. Elles permettent d'analyser les propriétés spectrales des opérateurs concernés, et elles apparaissent comme les ingrédients naturels des développements perturbatifs. De plus, elles sont reliées simplement à des fonctions de Green dynamiques, ce qui facilite la détermination de ces dernières.

Enfin, la méthode du col est d'une très grande importance pratique de par ses innombrables applications. Elle embrasse une large panoplie de significations physiques suivant les domaines considérés. Par exemple, elle conduit à la théorie champ moyen de Landau de la transition paramagnétique-ferromagnétique, tout comme à l'approximation semi-classique en mécanique quantique, en passant par l'extensivité de l'énergie libre d'un gaz idéal *via* la formule de Stirling !

Chapitre 1

Réponse linéaire et analyticit 

Quel que soit le domaine, m canique classique ou m canique quantique,  lectromagn tisme, hydrodynamique, thermodynamique, physique statistique, etc., un physicien est souvent conduit   d terminer la r ponse d'un syst me   une faible perturbation ext rieure. Il peut s'agir, par exemple, du courant induit dans un circuit par application d'une tension alternative, ou de la polarisation d'un atome soumis   un champ  lectrique variable, ou bien encore du d bit de fluide dans un capillaire forc  par un gradient de pression. Bien que ces syst mes rel vent de diff rents domaines de la physique, la r ponse recherch e doit ob ir   des principes simples et fondamentaux, et donc communs   tous ces probl mes. Ainsi, dans tous les cas  tudi s, la r ponse doit satisfaire au principe de causalit , qui impose que la perturbation appliqu e   un temps donn  n'agisse sur l' tat du syst me que pour des temps post rieurs. Par ailleurs, si la perturbation est suffisamment faible, la r ponse du syst me peut, en g n ral,  tre suppos e lin aire en la perturbation.

Dans ce chapitre, il est montr  comment quelques principes simples permettent d' tablir des r sultats g n raux sur la forme et les propri t s de la r ponse lin aire. Cette approche pr sente deux atouts majeurs. Le premier, d j   voqu , tient justement au caract re g n rique des propri t s obtenues, ind pendamment de la nature pr cise et de la complexit  du syst me consid r . Cet aspect universel est illustr  par l' tude d taill e de plusieurs syst mes soumis   des excitations oscillant dans le temps   une fr quence donn e. Le second atout majeur de cette approche peut para tre *a priori* surprenant : en effet, bien que les principes permettant d' tablir les propri t s g n rales de la r ponse lin aire soient simples, leurs cons quences ne sont pas pour autant mineures et sont m me parfois retentissantes ! Il est judicieux   cet  gard de d voiler d s   pr sent l'origine du titre de ce chapitre en justifiant ces propos par un exemple. Une des propri t s essentielles de la r ponse lin aire tient   l'analyticit  d'une quantit  physique centrale, la susceptibilit , qui est con ue comme une fonction de la fr quence de l'excitation. Sans entrer dans les d tails, indiquons simplement que la susceptibilit  v rifie des relations

importantes, caractéristiques de certaines fonctions analytiques et dites de Kramers-Kronig. Ces relations ont une portée inattendue. Par exemple, elles impliquent un résultat standard d'électromagnétisme, à savoir que dans n'importe quel milieu dispersif, la vitesse de propagation d'ondes électromagnétiques est inférieure à la vitesse de la lumière dans le vide.

Dans la première partie de ce chapitre, les propriétés générales de la réponse à une faible excitation sont établies à partir du triptyque causalité-linéarité-stationnarité. Ces propriétés générales sont ensuite explicitées à travers différents exemples. L'intérêt spécifique de chaque exemple tient à l'utilisation concrète d'une ou plusieurs propriétés, tant pour la compréhension des mécanismes en jeu que pour leur description phénoménologique. De plus, ces exemples sont choisis dans différents domaines de la physique (électronique, mécanique quantique, électromagnétisme, mécanique des fluides, physique statistique et enfin physique des plasmas) afin de mettre en lumière la puissance des méthodes, ainsi que leur caractère unificateur, source d'analogies nombreuses et fécondes. Naturellement, chaque exemple présente également un intérêt propre.

Les exemples sont présentés suivant un ordre croissant de difficulté résultant d'une dynamique interne des systèmes de plus en plus complexe. Ainsi, le premier exemple concerne un système classique à petit nombre de degrés de liberté : c'est un circuit RLC qui possède en plus une dynamique intrinsèque linéaire, de type oscillateur harmonique. Ensuite, nous passons à l'étude de systèmes continus, qui ont donc un nombre infini de degrés de liberté. Nous commençons avec l'exemple d'un diélectrique qui illustre l'application des propriétés d'analyticité à des modélisations phénoménologiques. L'exemple suivant est un écoulement oscillant dans un capillaire forcé par une variation de pression. Nous abordons enfin l'étude de la réponse linéaire de systèmes avec un grand nombre de degrés de liberté et à l'équilibre thermodynamique, cette problématique de mécanique statistique constituant un domaine en soi ! Un premier exemple est l'étude d'un plasma soumis à une onde de densité de charge dans une approche de type champ moyen à la Vlasov. À titre de dernière application, nous présentons différentes démonstrations des formules de Kubo classique et quantique, relatives à la conductivité électrique. Notons enfin qu'un dernier exemple dévolu à l'atome d'hydrogène soumis à un champ électrique variable est présenté dans le chapitre 3, cet exemple constituant également une application des développements perturbatifs en termes de fonctions de Green.

1.1 Propriétés générales

1.1.1 Position du problème

Considérons un système général ayant un nombre quelconque de degrés de liberté, et dont la description relève de n'importe quel domaine de la physique. Ce système est initialement dans un état stationnaire $\mathcal{E}_0$ et les quantités physiques relatives à cet état sont donc indépendantes du temps. Imaginons maintenant que ce système soit soumis à une faible perturbation homogène mais dépendant du temps, $F(t)$, avec les conditions initiales suivantes :

$$\left\{ \begin{array}{l} \text{État}(t = -\infty) = \mathcal{E}_0 \\ F(t = -\infty) = 0 \end{array} \right\}.$$

Examinons alors une certaine quantité physique ou observable A . Ici, il s'agit de déterminer la forme de la réponse du système à la perturbation, c'est-à-dire la relation entre $A(t)$ et $F(t')$. Pour fixer les idées, $\mathcal{E}_0$ peut correspondre par exemple à un oscillateur mécanique au repos, F à une force et A au déplacement de cet oscillateur par rapport à sa position d'équilibre.

Forme générale de la réponse

Comme il est toujours possible d'effectuer sur la quantité physique A étudiée un décalage de sa valeur d'équilibre $A(\mathcal{E}_0)$, nous poserons désormais $A(\mathcal{E}_0) = 0$ sans perte de généralité. La réponse du système à la perturbation doit obéir à des principes physiques simples et c'est pour cette raison qu'elle possède des propriétés communes à de nombreuses situations. Étudions ces propriétés successivement :

Linéarité. Même pour des systèmes dont les équations du mouvement sont non-linéaires, comme la perturbation est faible, il est naturel de supposer que la réponse $A(t)$ est linéaire en $F(t')$, c'est-à-dire que

$$A(t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt' K_0(t, t') F(t'). \quad (1.1)$$

Ceci revient à ne conserver que le premier terme d'un développement de Taylor en puissances de F pour la fonctionnelle $A_{[F]}(t)$,

$$A_{[F]}(t) = A_0 + \int_{-\infty}^{+\infty} dt' \left. \frac{\delta A_{[F]}(t)}{\delta F(t')} \right|_{F=0} F(t') + \dots$$

avec $A_0 = A_{[F=0]} = A(\mathcal{E}_0) = 0$ par hypothèse et donc $K_0(t, t') = \left. \frac{\delta A_{[F]}(t)}{\delta F(t')} \right|_{F=0}$. K_0 est appelée dérivée fonctionnelle¹ de $A_{[F]}$ prise en $F = 0$.

1. Le lecteur intéressé peut consulter l'annexe H où sont rappelées la définition et les propriétés de la dérivée fonctionnelle. Toutefois, cette notion n'est pas utilisée dans ce chapitre.

En fait, soulignons que deux hypothèses fondamentales doivent être nécessairement vérifiées afin que le développement précédent soit légitime. Tout d'abord, il faut que l'état $\mathcal{E}_0$ soit un état stable : faiblement écarté de cet état, le système doit en rester proche dans son évolution ultérieure. Ceci exclut bien sûr des états stationnaires instables, comme par exemple, celui d'un pendule pesant avec centre de gravité au-dessus du point d'attache. Ensuite, la différentiabilité de $A_{[F]}$ implique une dépendance suffisamment régulière en F de la fonctionnelle A . *A contrario*, la non-différentiabilité est la signature de comportements singuliers, comme ceux à l'œuvre au point critique d'une transition de phase en thermodynamique[✱].

Un autre point important à souligner est le caractère non instantané de la réponse du système. Autrement dit, la valeur de l'observable A à l'instant t dépend en principe de la valeur de la perturbation F à d'autres instants t' .

✱ **Commentaire 1.1.1.** Par exemple, pour un système magnétique présentant une transition entre des phases ferromagnétique et paramagnétique, à la température critique la susceptibilité diverge, et l'aimantation n'est plus proportionnelle au champ magnétique extérieur appliqué.

L'hypothèse de linéarité impose donc que K_0 soit une quantité intrinsèque au système et à l'état $\mathcal{E}_0$. Elle dépend bien sûr de l'observable A considérée. Elle ne dépend pas de l'évolution temporelle précise de F , mais seulement de la manière dont le forçage agit sur le système. Les propriétés de cette grandeur vont être étudiées tout au long de cette section.

Causalité. Il s'agit d'un principe fondamental en physique et qui va au-delà de l'hypothèse de linéarité. En reprenant l'exemple d'un oscillateur mécanique, il indique simplement que la force appliquée à un instant donné t_0 n'agit sur le déplacement de l'oscillateur que pour des instants postérieurs à t_0 . En d'autres termes, et dans le cas général, la réponse du système à un instant donné ne dépend que de la perturbation appliquée à des temps antérieurs, soit :

$$K_0(t, t') = 0 \text{ pour } t < t'. \quad (1.2)$$

Nous montrerons dans la suite que cette propriété simple a des conséquences fondamentales. Pour l'instant, en injectant la condition (1.2) dans l'expression (1.1), nous obtenons

$$A(t) = \int_{-\infty}^t dt' K_0(t, t') F(t'). \quad (1.3)$$

Stationnarité. $\mathcal{E}_0$ étant stationnaire, K_0 est invariant par translation dans le temps, i.e. :

$$K_0(t, t') = K_0(t - t').$$

En effet, la dépendance de K_0 en la seule différence $t - t'$, garantit l'invariance de K_0 si t et t' sont simultanément décalés d'un même temps Δt . Cela implique que ce décalage Δt pour la perturbation $F(t)$ donne le même décalage pour la réponse $A(t)$. Plus précisément, la réponse du système à la perturbation $F_2(t) = F_1(t - \Delta t)$ est donnée par

$$A_2(t) = \int_{-\infty}^t dt' K_0(t, t') F_2(t') = \int_{-\infty}^t dt' K_0(t, t') F_1(t' - \Delta t).$$

Si $K_0(t, t') = K_0(t - t')$, un simple changement de variable dans l'intégrale précédente montre que $A_2(t) = A_1(t - \Delta t)$.

En vertu de l'ensemble des propriétés précédentes, la réponse du système se réécrit donc comme

$$A(t) = \int_{-\infty}^t dt' K_0(t - t') F(t')$$

ou encore

$$A(t) = \int_0^{+\infty} d\tau K_0(\tau) F(t - \tau). \quad (1.4)$$

Propriétés de la fonction de réponse et interprétation

$K_0(\tau)$ joue donc le rôle de fonction de réponse avec mémoire puisqu'elle contrôle la contribution de la perturbation à l'instant $t - \tau$ à la quantité A pour l'instant ultérieur t . Afin de préciser la signification de K_0 , prenons le cas où l'excitation est un pulse, i.e. $F(t) = F_0 \delta(t - t_0)$ où $\delta(t - t_0)$ est la distribution de Dirac centrée en t_0 . L'action du pulse est d'écarter faiblement le système de l'état stationnaire $\mathcal{E}_0$ à l'instant t_0 , l'évolution ultérieure du système étant régie par sa seule dynamique interne. Or, d'après l'équation (1.4), la réponse à ce type d'excitation est

$$A_{pulse}(t) = F_0 K_0(t - t_0) \text{ pour } t > t_0. \quad (1.5)$$

L'évolution correspondante de l'observable A est donc simplement proportionnelle à la fonction $K_0(\tau)$. Ceci confirme que la fonction de réponse K_0 est évidemment spécifique à l'observable A considérée. De plus, nous pouvons en déduire immédiatement la nature qualitative des comportements de $K_0(\tau)$, quand $\tau \rightarrow \infty$ et quand $\tau \rightarrow 0$, à partir d'arguments simples concernant l'évolution intrinsèque du système sans forçage extérieur.

Temps longs. Comme $\mathcal{E}_0$ est stable, $A_{pulse}(t)$ reste faible (d'ordre F_0) à tout temps, et donc $K_0(\tau)$ est bornée pour $\tau \geq 0$. Si la stabilité est faible², le système oscille indéfiniment au voisinage de $\mathcal{E}_0$, et par conséquent $K_0(\tau)$ oscille sans décroître quand $\tau \rightarrow \infty$. Cette situation est typique des systèmes mécaniques conservatifs, comme l'oscillateur harmonique par exemple.

Si la stabilité est forte, le système revient vers l'état initial $\mathcal{E}_0$ au cours de l'évolution. La réponse $A_{pulse}(t)$ tend alors vers zéro quand $t \rightarrow \infty$, ce qui implique la décroissance de $K_0(\tau)$ aux grands τ ($K_0(\infty) = 0$). Ce comportement traduit une perte de mémoire progressive du système. Elle est le fruit de mécanismes de dissipation, ceux-ci influant directement sur la vitesse de décroissance de $K_0(\tau)$ à l'infini. En effet, plus la dissipation est importante, plus l'effet d'une perturbation s'amortit rapidement : ceci conduit à une décroissance rapide de $K_0(\tau)$. Par exemple, pour une particule immergée dans un fluide très visqueux, la réponse en vitesse à une force excitatrice décroît très rapidement sur une échelle de temps extrêmement courte, inversement proportionnelle au coefficient de frottement visqueux. Un autre exemple, à la physique beaucoup plus complexe, concerne les électrons de conduction dans un métal. Le processus de dissipation est ici engendré par le transfert d'énergie des électrons aux ions du réseau cristallin par collisions[✱].

Plus celles-ci sont nombreuses, plus les électrons « oublient » rapidement leur « passé ». La fonction $K_0(\tau)$ doit alors décroître d'autant plus rapidement que la dissipation est plus importante. Les comportements attendus pour ces deux exemples sont donc extrêmement semblables. Cette analogie est d'ailleurs à la base de l'introduction du modèle de Drude pour la conduction, où l'effet des collisions électron-réseau est justement modélisé par une force de frottement fluide !

✱ Commentaire 1.1.2. Ces collisions engendrent des phonons qui pompent de l'énergie aux électrons. Ce mécanisme de transfert est prépondérant à température ambiante pour de nombreux métaux. À très basse température (quelques degrés Kelvin), les collisions avec les impuretés deviennent dominantes. Elles induisent une tendance à la localisation des électrons rétrodiffusés par interférences quantiques. Cet effet quantique lié au désordre diminue la conductivité, ce qui peut être modélisé par un terme de frottement fluide supplémentaire dans l'équation du mouvement phénoménologique d'un électron de conduction (voir le livre [Kittel]).

Temps courts. Sous l'action du pulse, $A(0^+)$ prend une valeur non-nulle dont l'amplitude est déterminée par l'inertie (dans un sens large) du système. Par exemple, la réponse en vitesse d'un ballon de foot soumis à un

2. Les notions de stabilité aux sens faible et fort caractérisant un point fixe stable d'un système dynamique sont bien présentées dans l'excellent livre [Arnold] de V. Arnold sur les équations différentielles.

coup de pied est contrôlée aux faibles temps par la masse du ballon. Ainsi, d'après la forme (1.5) de la réponse, $K_0(0^+)$ doit être inversement proportionnelle à l'inertie du système grossièrement parlant. Aux temps courts, la forme de $K_0(\tau)$ est déterminée par l'évolution libre des constituants élémentaires du système, et leurs interactions mutuelles peuvent être traitées perturbativement en général. Notons que cette forme est spécifique à l'observable A considérée, alors que les comportements de relaxation aux temps longs sont contrôlés par des effets collectifs intrinsèques à la dynamique interne du système, et indépendants de cette observable particulière.

Remarquons que la dynamique de A est régie dans de nombreux cas par une équation différentielle linéaire : la fonction de réponse K_0 est alors une fonction de Green particulière pour cette équation différentielle. Plus précisément, $K_0(t - t')$ est la fonction de Green causale associée à cette équation différentielle. Comme les chapitres 2 et 3 sont consacrés à l'étude des fonctions de Green, nous renvoyons le lecteur à la lecture de ces chapitres. Par ailleurs, l'annexe C présente une méthode systématique et utile pour calculer la fonction de réponse K_0 dans ces situations.

1.1.2 Définition de la susceptibilité

Considérons maintenant une perturbation de la forme

$$F(t) = \text{Re} (F_z e^{-izt})$$

où Re désigne la partie réelle, et avec $z = \omega + i\epsilon$, ω réel, et $\epsilon > 0$. Comme $\epsilon > 0$, la perturbation a la forme d'une sinusoïdale amortie pour $t < 0$ de telle sorte que $F(-\infty) = 0$. La fréquence complexe z est donc prise dans le demi-plan complexe supérieur. La réponse à une excitation monochromatique à fréquence purement réelle $z = \omega$ sera définie comme la limite $\epsilon \rightarrow 0^+$, ce qui correspond physiquement au branchement adiabatique de la perturbation à $t = -\infty$. L'expression (1.4) de la réponse se réécrit alors :

$$A(t) = \int_0^{+\infty} d\tau K_0(\tau) \text{Re} (F_z e^{-iz(t-\tau)}) \quad (1.6)$$

$$= \text{Re} (\chi(z) F_z e^{-izt}) \quad (1.7)$$

où la susceptibilité $\chi(z)$ est définie par

$$\chi(z) = \int_0^{+\infty} d\tau K_0(\tau) e^{iz\tau}. \quad (1.8)$$

Dans l'équation (1.7), nous avons utilisé le caractère réel de la fonction de réponse K_0 . En vertu de la linéarité de la réponse, $A(t)$ est monochromatique comme $F(t)$ avec la même fréquence complexe z . Nous pouvons ainsi

réécrire $A(t)$ donné par l'expression (1.7) comme $A(t) = \operatorname{Re}(A_z e^{-izt})$ avec l'amplitude complexe

$$A_z = \chi(z)F_z. \quad (1.9)$$

Dorénavant, les parties réelles seront parfois omises dans certaines manipulations linéaires.

Soulignons que la susceptibilité $\chi(z)$ est une quantité complexe même pour $z = \omega$ réel. Son module mesure le rapport entre les amplitudes de A et de F alors que son argument donne le déphasage entre F et A . L'expression (1.8) de $\chi(z)$ s'identifie à la transformée de Laplace de K_0 pour l'argument $s = -iz$. Un rappel sur les propriétés de la transformée de Laplace est donné dans l'annexe B.

En pratique, il arrive souvent que le forçage soit monochromatique, de sorte que l'introduction de la susceptibilité $\chi(z)$ est tout à fait naturelle. Cela dit, si le forçage, toujours introduit adiabatiquement à $t = -\infty$, est une fonction du temps arbitraire, l'analyse de Fourier permet de décomposer $F(t)$ en une somme d'excitations monochromatiques. De manière évidente, la réponse linéaire (1.4) se réduit alors à la somme correspondante des réponses aux différentes composantes monochromatiques de $F(t)$, chaque réponse partielle étant contrôlée par la susceptibilité à la fréquence considérée. La connaissance de $\chi(z)$ permet donc de décrire la réponse à n'importe quelle excitation.

1.1.3 Analyticité de la susceptibilité

Dans ce paragraphe, il est montré comment des propriétés fondamentales telles que la causalité, combinées aux comportements de $K_0(\tau)$, se manifestent au niveau de la susceptibilité par des propriétés d'analyticité. Les conséquences de ces propriétés d'analyticité sont nombreuses, à la mesure de la richesse du concept de fonctions analytiques.

Analyticité dans $\mathbb{C}^+$

Les propriétés analytiques de la susceptibilité dépendent clairement du comportement de $K_0(\tau)$ quand $\tau \rightarrow +\infty$. Or, la discussion du paragraphe précédent indique que K_0 est bornée pour tout état stable $\mathcal{E}_0$. Alors, pour $z = \omega + i\epsilon$ avec $\epsilon > 0$, $\chi(z)$ définie par la formule (1.8) est analytique en vertu du théorème de dérivation sous le signe somme. Cette absence de singularité dans $\mathbb{C}^+$ signifie, en particulier, que la susceptibilité y est finie. Cette propriété peut être interprétée simplement en termes énergétiques : en effet, lorsque $\epsilon > 0$, l'énergie injectée dans le système par la perturbation $F(t) = F_z e^{-izt}$ est finie, et les variations des quantités physiques du système restent donc finies.

Axe réel

Pour $\epsilon \rightarrow 0^+$, c'est-à-dire z réelle, seule une forte décroissance de $K_0(\tau)$ pour $\tau \rightarrow +\infty$ peut garantir l'analyticité de $\chi(z)$ jusque sur l'axe réel. Du point de vue physique, et conformément à la discussion précédente sur la nature de la stabilité de $\mathcal{E}_0$, il faut distinguer deux cas suivant la présence ou non de dissipation dans le système.

Dissipation présente. Comme justifié plus haut, la dissipation se manifeste par une décroissance suffisamment rapide de $K_0(\tau)$, typiquement une décroissance exponentielle de la forme

$$K_0(\tau) \sim \text{Cste } e^{-\lambda\tau} \quad \text{quand } \tau \rightarrow \infty. \quad (1.10)$$

La constante positive λ est l'inverse d'un temps de relaxation, caractéristique du mécanisme dissipatif à l'œuvre. Par exemple, pour une particule immergée dans un fluide, la fonction de réponse relative à la vitesse vérifie bien la propriété (1.10) avec λ proportionnelle au coefficient de frottement visqueux. De manière générale, le comportement (1.10) implique alors que $\chi(z)$ est bien analytique sur l'axe réel.

Dissipation absente ou faible. En l'absence totale de dissipation, la fonction de réponse oscille sans décroître en général. Si ω coïncide avec une des fréquences caractéristiques de ces oscillations, $\chi(\omega)$ diverge : c'est le phénomène de résonance, avec une divergence de la réponse liée à une injection infinie d'énergie dans le système[✖].

Cette situation se rencontre par exemple dans le cas d'un oscillateur harmonique non amorti.

Dans certains cas, il apparaît une dissipation faible dans le système, au sens où $K_0(\tau)$ décroît bien aux grands temps, mais moins rapidement qu'une exponentielle, i.e. typiquement comme une loi de puissance,

$$K_0(\tau) \sim \frac{\text{Cste}}{\tau^p} \quad \text{quand } \tau \rightarrow \infty.$$

✖ Commentaire 1.1.3. Si la grandeur A est constamment amplifiée, on finit par sortir du cadre de la réponse linéaire. Les termes non-linéaires dans les équations du mouvement forcé ne peuvent plus être négligés, et ce sont eux qui peuvent conduire à une saturation de A , l'amplitude de saturation n'étant plus alors proportionnelle à l'intensité F_0 du forçage. Dans la pratique, le seuil de rupture du système peut être dépassé avant que la saturation ne soit atteinte, ce qui n'est pas, parfois, sans conséquences dramatiques...

Alors $\chi(z)$ diverge en $z = 0$ pour $p \leq 1$. Si $p > 1$, $\chi(z)$ est finie en 0 mais elle a des dérivées singulières. Le point $z = 0$ est alors typiquement un point de branchement d'une coupure.

En résumé, $\chi(z)$ est toujours analytique dans $\mathbb{C}^+$ et des singularités sont possibles sur $\mathbb{R}$ si la dissipation est absente ou faible.

Prolongement analytique

Dans $\mathbb{C}^-$, la représentation intégrale (1.8) de χ en termes de K_0 n'est plus nécessairement définie. Toutefois, χ peut y être prolongée analytiquement en général. Plusieurs possibilités sont alors envisageables, dont deux sont décrites ci-dessous.

Absence totale de singularités. Supposons que χ reste analytique dans $\mathbb{C}^-$. La définition (1.8) de χ montre que $\chi(z) \rightarrow 0$ lorsque $z \rightarrow \infty$ avec $\text{Im } z > 0$ (voir §1.1.5 pour une étude détaillée du comportement asymptotique de $\chi(z)$ à l'infini). Nous en déduisons que $\chi(z)$ doit diverger quand $z \rightarrow \infty$ avec $\text{Im } z < 0$. Sinon, en effet, $\chi(z)$ serait une fonction entière et bornée, et par conséquent constante en vertu du théorème de Liouville sur les fonctions analytiques. Comme par ailleurs elle s'annule à l'infini dans $\mathbb{C}^+$, elle serait alors nécessairement nulle.

Présence de singularités dans $\mathbb{C}^-$. Les singularités de χ dans $\mathbb{C}^-$ peuvent être de natures diverses, comme des lignes de coupure ou bien des pôles. Ces pôles correspondent typiquement aux modes propres du système dans l'état $\mathcal{E}_0$ comme nous le verrons dans la suite sur plusieurs exemples.

Cette étude de l'analyticité de $\chi(z)$ dresse le cadre qui permet d'aborder la discussion des autres propriétés générales de la susceptibilité.

1.1.4 Propriétés de parité et dissipation

Considérons la limite où la fréquence z devient réelle, *i.e.* $z = \omega + i\epsilon$ avec $\epsilon \rightarrow 0^+$. La susceptibilité $\chi(\omega)$ ainsi définie à partir de $\chi(z)$, possède une partie réelle $\chi'(\omega)$, ainsi qu'une partie imaginaire $\chi''(\omega)$. Rappelons que la présence de cette partie imaginaire montre que la réponse est en général déphasée par rapport au forçage. Si $K_0(\tau)$ décroît aux grands temps, alors nous pouvons prendre la limite $\epsilon \rightarrow 0^+$ sous le signe somme dans la représentation intégrale (1.8) de $\chi(z)$. Cette procédure donne :

$$\begin{aligned}\chi'(\omega) &= \int_0^\infty d\tau \cos(\omega\tau) K_0(\tau), \\ \chi''(\omega) &= \int_0^\infty d\tau \sin(\omega\tau) K_0(\tau).\end{aligned}\tag{1.11}$$

De manière évidente, χ' et χ'' sont donc respectivement des fonctions paire et impaire de ω . Si $K_0(\tau)$ ne tend pas vers zéro quand $\tau \rightarrow \infty$, alors les représentations intégrales précédentes de $\chi'(\omega)$ et $\chi''(\omega)$ ne sont plus valables. Néanmoins, ces quantités sont finies, excepté éventuellement aux points singuliers de $\chi(z)$ situés sur l'axe réel, et elles satisfont les mêmes propriétés de parité que celles données par les expressions (1.11).

Il est assez fréquent que la puissance fournie en moyenne sur une période $T = 2\pi/\omega$ par le forçage soit proportionnelle à $\chi'(\omega)$ ou bien à $\omega\chi''(\omega)$, comme nous le verrons au cas par cas pour chaque exemple traité. Cette puissance est positive en général, ce qui signifie que l'opérateur extérieur imposant le forçage fournit de l'énergie au système. Ceci est évidemment le cas en présence de dissipation dans sa dynamique interne. Il faut noter que d'autres mécanismes d'absorption d'énergie, induits en particulier par des résonances, sont également possibles (voir exemples), cette situation étant typique des systèmes conservatifs : alors, en dehors de ces résonances, la puissance moyenne fournie par le forçage est nulle [✱]. L'ensemble de ces considérations implique que $\chi'(\omega) \geq 0$ pour tout ω , ou bien $\chi''(\omega) \geq 0$ pour $\omega > 0$.

✱ Commentaire 1.1.4. Naturellement, le forçage doit fournir une quantité finie d'énergie depuis son introduction à $t = -\infty$ jusqu'à l'instant présent considéré, pour écarter le système de l'état $\mathcal{E}_0$ et induire des oscillations d'amplitude finie de l'observable A . En revanche, ces oscillations étant enclenchées, leur entretien ne demande aucun apport d'énergie en moyenne sur une période $T = 2\pi/\omega$.

1.1.5 Comportement aux basses et aux grandes fréquences

Les diverses propriétés mathématiques de la susceptibilité $\chi(z)$ n'ont pas uniquement une utilité purement technique, mais aussi et surtout une interprétation qui permet de mieux comprendre et caractériser le système étudié. Ainsi, les comportements limites aux basses et grandes fréquences de la susceptibilité ont des transcriptions précises en termes physiques.

Basses fréquences

Considérons d'abord la limite basse fréquence $z \rightarrow 0$ de $\chi(z)$. Si $K_0(\tau)$ décroît aux grands temps de manière intégrable, alors $\chi(0)$ est finie et se réduit à

$$\chi(0) = \int_0^\infty d\tau K_0(\tau) \quad (1.12)$$

qui n'est autre que la susceptibilité statique contrôlant la réponse à un forçage constant F_0 . Notons que cette quantité peut souvent être déterminée à partir d'une approche complètement statique. La représentation intégrale (1.12) fournit alors une contrainte sur la fonction de réponse $K_0(\tau)$. Cela se révèle en particulier utile dans les cas où cette fonction n'est pas connue exactement, et pour lesquels une modélisation phénoménologique est développée.

Si $\chi(z)$ est analytique en $z = 0$, alors elle est développable en série entière de z et les coefficients correspondants sont des moments de $K_0(\tau)$ (qui décroît alors suffisamment rapidement comme discuté précédemment au §1.1.3). Si $z = 0$ est un point singulier, le développement de $\chi(z)$ aux petits z contient des termes singuliers déterminés par la nature de la décroissance de $K_0(\tau)$ (voir §1.1.3). À nouveau, ces propriétés peuvent être exploitées à des fins de modélisation.

Grandes fréquences

Le comportement à grandes fréquences de la susceptibilité est relié à la forme de $K_0(\tau)$ aux petits temps. Supposons que $K_0(\tau)$ soit indéfiniment différentiable par rapport à τ , et que toutes les dérivées correspondantes admettent également une transformée de Laplace pour z dans le demi-plan complexe supérieur. En reprenant la représentation intégrale (1.8) de la susceptibilité, nous obtenons alors par une intégration par parties :

$$\chi(z) = \frac{iK_0(0)}{z} - \frac{1}{iz} \int_0^{+\infty} d\tau K'_0(\tau) e^{iz\tau}. \quad (1.13)$$

Il est clair que la réitération de cette opération fournit un développement de la susceptibilité en série de Laurent autour de l'infini, c'est-à-dire en puissances inverses de z . Nous trouvons ainsi le comportement asymptotique de $\chi(z)$ pour z grand, i.e. :

$$\boxed{\chi(z) = \frac{iK_0(0)}{z} - \frac{K'_0(0)}{z^2} + O(1/z^3).} \quad (1.14)$$

Le développement (1.14), valable *a priori* pour $\text{Im } z > 0$, est prolongeable jusque sur l'axe réel en général, pourvu que les singularités éventuelles de $\chi(\omega)$ y soient localisées[✱]. Comme K_0 est réelle, nous en déduisons les développements asymptotiques des parties réelle et imaginaire de $\chi(\omega)$,

$$\chi'(\omega) = -\frac{K'_0(0)}{\omega^2} + O(1/\omega^4), \quad (1.15)$$

et

$$\chi''(\omega) = \frac{K_0(0)}{\omega} + O(1/\omega^3), \quad (1.16)$$

qui ne contiennent que des puissances inverses paires et impaires respectivement.

La décroissance de $\chi(\omega)$ aux grandes fréquences est une conséquence de l'inertie du système qui l'empêche de suivre l'excitation correspondante. Les développements asymptotiques précédents font intervenir le comportement aux temps courts de $K_0(\tau)$, dont la nature physique a été discutée plus haut. Notons que l'amplitude $K_0(0)$ du terme dominant dans l'expression (1.16) est justement inversement proportionnelle à l'inertie du système. De plus, l'amplitude $K'_0(0)$ du terme dominant dans le développement (1.15) est déterminée par l'évolution libre en général, sans intervention des interactions internes au système. Par conséquent, ces amplitudes sont aisément calculables, de sorte que les développements aux grandes fréquences sont particulièrement utiles dans les constructions *ad hoc* de $\chi(\omega)$.

Si les hypothèses énoncées sur $K_0(\tau)$ ne sont pas satisfaites, le développement en série de Laurent de $\chi(z)$ aux grands z peut contenir des termes singuliers. Par exemple, lorsqu'une dérivée d'ordre p de $K_0(\tau)$ en $\tau = 0$ n'est pas bien définie, seuls les p premiers termes du développement (1.14) sont en $1/z^k$ avec $1 \leq k \leq p$. Le terme suivant du développement asymptotique, qui tend vers zéro plus vite que $1/z^p$, n'est pas équivalent à une puissance inverse entière de z .

1.1.6 Relations de Kramers-Kronig

Ce paragraphe est consacré aux relations dites de Kramers-Kronig qui sont satisfaites par la susceptibilité. Nous allons d'abord établir ces relations avant de discuter leurs intérêts et applications.

✱ Commentaire 1.1.5.

Ceci est une recette de physicien ! Sur un plan mathématique, il n'est pas possible d'énoncer un ensemble de conditions nécessaires et suffisantes sur $K_0(\tau)$ qui garantissent la validité de (1.14) pour $z = \omega$ réelle. Une condition suffisante possible est que les intégrales de $K_0(\tau)$ et de ses dérivées soient absolument convergentes. Mais même lorsque $K_0(\tau)$ ne décroît pas à l'infini par exemple, la recette énoncée marche pratiquement toujours...

Supposons donc pour commencer que $\chi(z)$ soit une fonction analytique dans le demi-plan complexe supérieur $\mathbb{C}^+$ et dans $\mathbb{R}$, ce qui est le cas en présence d'une dissipation suffisamment importante dans le système. Considérons alors le contour fermé $\mathcal{C}$ dans le plan complexe représenté sur la figure 1.1 : il est constitué du segment sur l'axe réel $[-R, R]$ complété par le demi-cercle dans le demi-plan complexe supérieur de rayon R et de centre 0.

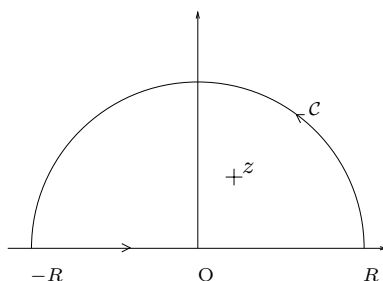


FIG. 1.1 – Contour $\mathcal{C}$ autour du point z .

Pour $z \in \mathbb{C}^+$, il est clair que la fonction $f(z')$ définie par

$$f(z') = \frac{\chi(z')}{(z' - z)}$$

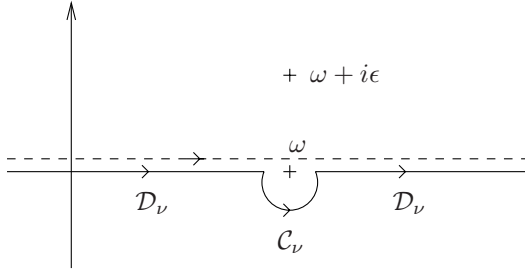
est analytique dans tout le demi-plan complexe supérieur, sauf en $z' = z$ où elle présente un pôle simple de résidu $\chi(z)$. L'application du théorème de Cauchy donne alors

$$\chi(z) = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} dz' \frac{\chi(z')}{(z' - z)}.$$

Comme $\chi(z)$ tend vers 0 quand $z \rightarrow \infty$ avec $\text{Im } z > 0$, l'intégrale sur le demi-cercle tend vers 0 quand $R \rightarrow \infty$ en vertu du lemme de Jordan. Il vient alors :

$$\chi(z) = \frac{1}{2\pi i} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - z)}. \quad (1.17)$$

Prenons maintenant la limite $\epsilon = \text{Im } z \rightarrow 0^+$ dans l'équation ci-dessus avec $\omega = \text{Re } z$. Pour le membre de gauche, nous obtenons $\chi(\omega)$ par continuité de $\chi(z)$ en $z = \omega$. Pour prendre cette limite dans le membre de droite, procédons comme suit. Fixons dans un premier temps ϵ . Comme par hypothèse χ est analytique sur l'axe réel, il existe $\nu \in \mathbb{R}$ suffisamment petit tel que χ soit analytique dans le disque de centre ω et de rayon ν . Il est alors judicieux de déformer le parcours $\mathbb{R}$ de l'intégrale (1.17) en $\mathcal{D}_\nu \cup \mathcal{C}_\nu$, où $\mathcal{D}_\nu$ est formé des demi-droites $] -\infty, \omega - \nu]$ et $[\omega + \nu, \infty[$ alors que $\mathcal{C}_\nu$ est le demi-cercle de centre ω et de rayon ν dans le demi-plan inférieur (voir figure 1.2). Comme

FIG. 1.2 – Contour $\mathcal{D}_\nu \cup \mathcal{C}_\nu$.

$f(z')$ est analytique à l'intérieur du domaine compris entre $\mathbb{R}$ et $\mathcal{D}_\nu \cup \mathcal{C}_\nu$, l'application du théorème de Cauchy donne :

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - z)} = \int_{-\infty}^{\omega-\nu} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - z)} + \int_{\omega+\nu}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - z)} + \int_{\mathcal{C}_\nu} dz' \frac{\chi(z')}{(z' - z)}.$$

La limite $\epsilon \rightarrow 0^+$ peut maintenant être prise facilement dans le membre de droite, et cette identité devient

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - z)} = \int_{-\infty}^{\omega-\nu} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)} + \int_{\omega+\nu}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)} + \int_{\mathcal{C}_\nu} dz' \frac{\chi(z')}{(z' - \omega)}. \quad (1.18)$$

L'égalité (1.18) est valable pour tout ν suffisamment petit et ne dépend pas de la valeur précise de ν . Le membre de droite peut donc être évalué en prenant la limite $\nu \rightarrow 0^+$. Pour l'intégrale sur $\mathcal{C}_\nu$, comme $\chi(z')$ est analytique en $z' = \omega$, il est légitime de remplacer $\chi(z')$ par son développement de Taylor au voisinage de $z' = \omega$,

$$\chi(z') = \chi(\omega) + \frac{d\chi}{d\omega}(\omega)(z' - \omega) + \dots$$

En paramétrant z' sur $\mathcal{C}_\nu$ par $z' = \omega + \nu e^{i\theta}$ avec $\theta \in [-\pi, 0]$, on montre alors aisément que

$$\lim_{\nu \rightarrow 0^+} \int_{\mathcal{C}_\nu} dz' \frac{\chi(z')}{(z' - \omega)} = i\pi\chi(\omega). \quad (1.19)$$

Pour l'intégrale sur $\mathcal{D}_\nu$, la limite $\nu \rightarrow 0^+$ définit la partie principale (PP), i.e. :

$$\begin{aligned} \lim_{\nu \rightarrow 0^+} \left[\int_{-\infty}^{\omega-\nu} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)} + \int_{\omega+\nu}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)} \right] \\ = \text{PP} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)} \end{aligned} \quad (1.20)$$

En reportant les résultats (1.19) et (1.20) dans l'identité (1.18), nous trouvons

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega - i\epsilon)} = \text{PP} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)} + i\pi\chi(\omega). \quad (1.21)$$

Remarquons que chacune des intégrales dans le membre de gauche de la définition (1.20) de la partie principale diverge si $\chi(\omega) \neq 0$. Cependant, ces divergences, en $\pm\chi(\omega) \ln \nu$, se compensent exactement et la somme des deux intégrales reste bien finie quand $\nu \rightarrow 0^+$. Notons aussi que le résultat (1.21) est, en fait, une conséquence de l'identité bien connue au sens des distributions :

$$\boxed{\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{(x - i\epsilon)} = \text{PP} \frac{1}{x} + i\pi\delta(x).} \quad (1.22)$$

Compte tenu de la formule (1.21), prendre la limite $\epsilon \rightarrow 0^+$ membre à membre dans l'identité (1.17), conduit à la relation

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

En exprimant $\chi(\omega)$ en termes de ses parties réelle et imaginaire

$$\chi(\omega) = \chi'(\omega) + i\chi''(\omega),$$

nous obtenons finalement les relations de Kramers-Kronig (K.K.) :

$$\boxed{\begin{aligned} \chi'(\omega) &= \frac{1}{\pi} \text{PP} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi''(\omega')}{(\omega' - \omega)}, \\ \chi''(\omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{PP} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi'(\omega')}{(\omega' - \omega)}. \end{aligned}} \quad (1.23)$$

Les relations de Kramers-Kronig sont d'une importance capitale pour les raisons suivantes :

i) En tant que conséquences de la causalité et de la dissipation, elles sont très générales et indépendantes de la complexité de la dynamique propre à chaque système.

ii) Ces formules exactes sont d'une très grande utilité en phénoménologie. En effet, dans certaines situations concrètes, il est possible d'avoir accès expérimentalement à la partie dissipatrice de la susceptibilité, par exemple sa partie imaginaire, pour fixer les idées. Les relations de K.K. permettent alors d'obtenir automatiquement la partie réelle correspondante. Cette méthode est bien illustrée par l'exemple du §1.2.2.

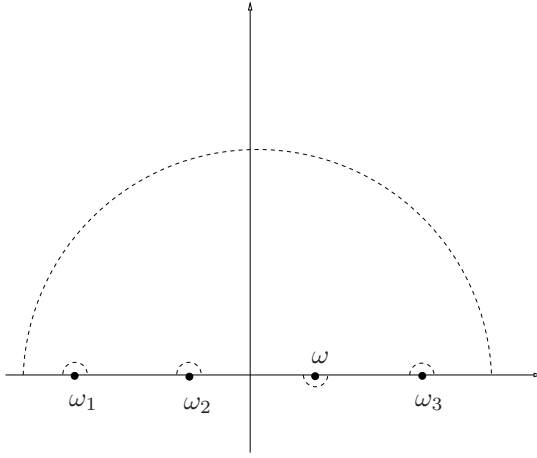


FIG. 1.3 – Contour utilisé dans le cas où χ a trois pôles ω_1 , ω_2 et ω_3 sur l'axe réel.

Soulignons que les relations de Kramers-Kronig peuvent se généraliser facilement au cas où $\chi(z)$ a des pôles simples sur l'axe réel. Imaginons en effet que $\chi(z)$ ait des pôles simples $\omega_1 \dots \omega_n$ avec résidus $R_1, \dots, R_n$ respectivement. Il suffit alors de reproduire le raisonnement précédent, mais avec un chemin d'intégration $\mathcal{C}$ dans le plan complexe qui contourne par le haut ces singularités, comme représenté sur la figure 1.3. Au voisinage de chaque pôle ω_k , $\chi(z)$ admet un développement en série de Laurent :

$$\chi(z') = \frac{R_k}{(z' - \omega_k)} + \text{partie régulière.}$$

Comme pour le cas précédent, il est alors possible d'effectuer l'intégrale sur le demi-cercle contournant la singularité considérée, en utilisant le développement de Laurent associé. En faisant tendre ultimement le rayon de chaque demi-cercle vers zéro, nous trouvons :

$$\chi(\omega) = \frac{1}{2\pi i} \text{PP} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi(\omega')}{(\omega' - \omega)} + \frac{1}{2} \left(\chi(\omega) - \sum_{k=1}^n \frac{R_k}{(\omega_k - \omega)} \right)$$

(le signe $-$ devant les résidus provient du sens anti-trigonométrique de l'intégration sur les demi-cercles contournant les pôles ω_k correspondants). En décomposant chaque résidu en parties réelle et imaginaire, $R_k = R'_k + iR''_k$,

nous obtenons finalement la généralisation des relations de Kramers-Kronig :

$$\boxed{\begin{aligned}\chi'(\omega) + \sum_{k=1}^n \frac{R'_k}{(\omega_k - \omega)} &= \frac{1}{\pi} \text{PP} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi''(\omega')}{(\omega' - \omega)}, \\ \chi''(\omega) + \sum_{k=1}^n \frac{R''_k}{(\omega_k - \omega)} &= -\frac{1}{\pi} \text{PP} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi'(\omega')}{(\omega' - \omega)}.\end{aligned}} \quad (1.24)$$

Notons que les parties principales dans ces relations, prennent en compte les n singularités des intégrands concernés en $\omega' = \omega_k$, en plus de celle en $\omega' = \omega$.

1.1.7 Règles de somme

Supposons que $K_0(\tau)$ satisfasse les hypothèses énoncées au §1.1.5, qui garantissent la validité des développements asymptotiques de $\chi'(\omega)$ et $\chi''(\omega)$ quand $\omega \rightarrow \infty$. De plus, supposons que $K_0(\tau)$ décroisse suffisamment rapidement de sorte que $\chi(z)$ soit bien analytique jusque sur l'axe réel. À partir du développement (1.16) de $\chi''(\omega)$ nous déduisons

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \omega \chi''(\omega) = K_0(0). \quad (1.25)$$

Par ailleurs, la deuxième équation de Kramers-Kronig donne

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \omega \chi''(\omega) = \lim_{\omega \rightarrow \infty} \frac{1}{\pi} \text{PP} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\omega \chi'(\omega')}{(\omega - \omega')}. \quad (1.26)$$

Dans le membre de droite de l'équation (1.26), il est légitime de passer la limite $\omega \rightarrow \infty$ sous le signe somme. En effet, la limite correspondante de l'intégrand $\omega \chi'(\omega')/(\omega - \omega')$, à ω' fixé, se réduit à $\chi'(\omega')$, qui est bien intégrable sur ω' . Le membre de gauche de la relation (1.26) peut, lui, être remplacé par $K_0(0)$ d'après le résultat (1.25). Il vient en conséquence

$$\boxed{\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \chi'(\omega) = K_0(0).} \quad (1.27)$$

Cette identité est une règle de somme. Elle contraint le moment d'ordre zéro de $\chi'(\omega)$ en termes d'une quantité plus aisément accessible, et elle présente donc un intérêt semblable à celui des développements asymptotiques aux grands ω établis page 13.

Il est possible d'obtenir de la sorte d'autres règles de somme pour χ' et χ'' . En particulier, le lecteur peut montrer par des raisonnements similaires (voir exercice 1.6 page 56) les règles de somme du premier moment pour χ'' ,

$$\boxed{\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \, \omega \left[\chi''(\omega) - \frac{K_0(0)}{\omega} \right] = K'_0(0),} \quad (1.28)$$

et du second moment pour χ' ,

$$\boxed{-\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \, \omega^2 \left[\chi'(\omega) + \frac{K'_0(0)}{\omega^2} \right] = K''_0(0).} \quad (1.29)$$

Notons qu'en vertu des comportements asymptotiques (1.16) et (1.15) respectivement, les intégrands $\omega(\chi''(\omega) - K_0/\omega)$ et $\omega^2(\chi'(\omega) + K'_0(0)/\omega^2)$ décroissent, aux grands ω , en $1/\omega^2$ au moins : ceci garantit bien la convergence des intégrales dans les membres de gauche des expressions (1.28) et (1.29).

Des manipulations similaires permettent d'obtenir des règles de sommes analogues pour des moments de $\chi(\omega)$ d'ordre supérieur. Comme signalé page 13, si une dérivée d'ordre p de $K_0(\tau)$ est singulière, seuls les p premiers termes du développement asymptotique (1.14) sont bien définis. Alors, les règles de somme précédentes restent valables pour les p premiers moments de $\chi(\omega)$.

1.1.8 Perturbations inhomogènes

Jusqu'à présent, nous n'avons pas considéré de dépendance spatiale pour la perturbation $F(t)$. Cependant, les propriétés mises en évidence précédemment se généralisent simplement au cas d'une perturbation inhomogène, et elles sont énumérées dans ce paragraphe.

Considérons un système infiniment étendu. Dans la pratique, il s'agit d'un système fini suffisamment grand, de sorte que les effets de bord sur ses propriétés en volume soient négligeables. Ces propriétés peuvent être caractérisées de manière intrinsèque, par une procédure de type limite thermodynamique où les bords du système sont rejetés à l'infini. Supposons à nouveau qu'il se trouve dans un état stationnaire $\mathcal{E}_0$ à $t = -\infty$. Imaginons maintenant que le forçage $F(\mathbf{r}, t)$ ait une dépendance spatiale. Pour étudier le comportement d'une quantité physique $A(\mathbf{r}, t)$ dépendant maintenant non seulement du temps, mais aussi de la position, on introduit naturellement la fonction de réponse $K_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t')$ telle que

$$\boxed{A(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' K_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') F(\mathbf{r}', t').} \quad (1.30)$$

À nouveau, les propriétés de K_0 sont intrinsèques au système dans l'état initial $\mathcal{E}_0$. Ainsi, si $\mathcal{E}_0$ est stationnaire et invariant par translation spatiale, la

fonction de réponse K_0 est une fonction de la différence des arguments, i.e. :

$$K_0(\mathbf{r}, \mathbf{r}', t, t') = K_0(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t').$$

Supposons maintenant que la perturbation soit une onde plane monochromatique de la forme

$$F(\mathbf{r}', t') = \text{Re} \left(F_{\mathbf{k}, z} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' - izt'} \right).$$

De manière analogue au cas homogène, l'observable A pourra donc s'écrire aussi comme

$$A(\mathbf{r}, t) = \text{Re} \left(\chi(\mathbf{k}, z) F_{\mathbf{k}, z} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - izt} \right)$$

avec

$$\chi(\mathbf{k}, z) = \int_0^\infty d\tau \int d\mathbf{r}' K_0(\mathbf{r}', \tau) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}' + iz\tau}. \quad (1.31)$$

La réponse en A a donc également une structure spatio-temporelle d'onde plane monochromatique comme le forçage, avec le même nombre d'onde $\mathbf{k}$ et la même fréquence complexe z . Pour $\mathbf{k}$ fixé, il est clair que tous les arguments utilisés dans le cas homogène restent valables. L'équivalent de $K_0(\tau)$ n'est autre ici que la transformée de Fourier $\tilde{K}_0(\mathbf{k}, \tau)$ de $K_0(\mathbf{r}, \tau)$, donnée par

$$\tilde{K}_0(\mathbf{k}, \tau) = \int d\mathbf{r}' K_0(\mathbf{r}', \tau) e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}'}.$$

En particulier, les relations de Kramers-Kronig s'écrivent maintenant

$$\begin{aligned} \chi'(\mathbf{k}, \omega) &= \frac{1}{\pi} \text{PP} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi''(\mathbf{k}, \omega')}{(\omega' - \omega)}, \\ \chi''(\mathbf{k}, \omega) &= -\frac{1}{\pi} \text{PP} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\chi'(\mathbf{k}, \omega')}{(\omega' - \omega)}, \end{aligned}$$

et il existe des règles de somme analogues à celles du cas homogène.

Dans le cas où le forçage a une dépendance quelconque en temps et en position, il est judicieux de le décomposer en une somme d'ondes planes monochromatiques, la somme portant à la fois sur les fréquences et les nombres d'onde. En vertu de la nature linéaire de la réponse, chaque composante monochromatique de A , de nombre d'onde $\mathbf{k}$ et de fréquence ω est alors simplement proportionnelle à la composante correspondante de F avec un facteur de proportionnalité qui n'est autre que $\chi(\mathbf{k}, \omega)$. De manière analogue à $\chi(\omega)$ dans le cas homogène, cette susceptibilité $\chi(\mathbf{k}, \omega)$ joue donc bien un rôle central pour la réponse à n'importe quel forçage inhomogène.

1.2 Applications et exemples

1.2.1 Admittance d'un circuit RLC

Pr sentation

Les exemples les plus simples de r ponse lin aire proviennent des syst mes classiques   petit nombre de degr s de libert  dont la dynamique interne est d j  lin aire. Un repr sentant standard de ces syst mes est un circuit  lectrique RLC, dont les  tats sont d crits par la charge Q du condensateur et l'intensit  I du circuit, variables analogues   la position et   la vitesse d'une particule en une dimension. L' tat stationnaire $\mathcal{E}_0$ est caract ris  par une charge nulle et une intensit  du courant nulle. Le for age ext rieur F correspond   une tension U appliqu e aux bornes du circuit, et branch e de mani re adiabatique. Nous allons  tudier l'intensit  du courant traversant le circuit, en r ponse   l'application de cette tension ext rieure. Le r le de l'observable A est donc tenu ici par l'intensit  I .

Notons d'embl e, que la r ponse en courant   une tension, entre bien dans le cadre physique g n ral introduit dans la premi re partie de ce chapitre. En effet, pour faire appara tre un courant dans le circuit, il faut n cessairement appliquer un champ  lectrique ext rieur aux porteurs de charge. En pratique, ce champ pourra  tre induit par un g n rateur de tension branch  aux bornes du circuit.

 tude et r solution

Rappelons l' quation diff rentielle r gissant l' volution du circuit repr sent  sur la figure 1.4. Soient U la tension aux bornes du circuit, I l'intensit 

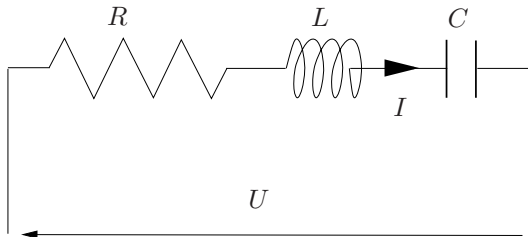


FIG. 1.4 – *Circuit RLC.*

du courant, et Q la charge du condensateur. Les tensions aux bornes de la r sistance, de la bobine inductive et de la capacit  sont respectivement RI , LdI/dt et Q/C . Comme $I = dQ/dt$ en vertu de la conservation de la charge,

la loi des noeuds s'écrit

$$\boxed{\frac{d^2 Q}{dt^2} + \frac{R}{L} \frac{dQ}{dt} + \frac{1}{LC} Q = \frac{U}{L}.} \quad (1.32)$$

Dans la situation considérée ici, les conditions initiales sont rejetées à $t = -\infty$, et s'écrivent $Q(-\infty) = 0$ et $I(-\infty) = 0$. La tension appliquée $U(t)$ est également nulle en $t = -\infty$. Lorsque celle-ci est monochromatique, de la forme $U = U_z e^{-izt}$ avec $z = \omega + i\epsilon$ et $\epsilon > 0$, la susceptibilité $\chi(z)$ contrôlant la réponse en courant est ici directement calculable sans passer par la fonction de réponse $K_0(\tau)$. Nous montrons que cette susceptibilité exhibe bien les propriétés d'analyticité générales. Puis, nous donnons la forme de $K_0(\tau)$, qui peut être obtenue de trois manières différentes.

Susceptibilité. Par suite de la linéarité des équations de l'électrocinétique, l'intensité $I(t)$ oscille avec la même fréquence z que la tension, i.e. $I = I_z e^{-izt}$. En insérant cette forme monochromatique dans la dérivée membre à membre de l'équation différentielle (1.32), il vient le résultat bien connu

$$I_z = \frac{U_z}{Z}$$

où $Z = R - i(Lz - 1/(Cz))$ est l'impédance du circuit. La susceptibilité est donc simplement égale à l'admittance, soit

$$\boxed{\chi(z) = \frac{iCz}{LCz^2 + iRCz - 1}.} \quad (1.33)$$

La susceptibilité $\chi(z)$ est ici une fraction rationnelle. En définissant

$$\delta = -R^2 C^2 + 4LC,$$

ses pôles sont situés en (voir figure 1.5) :

$$z_1 = \frac{-iRC - \sqrt{\delta}}{2LC} \quad ; \quad z_2 = \frac{-iRC + \sqrt{\delta}}{2LC} \quad \text{si } \delta > 0$$

ou

$$\tilde{z}_1 = -i \frac{RC - \sqrt{|\delta|}}{2LC} \quad ; \quad \tilde{z}_2 = -i \frac{RC + \sqrt{|\delta|}}{2LC} \quad \text{si } \delta < 0.$$

Comme $RC > \sqrt{|\delta|}$ lorsque $\delta < 0$, les deux pôles de $\chi(z)$ sont toujours dans le demi-plan complexe inférieur. Par conséquent, χ est bien analytique dans $\mathbb{C}^+$. Par ailleurs, les pôles de $\chi(z)$ correspondent manifestement aux modes propres du circuit RLC.

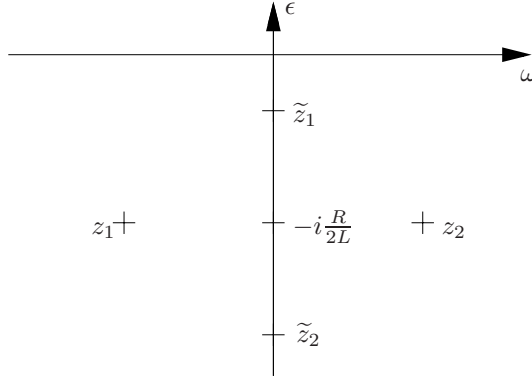


FIG. 1.5 – Les pôles (z_1, z_2) ou $(\tilde{z}_1, \tilde{z}_2)$ de l'admittance $\chi(z)$ d'un circuit RLC se situent dans le demi-plan complexe inférieur.

Comme la fraction rationnelle (1.33) est analytique dans $\mathbb{C}^+$, axe réel compris, les relations de Kramers-Kronig sont nécessairement satisfaites. Cela dit, sur un plan technique, il est intéressant de le vérifier explicitement sur cet exemple simple. Nous indiquons donc quelques étapes qui jalonnent les calculs correspondants. Pour $z = \omega$ réel, les parties réelle et imaginaire de $\chi(z)$ sont

$$\chi'(\omega) = \frac{R}{[R^2 + (L\omega - \frac{1}{C\omega})^2]} \quad \text{et} \quad \chi''(\omega) = \frac{(L\omega - \frac{1}{C\omega})}{[R^2 + (L\omega - \frac{1}{C\omega})^2]}. \quad (1.34)$$

Pour effectuer les intégrations en jeu dans les relations de K.K., il est commode de décomposer $\chi'(\omega)$ et $\chi''(\omega)$ en éléments simples.

Puis, il faut réécrire les parties principales comme des intégrales sur $] -L, \omega - \epsilon]$ et $[\omega + \epsilon, L[$, et prendre ensuite les limites $L \rightarrow +\infty$ et $\epsilon \rightarrow 0^+$. La vérification s'achève en utilisant l'identité[❧]

$$\lim_{L \rightarrow +\infty} \int_{-L}^L d\omega' \frac{1}{(\omega' - z_0)} = i\pi \operatorname{sign}(\operatorname{Im}(z_0)) \quad (1.35)$$

où $\operatorname{sign}(x)$ désigne le signe de x .

❧ Commentaire 1.2.1.

Pour démontrer l'identité (1.35), il suffit d'absorber la partie réelle de z_0 via une translation sur la variable ω' , puis de calculer l'intégrale de la partie paire en ω' par le théorème des résidus. Lorsque z_0 est réel, la limite de l'intégrale, qui est alors comprise au sens de la partie principale, est nulle.

Fonction de réponse. Pour déterminer $K_0(\tau)$, une première méthode consiste à déterminer le courant $I(t)$ induit par une tension $U(t)$ quelconque.

L'équation différentielle élémentaire (1.32) pour $Q(t)$ est alors résolue par la méthode de variation de la constante³. Dans l'expression intégrale obtenue pour $I(t) = dQ/dt$, qui est de la forme (1.4), p. 5, la fonction de réponse est identifiée à

$$K_0(\tau) = \frac{e^{-\frac{R}{2L}\tau}}{L\sqrt{\delta}} \left[\sqrt{\delta} \cos\left(\frac{\sqrt{\delta}}{2LC}\tau\right) - RC \sin\left(\frac{\sqrt{\delta}}{2LC}\tau\right) \right] \quad \text{pour } \delta > 0 \quad (1.36)$$

et

$$K_0(\tau) = \frac{e^{-\frac{R}{2L}\tau}}{L\sqrt{|\delta|}} \left[\sqrt{|\delta|} \operatorname{ch}\left(\frac{\sqrt{|\delta|}}{2LC}\tau\right) - RC \operatorname{sh}\left(\frac{\sqrt{|\delta|}}{2LC}\tau\right) \right] \quad \text{pour } \delta < 0. \quad (1.37)$$

Pour $\tau = 0$, ces expressions se réduisent à $K_0(0) = 1/L$, conformément à la signification physique de $K_0(0)$, et à l'interprétation de la bobine L comme décrivant l'inertie électrique dans l'analogie électromécanique habituelle. Ainsi, le comportement aux grandes fréquences $\chi(z) \sim i/(Lz)$ obtenu à partir de la formule (1.33), est bien en accord avec le comportement asymptotique général (1.14), p. 12.

Le lecteur est encouragé à retrouver les expressions (1.36) et (1.37), en considérant un forçage pulse $U_{pulse}(t) = F_0\delta(t - t_0)$. Il faut alors étudier la relaxation libre du circuit sans forçage, à partir des conditions initiales $Q(t_0^+) = 0$ et $I(t_0^+) = (F_0/L)$, induites par le pulse, et calculer l'intensité $I_{pulse}(t)$ du courant résultant. La fonction de réponse est alors obtenue en écrivant $K_0(\tau) = F_0^{-1}I_{pulse}(t_0 + \tau)$.

Enfin, il existe une troisième méthode pour retrouver les expressions (1.36) et (1.37) de $K_0(\tau)$. En effet, comme la susceptibilité χ a déjà été calculée directement, il suffit de prendre la transformée de Laplace inverse de $\chi(z)$, comme cela est proposé à l'exercice 1.2, p. 54.

Interprétation

Bien que cet exemple soit simple, il met déjà en valeur le contenu physique très riche des fonctions de réponse. En particulier, il illustre bien la relation générale, discutée dans le paragraphe 1.1.3, entre la dissipation et les propriétés d'analyticité de la susceptibilité. En effet, lorsque $R \neq 0$, la fonction de réponse $K_0(\tau)$ décroît exponentiellement aux grands temps. La présence de dissipation pour $R \neq 0$, se manifeste également par la nécessité de fournir constamment de l'énergie au circuit pour maintenir des oscillations du courant sans amortissement. Ainsi, la puissance fournie par le forçage, moyennée sur une période $T = 2\pi/\omega$,

$$\overline{\mathcal{P}} = \frac{1}{T} \int_0^T dt U(t) I(t),$$

3. Cette méthode est rappelée dans l'annexe C, p. 310.

est égale à

$$\overline{\mathcal{P}} = \frac{\chi'(\omega)}{2} |U_\omega|^2 . \quad (1.38)$$

Cette puissance est bien positive comme attendu, car $\chi'(\omega)$ est positif d'après la formule (1.34).

Lorsque $R = 0$, c'est-à-dire en l'absence de dissipation, alors $\delta = 4LC > 0$ de sorte que les expressions (1.36) et (1.33) se réduisent respectivement à

$$K_0(\tau) = \frac{1}{L} \cos(\tau/\sqrt{LC}) \quad \text{et} \quad \chi(z) = \frac{iCz}{LCz^2 - 1} .$$

La fonction de réponse ne tend donc plus vers zéro à l'infini, alors que la susceptibilité n'est plus analytique sur tout $\mathbb{R}$ car elle est singulière en $\omega = \pm\omega_0$ où $\omega_0 = 1/\sqrt{LC}$ est la fréquence propre du circuit LC. Pour $\omega \neq \omega_0$, comme la partie réelle $\chi'(\omega)$ de la susceptibilité s'annule, la puissance fournie $\overline{\mathcal{P}}$ est également nulle, en accord avec l'absence de dissipation. Le cas $\omega \rightarrow \pm\omega_0$ doit être examiné avec soin en prenant

$$z = \pm\omega_0 + i\epsilon \quad \text{avec} \quad \epsilon \rightarrow 0^+ .$$

Dans ce cas, nous trouvons

$$\chi(\pm\omega_0 + i\epsilon) \sim \frac{1}{2L\epsilon} .$$

Ainsi, la susceptibilité diverge mais en étant réelle, ce qui signifie que la puissance $\overline{\mathcal{P}}$ diverge pour la fréquence ω_0 . Ceci correspond bien sûr au phénomène de résonance pour l'oscillateur LC soumis au forçage.

Pour conclure, soulignons que les résultats de cet exemple sont caractéristiques de tout système dynamique en un point fixe stable vu comme un état stationnaire. Lorsqu'un tel système est soumis à un faible forçage extérieur, il reste au voisinage de ce point fixe, et les équations d'évolution correspondantes prennent une forme linéaire analogue à celle de l'équation différentielle (1.32). La susceptibilité $\chi(z)$ est alors une fraction rationnelle, dont les pôles, situés dans le demi-plan complexe inférieur ou sur l'axe réel, sont contrôlés par les modes propres de relaxation intrinsèques au point fixe considéré.

1.2.2 Absorption et dispersion dans un diélectrique

Présentation

Soit un milieu diélectrique plongé dans un champ électrique extérieur

$$\mathbf{E}_{ext}(t) = \text{Re}(\mathbf{E}_z e^{-izt})$$

oscillant à la fréquence complexe z , et dont la longueur d'onde est très grande devant la taille de l'échantillon. Cette condition permet de négliger

tout phénomène de propagation. Avec les hypothèses habituelles d'équilibre local, la polarisation d'origine microscopique $\mathbf{P}(\mathbf{r}, t)$ est simplement proportionnelle au champ électrique local $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t)$, qui est la somme de $\mathbf{E}_{ext}(t)$ et du champ électrique créé par les charges de polarisation ⁴. Comme les équations de Maxwell sont linéaires, la polarisation et le champ électrique local oscillent à la même fréquence complexe que le champ extérieur. En notant $\mathbf{E}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}(\mathbf{E}_z(\mathbf{r})e^{-izt})$, la relation constitutive s'écrit

$$\mathbf{P}(\mathbf{r}, t) = \epsilon_0 \text{Re}([\varepsilon(z) - 1] \mathbf{E}_z(\mathbf{r})e^{-izt}), \quad (1.39)$$

où la permittivité diélectrique relative complexe $\varepsilon(z)$ est intrinsèque au milieu. Elle ne dépend, en plus de la fréquence z , que de la densité supposée homogène et de la température. Dans la relation (1.39), pour un voisinage donné d'un point arbitraire $\mathbf{r}$, le champ $\text{Re}(\mathbf{E}_z(\mathbf{r})e^{-izt})$ joue le rôle d'un forçage extérieur, uniforme à l'échelle mésoscopique de ce voisinage. Par conséquent la quantité

$$\chi(z) = \varepsilon(z) - 1$$

est bien une susceptibilité au sens général.

Considérons maintenant $z = \omega$ réel et notons $\varepsilon'(\omega) - 1$ et $\varepsilon''(\omega)$ les parties réelle et imaginaire de $\varepsilon(\omega) - 1$ respectivement. D'après la remarque précédente, ces quantités possèdent les propriétés générales des susceptibilités. Dans certaines conditions expérimentales, il est possible d'avoir accès à $\varepsilon''(\omega)$, sans pour autant avoir un moyen direct de mesurer $\varepsilon'(\omega)$.

En effet, $\varepsilon''(\omega)$ est reliée à la dissipation, et donc à l'absorption dans le matériau. Ainsi, une mesure de la longueur de pénétration $\delta(\omega)$ d'une onde électromagnétique de fréquence ω permet d'accéder à la partie imaginaire $\varepsilon''(\omega)$. Par exemple, dans le cas où $\varepsilon'(\omega)$ est d'ordre 1, alors que $\varepsilon''(\omega) \ll 1$, la longueur[✱] $\delta(\omega)$ est proportionnelle à $c/(\omega\varepsilon''(\omega))$, et la longueur d'onde $\lambda(\omega)$ se réduit à $2\pi c/(\omega\sqrt{\varepsilon'(\omega)})$.

✱ Commentaire 1.2.2. Ces formules sont obtenues à partir des équations de propagation de l'onde dans le matériau, par ailleurs supposé sans propriétés magnétiques. Elles ne sont valables que si la longueur d'onde $\lambda(\omega)$ est grande devant la longueur de corrélation des atomes ou molécules constituant le matériau. Alors, dans un petit domaine de taille mésoscopique, la polarisation est bien donnée par la formule (1.39), avec le champ électrique local de l'onde qui peut toujours être vu comme une perturbation extérieure homogène à l'échelle de ce domaine.

Nous allons montrer comment les propriétés d'analyticité de la susceptibilité permettent en principe de déterminer la partie réelle $\varepsilon'(\omega)$, puis de modéliser la permittivité complète $\varepsilon(z)$.

4. Comme dans le cas statique, si le milieu est homogène, ces charges de polarisation sont localisées sur les bords de l'échantillon.

Étude et résolution

Une détermination expérimentale suffisamment précise de $\varepsilon''(\omega)$ donne en principe accès à $\varepsilon'(\omega)$, en appliquant la relation de Kramers-Kronig⁵

$$\varepsilon'(\omega) = 1 + \frac{1}{\pi} \text{PP} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\varepsilon''(\omega')}{\omega' - \omega}.$$

Ici, nous allons plutôt modéliser l'allure de cette fonction au voisinage d'un de ces pics, à l'aide d'une paramétrisation simple. Nous en détaillons le principe, puis nous donnons quelques pistes pour une modélisation plus globale sur l'ensemble du spectre.

Modélisation d'un pic d'absorption. Considérons un pic donné de $\varepsilon''(\omega)$ au voisinage d'une certaine fréquence ω_0 , dont l'allure typique est représentée sur la figure 1.6. La largeur du pic est faible devant ω_0 , et son altitude est très élevée par rapport aux autres valeurs de $\varepsilon''(\omega)$. Il est raisonnable d'imaginer que ce pic est la signature, sur l'axe réel $z = \omega$, d'une singularité de $\chi(z)$ dans le demi-plan complexe inférieur en un point proche de ω_0 . Supposons que cette singularité soit un pôle simple en $z_p = \omega_p - i\nu_p$ avec $\nu_p > 0$, de résidu $-C$. D'après les propriétés de parité de $\chi'(\omega)$ et $\chi''(\omega)$ vues au §1.1.4, p. 10, il existe un autre pôle simple en $\tilde{z}_p = -\omega_p - i\nu_p$, (voir figure 1.7) de résidu C , et C est un réel positif.

Il est alors légitime de poser

$$\chi(z) = \frac{C}{z + \omega_p + i\nu_p} - \frac{C}{z - \omega_p + i\nu_p} = \frac{-2C\omega_p}{z^2 + 2i\nu_p z - (\omega_p^2 + \nu_p^2)} \quad (1.40)$$

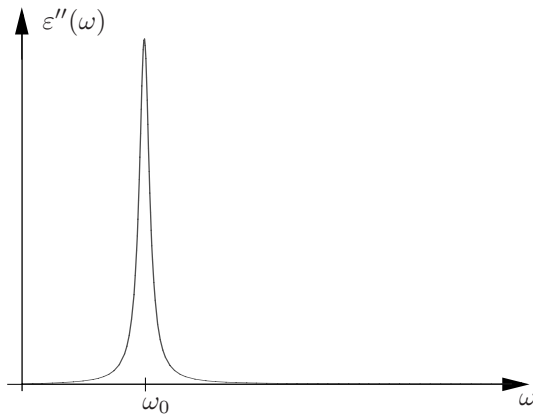


FIG. 1.6 – Allure typique de $\varepsilon''(\omega)$ au voisinage d'un pic centré en ω_0 .

5. Cela suppose bien sûr que $\varepsilon''(\omega)$ soit connue sur une gamme de fréquences suffisamment large.

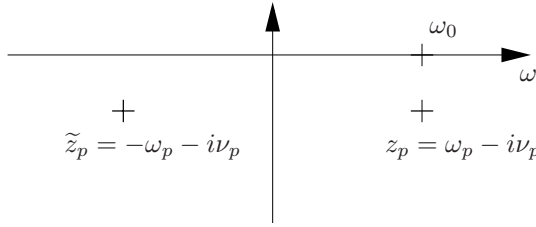


FIG. 1.7 – La susceptibilité (1.40) a des pôles simples en z_p et $\tilde{z}_p$. La proximité du pôle z_p de ω_0 est à l'origine du pic de $\varepsilon''(\omega)$ représenté sur la figure 1.6.

dans un voisinage proche de ω_0 . Avec cette modélisation, nous obtenons, en prenant $\varepsilon''(\omega) = \text{Im } \chi(\omega)$,

$$\varepsilon''(\omega) = \frac{4C\omega_p\nu_p\omega}{[(\omega_p^2 + \nu_p^2 - \omega^2)^2 + 4\nu_p^2\omega^2]} . \quad (1.41)$$

La forme analytique (1.41) dépend des trois paramètres C , ω_p et ν_p . Imaginons que ceux-ci soient alors bien ajustés à la position du pic, à sa largeur et à son amplitude mesurés sur la courbe expérimentale. On trouve alors que ν_p est la demi-largeur du pic à mi-hauteur, ensuite que

$$\omega_p = \sqrt{\omega_0^2 - \nu_p^2} \approx \omega_0, \quad (1.42)$$

et que C est fixé par la hauteur du pic. Évidemment, la procédure précédente fournit également une paramétrisation analytique simple pour $\varepsilon'(\omega) = 1 + \text{Re } \chi(\omega)$ au voisinage du pic considéré. Les tracés de $\varepsilon''(\omega)$ et de $\varepsilon'(\omega) - 1$ sont indiqués sur la figure 1.8.

Exploitation de contraintes globales. En général, l'allure complète de $\varepsilon''(\omega)$ est très riche, et elle exhibe de nombreux pics. Suivant la stratégie précédente, il est alors naturel de sommer les contributions (1.40) correspondant aux différents pics pour obtenir $\chi(z)$. Cela dit, il est judicieux d'y ajouter une forme simple *ad hoc*, centrée sur $\omega = 0$, qui permette de prendre en compte d'autres mesures expérimentales, ou bien certaines des règles de somme présentées dans la section 1.1.7. Par exemple, la valeur statique $\varepsilon'(0)$ n'est autre que la constante diélectrique usuelle qui peut être mesurée par d'autres techniques. En imposant les contraintes correspondantes à la forme empirique choisie, on en détermine les paramètres d'ajustement. En définitive, il est possible d'obtenir des représentations très fiables de la permittivité, sur une large gamme de fréquences.

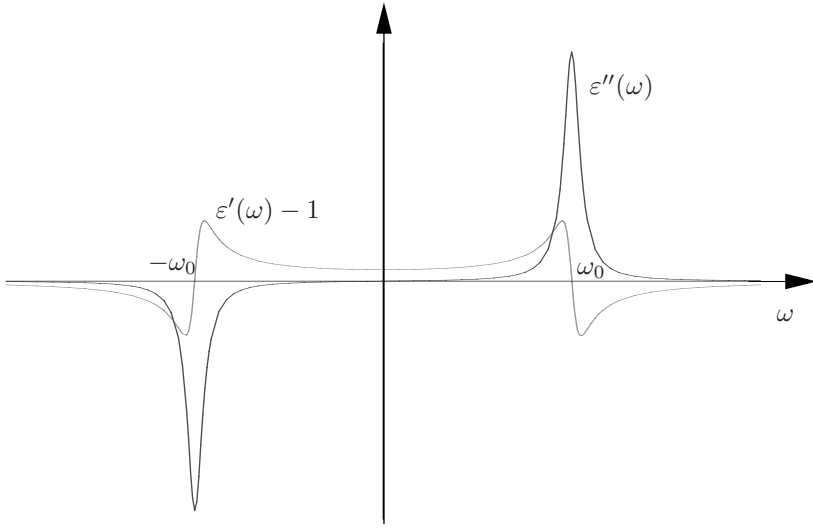


FIG. 1.8 – Parties réelle et imaginaire de la susceptibilité $\chi(z)$ correspondant à l'équation (1.40).

Interprétation

Il se trouve que la modélisation précédente peut être interprétée par une phénoménologie très simple au niveau microscopique. Nous considérons d'abord une raie d'absorption correspondant à un mode d'excitation électronique au sein des atomes ou molécules. Puis nous mentionnons rapidement d'autres situations avant de conclure.

Modèle de l'électron élastiquement lié. Considérons plus précisément un milieu diélectrique constitué d'atomes de densité numérique n , et un pic d'absorption correspondant à une transition électronique de fréquence ω_0 . Faisons comme si la polarisation était la somme des contributions de chaque atome, ce qui est justifié en toute rigueur à faible densité. Considérons de plus que la transition impliquée est caractérisée par le mouvement d'un seul électron dit excitable, dont la position sera notée $\mathbf{r}_e$. Le dipôle porté par l'atome est alors $\mathbf{p} = q\mathbf{r}_e$ où q est la charge de l'électron, et la polarisation totale s'écrit $\mathbf{P} = nq\mathbf{r}_e$. Lorsque $\mathbf{P}$ oscille à la fréquence z , il en va de même pour $\mathbf{r}_e$. À l'échelle de l'atome, le champ électrique varie peu. La relation (1.39), l'expression (1.40) de $\chi(z)$ et la relation (1.42) permettent alors de montrer que

$$(-z^2 - 2i\nu_p z + \omega_0^2)\mathbf{r}_e z e^{-izt} = \frac{q}{m_{exc}} \mathbf{E}_z e^{-izt} \quad (1.43)$$

où nous avons défini la masse effective

$$m_{exc} = \frac{nq^2}{2\epsilon_0 C \sqrt{\omega_0^2 - \nu_p^2}}.$$

En revenant à $\mathbf{r}_e = \text{Re}[\mathbf{r}_{ez}e^{-izt}]$, nous trouvons l'équation différentielle[✱]

$$\frac{d^2 \mathbf{r}_e}{dt^2} + 2\nu_p \frac{d\mathbf{r}_e}{dt} + \omega_0^2 \mathbf{r}_e = \frac{q}{m_{exc}} \mathbf{E}(t). \quad (1.44)$$

Autrement dit, tout se passe comme si l'électron excitable était une particule classique de charge q et de masse m_{exc} dans le champ électrique $\mathbf{E}(t)$, soumise par ailleurs à la force de rappel d'un ressort de raideur $m_{exc}\omega_0^2$ et à une force de frottement fluide $-2m_{exc}\nu_p$: ceci constitue le modèle bien connu de l'électron élastiquement lié !

✱ Commentaire 1.2.3. Bien que cette équation différentielle soit la même que celle vue p. 22, notons que les susceptibilités respectives (1.40) et (1.33) ont des comportements différents, notamment pour $z \rightarrow \infty$. Ceci s'explique par le fait que l'admittance (1.33) est l'analogue de la susceptibilité associée à la vitesse ($d\mathbf{r}/dt$) alors que nous étudions ici la susceptibilité associée à la position. L'inertie implique bien alors que cette admittance est proportionnelle à $1/z$ tandis que $\chi(z)$ est ici en $1/z^2$ à haute fréquence.

Extensions. À faible densité, typiquement en phase gazeuse, l'approximation des atomes indépendants est justifiée, et la phénoménologie précédente donne accès à l'énergie du niveau électronique excité, ainsi qu'à son temps de vie. Ceci est bien illustré par l'étude quantique de la polarisabilité de l'atome d'hydrogène dans la section 3.2.6. À plus forte densité, *modulo* l'approximation de Clausius-Mossotti⁶, la détermination expérimentale de ω_0 et ν_p fournit des estimations du déplacement et de l'élargissement de la transition atomique par des effets collectifs ou autres.

Lorsque le milieu est constitué de molécules, il apparaît également des pics d'absorption dans $\epsilon''(\omega)$, correspondant à l'excitation de modes de rotation ou de vibration. On peut alors procéder à une phénoménologie semblable, qui donne des informations intéressantes sur les caractéristiques de ces modes.

En conclusion, cet exemple illustre bien l'utilité et les conséquences des propriétés d'analyticité de la susceptibilité. Elle permet la construction de paramétrisations simples et précises, tout en ouvrant la voie à une phénoménologie fiable d'effets microscopiques très complexes.

6. Celle-ci relie la susceptibilité à la polarisabilité atomique pour une phase liquide dense, comme expliqué dans l'ouvrage [Jackson].

1.2.3 Écoulement oscillant dans un capillaire

Présentation

Considérons un capillaire contenant un fluide visqueux incompressible et excité à une de ses extrémités par une membrane vibrante. Nous ne prenons pas en compte d'éventuels phénomènes de cavitation, ce qui est justifié à fréquence pas trop élevée. Aussi, nous supposons que l'écoulement oscillant induit est laminaire. Ceci est valable si le nombre de Reynolds n'est pas trop grand, ce qui garantit l'absence de turbulence, comme détaillé dans le livre [Guyon]. Le capillaire est un cylindre de rayon R et de longueur L . En l'absence d'excitation extérieure, le fluide est au repos, caractérisé par une pression P_0 et une densité ρ constantes, ainsi qu'une vitesse nulle $\mathbf{v} = \mathbf{0}$: ceci définit l'état stationnaire $\mathcal{E}_0$. La membrane vibrante impose alors la pression $P = P_0 + \delta P_z e^{-izt}$ à une extrémité, prise en $x = 0$, tandis que la pression à l'autre extrémité en $x = L$ reste constante et égale à P_0 , comme indiqué sur la figure 1.9. Ici, c'est la surpression $\delta P_z e^{-izt}$ qui joue le rôle du forçage $F(t)$, et nous allons étudier la réponse du fluide en débit $Q(t)$, qui est donc identifié à l'observable dynamique $A(t)$.

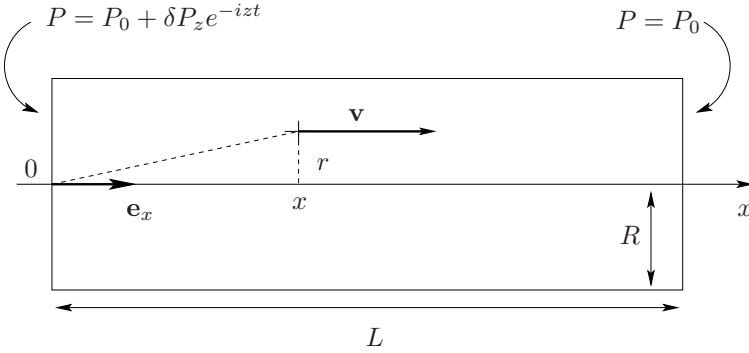


FIG. 1.9 – Le capillaire de longueur L est soumis à une membrane vibrante qui impose une pression oscillante à l'extrémité en $x = 0$.

Étude et résolution

Pour calculer le débit, nous déterminons dans un premier temps le champ de vitesse de l'écoulement, dont les caractéristiques sont brièvement décrites. Nous en déduisons la susceptibilité d'intérêt, et nous passons en revue ses propriétés analytiques. Par commodité d'écriture, et tant que cela n'est pas nécessaire, nous ne notons pas explicitement les parties réelles qu'il faut prendre pour obtenir les quantités physiques étudiées.

Détermination du champ de vitesse. En tenant compte de la symétrie cylindrique, la vitesse ne dépend que de t , x et de $r = \sqrt{y^2 + z^2}$. Par ailleurs, elle est, par hypothèse, partout dirigée suivant l'axe Ox , i.e. $\mathbf{v} = v_x(x, r, t)\mathbf{e}_x$, avec la condition de bord $\mathbf{v} = 0$ pour $r = R$, conséquence de la nature visqueuse du fluide. Comme ce dernier est incompressible, l'équation de conservation de la matière s'écrit ici

$$\frac{\partial v_x}{\partial x} = 0 ,$$

ce qui entraîne $v_x = v_x(r, t)$. L'équation de Navier-Stokes,

$$\partial_t \mathbf{v} + (\mathbf{v} \cdot \nabla) \mathbf{v} = -\frac{1}{\rho} \nabla P + \nu \Delta \mathbf{v} ,$$

où ν est la viscosité cinématique, donne alors composante par composante

$$\frac{\partial v_x}{\partial t} = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial x} + \nu \left(\frac{\partial^2 v_x}{\partial y^2} + \frac{\partial^2 v_x}{\partial z^2} \right) , \quad (1.45)$$

$$0 = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial y} \quad \text{et} \quad 0 = -\frac{1}{\rho} \frac{\partial P}{\partial z} . \quad (1.46)$$

Les deux dernières équations (1.46) montrent que la pression P ne dépend que de x et de t , $P = P(x, t)$. Comme v_x ne dépend que de r et de t , l'équation (1.45) implique alors que $\partial P / \partial x$ ne dépend que du temps t , soit

$$\boxed{P(x, t) = P_0 + \delta P_z e^{-izt} \frac{(L - x)}{L} ,}$$

compte tenu des conditions aux limites sur la pression. La vitesse oscille nécessairement à la même fréquence z que la surpression, car les équations précédentes sont linéaires. En posant $v_x(r, t) = \phi(r)e^{-izt}$, l'équation (1.45) devient alors

$$\frac{d^2 \phi}{dr^2} + \frac{1}{r} \frac{d\phi}{dr} + \frac{iz}{\nu} \phi = -\frac{\delta P_z}{\eta L} \quad (1.47)$$

où $\eta = \nu \rho$ est la viscosité dynamique.

L'équation différentielle ordinaire (1.47) pour ϕ , avec la condition de bord $\phi(R) = 0$, peut être très simplement résolue comme suit. De manière évidente, la fonction constante

$$\frac{i\delta P_z}{z\rho L} \quad (1.48)$$

est une solution particulière. L'équation homogène sans second membre s'écrit

$$\phi'' + \frac{1}{\xi} \phi' + \phi = 0 , \quad (1.49)$$

où $\phi' = d\phi/d\xi$ et ξ la variable adimensionnée

$$\xi = \left(\frac{iz}{\nu}\right)^{\frac{1}{2}} r .$$

La fonction analytique $(iz/\nu)^{\frac{1}{2}}$ est définie par le choix de détermination

$$(iz/\nu)^{\frac{1}{2}} = \sqrt{|z|/\nu} e^{i(\pi/4 + \arg(z)/2)},$$

avec une coupure sur le demi-axe imaginaire pur négatif partant du point de branchement $z = 0$. L'introduction de cette coupure est un artifice nécessaire de calcul, qui est sans conséquence sur le résultat final, comme vérifié par la suite. L'équation homogène (1.49) est du second ordre, et elle admet donc deux solutions indépendantes. L'une d'elles est la fonction de Bessel J_0 de première espèce d'ordre zéro,

$$\phi_1(\xi) = J_0(\xi) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i\xi \cos \theta} .$$

Le lecteur peut vérifier ce résultat directement, par dérivation sous le signe somme et intégration par parties. Pour déterminer une autre solution indépendante ϕ_2 , nous utilisons la méthode du Wronskien $W = \phi'_1 \phi_2 - \phi'_2 \phi_1$, qui est solution de l'équation différentielle

$$W' + \frac{1}{\xi} W = 0 ,$$

qui s'intègre en $W(\xi) = 1/\xi$ à une constante multiplicative près. Ainsi, ϕ_2 est solution de l'équation différentielle du premier ordre

$$J'_0 \phi_2 - J_0 \phi'_2 = \frac{1}{\xi} , \quad (1.50)$$

qui peut être résolue⁷ par la méthode familière de variation de la constante. Il se trouve que $\phi_2(\xi)$ admet une singularité logarithmique en $\xi = 0$, comme montré par simple inspection de la limite $\xi \rightarrow 0$ de l'équation (1.50), avec $J_0(\xi) \rightarrow 1$ et $J'_0(\xi) \rightarrow 0$. Comme le fluide ne saurait avoir une vitesse infinie au centre du capillaire, cette seconde solution de l'équation homogène ne doit pas être prise en compte. C'est pourquoi, la solution physique du problème se réduit à la somme de la solution particulière (1.48) et d'une constante fois $J_0(\xi)$. Cette constante est déterminée par la condition de bord d'annulation de ϕ sur la paroi du capillaire, ce qui donne finalement

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}, t) = \phi(r) e^{-izt} \mathbf{e}_x = \frac{i\delta P_z}{z\rho L} \left(1 - \frac{J_0\left[\left(\frac{iz}{\nu}\right)^{1/2} r\right]}{J_0\left[\left(\frac{iz}{\nu}\right)^{1/2} R\right]} \right) e^{-izt} \mathbf{e}_x . \quad (1.51)$$

7. ϕ_2 est proportionnelle à la fonction dite de Neumann N_0 , ou fonction de Bessel de seconde espèce d'ordre zéro. Nous n'avons pas ici besoin des propriétés de cette fonction, mais le lecteur intéressé peut se référer aux ouvrages mentionnés dans la bibliographie de ce chapitre.

Profils de vitesse. Avant de déterminer le débit, étudions les profils de vitesse correspondant au résultat (1.51). Il est naturel de définir la fréquence de coupure $\omega_c = \nu/R^2$ qui fixe la limite entre le régime visqueux ($\omega \ll \omega_c$) et inertiel ($\omega \gg \omega_c$).

À grande fréquence, $\omega \gg \omega_c$, comme

$$J_0(e^{i\frac{\pi}{4}}u) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi u}} \exp\left(\frac{i\pi}{8} - \frac{i}{\sqrt{2}}u + \frac{u}{\sqrt{2}}\right) \quad \text{pour } u \rightarrow +\infty,$$

la vitesse devient

$$v_x(r, t) \simeq \frac{\delta P_z}{\omega \rho L} \left[\sin(\omega t) - \sqrt{\frac{r}{R}} \exp\left(-\frac{R-r}{\delta}\right) \sin\left(\omega t - \frac{R-r}{\delta}\right) \right], \quad (1.52)$$

en introduisant la longueur $\delta = R\sqrt{2\omega_c/\omega} = \sqrt{2\nu/\omega}$, qui caractérise la profondeur de la couche limite. Notons que $\delta \ll R$, puisque la fréquence est élevée. Fixons un temps t et partons du bord du capillaire. En $r = R$, la vitesse est bien nulle comme imposé par la viscosité. En s'éloignant du bord, la vitesse croît pour $R - r \ll \delta$. Au-delà de la distance δ , la vitesse est sensiblement constante. Le profil de vitesse présente alors des doigts localisés près des bords, comme représenté sur la figure 1.10. Notons que des profils de vitesse très oscillants peuvent apparaître à certains instants. En effet, pour $\omega t \equiv 0 [\pi]$,

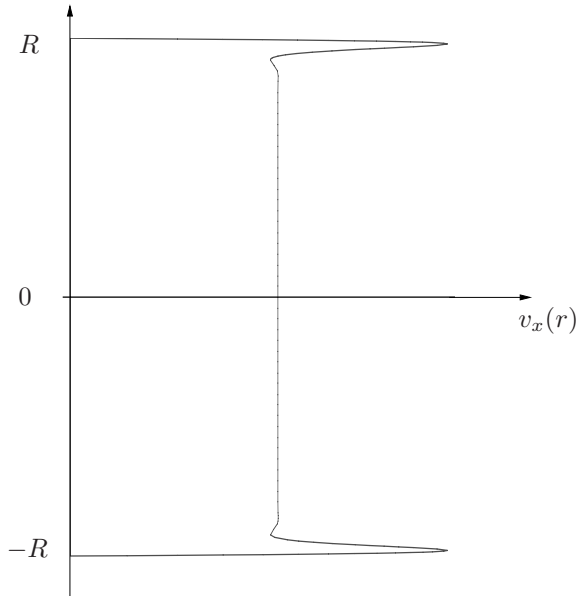


FIG. 1.10 – Forme du profil de vitesse (1.51) pour des grandes fréquences $\omega \gg \omega_c$.

la vitesse est proportionnelle à $\sin[(R-r)/\delta]$ qui oscille très vite. Un tel profil est tracé sur la figure 1.11.

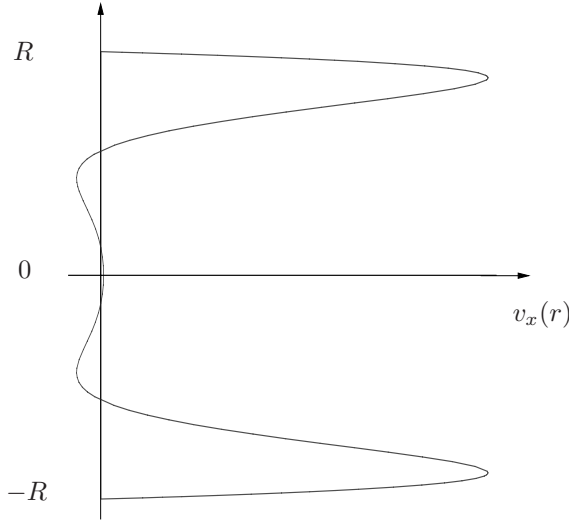


FIG. 1.11 – À certains instants, comme représenté ici à $t = 0$, le profil de vitesse (1.51) peut être très oscillant.

À faible fréquence, $\omega \ll \omega_c$, le profil de vitesse s'obtient facilement à partir du développement en série entière de la fonction de Bessel

$$J_0(\xi) = 1 + \sum_{p=1}^{\infty} \frac{(-1)^p}{(p!)^2} \left(\frac{\xi}{2}\right)^{2p}. \quad (1.53)$$

Ce sont alors les effets visqueux qui déterminent essentiellement le profil. En particulier, à fréquence nulle, le profil de vitesse est parabolique,

$$v_x(r, t) = \frac{\delta P_z}{2\rho L \omega_c} [1 - (r/R)^2].$$

Débit et susceptibilité. Le débit induit à travers une section S du capillaire vaut

$$Q(t) = \rho \int_S d\Sigma \mathbf{n} \cdot \mathbf{v} = 2\pi\rho \int_0^R dr r \phi(r) e^{-izt}. \quad (1.54)$$

En reportant l'expression (1.51) de $\phi(r)$, nous trouvons que la réponse en débit est proportionnelle au forçage en surpression,

$$Q(t) = \chi(z) \delta P e^{-izt},$$

via la susceptibilité⁸

$$\chi(z) = \frac{i\pi R^2}{Lz} \left(1 - \frac{2J_1\left[\left(\frac{iz}{\nu}\right)^{1/2}R\right]}{\left(\frac{iz}{\nu}\right)^{1/2}RJ_0\left[\left(\frac{iz}{\nu}\right)^{1/2}R\right]} \right) \quad (1.55)$$

où J_1 est la fonction de Bessel de première espèce d'ordre 1 définie par

$$J_1(\xi) = \frac{e^{-i\frac{\pi}{2}}}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \, e^{i\xi \cos \theta + i\theta}.$$

Les propriétés de cette susceptibilité vont maintenant être étudiées en détail.

Analyticité de la susceptibilité. Comme les fonctions de Bessel J_0 et J_1 sont des fonctions entières, i.e. analytiques dans $\mathbb{C}$, $\chi(z)$ est analytique dans tout $\mathbb{C}$ par le théorème de composition, sauf éventuellement :

(i) Sur la coupure qui définit $(iz/\nu)^{1/2}$. En fait, quand on tourne de 2π autour de $z = 0$, entre $-(\pi/2)^+$ et $(3\pi/2)^-$, $(iz/\nu)^{1/2}$ change de signe. Comme J_1 est impaire, et J_0 est paire, $\chi(z)$ est continue à la coupure. Il en va de même de toutes les dérivées de $\chi(z)$, qui reste donc bien analytique sur celle-ci.

(ii) En $z = 0$. En utilisant le développement en série entière (1.53) de $J_0(\xi)$, ainsi que celui de $J_1(\xi) = -J'_0(\xi)$, il est alors facile de montrer qu'en $z = 0$,

$$\chi(z) = \frac{\pi R^4}{8\nu L} + \left(\text{série entière en } z \right) = \frac{\pi R^4}{8\nu L} + O(z), \quad (1.56)$$

cette série admettant de plus un rayon fini de convergence. Ceci prouve que $\chi(z)$ reste bien analytique en $z = 0$ aussi.

(iii) Aux points où $J_0[(iz/\nu)^{1/2}R]$ s'annule. Les zéros de $J_0(\xi)$, notés ξ_n avec $n \in \mathbb{Z}^*$, sont situés sur l'axe réel⁹. Ces zéros engendrent des pôles simples de $\chi(z)$ de la forme

$$z_n = -i \frac{\nu}{R^2} \xi_n^2 = -i \omega_c \xi_n^2. \quad (1.57)$$

Tous les pôles de la susceptibilité sont donc sur l'axe imaginaire négatif.

En conclusion, $\chi(z)$ est analytique dans tout $\mathbb{C}$, sauf aux points z_n du demi-plan inférieur qui sont des pôles simples.

Pour les fréquences réelles $z = \omega$, $\chi'(\omega)$ et $\chi''(\omega)$ sont obtenues en prenant les parties réelle et imaginaire de la formule (1.55). Aux faibles fréquences

8. Le calcul explicite du débit repose sur l'identité $\xi J_0(\xi) = J_1(\xi) + \xi J'_1(\xi)$, que le lecteur averti de fonctions de Bessel pourra démontrer en utilisant les représentations intégrales de J_0 et J_1 .

9. Pour n grand, il est possible d'établir la formule asymptotique $\xi_n = n\pi - \pi/4 + O(1/n)$, à partir du résultat de l'exercice 4.1, p. 294.

$\omega \ll \omega_c$, il vient

$$\begin{aligned}\frac{\chi'(\omega)}{\chi(0)} &= 1 - \frac{11}{384}(\omega/\omega_c)^2 + O((\omega/\omega_c)^4) \\ \frac{\chi''(\omega)}{\chi(0)} &= \frac{1}{6}(\omega/\omega_c) + O((\omega/\omega_c)^3)\end{aligned}$$

avec la susceptibilité statique $\chi(0) = \pi R^4/(8\nu L)$, qui redonne bien la formule de Poiseuille $Q = \pi R^4/(8\nu L)\delta P_z$. Les comportements asymptotiques aux grandes fréquences $\omega \gg \omega_c$ sont obtenus en utilisant $J_1[(i\omega/\nu)^{1/2}R] \simeq iJ_0[(i\omega/\nu)^{1/2}R]$, avec le résultat

$$\frac{\chi'(\omega)}{\chi(0)} \simeq 8\sqrt{2}(\omega_c/\omega)^{\frac{3}{2}} \quad \text{et} \quad \frac{\chi''(\omega)}{\chi(0)} \simeq 8(\omega_c/\omega) .$$

Nous avons tracé les variations de $\chi'(\omega)$ et $\chi''(\omega)$ sur la figure 1.12.

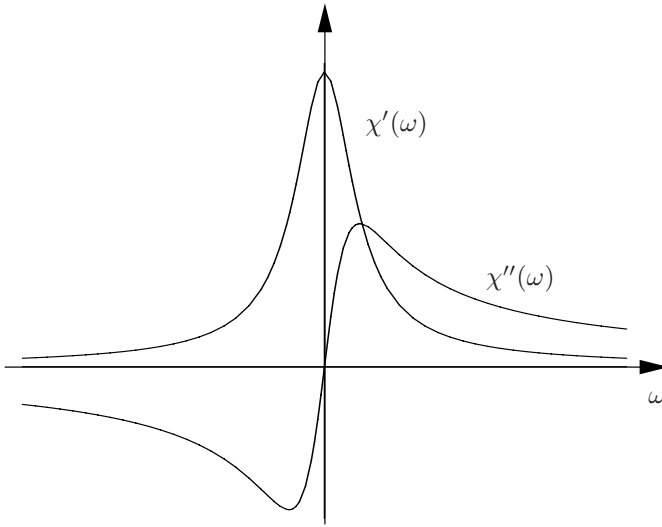


FIG. 1.12 – Parties réelle et imaginaire de la susceptibilité $\chi(\omega)$ donnée par l'équation (1.55).

Interprétation

Dans cet exemple de mécanique des fluides, qui fait intervenir un nombre infini de degrés de liberté, la susceptibilité n'est plus une simple fraction rationnelle comme dans les systèmes de type circuit RLC vus au §1.2.1. Néanmoins, les propriétés générales des susceptibilités, qui trouvent ici leur origine

physique dans la dissipation liée à la viscosité, sont bien présentes. En particulier, $\chi(z)$ est bien analytique dans le demi-plan complexe supérieur jusque sur l'axe réel. Ses singularités sont des pôles simples z_n en nombre infini et situés dans le demi-plan complexe inférieur. Leur position est bien contrôlée par la viscosité, de sorte qu'ils s'accumulent en $z = 0$ lorsque celle-ci tend vers 0.

Comme pour le circuit RLC, la présence de dissipation se manifeste également par la nécessité de fournir de l'énergie au fluide pour entretenir les oscillations. La puissance moyenne $\overline{P}$ ainsi fournie par la membrane, coïncide avec la puissance de la force de pression exercée,

$$\overline{P} = \frac{1}{T} \int_0^T dt \int_S d\Sigma P(t) \mathbf{n} \cdot \mathbf{v}(r, t) = \frac{1}{T} \int_0^T dt P(t) Q(t) ,$$

avec $T = 2\pi/\omega$. Pour calculer cette intégrale temporelle, il faut travailler avec les parties réelles des expressions complexes, car l'intégrant n'est pas une forme linéaire des quantités en jeu. Un calcul élémentaire donne

$$\overline{P} = \frac{\chi'(\omega)}{2\rho} |\delta P_z|^2 ,$$

car seule la partie $\chi'(\omega)P(t)$ de $Q(t)$ en phase avec $P(t)$ contribue à la moyenne temporelle. Les développements à basse et haute fréquence de $\chi'(\omega)$, ainsi que sa représentation numérique sur la figure 1.12, suggèrent que $\chi'(\omega)$ est toujours positif, en accord avec la présence de dissipation. Cela dit, une preuve mathématique de cette positivité n'est pas immédiate, car elle fait intervenir des inégalités sur les fonctions de Bessel.

1.2.4 Réponse d'un plasma dans l'approximation de Vlasov

Présentation

Cet exemple porte sur l'étude d'un modèle de plasma, constitué d'une seule espèce de charges ponctuelles mobiles de charge q et de masse m en densité ρ , qui baignent dans un fond rigide uniforme de densité de charge $-q\rho$ assurant la neutralité globale. Dans la littérature, ce modèle est appelé jellium ou plasma à une composante. Il peut raisonnablement décrire de nombreuses situations physiques, comme les électrons de conduction dans un métal, ou bien les noyaux de Carbone au cœur d'une naine blanche. Ici, les charges sont supposées classiques. Elles interagissent entre elles suivant le potentiel coulombien à deux corps, et elles sont également soumises au potentiel électrostatique créé par le bain rigide. Supposons que le plasma soit originellement à l'équilibre thermodynamique. Nous nous proposons alors de déterminer la réponse de sa densité de charge interne $Q(\mathbf{r}, t)$, à un potentiel électrique extérieur de

la forme

$$\phi_{ext}(\mathbf{r}, t) = \text{Re}[\phi_z \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - izt)].$$

En négligeant tout phénomène de propagation électromagnétique, un tel potentiel est créé par une distribution de charge extérieure donnée par l'équation de Poisson, i.e. :

$$Q_{ext}(\mathbf{r}, t) = -\epsilon_0 \mathbf{k}^2 \text{Re}[\phi_z \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - izt)].$$

Notons que cette distribution, qui correspond à une onde de densité de charge, est présente au sein même du système. En vertu de l'analyse générale, la réponse du plasma doit être de la forme

$$Q(\mathbf{r}, t) = \text{Re}[\chi(\mathbf{k}, z) \phi_z e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - izt}], \quad (1.58)$$

avec une susceptibilité $\chi(\mathbf{k}, z)$ qui dépend également du nombre d'onde $\mathbf{k}$.

La détermination de la réponse du plasma relève de la problématique générale des systèmes hamiltoniens à l'équilibre thermodynamique, excités par une perturbation extérieure. Pour cette classe de systèmes, la susceptibilité $\chi(\mathbf{k}, z)$ peut être exprimée en termes de fonctions de corrélation dynamiques à l'équilibre¹⁰. Ici, nous allons calculer $\chi(\mathbf{k}, z)$ dans le cadre d'une théorie de champ moyen. Cette approche capture nombre d'effets physiques essentiels. De plus, elle permet de s'affranchir de la complexité du problème à N corps. En effet, l'état du plasma est alors entièrement décrit par la fonction de distribution $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ dans l'espace de phase des position $\mathbf{r}$ et impulsion $\mathbf{p}$ d'une seule particule. Cette fonction correspond à la densité de probabilité dans l'espace de phase. La densité de charge s'écrit ainsi

$$Q(\mathbf{r}, t) = q[-\rho + \int d\mathbf{p} f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)]. \quad (1.59)$$

L'état stationnaire $\mathcal{E}_0$ est caractérisé par la distribution d'équilibre f_0 à la température T et à la densité ρ , qui s'écrit

$$f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p}) = f_0(\mathbf{p}) = \rho \left(\frac{\beta}{2\pi m} \right)^{3/2} \exp(-\beta \frac{\mathbf{p}^2}{2m}), \quad (1.60)$$

avec $\beta = 1/(k_B T)$. Cette distribution fait apparaître la distribution des vitesses $\mathbf{v} = \mathbf{p}/m$ de Maxwell-Boltzmann, qui prend la forme gaussienne bien connue. La densité de charge (1.59) est identiquement nulle dans l'état $\mathcal{E}_0$ pour $f_0(\mathbf{p})$. Dans le cas général, elle se réécrit

$$Q(\mathbf{r}, t) = q \int d\mathbf{p} [f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - f_0(\mathbf{r}, \mathbf{p})]. \quad (1.61)$$

Dans tout le problème, nous supposons que le plasma est infiniment étendu et que les bords sont sans effet sur les quantités cherchées.

¹⁰. Les formules générales correspondantes sont établies dans l'exemple du paragraphe 1.2.5 traitant de la conductivité d'un matériau.

Étude et résolution

D'abord, nous introduisons l'équation de Vlasov, qui gouverne l'évolution de $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ sous l'action de l'interaction coulombienne et du champ de force dérivant du potentiel $\phi_{ext}(\mathbf{r}, t)$. Ensuite, nous déterminons la différence $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) - f_0(\mathbf{p})$ au premier ordre en ϕ_{ext} , et nous en déduisons la susceptibilité $\chi(\mathbf{k}, z)$.

Équation de Vlasov. Introduisons l'équation d'évolution de la distribution $f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t)$ pour une particule soumise à une force $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ ne dépendant que de la position et du temps. Cette équation traduit la conservation du nombre total d'états de la particule dans l'espace de phase. Elle est obtenue à partir de l'équation de conservation habituelle

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \text{div } \mathbf{J} = 0 ,$$

où

$$\mathbf{J} = (f \, (d\mathbf{r}/dt), f \, (d\mathbf{p}/dt)) = (f \, \mathbf{p}/m, f \, \mathbf{F}(\mathbf{r}, t))$$

est la densité de courant dans l'espace à 6 dimensions $(\mathbf{r}, \mathbf{p})$, div est l'opérateur divergence dans cet espace, et où nous avons utilisé les équations du mouvement de $\mathbf{r}$ et $\mathbf{p}$. Cette équation prend donc la forme

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} + \mathbf{F}(\mathbf{r}, t) \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} = 0. \quad (1.62)$$

Ici, la force $\mathbf{F}(\mathbf{r}, t)$ comprend non seulement la force extérieure $-q\partial\phi_{ext}/\partial\mathbf{r}$, mais également la force électrostatique associée au champ électrique créé par la distribution de charge interne $Q(\mathbf{r}, t)$. L'équation d'évolution (1.62) prend alors la forme dite de Vlasov

$$\boxed{\begin{aligned} \frac{\partial f}{\partial t} + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{r}} &+ \left[\int d\mathbf{r}' \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} Q(\mathbf{r}', t) \right] \cdot \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \\ &= \frac{\partial f}{\partial \mathbf{p}} \cdot \text{Re} \left(iq\mathbf{k} \phi_z e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - izt} \right). \end{aligned}} \quad (1.63)$$

Soulignons que, dans le dernier terme du membre de gauche de cette équation, $Q(\mathbf{r}', t)$ dépend aussi de la distribution f via l'équation (1.61). Ce terme est de type champ moyen, car il correspond à l'expression approchée de la force totale exercée par toutes les autres particules, obtenue en négligeant leurs corrélations avec la particule considérée[✕].

✱ **Commentaire 1.2.4.** L'équation de Vlasov peut être établie dans le cadre du problème à N corps. Il faut alors partir de l'équation de Liouville dans l'espace de phase total à $6N$ dimensions. Comme détaillé dans [Hansen, Pottier], l'intégration de celle-ci sur toutes les positions et impulsions de $N - 1$ particules, conduit à la première équation de la hiérarchie Bogoliubov-Born-Green-Kirkwood-Yvon (BBGKY), qui relie les distributions $f^{(1)}$ et $f^{(2)}$ à une et deux particules. L'équation de Vlasov est alors obtenue via la factorisation $f^{(2)} \rightarrow f^{(1)}f^{(1)}$.

Distribution induite au premier ordre. Introduisons la différence

$$\delta f = f - f_0.$$

Cette dernière étant supposée faible, l'étape suivante consiste donc à linéariser l'équation de Vlasov (1.63), en ne gardant que les termes du premier ordre en la perturbation. Évidemment, f_0 est solution de l'équation sans second membre. Par ailleurs, $Q(\mathbf{r}', t)$ est au moins du premier ordre, car le plasma est localement neutre dans l'état $\mathcal{E}_0$. Alors, dans le terme de champ moyen, ainsi que dans le terme de force extérieure, on peut remplacer $\partial f / \partial \mathbf{p}$ par $\partial f_0 / \partial \mathbf{p} = -\beta \mathbf{p} f_0 / m$. L'équation de Vlasov ainsi linéarisée s'écrit

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \delta f + \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\partial}{\partial \mathbf{r}} \delta f - \beta f_0 \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \int d\mathbf{r}' \frac{q^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3} \int d\mathbf{p}' \delta f(\mathbf{r}', \mathbf{p}', t) \\ = -i\beta q \mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{p}}{m} f_0 \phi_z e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - izt}. \end{aligned} \quad (1.64)$$

Dorénavant, nous omettons de noter explicitement qu'il faut prendre les parties réelles, sauf nécessité absolue.

Compte tenu des conditions initiales à $t_0 = -\infty$ d'une part, et de la linéarité de l'équation d'évolution (1.64) d'autre part, δf oscille dans le temps à la même fréquence complexe z que ϕ_{ext} . De plus, dans un volume infini, l'invariance par translation nous conduit à chercher δf sous la forme d'une onde plane

$$\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \psi(\mathbf{p}) \phi_z e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - izt},$$

semblable à ϕ_{ext} . Par ailleurs, la transformée de Fourier de $q^2(\mathbf{r} - \mathbf{r}') / (4\pi\epsilon_0 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^3)$ est égale¹¹ à $-iq^2 \mathbf{k} / (\epsilon_0 k^2)$. Il vient alors

$$(-iz + i\mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{p}}{m}) \psi(\mathbf{p}) + i\beta q^2 \frac{\mathbf{p}}{m} \cdot \frac{\mathbf{k}}{\epsilon_0 k^2} f_0(\mathbf{p}) \int d\mathbf{p}' \psi(\mathbf{p}') = -i\beta q \mathbf{k} \cdot \frac{\mathbf{p}}{m} f_0(\mathbf{p}),$$

soit encore

$$\psi(\mathbf{p}) = \psi_{id}(\mathbf{p}) \left[1 + \frac{q}{\epsilon_0 k^2} \int d\mathbf{p}' \psi(\mathbf{p}') \right] \quad (1.65)$$

11. Obtenir ce résultat revient simplement à calculer la transformée de Fourier du gradient du potentiel coulombien, et donc à multiplier par $-i\mathbf{k}$ la transformée du potentiel lui-même. Le lecteur peut alors consulter le chapitre 2, p. 78, où cette dernière transformée est calculée.

où

$$\psi_{id}(\mathbf{p}) = \frac{\beta q \mathbf{k} \cdot \mathbf{p}}{(mz - \mathbf{k} \cdot \mathbf{p})} f_0(\mathbf{p}) \quad (1.66)$$

est la forme de ψ pour un gaz idéal, sans interactions coulombiennes entre les particules. L'intégration membre à membre de l'équation intégrale (1.65) pour ψ donne aisément la constante $\int d\mathbf{p}\psi(\mathbf{p})$ en termes de ψ_{id} . Nous obtenons finalement

$$\delta f(\mathbf{r}, \mathbf{p}, t) = \frac{\psi_{id}(\mathbf{p})}{1 - (q/\epsilon_0 k^2) \int d\mathbf{p}\psi_{id}(\mathbf{p})} \phi_z e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - izt}. \quad (1.67)$$

Susceptibilité et propriétés analytiques. Pour obtenir la susceptibilité, il suffit de reporter l'expression (1.67) de δf dans l'intégrale (1.61) donnant Q , ce qui conduit à

$$\chi(\mathbf{k}, z) = \frac{\chi_{id}(\mathbf{k}, z)}{1 - \chi_{id}(\mathbf{k}, z)/(\epsilon_0 k^2)}. \quad (1.68)$$

Dans cette formule, $\chi_{id}(\mathbf{k}, z) = q \int d\mathbf{p}\psi_{id}(\mathbf{p})$ est la susceptibilité du gaz idéal,

$$\chi_{id}(k, z) = \beta q^2 \rho (2\pi m k_B T)^{-\frac{1}{2}} \int_{-\infty}^{+\infty} dp_x e^{-\beta \frac{p_x^2}{2m}} \frac{k p_x}{mz - k p_x}, \quad (1.69)$$

où nous avons utilisé l'expression (1.60) de f_0 , ainsi que l'invariance par rotation.

À $\mathbf{k}$ fixé, la susceptibilité idéale χ_{id} est analytique en z dans le demi-plan complexe supérieur, comme montré en dérivant la représentation intégrale (1.69) sous le signe somme. Nous en déduisons que la susceptibilité χ est également analytique dans ce demi-plan, en vertu du théorème de composition, et également car le dénominateur $1 - \chi_{id}(k, z)/(\epsilon_0 k^2)$ ne saurait s'y annuler vu que χ_{id} a une partie imaginaire non nulle. Pour s'en convaincre, il suffit de déterminer la représentation intégrale de la partie imaginaire χ_{id}'' à partir de la formule (1.69). Celle-ci n'est jamais nulle pour $\text{Im } z > 0$.

Pour obtenir $\chi(k, \omega)$ sur l'axe réel, il faut prendre la limite de $\chi(k, z)$, avec $z = \omega + i\epsilon$ et $\epsilon \rightarrow 0^+$. Dans cette procédure, nous pouvons utiliser l'identité standard (1.22), p. 16, qui permet d'extraire les parties réelle et imaginaire dans la représentation intégrale (1.69) de $\chi_{id}(k, \omega)$, c'est-à-dire :

$$\chi_{id}'(k, \omega) = -\beta q^2 \rho \left(\frac{\beta m}{2\pi}\right)^{1/2} \text{PP} \int_{-\infty}^{+\infty} dv \frac{v e^{-\frac{\beta m v^2}{2}}}{v - \omega/k} \quad (1.70)$$

et

$$\chi''_{id}(k, \omega) = -\beta q^2 \rho \left(\frac{\pi \beta m}{2} \right)^{1/2} \frac{\omega}{k} \exp \left[-\frac{\beta m \omega^2}{2k^2} \right]. \quad (1.71)$$

L'expression correspondante de $\chi(k, \omega)$ suit immédiatement en remplaçant $\chi_{id}(k, \omega)$ par $\chi'_{id}(k, \omega) + i\chi''_{id}(k, \omega)$ dans la formule (1.68). Une propriété importante vérifiée par $\chi(k, \omega)$ est que pour $k \neq 0$, $\chi(k, \omega)$ reste analytique en ω sur l'axe réel. En revanche, des singularités peuvent y apparaître à $k = 0$, comme discuté plus loin.

Grandes et basses fréquences. Aux grandes fréquences, le comportement asymptotique de $\chi'_{id}(k, \omega)$ est aisément obtenu en remplaçant $1/(v - \omega/k)$ par son développement $-(k/\omega)(1 + kv/\omega + \dots)$ dans l'intégrant de la formule (1.70), avec le résultat

$$\chi'(k, \omega) \simeq \frac{q^2 \rho k^2}{m \omega^2}. \quad (1.72)$$

Par ailleurs, $\chi''_{id}(k, \omega)$ décroît gaussiennement vite quand $\omega \rightarrow \infty$. À partir de la formule (1.68), nous en déduisons que $\chi(k, \omega)$ se comporte comme $\chi_{id}(k, \omega)$ à grande fréquence. Dans cette limite, les interactions deviennent négligeables par rapport aux purs effets d'inertie, en accord avec la discussion générale p. 13.

Remarquons que la décroissance gaussienne de $\chi''(k, \omega)$ aux grandes fréquences, plus rapide que toute puissance inverse de ω , est une conséquence du comportement de la fonction de réponse $K_0(\tau)$ aux petits τ .

En effet[✱], le développement correspondant de $K_0(\tau)$ ne contient que des puissances impaires de τ par suite de l'invariance par renversement du temps du système hamiltonien considéré. Alors, d'après l'analyse générale p. 12, tous les coefficients du développement de $\chi''(k, \omega)$ en puissances inverses de ω sont nuls.

✱ Commentaire 1.2.5. Par comparaison, dans le modèle de l'électron élastiquement lié vu au §1.2.2, il y a une force dissipative, donc ce système n'est pas invariant sous la transformation $t \rightarrow -t$. Le développement de $K_0(\tau)$ aux petits τ contient toutes les puissances de τ , et finalement la susceptibilité a une décroissance algébrique.

Aux basses fréquences, $\chi'_{id}(k, \omega)$ s'annule comme ω , alors que $\chi'_{id}(k, \omega)$ tend vers une valeur finie non-nulle. Nous en déduisons la valeur statique

$$\chi(k, 0) = \frac{-\beta q^2 \rho}{1 + \beta q^2 \rho / (\varepsilon_0 k^2)}. \quad (1.73)$$

Elle diffère de la valeur idéale $-\beta q^2 \rho$ par un facteur dû aux interactions.

Interprétation

Les propriétés analytiques de $\chi(k, z)$ ont différentes conséquences physiques importantes. Nous étudions d'abord les effets d'écran. Puis nous interprétons l'absorption d'énergie dans ce système conservatif, ainsi que l'apparition des modes plasmons.

Effet d'écran. Le potentiel total ϕ_{tot} est la somme du potentiel extérieur ϕ_{ext} , et du potentiel induit ϕ_{ind} créé par la distribution de charge $Q(\mathbf{r}, t)$. La permittivité diélectrique $\varepsilon(\mathbf{k}, z)$ est définie via la relation usuelle

$$\phi_{tot} = \frac{\phi_{ext}}{\varepsilon(\mathbf{k}, z)} .$$

En exprimant ϕ_{ind} en termes de la susceptibilité χ et de ϕ_{ext} , on obtient une relation simple entre $\varepsilon(k, z)$ et $\chi(k, z)$. Compte tenu de l'expression (1.68) pour $\chi(k, z)$, nous trouvons finalement

$$\varepsilon(k, z) = 1 - \frac{\chi_{id}(k, z)}{\epsilon_0 k^2} , \quad (1.74)$$

dans l'approximation de Vlasov. Dans la limite statique de fréquence nulle, $\chi_{id}(k, 0)$ se réduit à $-\beta q^2 \rho$, de sorte que

$$\varepsilon(k, 0) = 1 + \frac{\beta q^2 \rho}{\epsilon_0 k^2} . \quad (1.75)$$

Lorsque $k \rightarrow 0$, $\varepsilon(k, 0)$ diverge, et donc ϕ_{tot} s'annule. La charge induite $Q(\mathbf{r})$ s'ajuste alors exactement à $-Q_{ext}(\mathbf{r})$ en tout point. Cet effet d'écran est spécifique aux systèmes conducteurs. De plus, la formule (1.75) obtenue dans le cadre de l'approximation de Vlasov devient exacte dans la limite des grandes longueurs d'onde.

Absorption d'énergie. La puissance fournie au système est proportionnelle à $\varepsilon''(k, \omega)$ qui se réduit à $-\chi''_{id}(k, \omega)/(\epsilon_0 k^2)$ d'après la formule (1.74). Comme la partie imaginaire $\chi''_{id}(k, \omega)$ est négative sur l'axe réel, la puissance fournie est non nulle. Ce résultat, *a priori* surprenant pour ce système conservatif, est interprété comme suit. L'absorption d'énergie n'est pas ici induite par une force de freinage dans le plasma, mais par un effet résonant dû aux particules *surfeuses*. Ces particules ont une vitesse $\mathbf{v} = \omega \mathbf{k}/k^2$ identique à la vitesse de phase de l'onde associée à ϕ_{ext} . La puissance qui leur est fournie $\mathbf{F}_{ext} \cdot \mathbf{v}$ reste constante dans le temps, et strictement positive, au premier ordre en la perturbation. Ainsi, elles pompent bien une partie de l'énergie de l'onde excitatrice. En général, ce processus d'absorption d'énergie à caractère résonant engendre des singularités. Par exemple, pour un oscillateur harmonique non amorti de type circuit LC, la résonance à sa fréquence propre induit une

divergence de la réponse. Ici, la singularité correspondant à la vitesse de phase est lissée par l'intégration sur toutes les vitesses possibles distribuées suivant la statistique de Maxwell-Boltzmann, qui prend en compte les fluctuations thermiques. En physique des plasmas, ce phénomène est appelé amortissement de Landau.

Modes plasmons. Dans la limite des grandes longueurs d'onde $k \rightarrow 0$ avec $\text{Im } z > 0$ fixée, à partir des formules (1.68) et (1.69) nous obtenons la forme asymptotique de la susceptibilité

$$\chi(k, z) \simeq \frac{q^2 \rho k^2}{m} \frac{1}{z^2 - \omega_p^2} .$$

En écrivant

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{z^2 - \omega_p^2} = \frac{1}{2\omega_p} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \left[\frac{1}{z - \omega_p} - \frac{1}{z + \omega_p} \right]$$

et en utilisant à nouveau la relation (1.22), p. 16, nous pouvons séparer les parties réelle et imaginaire, avec le résultat¹²

$$\chi''(k, \omega) \simeq -\frac{q^2 \rho k^2 \pi}{2m\omega_p} [\delta(\omega - \omega_p) - \delta(\omega + \omega_p)] \text{ quand } k \rightarrow 0, \omega \text{ fixée} . \quad (1.76)$$

Ce comportement est la signature de la présence d'un mode plasmon à la fréquence $\pm\omega_p$ non-amorti. Soulignons que l'existence de ce mode n'est pas un effet spurieux du champ moyen. En effet, à la limite des grandes longueurs d'onde, les tranches de plasma non-neutres sont rappelées à leur position d'équilibre par le bain, de sorte que leur dynamique devient isomorphe à celle d'un oscillateur harmonique non-amorti à la fréquence ω_p . À $k \neq 0$, les modes plasmons sont amortis par différents processus, dont celui des particules surfeuses. Pour un plasma à deux composantes, comme par exemple un sel ionique, les modes plasmons sont toujours amortis, même dans la limite $k \rightarrow 0$, par suite des collisions entre charges positives et négatives qui oscillent en opposition de phase.

1.2.5 Conductivité et formule de Kubo

Présentation

Considérons un milieu conducteur soumis à une certaine différence de potentiel qui induit un courant électrique. Au niveau microscopique, ce courant est associé au mouvement de particules libres chargées. L'étude correspondante de la conductivité est extrêmement difficile. En fait, elle entre dans le

12. Voir aussi dans ce contexte l'exercice 1.4, p. 55.

cadre très général de la réponse linéaire en mécanique statistique. Cette problématique constitue un domaine en soi, qui est abondamment traité dans la littérature. Ici, nous présentons une démonstration de la formule de Kubo sans passer par les outils traditionnels du problème à N corps, comme la matrice densité. Cette formule montre que la fonction de réponse en jeu est égale à une certaine fonction de corrélation dynamique du système à l'équilibre. Nous discutons brièvement quels sont les comportements attendus, puis nous montrons comment l'expression microscopique exacte de la conductivité, peut conduire à des modélisations phénoménologiques simples.

Soit H_0 le Hamiltonien en mécanique quantique des particules constituant le milieu conducteur, H_0 ne dépendant pas explicitement du temps. L'état initial $\mathcal{E}_0$ à $t_0 = -\infty$ est ici un état d'équilibre à une certaine température T , avec $\beta = 1/(k_B T)$. Nous travaillons dans l'ensemble canonique, en considérant que le système est infiniment étendu et sans tenir compte d'éventuels effets de bord. Par ailleurs, le système est traité quantiquement, étant entendu que les expressions obtenues peuvent être aisément spécifiées au cas classique. Ainsi, étant donnée une observable associée à un opérateur hermitien A , sa valeur moyenne d'équilibre $\langle A \rangle_0$ dans l'état $\mathcal{E}_0$ s'écrit

$$\langle A \rangle_0 = \frac{\text{Tr}[e^{-\beta H_0} A]}{\text{Tr} e^{-\beta H_0}}, \quad (1.77)$$

où Tr désigne la trace sur l'espace des états microscopiques accessibles au système. Cette trace peut être calculée en utilisant n'importe quelle base de cet espace. En particulier, si on introduit la base orthonormée formée avec les états propres $|\psi_n\rangle$ d'énergie E_n du Hamiltonien H_0 , il vient

$$\langle A \rangle_0 = \frac{\sum_n e^{-\beta E_n} \langle \psi_n | A | \psi_n \rangle}{\sum_n e^{-\beta E_n}}. \quad (1.78)$$

Enfin, le courant initial est nul, i.e. :

$$\langle \mathbf{J} \rangle_0 = 0$$

où $\mathbf{J}$ est l'opérateur de courant microscopique.

Soumettons le système à un champ électrique extérieur homogène $\mathbf{E}_{ext}(t)$ dépendant du temps, et introduit adiabatiquement à $t_0 = -\infty$. Ce champ extérieur joue le rôle du forçage. Dans un premier temps, nous considérons une dépendance temporelle générale, avec la seule condition que $\mathbf{E}_{ext}(t)$ tende exponentiellement vite vers zéro quand $t \rightarrow -\infty$. Le Hamiltonien $H(t)$ en présence de la perturbation extérieure est

$$H(t) = H_0 - \mathbf{P} \cdot \mathbf{E}_{ext}(t) \quad (1.79)$$

où $\mathbf{P}$ est l'opérateur de polarisation microscopique. Nous allons étudier la réponse du système en courant à ce forçage.

Étude et résolution

Tout d'abord, nous allons établir la formule de Kubo, en considérant l'évolution de la valeur moyenne d'une observable A quelconque, le système étant soumis à un forçage décrit par le Hamiltonien

$$H(t) = H_0 - BF(t) \quad (1.80)$$

où B est une observable également quelconque, et $F(t)$ une fonction scalaire arbitraire qui tend exponentiellement vite vers zéro quand $t \rightarrow -\infty$. Nous spécifierons ultérieurement les formules obtenues au cas décrit dans la présentation ci-dessus.

La stratégie adoptée consiste à déterminer en premier lieu l'état évolué $|\psi_n(t)\rangle$ sous l'action de $H(t)$ en partant d'un état initial qui soit un état propre $|\psi_n\rangle$ du Hamiltonien non-perturbé H_0 . L'évolution de la moyenne statistique $\langle A \rangle_t$ est alors simplement obtenue en pondérant la moyenne quantique $\langle \psi_n(t) | A | \psi_n(t) \rangle$ par le facteur de Boltzmann $e^{-\beta E_n}$, et en sommant sur tous les états quantiques possibles, i.e. :

$$\langle A \rangle_t = \frac{\sum_n e^{-\beta E_n} \langle \psi_n(t) | A | \psi_n(t) \rangle}{\sum_n e^{-\beta E_n}}. \quad (1.81)$$

Évolution perturbative d'un état propre du Hamiltonien non-perturbé. Il est possible de montrer que $|\psi_n(t)\rangle$ est solution de l'équation intégrale :

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} |\psi_n\rangle - \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t-t_0} d\tau F(t-\tau) e^{-iH_0\tau/\hbar} B |\psi_n(t-\tau)\rangle. \quad (1.82)$$

Nous établirons en fait de manière générale ce résultat au chapitre 3 (voir équation (3.74), p. 177) : il faut alors procéder aux substitutions $|\phi_0\rangle \rightarrow |\psi_n\rangle$, $|\phi(t)\rangle \rightarrow |\psi_n(t)\rangle$, et $W(t) \rightarrow -BF(t)$. Cependant, le lecteur peut aussi vérifier explicitement¹³ que $|\psi_n(t)\rangle$ est bien solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} |\psi_n(t)\rangle = H(t) |\psi_n(t)\rangle.$$

Pour un faible forçage, l'équation (1.82) donne lieu à un développement perturbatif en puissances de $B F(t)$:

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} |\psi_n\rangle - \frac{1}{i\hbar} \int_0^{t-t_0} d\tau F(t-\tau) e^{-iH_0\tau/\hbar} B e^{-iH_0(t-\tau-t_0)/\hbar} |\psi_n\rangle + \dots \quad (1.83)$$

au premier ordre en F .

13. Pour cela, il aura intérêt à faire d'abord le changement de variables $t' = t - \tau$ dans l'intégrale apparaissant dans l'équation (1.82) avant de calculer $(\partial/\partial t)|\psi_n(t)\rangle$.

Le développement perturbatif (1.83) permet de déterminer l'évolution de la moyenne quantique $\langle \psi_n(t) | A | \psi_n(t) \rangle$ de A dans l'état $|\psi_n(t)\rangle$. En rejetant les conditions initiales à $t_0 = -\infty$, nous obtenons

$$\begin{aligned} \langle \psi_n(t) | A | \psi_n(t) \rangle &\simeq \langle \psi_n | A | \psi_n \rangle \\ &+ \frac{1}{i\hbar} \int_0^{+\infty} d\tau F(t - \tau) \langle \psi_n | [e^{-iH_0\tau/\hbar} B e^{iH_0\tau/\hbar} A \\ &- A e^{-iH_0\tau/\hbar} B e^{iH_0\tau/\hbar}] | \psi_n \rangle \end{aligned} \quad (1.84)$$

au premier ordre en F . Pour établir ce résultat nous avons utilisé le fait que $|\psi_n\rangle$ est un état propre de H_0 et donc que

$$e^{-iH_0(t-t_0)/\hbar} |\psi_n\rangle = e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} |\psi_n\rangle.$$

Moyenne statistique sur les configurations initiales. En insérant le développement (1.84) dans la formule (1.81), nous trouvons

$$\begin{aligned} \langle A \rangle_t - \langle A \rangle_0 &= \frac{1}{i\hbar} \int_0^{+\infty} d\tau F(t - \tau) \\ &\times \frac{\text{Tr} \left\{ e^{-\beta H_0} [e^{-iH_0\tau/\hbar} B e^{iH_0\tau/\hbar} A - A e^{-iH_0\tau/\hbar} B e^{iH_0\tau/\hbar}] \right\}}{\text{Tr} e^{-\beta H_0}} + \dots \end{aligned} \quad (1.85)$$

en ne gardant que les termes linéaires dans le forçage.

La formule (1.85) prend donc exactement la forme générale (1.4), p. 5, de la réponse linéaire. La fonction de réponse de l'observable A au forçage considéré est donc

$$K_0(\tau) = -\frac{1}{i\hbar} \frac{\text{Tr} \{ [B, e^{-\beta H_0}] A_I(\tau) \}}{\text{Tr} e^{-\beta H_0}}, \quad (1.86)$$

avec le commutateur

$$[B, e^{-\beta H_0}] = B e^{-\beta H_0} - e^{-\beta H_0} B \quad (1.87)$$

et l'opérateur évolué dans le temps

$$A_I(\tau) = e^{iH_0\tau/\hbar} A e^{-iH_0\tau/\hbar}. \quad (1.88)$$

Pour établir la formule (1.86), nous avons utilisé la propriété de cyclicité de la trace, $\text{Tr}(\mathcal{O}_1 \mathcal{O}_2) = \text{Tr}(\mathcal{O}_2 \mathcal{O}_1)$, valable pour deux opérateurs quelconques $\mathcal{O}_1$ et $\mathcal{O}_2$ de traces bien définies.

Formule de Kubo. Il est d'usage de réécrire la fonction de réponse en termes de l'opérateur $\dot{B}$ défini par ¹⁴

$$\dot{B} = -\frac{1}{i\hbar} [H_0, B] .$$

Il vient alors l'identité

$$-\frac{1}{i\hbar} [B, e^{-\beta H_0}] = e^{-\beta H_0} \int_0^\beta d\beta_1 e^{\beta_1 H_0} \dot{B} e^{-\beta_1 H_0} , \quad (1.89)$$

simplement obtenue par intégration de la relation

$$\frac{\partial}{\partial \beta} (e^{\beta H_0} B e^{-\beta H_0}) = [H_0, e^{\beta H_0} B e^{-\beta H_0}] .$$

En utilisant l'identité (1.89) dans l'expression (1.86) de la fonction de réponse, nous obtenons la formule de Kubo

$$K_0(\tau) = \left\langle \int_0^\beta d\beta_1 e^{\beta_1 H_0} \dot{B} e^{-\beta_1 H_0} A_I(\tau) \right\rangle_0 . \quad (1.90)$$

Ainsi, nous dirons de manière schématique que la réponse en A à un forçage de couplage B , est déterminée par les corrélations dynamiques d'équilibre de A et B . Nous constatons que la fonction de réponse $K_0(\tau)$ est bien indépendante de F , et qu'elle dépend de la manière dont le forçage est couplé au système, comme discuté p. 4. Dans le cadre du problème à N corps, la formule de Kubo est souvent démontrée en partant de l'équation de Liouville qui gouverne l'évolution de la matrice densité sous l'action du forçage. Cette méthode est bien sûr équivalente à l'approche utilisée ici, qui permet de s'affranchir de l'introduction explicite de ces notions.

Conductivité dépendant de la fréquence. Spécifions maintenant la formule de Kubo à la situation suivante. En l'absence de champ magnétique extérieur, et en négligeant tout effet relativiste, le Hamiltonien H_0 est de la forme

$$H_0 = \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m_i} + V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N),$$

où $\mathbf{p}_i = -i\hbar \nabla_i$ est l'opérateur impulsion de la particule i , canoniquement conjugué de sa position $\mathbf{r}_i$, et $V(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N)$ est l'opérateur décrivant les interactions entre particules, qui ne dépendent que de leurs positions. L'observable A est vectorielle et correspond au courant

$$\mathbf{J} = \sum_{i=1}^N q_i \frac{\mathbf{p}_i}{m_i}$$

14. Cet opérateur coïncide avec la dérivée temporelle de l'opérateur évolué $B_I(\tau)$ à $\tau = 0$.

où q_i est la charge de la particule i , tandis que la perturbation $-B F(t)$ correspond à $-\mathbf{P} \cdot \mathbf{E}_{ext}(t)$. Déterminons d'abord l'opérateur $\dot{\mathbf{P}}$. En utilisant l'expression microscopique $\mathbf{P} = \sum_{i=1}^N q_i \mathbf{r}_i$, un calcul élémentaire donne alors

$$\dot{\mathbf{P}} = -\frac{1}{i\hbar} [H_0, \mathbf{P}] = \mathbf{J}.$$

Considérons maintenant un champ extérieur monochromatique de la forme habituelle $\mathbf{E}_{ext}(t) = \text{Re}(\mathbf{E}_z e^{-izt})$, et gardant une direction fixe dans le temps. La susceptibilité en jeu est alors la conductivité $\sigma(z)$ par unité de volume. Supposons que la réponse soit isotrope, autrement dit que le courant induit soit colinéaire au champ extérieur, $\sigma(z)$ se réduisant alors à un pur scalaire. Sous cette hypothèse, en insérant l'expression (1.90) dans la formule générale (1.8) de la susceptibilité, nous trouvons

$$\sigma(z) = \frac{1}{3V} \int_0^\infty d\tau e^{iz\tau} \langle \int_0^\beta d\beta_1 e^{\beta_1 H_0} \mathbf{J} e^{-\beta_1 H_0} \cdot \mathbf{J}_I(\tau) \rangle_0 \quad (1.91)$$

où V est le volume du système. Donc la conductivité s'exprime en termes de la fonction d'auto-corrélation dynamique du courant à l'équilibre.

Limite classique. Dans certains milieux conducteurs, comme les sels ioniques par exemple, les effets quantiques sont faibles, de sorte que la conductivité peut être calculée dans le cadre de la mécanique classique avec une bonne précision. La version classique de la formule de Kubo est alors immédiatement obtenue en appliquant la recette

$$\int_0^\beta d\beta_1 e^{-(\beta-\beta_1)H_0} \mathbf{J} e^{-\beta_1 H_0} \rightarrow \beta e^{-\beta H_0} \mathbf{J}$$

qui revient à faire commuter $\mathbf{J}$ et $e^{-\beta_1 H_0}$. On obtient ainsi pour la conductivité classique

$$\sigma_{cl}(z) = \frac{\beta}{3V} \int_0^\infty d\tau e^{iz\tau} \langle \mathbf{J}(0) \cdot \mathbf{J}(\tau) \rangle_0, \quad (1.92)$$

avec

$$\mathbf{J}(\tau) = \sum_{i=1}^N q_i \mathbf{v}_i(\tau).$$

Ici, $\mathbf{v}_i(\tau)$ est la vitesse de la particule i à l'instant τ dans l'évolution non-perturbée régie par H_0 , à partir d'une configuration initiale donnée à $\tau = 0$, repérée par un point de coordonnées $(\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{p}_1, \dots, \mathbf{p}_N)$ dans l'espace de phase des variables canoniques à $6N$ dimensions. La moyenne statistique sur ces configurations initiales, est une intégrale sur cet espace de phase avec le facteur de Boltzmann $\exp[-\beta H_0(\mathbf{r}, \mathbf{p})]$.

La formule classique de Kubo (1.92) peut  tre obtenue  galement   partir de l' quation de Liouville dans l'espace de phase   $6N$ dimensions. Ici, nous proposons une d monstration plus simple exploitant l'interpr tation de la fonction de r ponse $K_0(\tau)$ comme l' volution libre de $\langle \mathbf{J}_{pulse}(\tau) \rangle / V$ apr s application d'un champ  lectrique strictement localis    l'instant $t_0 = 0$ de la forme

$$\mathbf{E}_{ext}(t) = \mathbf{F}_0 \delta(t).$$

Pour un ensemble de conditions initiales $\{\mathbf{r}_i, \mathbf{v}_i\} = (\mathbf{r}_1, \dots, \mathbf{r}_N; \mathbf{v}_1, \dots, \mathbf{v}_N)$,   l'instant 0^- , les positions et vitesses   l'instant 0^+ , apr s application du champ  lectrique pr c dent deviennent

$$\mathbf{r}_i(0^+) = \mathbf{r}_i \quad \text{et} \quad \mathbf{v}_i(0^+) = \mathbf{v}_i + \frac{q_i \mathbf{F}_0}{m_i}.$$

Pour cette configuration initiale, il vient

$$\mathbf{J}_{pulse}(\tau) = \sum_i q_i \mathbf{v}_i(\tau | \{\mathbf{r}_i; \mathbf{v}_i + \frac{q_i \mathbf{F}_0}{m_i}\}).$$

Ici, les vitesses $\mathbf{v}_i$   l'instant τ se d duisent des conditions initiales $\{\mathbf{r}_i; \mathbf{v}_i + \frac{q_i \mathbf{F}_0}{m_i}\}$   0^+ via l' volution intrins que engendr e par H_0 . Nous obtenons alors

$$\langle \mathbf{J}_{pulse}(\tau) \rangle = Z_{cl}^{-1} \int \prod_i d\mathbf{r}_i d\mathbf{p}_i e^{-\beta H_0(\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i\})} \sum_i q_i \mathbf{v}_i(\tau | \{\mathbf{r}_i; \mathbf{v}_i + \frac{q_i \mathbf{F}_0}{m_i}\}) ,$$

  Z_{cl} est l'int grale de configuration classique

$$Z_{cl} = \int \prod_i d\mathbf{r}_i d\mathbf{p}_i e^{-\beta H_0(\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i\})} .$$

En faisant le changement de variables

$$\mathbf{r}'_i = \mathbf{r}_i \quad ; \quad \mathbf{p}'_i = \mathbf{p}_i + q_i \mathbf{F}_0,$$

dont le Jacobien est  videmment  gal   1, et en lin arisant le facteur de Gibbs $e^{-\beta H_0(\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i\})}$ exprim  dans les nouvelles variables,

$$\begin{aligned} \exp[-\beta H_0(\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i\})] &= \exp\left[-\beta \sum_i \frac{(\mathbf{p}'_i - q_i \mathbf{F}_0)^2}{2m_i} - \beta V(\{\mathbf{r}'_i\})\right] \\ &= \exp[-\beta H_0(\{\mathbf{r}'_i, \mathbf{p}'_i\})] \left(1 + \beta \sum_i q_i \mathbf{v}'_i \cdot \mathbf{F}_0 + O(F_0^2)\right), \end{aligned}$$

nous obtenons

$$\langle \mathbf{J}_{pulse}(\tau) \rangle = \beta Z_{cl}^{-1} \int \prod_i d\mathbf{r}'_i d\mathbf{p}'_i e^{-\beta H_0(\{\mathbf{r}'_i, \mathbf{p}'_i\})} \sum_i q_i \mathbf{v}_i(\tau | \{\mathbf{r}'_i; \mathbf{v}'_i\}) \sum_j q_j \mathbf{v}'_j \cdot \mathbf{F}_0$$

au premier ordre en $\mathbf{F}_0$. L'identité (1.5), établie de manière générale p. 5, s'écrit ici

$$\frac{1}{V} \langle \mathbf{J}_{pulse}(\tau) \rangle = \mathbf{F}_0 K_0(\tau).$$

Nous trouvons finalement

$$\begin{aligned} K_0(\tau) &= \frac{\beta}{3V Z_{cl}} \int \prod_i d\mathbf{r}_i d\mathbf{p}_i e^{-\beta H_0(\{\mathbf{r}_i, \mathbf{p}_i\})} \sum_i q_i \mathbf{v}_i(\tau | \{\mathbf{r}_i; \mathbf{v}_i\}) \cdot \sum_j q_j \mathbf{v}_j \\ &= \frac{\beta}{3V} \langle \mathbf{J}(0) \cdot \mathbf{J}(\tau) \rangle_0, \end{aligned}$$

ce qui redonne bien la formule de Kubo classique (1.92) en appliquant la formule générale (1.8).

Interprétation

La détermination des corrélations dynamiques du courant à un niveau microscopique est extrêmement difficile. En effet, il faut à la fois prendre en compte les interactions et la nature quantique des particules. Dans le cas classique, le problème devient plus simple, mais il reste malgré tout très difficile. Il faut alors mettre en œuvre l'arsenal des équations cinétiques pour le problème à N corps, ce qui ne saurait être décrit ici, même succinctement ! Nous nous contentons de conclure par quelques remarques sur le théorème fluctuation-dissipation, ainsi que sur la modélisation phénoménologique des fonctions de corrélation intervenant dans la formule de Kubo.

Théorème fluctuation-dissipation. Considérons une fréquence réelle $z = \omega$. Le calcul de la puissance fournie par le champ exciteur, moyennée sur une période $T = 2\pi/\omega$,

$$\overline{\mathcal{P}} = \frac{1}{T} \int_0^T dt \left\langle \frac{\partial H(t)}{\partial t} \right\rangle_t = -\frac{1}{T} \int_0^T dt \left\langle \mathbf{P} \right\rangle_t \cdot \frac{d\mathbf{E}_{ext}}{dt},$$

donne

$$\overline{\mathcal{P}} = \frac{\sigma'(\omega)}{2} |\mathbf{E}_\omega|^2. \quad (1.93)$$

C'est donc la partie réelle $\sigma'(\omega)$ de la conductivité qui contrôle la puissance fournie, et qui est ainsi reliée aux processus dissipatifs à l'œuvre dans le système. Ceci implique $\sigma'(\omega) > 0$. Soulignons que la formule (1.93), combinée à la formule de Kubo pour la conductivité, constituent un cas particulier du célèbre théorème fluctuation-dissipation. Ici, la dissipation est déterminée par les fluctuations dynamiques du courant *via* un facteur de proportionnalité qui n'est autre que la température inverse $\beta = 1/(k_B T)$.

Mod lisation ph nom nologique. Les corr lations dynamiques du courant peuvent  tre mod lis es   l'aide d'une simple exponentielle d croissante $C \exp(-\gamma\tau)$. La constante C et le temps de relaxation γ^{-1} peuvent  tre alors ajust s, via diff rentes contraintes, par exemple la valeur de la conductivit  statique $\sigma(0)$, ou le comportement aux temps courts de la fonction de r ponse ¹⁵. Une telle mod lisation peut s'interpr ter dans le cadre du mod le bien connu de Drude. Ces aproches ph nom nologiques sont analogues dans l'esprit   celles pr sent es dans l'exemple sur les di lectriques au  1.2.2.

15. Dans le cas classique, $K_0(0) = \rho q^2/m$ pour un seul type de particules mobiles identiques portant une charge q et de densit  ρ . D'autres informations sur le d veloppement aux temps courts de $K_0(\tau)$ peuvent  tre obtenues en termes de certaines corr lations statiques d' quilibre.

1.3 Exercices

■ Exercice 1.1. Fonctions de réponse associées à des opérateurs linéaires

1. Obtenir les fonctions de réponse associées aux opérateurs

$$L_1 = \frac{d}{dt} + a \quad ; \quad L_2 = \frac{d^2}{dt^2} + b$$

avec a et b des constantes positives, i.e. les fonctions $K_i(t - t')$, solutions de $L_i K_i(t - t') = \delta(t - t')$ avec $K_i(t - t') = 0$ pour $t < t'$.

2. Obtenir les susceptibilités $\chi_1(z)$ et $\chi_2(z)$ associées respectivement à L_1 et L_2 . Discuter leurs pôles et leurs domaines d'analyticité. Même question si a et b sont négatifs.

Solution page 337.

■ Exercice 1.2. Fonction de réponse d'un circuit RLC

Calculer la fonction de réponse d'un circuit RLC de trois manières différentes : les deux premières en utilisant les méthodes de l'annexe C, c'est-à-dire les résultats (C.2) et (C.4) ; puis en effectuant la transformée de Laplace inverse de la susceptibilité

$$\chi(z) = \frac{1}{R - i(Lz - \frac{1}{Cz})}.$$

Solution page 337.

■ Exercice 1.3. Particule brownienne chargée

Une particule chargée est soumise à un champ électrique $E(t)$ en une dimension¹⁶ et à une force de type brownien due à son environnement. L'évolution de la variable $r(t)$, qui représente la valeur moyenne de la position de la particule est alors simplement gouvernée par l'équation :

$$m\ddot{r} + \gamma\dot{r} = E(t). \quad (1.94)$$

1. En écrivant $E(t) = E_z e^{-izt}$, obtenir les susceptibilités $\chi(z)$ et $\mu(z)$ associées respectivement à $\dot{r}(t)$ et $r(t)$. Ces susceptibilités satisfont-elles aux relations de K.K. ? Vérifier la règle de somme (1.27), p. 18, pour $\chi(z)$.

16. La généralisation à trois dimensions est immédiate.

2. Déterminer les fonctions de réponse $V(\tau)$ et $R(\tau)$ associées respectivement à $\dot{r}(t)$ et $r(t)$.

3. Quel terme pourrait-on ajouter à l'équation de mouvement (1.94) pour éliminer la partie constante aux grands τ de la fonction de réponse $R(\tau)$?

Solution page 338.

■ Exercice 1.4. Raie d'absorption

Imaginons une susceptibilité qui corresponde à une raie d'absorption très fine pour une pulsation ω_0 . Plus précisément, supposons que la partie imaginaire, $\chi''(\omega)$, de la susceptibilité $\chi(\omega)$ étudiée corresponde à une distribution de Dirac centrée en ω_0 .

1. Pourquoi faut-il prendre $\chi''(\omega) = \sigma\delta(\omega - \omega_0) - \sigma\delta(\omega + \omega_0)$?

2. Qu'obtient-on alors pour la partie réelle $\chi'(\omega)$ de la susceptibilité par simple application des relations de Kramers-Kronig sans prendre de précautions, c'est-à-dire sans tenir compte des singularités en $\pm\omega_0$?

3. On se propose de retrouver le résultat précédent par une méthode plus rigoureuse. Montrer tout d'abord que l'identité

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{(x - i\epsilon)} = \text{PP} \frac{1}{x} + i\pi\delta(x) \quad (1.95)$$

permet de définir une susceptibilité $\chi_\epsilon(z)$ qui soit analytique dans $\mathbb{C}^+$ et dans $\mathbb{R}$ et qui vérifie $\chi''_\epsilon(\omega) \rightarrow \sigma\delta(\omega - \omega_0) - \sigma\delta(\omega + \omega_0)$ lorsque $\epsilon \rightarrow 0^+$. Donner l'expression de $\chi_\epsilon(z)$ ainsi que celles de $\chi'_\epsilon(\omega)$ et $\chi''_\epsilon(\omega)$. Vérifier alors que le résultat de la question précédente pour $\chi'(\omega)$ est retrouvé à la limite $\epsilon \rightarrow 0^+$.

4. Obtenir $\chi''_\epsilon(\omega)$ à partir de $\chi'_\epsilon(\omega)$ en utilisant les relations de Kramers-Kronig.

Solution page 339.

■ Exercice 1.5. Application des relations de Kramers-Kronig en astrophysique

1. Montrer que les relations de Kramers-Kronig (1.23), p. 16, se réécrivent

$$\begin{aligned} \chi'(\omega) &= \frac{2}{\pi} \text{PP} \int_0^\infty d\omega' \frac{\omega' \chi''(\omega')}{(\omega'^2 - \omega^2)}, \\ \chi''(\omega) &= -\frac{2\omega}{\pi} \text{PP} \int_0^\infty d\omega' \frac{\chi'(\omega')}{(\omega'^2 - \omega^2)}. \end{aligned} \quad (1.96)$$

2. Dans un modèle simplifié pour le milieu interstellaire, le vide est parsemé de grains sphériques. Dans cette question, une limite inférieure pour la fraction du volume occupé par les grains est déterminée.

Pour cela, considérons la susceptibilité $\chi(\omega) = \epsilon(\omega) - 1$ où $\epsilon(\omega)$ est la permittivité diélectrique du milieu interstellaire. Il est possible de montrer en utilisant notamment l'équation de Clausius-Mossotti que

$$\chi'(0) = 4\pi\rho r^3 \frac{\epsilon_g - 1}{\epsilon_g + 2}$$

où r est le rayon des grains sphériques, ρ leur densité et ϵ_g la constante diélectrique statique des grains. Par ailleurs, il est rappelé que $\epsilon''(\omega)$ est une fonction impaire et positive pour $\omega > 0$.

Supposons que la fonction $\chi''(\omega)$ soit connue entre deux pulsations ω_1 et ω_2 grâce à des mesures expérimentales. Montrer que ces mesures permettent de calculer une limite inférieure pour la fraction du volume occupé par les grains.

Solution page 340.

■ Exercice 1.6. Règles de somme

Montrer les règles de somme (1.28) et (1.29) i.e. :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \, \omega \left[\chi''(\omega) - \frac{K_0(0)}{\omega} \right] &= K'_0(0), \\ -\frac{1}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \, \omega^2 \left[\chi'(\omega) + \frac{K'_0(0)}{\omega^2} \right] &= K''_0(0). \end{aligned}$$

Pour cela, supposer que les première et deuxième dérivées de la fonction de réponse $K_0(\tau)$, notées respectivement $K'_0(\tau)$ et $K''_0(\tau)$ peuvent aussi être considérées comme de bonnes fonctions de réponse, finies en $\tau = 0$. Leurs susceptibilités respectives seront notées $\tilde{\chi}(z)$ et $\tilde{\tilde{\chi}}(z)$ et seront reliées à $\chi(z)$, la susceptibilité de $K_0(\tau)$.

Solution page 340.

■ Exercice 1.7. Réponse à un bruit

Considérons une équation pour une variable physique $x(t)$ donnée par $\mathcal{O}x(t) = \eta(t)$ avec $x(t) \rightarrow 0$ pour $t \rightarrow -\infty$. $\mathcal{O}$ est un opérateur différentiel linéaire et $\eta(t)$ est une variable aléatoire de valeur moyenne nulle et décorrélée dans le temps, i.e. :

$$\langle \eta(t) \rangle = 0, \quad \langle \eta(t)\eta(t') \rangle = \alpha\delta(t - t').$$

La variable x peut représenter par exemple la position d'une particule brownienne et η l'influence de l'environnement sur son mouvement.

1. Exprimer $x(t)$ en fonction de la réponse causale $K(t; t')$ associée à $\mathcal{O}$ et de η . Obtenir ensuite une expression pour $\langle x^2(t) \rangle$.

2. Montrer que si $\mathcal{O}$ correspond à l'opérateur différentiel associé à un oscillateur harmonique suramorti, i.e. :

$$\mathcal{O} = m \frac{d^2}{dt^2} + \gamma \frac{d}{dt} + m\omega^2$$

avec $\gamma > 2m\omega$, alors

$$\langle x^2(t) \rangle = \frac{\alpha}{2m\gamma\omega^2}.$$

Solution page 340.

■ Exercice 1.8. Relations de Kramers-Kronig pour un métal

On considère un métal de conductivité σ . En présence d'un champ électrique extérieur homogène de seule composante monochromatique $\exp(-i\omega t)$, ce métal se comporte comme un diélectrique de constante relative $\varepsilon(\omega)$.

1. Préciser dans quelles conditions un tel champ peut effectivement être créé à l'échelle d'un échantillon de taille finie.

2. Rappelons que la densité de courant $\mathbf{j}$ est donnée par $\mathbf{j} = (\partial \mathbf{P} / \partial t)$ où $\mathbf{P}$ est la polarisation. Montrer que dans la limite statique, i.e. $\omega \rightarrow 0$, $\varepsilon(\omega)$ se comporte comme $i\sigma/(\varepsilon_0\omega)$ où ε_0 est la constante diélectrique du vide. En déduire que $\varepsilon(z)$ présente un pôle simple en $z = 0$ de résidu $i\sigma/\varepsilon_0$.

3. On admet que $\varepsilon(z) - 1$ est analytique dans $\mathbb{C}^+$ (axe réel compris) sauf à l'origine, et qu'elle décroît au moins comme $1/z$ aux grands z dans $\mathbb{C}^+$. Trouver les relations de Kramers-Kronig modifiées reliant les parties réelle $\varepsilon'(\omega) - 1$ et imaginaire $\varepsilon''(\omega)$. Sur ces expressions, vérifier que $\varepsilon'(\omega) - 1$ est finie en $\omega = 0$ alors que $\varepsilon''(\omega)$ diverge comme $\sigma/(\varepsilon_0\omega)$.

4. Trouver, grâce à un argument simple, la forme asymptotique de $\varepsilon(\omega) - 1$ aux grands ω (on notera n la densité numérique des électrons, m leur masse et q leur charge). En déduire que $\varepsilon''(\omega)$ décroît plus vite que $1/\omega^2$, ainsi qu'une règle de somme donnant le premier moment de $\varepsilon''(\omega)$ en termes de n , q , m et ε_0 .

5. Comme modélisation simple pour $\varepsilon(\omega)$, et à titre d'exemple, prenons

$$\varepsilon''(\omega) = \frac{\sigma}{\varepsilon_0\omega(1 + \omega^2\tau^2)}.$$

Exprimer le temps caractéristique τ en fonction des paramètres précédents du problème.

6. Quel modèle microscopique simple conduit à l'expression de $\varepsilon(\omega)$ correspondant à la question précédente ? Quelles améliorations pourrait-on lui apporter ?

Solution page 341.

■ Exercice 1.9. Propagation des signaux dans les milieux diélectriques

Cet exercice propose l'étude de la propagation d'une onde dans un milieu dispersif afin de montrer que la causalité implique qu'un signal ne peut pas se propager plus vite que la vitesse de la lumière dans le vide. Pour cela, rappelons que la permittivité électrique $\epsilon(z)$ se construit à partir d'une fonction de réponse causale, $G(\tau)$, donnée par le comportement microscopique du milieu :

$$\epsilon(z) = 1 + \int_0^\infty G(\tau) e^{iz\tau} d\tau.$$

1. Quelles conditions doit-on imposer sur $G(\tau)$ pour que $\epsilon(z)$ soit analytique et que $\epsilon(z) \rightarrow 1$ quand $z \rightarrow \infty$ dans le demi-plan complexe supérieur y compris l'axe réel ?

2. Pour simplifier, considérons le cas uni-dimensionnel avec un domaine correspondant à $x > 0$. Supposons qu'une source soit allumée à $t = 0$ et en $x = 0$, et que l'amplitude du champ (électrique par exemple) en $x = 0$ soit :

$$F(0, t) = \theta(t) f(t) \quad \text{avec} \quad \forall t, |f(t)| < C$$

pour C donné. Montrer que $F(0, t)$ peut s'écrire

$$F(0, t) = \int_{-\infty+i\gamma}^{\infty+i\gamma} dz g_z e^{-izt}$$

avec γ un réel positif arbitraire.

3. L'équation de propagation pour chaque composante de fréquence complexe $g_z(x, t) = g_z g(x) \exp(-izt)$ est donnée par :

$$\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} - \frac{n^2(z)}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) g_z(x, t) = 0$$

où $n(z) = \sqrt{\epsilon(z)}$ est l'indice de réfraction (en supposant que la permittivité μ soit celle du vide pour tout z). En étudiant le domaine d'analyticité et le

comportement pour z grand de $n(z)$, donner la forme g n rale de $F(x, t)$ et montrer qu'elle est nulle pour $x > ct$.

Solution page 342.

Chapitre 2

Fonctions de Green indépendantes du temps

Il est fréquent qu'une quantité physique soit reliée à une source par une équation aux dérivées partielles (EDP) linéaire. Cette grandeur peut être, par exemple, un champ électromagnétique ou bien une température, avec pour sources respectives des charges ou des sources de chaleur. Dans ce chapitre, nous considérons des situations stationnaires où toutes les quantités en jeu sont indépendantes du temps. La quantité physique étudiée est donc un champ statique, c'est-à-dire une fonction dépendant uniquement des coordonnées spatiales. Nous présentons des méthodes générales pour étudier ce genre de problématique.

Soulignons tout d'abord que la quantité physique recherchée n'est pas déterminée de manière univoque par la donnée de l'EDP qu'elle satisfait. En fait, l'unicité est garantie en imposant des conditions supplémentaires. Dans la plupart des situations physiques, il apparaît naturellement des conditions aux limites (C.L.) sur la forme de la grandeur cherchée aux bords du système. Par exemple, en électrostatique, ces conditions aux limites reviennent à prendre en compte implicitement les contributions de sources supplémentaires qui sont induites dans le milieu extérieur au système considéré. De manière générale, ces conditions aux limites ont une signification physique bien précise, et elles jouent ainsi un rôle crucial dans la forme de la grandeur étudiée. Mathématiquement, la détermination du type de C.L. qu'il faut imposer pour assurer à la fois l'existence d'une solution et son unicité est en général assez délicat : en effet, l'existence requiert des C.L. pas trop restrictives, tandis que l'unicité nécessite au contraire des C.L. assez restrictives. La question fondamentale des conditions aux limites est donc la première traitée dans chaque situation.

La linéarité de l'EDP permet de déterminer le champ d'intérêt en appliquant le principe de superposition. Il est alors très naturel d'introduire le

champ particulier créé par une source ponctuelle : c'est ce champ qui est appelé fonction de Green du problème considéré. Le champ total induit par une distribution arbitraire de sources se réduit alors à la superposition des champs particuliers créés par des sources ponctuelles. Cette décomposition met en lumière le rôle majeur des fonctions de Green dans la résolution générale des EDP linéaires. Dans cette argumentation succincte, nous n'avons pas pris en compte la problématique des conditions aux limites. Celle-ci est étudiée en détail pour chacun des cas particuliers abordés dans ce chapitre. Ici, remarquons qu'il existe, pour une EDP donnée, toute une variété de fonctions de Green correspondant à des conditions aux limites différentes. Plus remarquable, la solution générale de cette EDP pour des conditions aux limites particulières est reliée à n'importe quelle fonction de Green associée à d'autres conditions aux limites ! Ceci renforce d'autant l'intérêt de ces fonctions.

Dans la première partie de ce chapitre, nous considérons tout d'abord une EDP linéaire très générale, à partir de laquelle sont introduites les fonctions de Green correspondantes. En exploitant le principe de superposition, nous montrons alors qu'une intégrale adéquate de l'une quelconque de ces fonctions de Green sur tous les points sources est bien solution de l'EDP considérée. La problématique des conditions aux limites est ensuite brièvement abordée. Nous présentons rapidement les propriétés générales des fonctions de Green, avant de les réécrire en termes des éléments de matrice d'un certain opérateur. Cette interprétation opératorielle ouvre la voie à une extension naturelle de la notion de fonction de Green, à des situations où l'enjeu n'est plus de déterminer un champ créé par des sources données. Ensuite, nous étudions successivement deux EDP particulières, faisant intervenir les opérateurs Laplacien et de Helmholtz, dans l'espace tridimensionnel. Par suite des propriétés d'invariance de l'espace, ces opérateurs interviennent naturellement dans de nombreux domaines de la physique. Pour chacun d'entre eux, nous abordons la problématique des conditions aux limites, puis nous exprimons la solution de l'EDP correspondante en termes des fonctions de Green. Cette étude est ensuite reprise pour un espace de basse dimension. En particulier, nous présentons à cette occasion une méthode spécifique à la dimension deux, basée sur l'utilisation des transformations conformes. Enfin, nous terminons par des EDP reliées à des opérateurs inhomogènes, qui interviennent en particulier dans le cadre de la mécanique quantique. Les fonctions de Green correspondantes sont définies par la procédure d'extension de la notion originelle mentionnée précédemment. Leur intérêt réside principalement dans la détermination de propriétés spectrales des opérateurs en jeu, ainsi que dans la construction de séries perturbatives.

La seconde partie du chapitre est consacrée à des exemples illustrant et enrichissant les propriétés générales présentées dans la première partie. D'abord, nous considérons le problème standard du champ électrostatique créé par des charges au voisinage d'une paroi conductrice. La structure des fonctions de Green obtenues par un calcul élémentaire fait naturellement apparaître les

images des charges qui interviennent dans la fameuse méthode du même nom. Ceci permet d'en retrouver les prédictions, et surtout de mettre en valeur le caractère systématique de cette méthode. Après cela, nous considérons une situation rencontrée tout aussi bien en mécanique des fluides qu'en supra-conductivité : le champ d'intérêt est alors solution de l'équation de Laplace avec des conditions aux bords particulières. Dans cet exemple sans sources explicites, une résolution directe de l'EDP par décomposition du champ en harmoniques sphériques est également possible. Les deux exemples suivants sont relatifs à la mécanique quantique : le but du premier est le calcul d'une densité d'états, tandis que le second traite de la diffusion. Enfin, nous décrivons une application des transformations conformes à l'étude du vent soufflant sur un mur.

2.1 Propriétés générales

2.1.1 Définition et propriétés des fonctions de Green

Considérons un système contenu dans un domaine $\mathcal{D}$ de dimension *a priori* quelconque, et comprenant des sources distribuées avec une certaine densité $\rho(\mathbf{r})$, où ici $\mathbf{r}$ désigne un point du domaine $\mathcal{D}$. Supposons que ces sources induisent un certain champ $\phi(\mathbf{r})$, univoquement déterminé par le système

$$\boxed{\begin{array}{l} \mathcal{O} \phi(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) \\ \text{C.L.}(\phi). \end{array}} \quad (2.1)$$

Dans la première équation de ce système, $\mathcal{O}$ désigne un opérateur linéaire incluant des dérivations partielles par rapport aux différentes composantes de $\mathbf{r}$. De plus, la notation C.L. (ϕ) représente les conditions aux limites (C.L.) spécifiques à la situation étudiée. En général, celles-ci porteront sur la valeur de $\phi(\mathbf{r})$ et/ou de ses dérivées spatiales sur le bord $\partial\mathcal{D}$, du domaine $\mathcal{D}$. Dans la suite, et par abus de langage, nous appellerons $\partial\mathcal{D}$ aussi surface, en référence au cas où le domaine $\mathcal{D}$ est tri-dimensionnel.

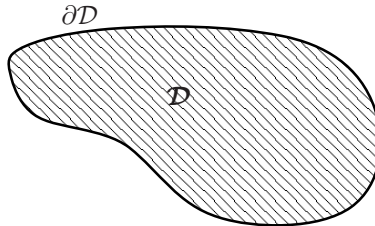


FIG. 2.1 – Domaine $\mathcal{D}$ et son bord $\partial\mathcal{D}$.

En toute généralité, nous envisagerons un champ $\phi(\mathbf{r})$ pouvant prendre des valeurs complexes.

L'EDP satisfaite par ϕ étant linéaire, il est tentant d'introduire le principe de superposition, i.e. de décomposer ϕ comme la somme de champs créés par des sources élémentaires adéquates. Immédiatement, cette tentative se heurte aux difficultés induites par les conditions aux limites. Lesquelles faut-il choisir pour définir univoquement les champs élémentaires, afin de s'assurer que la superposition correspondante satisfasse bien aux conditions de bord originelles portant sur ϕ ? En fait, il n'existe pas de réponse générale à cette question, qui sera traitée au cas par cas dans la suite.

Définition

Revenons à l'idée de superposition. En vertu de l'identité

$$\rho(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.2)$$

valable pour $\mathbf{r}$ strictement à l'intérieur de $\mathcal{D}$ (et non sur la frontière $\partial\mathcal{D}$), il est naturel d'introduire l'assemblée de toutes les sources ponctuelles, assemblée décrite par la position de la source en un point quelconque $\mathbf{r}'$ de $\mathcal{D}$. À chacune de ces sources localisée en un point $\mathbf{r}'$ donné est associée une densité purement locale qui n'est autre que $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Chacune d'entre elles induit un champ élémentaire, défini univoquement par la donnée de conditions aux limites sur la frontière $\partial\mathcal{D}$. Ce champ est appelé fonction de Green de l'opérateur $\mathcal{O}$, et il est donc défini par le système

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') & (2.3) \\ \text{C.L.}(G) &. \end{aligned}$$

Soulignons que la fonction de Green $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ dépend de deux positions qui ne jouent pas le même rôle : $\mathbf{r}$ désigne le point d'observation où le champ élémentaire est évalué, alors que $\mathbf{r}'$ dénote la position de la source ponctuelle. Ainsi dans l'EDP satisfaite par $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$, l'opérateur agit sur la variable $\mathbf{r}$, ce qui est stipulé par la notation $\mathcal{O}_{\mathbf{r}}$. De plus, il existe souvent plusieurs types de C.L., qui, en particulier, peuvent être différentes de celles définissant ϕ .

Intérêt

Poursuivons maintenant l'idée de superposition. Considérons pour cela le champ $\phi_G(\mathbf{r})$, défini comme la combinaison linéaire, sommée sur $\mathbf{r}'$, des champs élémentaires $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ pondérés par $\rho(\mathbf{r}')$, i.e. :

$$\phi_G(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}'). \quad (2.4)$$

Appliquons l'opérateur $\mathcal{O}_{\mathbf{r}}$ à $\phi_G(\mathbf{r})$. Le caractère linéaire de cet opérateur nous permet de le passer sous le signe somme dans l'expression intégrale (2.4). De plus, ce même caractère linéaire implique qu'il agit alors uniquement sur $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$, la densité $\rho(\mathbf{r}')$ jouant le rôle d'une simple constante multiplicative. En utilisant enfin l'EDP satisfaite par $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$, nous trouvons aisément

$$\mathcal{O}_{\mathbf{r}} \phi_G(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}). \quad (2.5)$$

Comme attendu, ce champ $\phi_G(\mathbf{r})$ satisfait donc la même EDP que le champ cherché $\phi(\mathbf{r})$. Ceci met bien en lumière l'intérêt majeur des fonctions de Green dans la résolution du système général (2.1). Une fois ces fonctions déterminées, il suffit en effet de calculer une intégrale spatiale pour avoir accès à une solution particulière de l'EDP étudiée.

Bien sûr, $\phi_G(\mathbf{r})$ ne se réduit pas à $\phi(\mathbf{r})$ en général, car il ne satisfait pas aux bonnes conditions aux limites. Il en diffère typiquement par une intégrale de surface[✱], où le point d'intégration parcourt la frontière $\partial\mathcal{D}$ du domaine comme cela sera vu plus loin dans le cas de l'opérateur Laplacien. Une étude exhaustive de cette contribution de surface n'est pas possible, sauf dans le cas simple des C.L. homogènes que nous présentons ci-dessous.

✱ Commentaire 2.1.1. Considérons un champ $\phi_\psi(\mathbf{r})$ défini par une intégrale surfacique sur $\mathbf{r}' \in \partial\mathcal{D}$ de $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$, ou de l'une quelconque de ses dérivées spatiales, pondérée par une fonction arbitraire $\psi(\mathbf{r}')$. En exploitant à nouveau la linéarité de l'opérateur $\mathcal{O}_{\mathbf{r}}$, ainsi que les propriétés (2.3) définissant $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$, nous trouvons que l'action de cet opérateur sur $\phi_\psi(\mathbf{r})$ donne zéro pour $\mathbf{r}$ strictement à l'intérieur de $\mathcal{D}$. Autrement dit, $\phi_\psi(\mathbf{r})$ est une solution particulière de l'EDP homogène, i.e. avec une densité de sources identiquement nulle. Alors, la somme $\phi_G(\mathbf{r}) + \phi_\psi(\mathbf{r})$ est solution de l'EDP originelle, et il est concevable qu'un ajustement adéquat de la forme de ϕ_ψ puisse donner le champ ϕ cherché avec les bonnes conditions aux limites.

Conditions aux limites homogènes

Ces C.L. obéissent à la propriété remarquable suivante. Si deux fonctions f_1 et f_2 définies dans $\mathcal{D}$ satisfont ces conditions, alors $\alpha_1 f_1 + \alpha_2 f_2$, avec α_1 et α_2 des fonctions régulières arbitraires, satisfait aussi ces mêmes C.L.

Supposons que les C.L. définissant le champ ϕ soient homogènes. Introduisons alors la fonction de Green homogène G_H définie par les mêmes C.L. dans le système (2.3). D'après la propriété d'homogénéité de ces C.L., il est clair que le champ ϕ_{G_H} donné par la superposition (2.4) satisfait également ces C.L., et donc ce champ n'est autre que le champ ϕ cherché, i.e. :

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' G_H(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \rho(\mathbf{r}'). \quad (2.6)$$

La fonction de Green homogène G_H se révèle donc particulièrement utile ici, puisqu'elle fournit la solution générale de l'EDP en ϕ par une simple superposition des champs élémentaires correspondants.

Un exemple simple de C.L. homogène est donné par les conditions dites de Dirichlet homogènes, qui imposent la nullité des fonctions sur la frontière du domaine. La condition C.L. (ϕ) devient alors $\phi(\mathbf{r}) = 0$ pour $\mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}$. La fonction de Green homogène satisfait aux mêmes conditions $G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = 0$ pour $\mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}$. Ces C.L. de Dirichlet homogènes apparaissent dans de nombreuses situations et nous les étudierons en détail plus loin.

Propriétés usuelles

Quelques propriétés simples des fonctions de Green découlent immédiatement de leur définition. Ces propriétés sont reliées aux symétries du problème déterminées à la fois par la forme du domaine $\mathcal{D}$, la structure de l'opérateur $\mathcal{O}$ et la nature des conditions aux limites. Dans la suite, nous énumérons celles qui sont le plus fréquemment rencontrées.

Réciprocité. Supposons que $\mathcal{O}$ soit hermitien dans l'ensemble des fonctions définies dans $\mathcal{D}$ et satisfaisant à des C.L. données. Cela signifie que quelque soient les fonctions $u(\mathbf{r})$ et $v(\mathbf{r})$ appartenant à cet ensemble,

$$\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} [u^*(\mathbf{r}) \mathcal{O}_{\mathbf{r}} v(\mathbf{r}) - (\mathcal{O}_{\mathbf{r}} u(\mathbf{r}))^* v(\mathbf{r})] = 0,$$

où $u^*(\mathbf{r})$ dénote le complexe conjugué de $u(\mathbf{r})$. Alors,

$$\boxed{G(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2) = G^*(\mathbf{r}_2; \mathbf{r}_1), \quad \forall \mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2 \in \mathcal{D}.} \quad (2.7)$$

Cette propriété est un cas particulier de relations dites de réciprocité. Elle se démontre en partant des deux équations

$$\mathcal{O}_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1), \quad (2.8)$$

$$\mathcal{O}_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_2) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2), \quad (2.9)$$

obtenues en spécifiant l'EDP satisfaite par $G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ aux deux points sources $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_2$ respectivement. Multiplions membre à membre l'équation (2.8) par $G^*(\mathbf{r}; \mathbf{r}_2)$ d'une part, et le complexe conjugué de l'équation (2.9) par $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1)$ d'autre part. Intégrons ensuite chaque terme sur $\mathbf{r}$. Par soustraction membre à membre, nous obtenons finalement :

$$\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} [G^*(\mathbf{r}; \mathbf{r}_2) \mathcal{O}_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1) - (\mathcal{O}_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_2))^* G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1)] = G^*(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2) - G(\mathbf{r}_2; \mathbf{r}_1).$$

Comme $\mathcal{O}$ est hermitien, le terme de gauche est nul, ce qui implique bien la relation (2.7).

Dans le cas où G est réelle, la relation (2.7) devient $G(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2) = G(\mathbf{r}_2; \mathbf{r}_1)$. Alors, les points $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$ jouent des rôles symétriques : le champ élémentaire créé en $\mathbf{r}_1$ par $\mathbf{r}_2$, est identique à celui créé par $\mathbf{r}_2$ en $\mathbf{r}_1$.

Invariance par translation. Si les symétries du problème impliquent l'invariance par translation, alors $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ est fonction uniquement de la différence $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Il est facile de s'en convaincre en exprimant G en termes des variables $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ et $\mathbf{r} + \mathbf{r}'$. En effet, l'invariance par toute translation spatiale de vecteur quelconque $\mathbf{r}_0$, se manifeste alors par l'identité $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \mathbf{r} + \mathbf{r}' + 2\mathbf{r}_0) = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \mathbf{r} + \mathbf{r}')$, pour tout $\mathbf{r}_0$, ce qui implique bien l'indépendance de G par rapport à la variable $\mathbf{r} + \mathbf{r}'$.

L'invariance par translation peut être observée dans différentes situations. La plus courante est celle d'un système infiniment étendu (le domaine $\mathcal{D}$ est l'espace tout entier), avec un opérateur $\mathcal{O}$ lui-même invariant par translation, et des C.L. de Dirichlet homogènes. Notons que l'invariance par translation peut être restreinte à certaines directions spatiales, en particulier dans le cas des systèmes semi-infinis.

Invariance par translation et rotation. Supposons que les symétries du problème induisent la double invariance par translation et rotation. D'après ce qui précède, $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. De plus, comme G doit être inchangée par n'importe quelle rotation de centre $\mathbf{r}'$ avec axe et angle arbitraires, G ne peut pas dépendre des angles de $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$ dans un repère donné. Par conséquent, G est une fonction uniquement de la distance relative $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Remarquons que si de plus $\mathcal{O}$ est hermitien, la relation de réciprocité (2.7), combinée à $G(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2) = G(|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|)$, impliquent alors que G est réelle.

La double invariance par translation et rotation sera typiquement observée pour un système infiniment étendu dans toutes les directions, avec un opérateur $\mathcal{O}$ ayant lui-même ces propriétés d'invariance, et des C.L. de Dirichlet homogènes.

2.1.2 Point de vue opératoire

Revenons à l'équation générale (2.1) et supposons que les conditions aux limites soient homogènes. Ces C.L. définissant une solution ϕ unique pour chaque ρ , l'opérateur inverse $\mathcal{O}^{-1}$ est alors bien défini. Cet opérateur inverse dépend du type de C.L. homogènes choisies. Il existe donc *a priori* plusieurs opérateurs $\mathcal{O}^{-1}$ possibles¹. Pour des C.L. données, nous pouvons donc écrire

$$\phi(\mathbf{r}) = \mathcal{O}_{\mathbf{r}}^{-1} \rho(\mathbf{r}). \quad (2.10)$$

1. Dans la suite, par commodité de notation, nous ne spécifierons pas explicitement la dépendance de $\mathcal{O}^{-1}$ vis-à-vis des C.L. retenues.

Dans ce langage opératoire, la fonction de Green homogène $G_H(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est obtenue par la spécification de la formule d'inversion (2.10) au cas d'une source ponctuelle de densité associée $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, i.e. :

$$G_H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathcal{O}_{\mathbf{r}}^{-1} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (2.11)$$

où $\mathcal{O}_{\mathbf{r}}^{-1}$ agit sur la position $\mathbf{r}$. Il est aisé de montrer que, comme $\mathcal{O}$ lui-même, son inverse $\mathcal{O}^{-1}$ est bien linéaire également. Notons alors qu'en insérant la décomposition (2.2) de la densité $\rho(\mathbf{r})$ dans la formule d'inversion (2.10), et en utilisant cette propriété de linéarité, nous trouvons

$$\phi(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') \mathcal{O}_{\mathbf{r}}^{-1} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Cette expression correspond bien à la forme (2.4) de la solution générale en ϕ avec $G_H(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \mathcal{O}_{\mathbf{r}}^{-1} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$.

Représentation spectrale

Supposons maintenant que l'opérateur $\mathcal{O}$ admette un ensemble complet de fonctions propres orthonormées $\psi_n(\mathbf{r})$ dans l'espace des fonctions définies sur $\mathcal{D}$ avec les conditions aux limites homogènes considérées. En notant λ_n la valeur propre associée à $\psi_n(\mathbf{r})$, l'action de $\mathcal{O}$ sur $\psi_n(\mathbf{r})$ donne simplement

$$\mathcal{O} \psi_n(\mathbf{r}) = \lambda_n \psi_n(\mathbf{r}).$$

L'ensemble des valeurs propres définit le spectre de $\mathcal{O}$. Notons que certaines valeurs propres peuvent être dégénérées, i.e. $\lambda_n = \lambda_p$, avec $n \neq p$. Par ailleurs, le spectre comprend, en général, une partie discrète, pour laquelle n prend des valeurs entières, et une partie continue pour laquelle n est lui-même une variable continue. L'existence de l'opérateur inverse $\mathcal{O}^{-1}$ exclut la valeur propre nulle. En effet, le noyau de $\mathcal{O}$, défini par $\mathcal{O}\psi = 0$, qui n'est autre que l'EDP homogène associée à l'EDP générale (2.1), se réduit alors à la seule fonction $\psi(\mathbf{r}) = 0$ identiquement nulle. Enfin, $\psi_n(\mathbf{r})$ est également fonction propre de l'opérateur inverse $\mathcal{O}^{-1}$ avec la valeur propre $1/\lambda_n$.

La base des $\psi_n(\mathbf{r})$ étant supposée complète, n'importe quelle fonction définie dans le domaine $\mathcal{D}$ avec les mêmes C.L. se décompose de manière unique comme une combinaison linéaire de ces fonctions. Cette propriété remarquable se traduit, de manière équivalente, par la relation dite de complétude

$$\sum_n \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.12)$$

Dans cette expression, la notation de la sommation sur n , i.e. sur tout le spectre de $\mathcal{O}$, est symbolique, étant entendu que celle-ci comprend, en général, une somme discrète ainsi qu'une intégrale pour la partie continue du spectre.

La relation (2.12) n'est autre que la décomposition de la densité $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ associée à une source ponctuelle localisée en $\mathbf{r}'$, sur la base complète des fonctions propres $\psi_n(\mathbf{r})$. En remplaçant $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ par cette décomposition² dans l'expression (2.11), et en exploitant la linéarité de $\mathcal{O}_{\mathbf{r}}^{-1}$, nous trouvons immédiatement la représentation spectrale

$$G_H(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{r})\psi_n^*(\mathbf{r}')}{\lambda_n}. \quad (2.13)$$

La connaissance du spectre de l'opérateur $\mathcal{O}$, donne donc accès *via* la représentation (2.13) à la fonction de Green homogène correspondant aux C.L. considérées. Remarquons que si $\mathcal{O}$ est hermitien, alors ses valeurs propres λ_n sont toutes réelles : ceci permet de retrouver la relation de réciprocité (2.7) en prenant le complexe conjugué de la représentation (2.13).

Extensions et réécritures

Nous avons introduit la notion de fonction de Green dans le contexte de la détermination d'un champ créé par des sources données. Il se trouve que cette notion peut être étendue à d'autres situations physiques, comme en mécanique quantique, où l'enjeu n'est plus la détermination d'un champ créé par une source. Par analogie, cette terminologie est conservée pour des quantités solutions d'EDP linéaires de la forme (2.3). Si ces quantités ne sont plus interprétables en termes de champs élémentaires (électrostatique ou autres), elles présentent néanmoins un grand intérêt dans l'analyse du problème considéré comme nous le verrons notamment au §2.1.6.

Tant pour une simplification des manipulations algébriques que pour des interprétations et extensions ultérieures, il est particulièrement utile de réécrire la formule d'inversion (2.11), en introduisant les concepts spécifiques aux espaces vectoriels. Ici, l'espace vectoriel en question n'est autre que l'espace des fonctions définies sur $\mathcal{D}$ avec les C.L. homogènes données. Cet espace de dimension infinie est un espace de Hilbert².

2. Il est clair que la distribution de Dirac est mal définie lorsque $\mathbf{r}$ ou $\mathbf{r}'$ appartient à $\partial\mathcal{D}$. Dans la suite il n'est pas nécessaire de prendre en compte explicitement cette difficulté. Lorsqu'elle conduit à des ambiguïtés sur la valeur des quantités mises en jeu sur la frontière, il est implicitement convenu que ces valeurs sont définies par un processus de limite en partant de l'intérieur de $\mathcal{D}$.

Dans un tel cadre, la formule d'inversion (2.11) devient

$$\boxed{G_H(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \mathcal{O}^{-1} | \mathbf{r}' \rangle} \quad (2.14)$$

où nous avons utilisé la notation de Dirac. Ainsi, la fonction de Green $G_H(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ créée, en un point d'observation $\mathbf{r}$ par une source localisée en $\mathbf{r}'$, n'est autre que la composante suivant le vecteur de base $|\mathbf{r}\rangle$ du vecteur image $\mathcal{O}^{-1}|\mathbf{r}'\rangle$ de $|\mathbf{r}'\rangle$ par l'opérateur $\mathcal{O}^{-1}$, i.e. l'élément de matrice de $\mathcal{O}^{-1}$ entre $\langle \mathbf{r} |$ et $|\mathbf{r}'\rangle$.

✱ Commentaire 2.1.2.

Nous n'avons pas besoin ici de développer la problématique de la définition mathématique précise d'un espace de Hilbert. Retenons simplement qu'il possède des propriétés tout à fait semblables à celles des espaces vectoriels finis et renvoyons le lecteur à l'annexe D qui rappelle, d'un point de vue pragmatique, les notions et propriétés indispensables aux manipulations effectuées ci-dessous, en particulier la notation de Dirac.

L'intérêt technique des notions utilisées ici est bien illustré par la manipulation suivante. Dans l'élément de matrice (2.14), écrivons la tautologie $\mathcal{O}^{-1} = \mathcal{O}^{-1} \mathcal{I}$, où $\mathcal{I}$ est l'opérateur identité. Remplaçons ensuite $\mathcal{I}$ par la somme des opérateurs de projection orthogonale suivant les vecteurs propres $|\psi_n\rangle$ de $\mathcal{O}$,

$$\mathcal{I} = \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|, \quad (2.15)$$

cette identité étant une simple réécriture de la relation de complétude (2.12). Nous obtenons

$$\begin{aligned} G_H(\mathbf{r}; \mathbf{r}') &= \langle \mathbf{r} | \mathcal{O}^{-1} \mathcal{I} | \mathbf{r}' \rangle \\ &= \langle \mathbf{r} | \mathcal{O}^{-1} \sum_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n| \mathbf{r}' \rangle \\ &= \sum_n \lambda_n^{-1} \langle \mathbf{r} | \psi_n \rangle \langle \psi_n | \mathbf{r}' \rangle, \end{aligned} \quad (2.16)$$

ce qui redonne bien la représentation spectrale (2.13) via les identifications $\langle \mathbf{r} | \psi_n \rangle = \psi_n(\mathbf{r})$ et $\langle \psi_n | \mathbf{r}' \rangle = \psi_n^*(\mathbf{r}')$. Nous donnerons au §2.1.6 des exemples d'extensions et d'autres interprétations des fonctions de Green basées sur l'écriture matricielle (2.14).

2.1.3 Opérateur Laplacien

Spécifions maintenant notre étude au cas de l'opérateur Laplacien, Δ , défini par

$$\Delta = \sum_{i=1}^d \frac{\partial^2}{\partial x_i^2}. \quad (2.17)$$

Ici, x_i sont des coordonnées cartésiennes de l'espace considéré de dimension d . L'élément de volume infinitésimal sera noté $d\mathbf{r} = \prod_{i=1}^d dx_i$.

L'opérateur Laplacien est le plus simple que l'on puisse construire à partir des dérivées partielles spatiales $\partial/\partial x_i$, qui soit invariant par les symétries naturelles de translation et de rotation de l'espace vide : il n'est autre que le carré scalaire de l'opérateur vectoriel gradient, i.e. $\Delta = \nabla^2$. C'est pourquoi cet opérateur apparaît naturellement en physique. Ainsi, la forme générale de l'EDP dans le système (2.1) spécifiée au cas $\mathcal{O} = -\Delta$ devient l'équation de Poisson³

$$\boxed{-\Delta\phi(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r})}. \quad (2.18)$$

C'est une des équations aux dérivées partielles les plus courantes de la physique. Par exemple en électrostatique, ϕ/ϵ_0 correspond au potentiel électrique et ρ s'identifie à la densité de charges.

Nous allons commencer l'étude de l'opérateur Laplacien en examinant le problème des conditions aux limites assurant l'unicité de l'équation de Poisson. Nous montrons ensuite comment l'utilisation des fonctions de Green de cet opérateur permet de déterminer une équation intégrale satisfaite par chaque solution de l'équation de Poisson. Cette analyse nous permettra alors d'étudier plus précisément les fonctions de Green du Laplacien et *in fine* de donner l'expression de la solution de l'équation de Poisson, selon le type de C.L. considéré.

Conditions aux limites

Comme souligné dans le cas général d'un opérateur $\mathcal{O}$ quelconque, l'unicité de la solution en ϕ de l'EDP (2.18) pour des sources données passe par l'introduction de conditions aux limites appropriées, C.L.(ϕ), à la frontière $\partial\mathcal{D}$ définissant le domaine fermé d'intérêt $\mathcal{D}$. Il est donc crucial de déterminer la nature de ces conditions aux limites.

Argument physique. Avant de passer à une analyse mathématique rigoureuse de cette problématique, il est utile de faire appel aux phénomènes observés en électrostatique. Imaginons des charges dans une enceinte dont les parois sont constituées d'un matériau conducteur maintenu à un potentiel fixe. L'expérience montre qu'il s'établit un équilibre électrostatique avec l'apparition de charges d'influence dans le matériau conducteur. Le champ électrostatique total $\mathbf{E} = -\nabla\phi$ prend alors une valeur bien précise en tout point. Ceci suggère que la donnée de ϕ sur le bord $\partial\mathcal{D}$ est suffisante pour garantir l'unicité. De manière similaire, si les parois sont maintenant isolantes, et si on y dépose des charges superficielles, le champ $\mathbf{E}$ dans l'enceinte est

3. Ici, le choix du signe moins n'a aucune signification profonde. Ce signe est introduit de sorte que l'EDP (2.18) ainsi définie coïncide avec l'équation de Poisson en électrostatique, au facteur $1/\epsilon_0$ près dans le terme source.

à nouveau bien déterminé. La présence de charges superficielles induisant ici une discontinuité de la composante normale à la paroi de $\mathbf{E}$, ce sont maintenant des conditions portant sur la composante normale de $\nabla\phi$ qui semblent suffisantes pour assurer l'unicité.

Ainsi, ces considérations suggèrent d'examiner avec soin les situations où ϕ ou sa dérivée normale à $\partial\mathcal{D}$ sont fixées sur $\partial\mathcal{D}$. C'est donc ce que nous allons faire, après avoir présenté deux formules intégrales appelées formules de Green, qui seront utilisées maintes fois par la suite.

Formules de Green. Soient u et v deux fonctions à valeurs complexes définies dans le domaine $\mathcal{D}$ et de carré sommable, i.e. telles que les intégrales $\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} |u(\mathbf{r})|^2$ et $\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} |v(\mathbf{r})|^2$ soient convergentes. Alors, le couple de fonctions (u, v) obéit à la première formule de Green,

$$\boxed{\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} [u(\mathbf{r})\Delta v(\mathbf{r}) + \nabla u(\mathbf{r}) \cdot \nabla v(\mathbf{r})] = \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma u(\mathbf{r}) [\mathbf{n} \cdot \nabla v(\mathbf{r})]}. \quad (2.19)$$

Dans l'intégrale de surface apparaissant dans le second membre, la position $\mathbf{r}$ parcourt la surface $\partial\mathcal{D}$, $\mathbf{n}$ est le vecteur unité normal à cette surface au point considéré et orienté de l'intérieur vers l'extérieur du domaine, et $d\Sigma$ est l'élément de surface infinitésimal (voir figure 2.2).

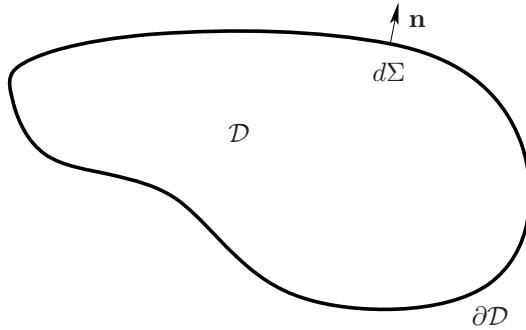


FIG. 2.2 – Sur cette figure, $\mathbf{n}$ est le vecteur unité normal à la surface $\partial\mathcal{D}$ au point considéré et orienté vers l'extérieur.

La démonstration de la formule (2.19) est immédiate à partir du théorème de Green-Ostrogradski. Celui-ci stipule qu'une intégrale de volume sur $\mathcal{D}$ de la divergence d'un vecteur est égale au flux de ce vecteur à travers la surface $\partial\mathcal{D}$. La formule (2.19) est tout simplement l'écriture de cette identité pour le vecteur $u\nabla v$ dont la divergence n'est autre que $(u\Delta v + \nabla u \cdot \nabla v)$.

La seconde formule de Green correspond simplement à la partie anti-symétrique en u et v de la première formule de Green,

$$\boxed{\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} [u(\mathbf{r})\Delta v(\mathbf{r}) - v(\mathbf{r})\Delta u(\mathbf{r})] = \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma \mathbf{n} \cdot [u(\mathbf{r})\nabla v(\mathbf{r}) - v(\mathbf{r})\nabla u(\mathbf{r})].} \quad (2.20)$$

Pour établir cette formule, il suffit donc de soustraire membre à membre les deux premières formules de Green pour les couples (u, v) et (v, u) .

Mise en évidence de conditions aux limites naturelles. Revenons maintenant à la problématique du choix des conditions aux limites. Supposons donc que ϕ_1 et ϕ_2 soient deux solutions de (2.18) dans $\mathcal{D}$, et introduisons leur différence $\alpha = \phi_1 - \phi_2$. Celle-ci satisfait clairement à l'équation de Laplace

$$\boxed{\Delta\alpha(\mathbf{r}) = 0.} \quad (2.21)$$

Cette EDP est la version sans sources de l'équation de Poisson (2.18). L'application de la première formule de Green avec $u = \alpha^*$ et $v = \alpha$ donne alors

$$\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} \nabla\alpha^*(\mathbf{r}) \cdot \nabla\alpha(\mathbf{r}) = \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma \alpha^*(\mathbf{r}) [\mathbf{n} \cdot \nabla\alpha(\mathbf{r})]. \quad (2.22)$$

Ainsi, si $\alpha^*(\mathbf{r})[\mathbf{n} \cdot \nabla\alpha(\mathbf{r})] = 0$ en tout point du bord $\partial\mathcal{D}$, alors

$$\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} |\nabla\alpha(\mathbf{r})|^2 = 0. \quad (2.23)$$

Par conséquent $\nabla\alpha(\mathbf{r}) = 0$ en tout point $\mathbf{r}$ de $\mathcal{D}$, et $\alpha(\mathbf{r})$ se réduit alors à une constante. Ceci signifie que les deux solutions ϕ_1 et ϕ_2 de l'équation de Poisson ne diffèrent que d'une constante. Ces considérations nous permettent d'énoncer différents choix possibles de conditions aux limites qui garantissent l'unicité de la solution de l'EDP (2.18).

Conditions aux limites de Dirichlet. Ces C.L. sont définies en imposant la valeur du champ $\phi(\mathbf{r})$ en tout point $\mathbf{r}$ du bord $\partial\mathcal{D}$, i.e. :

$$\boxed{\text{Dirichlet :} \quad \phi(\mathbf{r}) = D(\mathbf{r}) \quad \text{pour} \quad \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D},} \quad (2.24)$$

où D est une fonction donnée. Alors, pour deux fonctions ϕ_1 et ϕ_2 solutions de l'EDP (2.18) avec cette C.L., la condition $\alpha^*(\mathbf{r})[\mathbf{n} \cdot \nabla\alpha(\mathbf{r})] = 0$ sur le bord $\partial\mathcal{D}$ est également satisfaite. Ainsi, la différence $\alpha = \phi_1 - \phi_2$ est constante à l'intérieur du domaine $\mathcal{D}$, et par continuité des fonctions en jeu à la surface $\partial\mathcal{D}$, cette constante est nécessairement nulle. Nous en déduisons que ϕ_1 et ϕ_2 sont identiques, et la solution de l'EDP (2.18) est bien unique, si elle existe. Noter qu'en général, l'unicité ne garantit pas l'existence. Ceci est bien illustré dans la discussion page 77 sur les fonctions de Green dites de Neumann.

Conditions aux limites de Neumann. Ces C.L. sont définies en imposant la valeur de la composante normale du gradient du champ en tout point $\mathbf{r}$ de la surface $\partial\mathcal{D}$, ainsi que la valeur du champ en un point $\mathbf{r}_0$ donné de $\mathcal{D}$, i.e. :

$$\boxed{\text{Neumann : } \mathbf{n} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}) = N(\mathbf{r}) \quad \text{pour } \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D} \quad \text{et} \quad \phi(\mathbf{r}_0) = c,} \quad (2.25)$$

où N est une fonction donnée et c est un nombre complexe donné. Pour deux fonctions ϕ_1 et ϕ_2 solutions de l'EDP (2.18) avec cette C.L., la condition $\alpha^*(\mathbf{r})[\mathbf{n} \cdot \nabla \alpha(\mathbf{r})] = 0$ sur le bord $\partial\mathcal{D}$ est à nouveau satisfaite, et par conséquent la différence $\alpha = \phi_1 - \phi_2$ est toujours constante à l'intérieur du domaine $\mathcal{D}$. Cette constante est nulle car $\alpha(\mathbf{r})$ s'annule en $\mathbf{r} = \mathbf{r}_0$, ce qui implique bien l'unicité $\phi_1 = \phi_2$, mais n'assure pas l'existence de la solution, bien entendu.

Autres conditions aux limites. Naturellement, il existe d'autres conditions aux limites qui garantissent l'unicité de la solution de l'EDP (2.18), notamment des conditions dites mixtes combinant les conditions de Dirichlet et de Neumann sur des parties complémentaires de la surface $\partial\mathcal{D}$. Le lecteur peut consulter aussi l'exercice 3.9 du chapitre 3, page 239, qui présente des C.L. dites de Robin intervenant dans des problèmes de diffusion. Dans la pratique, les C.L. les plus courantes sont de type Dirichlet ou Neumann.

Fonctions de Green et équation intégrale

Une fonction de Green du Laplacien satisfait à l'EDP (2.18) avec $\rho(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, i.e. :

$$-\Delta_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.26)$$

Revenons maintenant au champ ϕ , défini comme solution de l'équation de Poisson (2.18). Nous allons montrer que ϕ vérifie une équation intégrale qui fait intervenir n'importe quelle fonction de Green du Laplacien, solution de l'EDP (2.26). Pour cela, dans la seconde formule de Green (2.20), rebaptisons la variable muette d'intégration $\mathbf{r}'$, et posons $u(\mathbf{r}') = \phi(\mathbf{r}')$ et $v(\mathbf{r}') = G(\mathbf{r}'; \mathbf{r})$ où $\mathbf{r}$ est ici un point fixé. Il vient

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' [\phi(\mathbf{r}') \Delta_{\mathbf{r}'} G(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) - G(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) \Delta_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}')] \\ = \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \mathbf{n}' \cdot [\phi(\mathbf{r}') \nabla_{\mathbf{r}'} G(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) - G(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}')]. \end{aligned}$$

En vertu des EDP respectives (2.18) et (2.26),

$$-\Delta_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}') = \rho(\mathbf{r}') \quad \text{et} \quad -\Delta_{\mathbf{r}'} G(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}),$$

l'identité précédente devient

$$\boxed{\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) = & \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) \\ & - \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \mathbf{n}' \cdot [\phi(\mathbf{r}') \nabla_{\mathbf{r}'} G(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) - G(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}')]. \end{aligned}} \quad (2.27)$$

Puisque le membre de droite dépend des valeurs du champ $\phi(\mathbf{r})$ et de son gradient sur le bord $\partial\mathcal{D}$, l'équation (2.27) s'interprète comme une équation intégrale satisfaite par $\phi(\mathbf{r})$. L'intérêt majeur de cette équation est sa validité pour n'importe quelle fonction de Green solution de l'EDP (2.26) dans tout le domaine $\mathcal{D}$! Il y a donc une équation intégrale pour chaque fonction de Green. Pour aller plus loin, il faut prendre en compte les C.L. satisfaites par le champ $\phi(\mathbf{r})$. C'est ce que nous ferons dans la suite après avoir introduit diverses fonctions de Green du Laplacien.

Comme déjà évoqué, la spécification de conditions aux limites revient à introduire implicitement des sources supplémentaires à la surface $\partial\mathcal{D}$ du domaine. Ainsi, chaque fonction de Green peut être vue comme un champ élémentaire habillé, *i.e.* créé à la fois par une source ponctuelle et les sources implicites induites par les C.L. correspondantes. L'interprétation de chaque terme de l'expression (2.27) se révèle alors délicate, car l'intégrale de volume contient aussi implicitement des contributions de surface. D'ailleurs, notons bien que ce terme de volume ne se réduit au champ ϕ_G défini par la simple superposition (2.4), p. 64, que si G est symétrique dans l'échange des points observation et source.

Fonctions de Green

La discussion sur les conditions aux limites assurant l'unicité de la solution de l'équation de Poisson s'applique bien entendu aux fonctions de Green, solutions de l'équation de Poisson pour la source particulière $\rho(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. Il faut cependant tenir compte de la dépendance des fonctions de Green des deux arguments $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$, l'argument $\mathbf{r}'$ étant muet dans la détermination des C.L. Plus précisément, il est très avantageux d'introduire plusieurs types de fonctions de Green, chacune d'elles étant définie par des C.L. particulières.

Fonctions de Green de Dirichlet. Elles sont définies par l'EDP (2.26) avec les conditions aux limites, $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = D(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$, quelque soient $\mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}$ et $\mathbf{r}' \in \mathcal{D}$. Ces C.L. définissent tout un ensemble de fonctions de Green, engendré par tous les choix possibles de fonction $D(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$.

Fonction de Green de Dirichlet homogène. Un cas particulier est donné par le choix $D(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = 0$, qui définit la fonction de Green G_{DH}

correspondant aux C.L. de Dirichlet homogènes :

Fonction de Green de Dirichlet homogène	$\begin{aligned} -\Delta_{\mathbf{r}} G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') &= 0 \quad \forall \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}, \quad \forall \mathbf{r}' \in \mathcal{D} \end{aligned}$
--	--

Comme illustré par la formule intégrale (2.6), page 65, cette fonction de Green homogène est particulièrement utile pour la résolution de nombreux problèmes, où les C.L. sur le champ ϕ sont aussi de type Dirichlet homogène. Nous verrons plus loin que G_{DH} fournit également une représentation simple de tout champ ϕ défini par des C.L. de Dirichlet inhomogènes, pour lesquelles la donnée $D(\mathbf{r})$ dans la C.L. (2.24) n'est pas identiquement nulle.

La fonction de Green $G_{DH}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2)$ est symétrique dans l'échange des points d'observation $\mathbf{r}_1$ et source $\mathbf{r}_2$, i.e :

$$\boxed{G_{DH}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2) = G_{DH}(\mathbf{r}_2; \mathbf{r}_1).} \quad (2.28)$$

Comme proposé à l'exercice 2.4, page 129, le lecteur peut démontrer cette propriété remarquable en posant $G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1) = u(\mathbf{r})$ et $G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_2) = v(\mathbf{r})$ dans la seconde formule de Green (2.20). De plus, l'opérateur Laplacien étant hermitien dans l'espace des fonctions définies dans $\mathcal{D}$ avec des C.L. de Dirichlet homogènes, G_{DH} satisfait également la relation de réciprocité (2.7). En vertu de la symétrie (2.28), nous en déduisons que G_{DH} est réelle. Notons par ailleurs que ces propriétés peuvent être établies à partir de la représentation spectrale (2.13). En effet, il est possible de choisir un jeu de fonctions propres purement réelles pour le Laplacien, ce qui implique immédiatement les caractères réel et symétrique de G_{DH} .

Pour des domaines présentant suffisamment de symétries (voir par exemple l'exemple du §2.2.1, page 104, ou encore l'exercice 2.8, page 131) une détermination explicite de G_{DH} est possible. Pour un domaine de forme quelconque, une telle détermination est un problème extrêmement difficile. L'origine de cette difficulté apparaît clairement dans le cadre physique de l'électrostatique. En effet, G_{DH} n'est autre que le potentiel créé par une charge ponctuelle à l'intérieur d'un domaine délimité par des parois conductrices maintenues au potentiel nul. Par influence, des charges superficielles sont induites sur ces parois, de sorte que le champ électrostatique total soit identiquement nul dans le matériau conducteur. La fonction de Green G_{DH} est simplement la somme des potentiels coulombiens dans le vide créés par la charge ponctuelle et les charges d'influence. La calculer explicitement est donc équivalent à trouver la répartition des charges d'influence, un problème éminemment complexe pour une surface $\partial\mathcal{D}$ sans symétries simples[✱].

✱ **Commentaire 2.1.3.** Cette difficulté se retrouve dans l'étude du spectre de l'opérateur Laplacien, qui donne formellement accès à G_{DH} via la représentation (2.13), page 69. En effet, la détermination des valeurs propres λ_n et des fonctions propres associées reste un problème ouvert, sauf pour des surfaces $\partial\mathcal{D}$ très simples comme la sphère ou le cube par exemple. Remarquons que, dans le cadre de la mécanique quantique, ces valeurs propres coïncident, au facteur $\hbar^2/(2m)$ près, avec les niveaux d'énergie d'une particule libre de masse m confinée dans une boîte de bord $\partial\mathcal{D}$. En fait, ce problème, d'apparence simple, est tout aussi riche que complexe. En particulier, contrairement au cas des géométries simples où les énergies sont régulièrement espacées, il apparaît en général un caractère aléatoire dans la distribution des niveaux, avec en prime des corrélations entre eux : ce phénomène est un aspect du chaos quantique [Gutzwiller] et de son lien avec la théorie des matrices aléatoires [Mehta].

Fonctions de Green de Neumann. *A priori*, il semblerait naturel de définir, de manière analogue à ce qui précède, les fonctions de Green de Neumann, solutions de l'EDP (2.26) avec les conditions aux limites, $\mathbf{n} \cdot \nabla G_N(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = N(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ et $G_N(\mathbf{r}_0; \mathbf{r}') = c(\mathbf{r}')$ quels que soient $\mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}$ et $\mathbf{r}' \in \mathcal{D}$ pour $\mathbf{r}_0$ donné. Il se trouve qu'en fait nombre d'entre elles n'existent pas, i.e. le système d'équations ci-dessus n'admet aucune solution pour partie de ces choix. Pour s'en convaincre, il suffit d'appliquer le théorème de Green-Ostrogradski au flux de $\nabla_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ à travers la surface $\partial\mathcal{D}$, qui impose l'identité ⁴

$$\oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma \, \mathbf{n} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = -1, \quad (2.29)$$

valable pour n'importe quelle fonction de Green du Laplacien, indépendamment des C.L. choisies. Ici, comme par ailleurs $\mathbf{n} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} G_N(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = N(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$, G_N ne pourra exister que si la fonction N satisfait à la condition

$$\oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma \, N(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = -1. \quad (2.30)$$

Cette condition, qui n'est pas forcément suffisante, est par contre nécessaire quant à l'existence de G_N . Ainsi, il n'existe pas de fonction de Green vérifiant des C.L. de Neumann homogènes pour lesquelles $N(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = 0$. Par contre, nous pouvons *a priori* imposer la condition non-homogène où $N(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ se réduit à

$$N(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = -1/S \quad \forall \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}, \quad (2.31)$$

4. Évidemment, en électrostatique, cette identité n'est autre que le théorème de Gauss.

$S = \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma$ étant la mesure de la surface $\partial\mathcal{D}$ supposée finie. Nous définissons donc les fonctions de Green de Neumann spéciales :

Fonctions de Green de Neumann spéciales	$\begin{aligned} -\Delta_{\mathbf{r}} G_{\bar{N}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ \mathbf{n} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} G_{\bar{N}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') &= -\frac{1}{S} \quad \forall \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}, \quad \forall \mathbf{r}' \in \mathcal{D} \\ G_{\bar{N}}(\mathbf{r}_0; \mathbf{r}') &= c(\mathbf{r}') \quad \forall \mathbf{r}' \in \mathcal{D} \end{aligned}$
--	--

(2.32)

Comme illustré plus avant, $G_{\bar{N}}$ est amenée à jouer un rôle important dans les situations physiques où les conditions de bord sur le champ ϕ sont de la forme Neumann (2.25).

Contrairement au cas de G_{DH} , les fonctions $G_{\bar{N}}$ ne présentent pas de propriétés de symétries générales⁵. Leur détermination est tout aussi compliquée que celle de G_{DH} pour des domaines $\mathcal{D}$ de forme quelconque et un calcul explicite de $G_{\bar{N}}$ n'est possible que pour des géométries simples.

Fonction de Green homogène du système infini

Lorsque le domaine $\mathcal{D}$ correspond à l'espace $\mathbb{R}^d$ tout entier, la surface $\partial\mathcal{D}$ est rejetée à l'infini et la fonction de Green de Dirichlet homogène du système infini, notée G_{∞} , est définie par

$\begin{aligned} -\Delta_{\mathbf{r}} G_{\infty}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \\ G_{\infty}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') &\rightarrow 0 \quad \text{pour} \quad \mathbf{r} \rightarrow \infty \quad \text{avec} \quad \mathbf{r}' \text{ fixé.} \end{aligned}$	(2.33)
--	--------

Comme démontré dans la présentation générale, les invariances par translation et rotation de l'opérateur Laplacien et des C.L. choisies, impliquent que $G_{\infty}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ est uniquement fonction de $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Dans la suite, nous calculons explicitement $G_{\infty}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ dans le cas tridimensionnel. Le cas des dimensions inférieures sera abordé à la section 2.1.5, celui des dimensions supérieures étant traité dans l'exercice 2.2, page 128.

Calcul de G_{∞} à trois dimensions. La linéarité de l'EDP satisfaite par G_{∞} combinée à l'invariance par translation, nous orientent vers l'utilisation de la transformée de Fourier pour déterminer cette fonction de Green. Considérons la transformée de Fourier de G_{∞} définie par

$$\widehat{G}_{\infty}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} \, e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} G_{\infty}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|).$$

Dans le monde de Fourier, les opérations de dérivation partielle par rapport aux coordonnées spatiales deviennent de simples multiplications par des puissances de $i\mathbf{k}$. Par conséquent, $\widehat{G}_{\infty}(\mathbf{k})$ vérifie l'équation purement algébrique

$$\mathbf{k}^2 \widehat{G}_{\infty}(\mathbf{k}) = 1, \quad (2.34)$$

⁵. Voir cependant l'exercice 2.5 page 129.

dont la résolution est immédiate. *Modulo* la subtilité discutée plus loin, nous trouvons $\widehat{G}_\infty(\mathbf{k}) = 1/\mathbf{k}^2$, puis $G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ est simplement obtenue en effectuant la transformée inverse, soit

$$G_\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \frac{1}{\mathbf{k}^2}. \quad (2.35)$$

L'intégrale sur $\mathbf{k}$ peut être effectuée en prenant comme axe Oz la direction du vecteur fixé $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, et en introduisant les coordonnées sphériques correspondantes,

$$\begin{aligned} G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) &= \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dk k^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\phi e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \cos \theta} \frac{1}{k^2}, \\ &= \frac{1}{2\pi^2} \int_0^\infty dk \frac{\sin(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{k|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}, \\ &= \frac{1}{2\pi^2|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_0^\infty d\xi \frac{\sin \xi}{\xi}, \end{aligned}$$

ce qui donne finalement

$$\boxed{G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}. \quad (2.36)$$

Nous retrouvons ainsi, au facteur q/ϵ_0 près, l'expression bien connue du potentiel de Coulomb à trois dimensions créé par une charge ponctuelle q dans le vide.

Discussion sur les C.L. Il se trouve que l'expression (2.36) de G_∞ satisfait bien aux C.L. de Dirichlet homogènes stipulées dans le système (2.33). Or, nous n'avons à aucun moment imposé quelque contrainte que ce soit sur la valeur de G_∞ à l'infini ! Il est donc naturel de se demander pourquoi le résultat obtenu a été sélectionné parmi l'infinité d'autres possibilités de conditions aux limites. Afin d'éclaircir ce paradoxe, revenons à l'équation (2.34). Au sens des distributions, cette équation admet pour solution

$$\frac{1}{\mathbf{k}^2} + \widehat{D}_h(\mathbf{k}),$$

où $\widehat{D}_h(\mathbf{k})$ est une distribution au support localisé en $\mathbf{k} = \mathbf{0}$. Cette distribution peut être écrite comme une combinaison linéaire de $\delta(\mathbf{k})$ et de toutes ses dérivées. Sa transformée de Fourier inverse, $D_h(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, est tout simplement une fonction harmonique, solution de l'équation de Laplace (2.21) dans tout l'espace. Cette fonction est donc une combinaison linéaire d'harmoniques sphériques⁶ de la forme $R^l Y_l^m(\theta, \phi)$ avec l entier et m entier ($-l \leq m \leq l$), et

6. L'annexe G contient des rappels sur les harmoniques sphériques.

où $\mathbf{R} = \mathbf{r} - \mathbf{r}'$ est le vecteur position relative d'angles θ et ϕ en coordonnées sphériques. Il est alors clair que seule la fonction D_h identiquement nulle a le bon comportement de décroissance à l'infini, ce qui justifie l'identification de $\widehat{G}_\infty(\mathbf{k})$ à $1/\mathbf{k}^2$.

Considérations spectrales. Remarquons que G_∞ peut également être aisément calculée à partir de considérations spectrales. Pour cela, il est commode d'introduire un domaine fini cubique de côté L , ainsi que la fonction de Green de Dirichlet homogène $G_{DH}^{(L)}$ correspondante. Les fonctions propres de l'opérateur Laplacien qui interviennent dans cette méthode sont des ondes stationnaires, combinaisons linéaires d'ondes planes en $e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, de valeur propre associée $-\mathbf{k}^2$ avec $\mathbf{k}$ quantifié. Dans la représentation spectrale (2.13) de $G_{DH}^{(L)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$, la limite $L \rightarrow \infty$ à positions $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$ fixées, redonne alors exactement l'expression intégrale (2.35) de $G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$. Soulignons donc que l'expression (2.35),

$$G_\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \frac{1}{\mathbf{k}^2} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'},$$

s'interprète naturellement dans le cadre de ces considérations spectrales[✱].

✱ **Commentaire 2.1.4.** Cette discussion permet aussi de bien comprendre pourquoi il est naturel de calculer G_∞ par transformée de Fourier. En effet, l'opérateur Laplacien commute avec l'opérateur engendrant les translations, qui est simplement l'opérateur ∇ . Cette propriété de commutation est évidente puisque $\Delta = \nabla^2$. Or, les ondes planes sont fonctions propres de l'opérateur de translation. Pour reprendre un langage utilisé en mécanique quantique, les opérateurs de Laplace et de translation sont diagonalisés simultanément par transformée de Fourier.

Comportement asymptotique. En dimension supérieure ($d > 3$), $G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ décroît comme $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{d-2}$ aux grandes distances relatives⁷ (voir exercice 2.2, page 128). En dimension inférieure, ($d < 3$), $G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ diverge comme $\ln(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ pour $d = 2$ et comme $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ pour $d = 1$ comme cela sera montré au §2.1.5. Tous ces comportements asymptotiques sont non-intégrables : G_∞ est dite à longue portée. Comme nous le verrons par la suite, ces décroissances lentes, voire ces divergences à basse dimension, ont des conséquences importantes.

7. Dans le monde de Fourier, $\widehat{G}_\infty(\mathbf{k})$ est toujours égale à $1/\mathbf{k}^2$. Par analyse dimensionnelle, nous voyons immédiatement que $G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ se réduit à une constante fois $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{d-2}$.

Solution de l'équation de Poisson

C.L. de Dirichlet sur ϕ . Reprenons l'équation intégrale (2.27),

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') G(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) - \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \mathbf{n}' \cdot [\phi(\mathbf{r}') \nabla_{\mathbf{r}'} G(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) - G(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}')],$$

et rappelons que celle-ci est valable pour toute fonction de Green du Laplacien, indépendamment de ses C. L. et de celles définissant ϕ . Imaginons que l'on impose les C.L. (2.24) de type Dirichlet sur ϕ . Il est clair que la connaissance d'une fonction de Green quelconque ne sera pas suffisante pour déterminer ϕ à partir de l'équation intégrale ci-dessus, car la valeur de $\nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}')$ sur le bord $\partial\mathcal{D}$ du domaine n'est pas connue *a priori*. En fait, il est judicieux d'utiliser ici la fonction de Green de Dirichlet homogène G_{DH} qui s'annule sur $\partial\mathcal{D}$. L'expression ci-dessus se réduit alors à $\star$

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') - \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' D(\mathbf{r}') \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} G_{DH}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}), \quad (2.37)$$

où $D(\mathbf{r}')$ est la valeur de ϕ sur $\partial\mathcal{D}$ imposée dans les C.L. (2.24) et où nous avons utilisé la symétrie (2.28) de la fonction $G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$. Ainsi la connaissance de G_{DH} donne immédiatement accès à ϕ pour n'importe quelle densité ρ .

$\star$ Commentaire 2.1.5. Dans l'expression (2.37), le terme de volume s'annule pour $\mathbf{r}$ dans $\partial\mathcal{D}$. Donc, toujours pour $\mathbf{r}$ dans $\partial\mathcal{D}$, l'intégrale de surface s'identifie avec $-D(\mathbf{r})$. Ainsi, cela signifie que pour $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$ dans $\partial\mathcal{D}$,

$$-\mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} G_{DH}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) \quad (2.38)$$

correspond à la distribution de Dirac sur la surface $\partial\mathcal{D}$. Ce résultat a une interprétation simple en électrostatique où l'expression ci-dessus correspond à la composante normale à la surface du champ $\mathbf{E}$. En effet, comme indiqué page 76, la présence d'une charge ponctuelle (prise ici en $\mathbf{r}$) induit un nuage de polarisation sur la paroi conductrice de potentiel nul. Ce nuage est localisé au voisinage de cette charge. Lorsque la charge se rapproche de la paroi, elle est totalement écrantée par le nuage de polarisation de telle sorte que le champ électrostatique est nul sauf au point $\mathbf{r}$. Notons par ailleurs que l'intégrale de la composante normale du champ électrique est donné par le théorème de Gauss (2.29). Donc, l'expression (2.38) s'identifie bien à la distribution de Dirac. Le lecteur peut enfin vérifier cette propriété explicitement pour une géométrie particulière, comme cela est proposé dans le cadre de l'exercice 2.15, page 137.

C.L. de Neumann sur ϕ . Supposons maintenant que soient imposées des C.L. (2.25) de type Neumann. L'exemple des C.L. de Dirichlet suggère de choisir des C.L. de Neumann homogènes pour G . Mais il a été montré précédemment qu'une telle fonction de Green n'existe pas! Par contre, nous pouvons considérer les fonctions de Green de Neumann spéciales $G_{\bar{N}}$, correspondant à la définition (2.32). L'introduction de $G_{\bar{N}}$ dans l'équation intégrale donne

$$\phi(\mathbf{r}) = \bar{\phi}_{\partial\mathcal{D}} + \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') G_{\bar{N}}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) + \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' G_{\bar{N}}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) N(\mathbf{r}'), \quad (2.39)$$

où

$$\bar{\phi}_{\partial\mathcal{D}} = \frac{1}{S} \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \phi(\mathbf{r}')$$

est la moyenne de ϕ sur la surface $\partial\mathcal{D}$ du domaine, et $N(\mathbf{r}')$ est la valeur de $\mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}')$ sur $\partial\mathcal{D}$ imposée dans les C.L. (2.25). La connaissance de $G_{\bar{N}}$ permet de déterminer les intégrales de volume et de surface dans l'expression (2.39). La moyenne $\bar{\phi}_{\partial\mathcal{D}}$, qui joue le rôle d'une constante, est alors ajustée en imposant la valeur spécifiée de $\phi(\mathbf{r}_0)$ dans les C.L. (2.25). Ceci achève la détermination complète de ϕ à partir de $G_{\bar{N}}$.

Utilisation de G_{∞} . Comme évoqué plus haut, la détermination des fonctions de Green G_{DH} ou $G_{\bar{N}}$ peut vite devenir délicate. Or, les conditions aux limites définissant les fonctions de Green ne sont pas nécessairement à prendre sur la surface $\partial\mathcal{D}$ du domaine considéré. En fait, on peut introduire des C.L. sur une autre surface définissant un domaine plus vaste incluant le domaine $\mathcal{D}$ d'intérêt. Dans ce contexte, il est particulièrement intéressant d'utiliser la fonction de Green homogène du système infini.

En utilisant cette fonction de Green, et en exploitant son caractère symétrique ainsi que sa seule dépendance dans la différence $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$, nous trouvons que l'équation intégrale (2.27), page 75, devient :

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' G_{\infty}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \rho(\mathbf{r}') + \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' G_{\infty}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}') \\ + \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \phi(\mathbf{r}') \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}} G_{\infty}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \end{aligned} \quad (2.40)$$

L'interprétation de ce résultat est plus transparente que pour l'expression générale (2.27). En effet, G_{∞} étant le champ élémentaire nu créé par une source ponctuelle seule dans l'espace tout entier, les diverses contributions à cette formule peuvent être simplement interprétées. L'intégrale de volume est le champ total créé par les sources originelles distribuées à l'intérieur de $\mathcal{D}$ avec la densité ρ . La première intégrale de surface,

$$\oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' G_{\infty}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}'),$$

est le champ total créé par des sources induites localisées sur $\partial\mathcal{D}$, et distribuées avec la densité surfacique $\mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}')$. La seconde intégrale de surface fait apparaître une dérivée du champ élémentaire G_{∞} . En fait, la quantité $\mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}} G_{\infty}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ est le champ élémentaire nu créé par une source localisée en $\mathbf{r}'$ et de densité $\mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$. En effet, elle est bien solution de l'EDP (2.18) correspondante dans l'espace tout entier, avec des conditions de

Dirichlet homogènes à l'infini. En reprenant la terminologie de l'électrostatique, cette distribution localisée a une charge totale nulle, *i.e.* :

$$\int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{r} \, \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = 0,$$

et seul son dipôle (ou premier moment)

$$\int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{r} \, (\mathbf{r} - \mathbf{r}') \, \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\mathbf{n}'$$

est non-nul, tous les autres multipôles (moments) d'ordre supérieur étant identiquement nuls. Elle décrit donc un dipôle strictement localisé en $\mathbf{r}'$ et d'intensité $-\mathbf{n}'$, de sorte que l'intégrale de surface

$$\oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \, \phi(\mathbf{r}') \, \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}} G_{\infty}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$$

n'est autre que le champ créé par l'assemblée de tous ces dipôles distribués avec la densité surfacique $-\phi(\mathbf{r}')$.

Il convient de noter que la formule (2.40) spécifique à l'utilisation de G_{∞} se révèle très utile dans certains problèmes. Elle n'est certes pas complètement explicite, car elle fait intervenir les valeurs de ϕ et $\nabla\phi$ sur $\partial\mathcal{D}$, qui ne sauraient être imposées simultanément dans des C.L. particulières. Par contre, la connaissance de G_{∞} confère à cette expression de ϕ un intérêt certain. D'abord une résolution ultérieure explicite est parfois possible en imposant les C.L. appropriées comme cela est illustré sur l'exemple du paragraphe 2.2.2, page 107. Aussi, la formule (2.40) fournit des informations sur les comportements asymptotiques ou sur l'importance des effets de bord. Notons en particulier que, même lorsque les bords sont rejetés à l'infini, les termes de surface peuvent donner des contributions finies (non nulles) à $\phi(\mathbf{r})$ en un point $\mathbf{r}$ fixé, par suite de la longue portée de G_{∞} .

2.1.4 Opérateur de Helmholtz

L'opérateur de Helmholtz, défini par

$$\mathcal{O} = -\Delta + m^2 \tag{2.41}$$

avec m constante réelle positive, intervient dans de nombreux domaines, comme la mécanique statistique des plasmas ou la physique des particules. Il est aussi l'extension⁸ la plus simple de l'opérateur Laplacien qui préserve la double invariance par rotation et translation de l'espace vide. La forme générale de l'EDP associée à l'opérateur de Helmholtz est donc :

$$\boxed{-\Delta\phi(\mathbf{r}) + m^2\phi(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r})}. \tag{2.42}$$

8. La discussion sur l'opérateur $-\Delta - m^2$, dont les propriétés sont très différentes de l'opérateur de Helmholtz, est incluse dans la discussion générale de la section 2.1.6.

Les méthodes introduites précédemment pour étudier l'équation de Poisson sont aisément transposables à l'analyse de cette EDP. Nous reprenons donc la présentation de la section précédente, en résumant les démonstrations et en faisant ressortir les propriétés spécifiques de l'opérateur de Helmholtz.

Analyse des conditions aux limites

Pour l'opérateur Laplacien, nous avons montré que les conditions aux limites de Dirichlet (2.24), page 73, déterminent univoquement la solution de l'équation de Poisson. Nous allons montrer que ces C.L. déterminent également la solution de l'EDP (2.42) de manière unique. Pour cela, considérons deux solutions ϕ_1 et ϕ_2 de cette EDP. Leur différence $\alpha = \phi_1 - \phi_2$ est telle que

$$\Delta \alpha(\mathbf{r}) = m^2 \alpha(\mathbf{r}) ,$$

de sorte que la première formule de Green (2.19), page 72, appliquée à $u = \alpha^*$ et $v = \alpha$ nous donne

$$\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} [m^2 |\alpha(\mathbf{r})|^2 + |\nabla \alpha(\mathbf{r})|^2] = \oint_{\partial \mathcal{D}} d\Sigma \alpha^*(\mathbf{r}) [\mathbf{n} \cdot \nabla \alpha(\mathbf{r})] . \quad (2.43)$$

Si ϕ_1 et ϕ_2 satisfont aux mêmes C.L. (2.24), alors α est identiquement nulle sur la surface $\partial \mathcal{D}$. L'intégrale de volume du membre de gauche de l'identité (2.43) doit donc être nulle. Comme l'intégrand correspondant ne peut être négatif en aucun point⁹, la différence α est identiquement nulle sur tout le domaine $\mathcal{D}$. Ceci prouve que les C. L. de Dirichlet (2.24) garantissent bien l'unicité de la solution de l'EDP (2.42).

Dans les C.L. de Neumann (2.25), il faut spécifier en particulier la valeur de ϕ en un point donné. Pour l'opérateur de Helmholtz, cela n'est pas nécessaire et il est suffisant d'imposer seulement les valeurs de $\mathbf{n} \cdot \nabla \phi$ sur la surface $\partial \mathcal{D}$, i.e. :

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}) = N(\mathbf{r}) \quad \text{pour } \mathbf{r} \in \partial \mathcal{D} . \quad (2.44)$$

En effet, en exploitant de nouveau l'identité (2.43), ainsi que la nullité de $\mathbf{n} \cdot \nabla \alpha$ sur la surface $\partial \mathcal{D}$, nous trouvons bien que la différence $\alpha = \phi_1 - \phi_2$ entre deux solutions est nécessairement identiquement nulle en tout point du domaine. Nous appellerons les conditions (2.44), C.L. de Neumann simples.

Gardons à l'esprit que les C.L. précédentes ne garantissent pas *a priori* l'existence d'une solution. Par ailleurs, si elles apparaissent naturellement dans la plupart des situations physiques, d'autres C.L. conduisant à l'unicité de la solution sont possibles.

9. C'est à ce niveau que l'analyse pour l'opérateur $-\Delta - m^2$ est différente (voir page 99).

Fonctions de Green de l'opérateur de Helmholtz

Les fonctions de Green $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ sont solution de l'EDP

$$(-\Delta_{\mathbf{r}} + m^2) G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.45)$$

avec des conditions aux limites particulières. Comme dans le cas du Laplacien, la fonction de Green de Dirichlet homogène G_{DH} est amenée à jouer un rôle important. Cette fonction de Green $G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ est de nouveau réelle et symétrique dans l'échange des points observation $\mathbf{r}$ et source $\mathbf{r}'$. Pour démontrer ces propriétés, il suffit de reprendre les démonstrations introduites dans le cas du Laplacien, en notant que l'opérateur de Helmholtz est également hermitien.

Notons que contrairement à l'équation de Laplace, il est possible de construire la fonction de Green satisfaisant des C.L. homogènes de Neumann simples : la fonction de bord N est alors identiquement nulle. La fonction de Green G_{NH} ainsi définie, est réelle et symétrique comme G_{DH} , et ce pour des raisons similaires.

Comme pour le Laplacien, il est particulièrement intéressant d'introduire la fonction de Green de Dirichlet homogène du système infini $G_{\infty}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ qui s'annule quand $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$ à $\mathbf{r}'$ fixé. La double invariance par translation et rotation implique que $G_{\infty}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ est uniquement fonction de $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Ici, nous calculons explicitement $G_{\infty}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ dans le cas tridimensionnel, le cas des dimensions $d < 3$ étant abordé à la section 2.1.5. De nouveau, linéarité et invariance par translation nous conduisent naturellement à prendre la transformée de Fourier membre à membre de l'EDP (2.45). Ceci fournit une équation algébrique pour $\hat{G}_{\infty}(\mathbf{k})$, dont la solution est simplement

$$\hat{G}_{\infty}(\mathbf{k}) = \frac{1}{\mathbf{k}^2 + m^2} \cdot \quad (2.46)$$

Sa transformée inverse s'écrit

$$G_{\infty}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} \frac{1}{\mathbf{k}^2 + m^2}.$$

L'intégrale sur $\mathbf{k}$ est calculée en utilisant les coordonnées sphériques déjà introduites pour évaluer la transformée de Fourier inverse (2.35). Les intégrations angulaires sont élémentaires et elles conduisent à

$$\begin{aligned} G_{\infty}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') &= \frac{i}{4\pi^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_0^{+\infty} dk \frac{k}{k^2 + m^2} \left(e^{-ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} - e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right), \\ &= -\frac{i}{4\pi^2 |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{k}{k^2 + m^2} e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \end{aligned} \quad (2.47)$$

Cette intégrale peut être effectuée en appliquant le théorème des résidus à la fonction $ze^{iz|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}/(z^2 + m^2)$ dont les pôles sont situés sur l'axe imaginaire

en $z_{\pm} = \pm im$. Dans le demi-plan complexe supérieur, l'intégrand décroît exponentiellement vite quand $\text{Im } z \rightarrow +\infty$. Il est donc judicieux d'introduire le contour fermé obtenu en complétant l'axe réel par un demi-cercle dans ce demi-plan supérieur (voir figure 2.3). En effet, en vertu du lemme de Jordan, l'intégrale sur le demi-cercle est asymptotiquement nulle dans la limite des rayons infinis. Le seul résidu concerné étant celui du pôle $z_+ = im$, nous trouvons finalement

$$G_{\infty}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^{-m|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (2.48)$$

Pour $m = 0$, nous retrouvons l'expression (2.36) de G_{∞} pour le Laplacien. Pour $m \neq 0$ la longue portée de G_{∞} observée dans le cas du Laplacien est gommée : la présence du terme $e^{-m|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}$ induit une décroissance exponentiellement rapide de G_{∞} quand $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'| \rightarrow \infty$. Ce mécanisme dit d'écran joue un rôle fondamental en physique des plasmas. La fonction de Green (2.48) est alors simplement, au facteur q/ϵ_0 près, le potentiel de Debye créé par une charge ponctuelle q immergée dans un milieu contenant des charges libres, et $1/m$ est la longueur de Debye. En physique des particules, cette fonction de Green s'identifie au potentiel de Yukawa entre deux entités élémentaires, engendrées par l'échange¹⁰ de particules massives de masse proportionnelle à m .

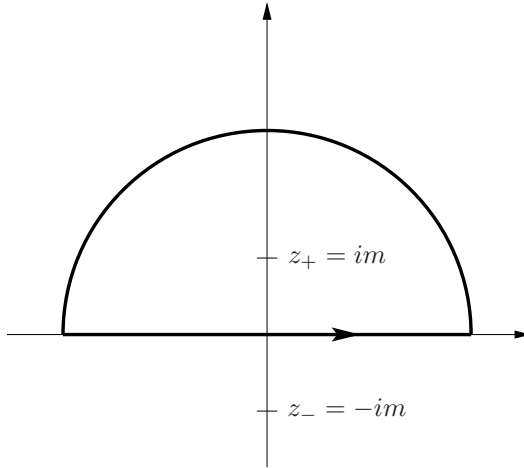


FIG. 2.3 – Contour utilisé pour calculer l'intégrale (2.47) par le théorème des résidus.

10. Ce processus d'échange pouvant décrire les interactions fortes par exemple. Noter que les interactions électromagnétiques sont engendrées par des échanges de photons de masse nulle, ce qui a pour conséquence la longue portée en $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ des interactions Coulombiennes.

Expression générale de la solution

Comme dans le cas du Laplacien, appliquons la seconde formule de Green (2.20), page 73, en ayant rebaptisé la variable muette d'intégration $\mathbf{r}'$, et avec $u(\mathbf{r}') = \phi(\mathbf{r}')$ et $v(\mathbf{r}') = G(\mathbf{r}'; \mathbf{r})$, $\mathbf{r}$ étant toujours un point fixé. En utilisant les EDP (2.42) et (2.45) satisfaites respectivement par $\phi(\mathbf{r}')$ et $G(\mathbf{r}'; \mathbf{r})$, nous trouvons que l'expression de ϕ en termes de n'importe quelle fonction de Green G est identique à l'expression (2.27) obtenue pour le Laplacien.

À nouveau, si ϕ satisfait des C.L. de Dirichlet, il est judicieux d'utiliser la fonction de Green de Dirichlet homogène G_{DH} dans l'expression générale (2.27), ce qui redonne exactement la formule (2.37), page 81. Si ϕ satisfait les C.L. de Neumann simples (2.44), l'utilisation de la fonction de Green de Neumann homogène G_{NH} conduit à la formule

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') G_{NH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') + \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' G_{NH}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) N(\mathbf{r}'). \quad (2.49)$$

Comme dans le cas du Laplacien, la détermination explicite des fonctions de Green G_{DH} ou G_{NH} n'est pas chose aisée pour une géométrie du domaine $\mathcal{D}$ sans symétries particulières. Il peut alors être plus avantageux de considérer la version (2.40) de la formule générale (2.27) en termes de la fonction de Green G_{∞} du système infini. En particulier, nous voyons immédiatement que, comme G_{∞} est maintenant à courte portée, les effets de bord sur $\phi(\mathbf{r})$ seront extrêmement faibles si le point d'observation $\mathbf{r}$ est loin de la surface $\partial\mathcal{D}$, i.e. à une distance grande devant $1/m$. Alors, avec une très bonne approximation, on pourra identifier $\phi(\mathbf{r})$ au simple champ de superposition $\phi_{G_{\infty}}(\mathbf{r})$.

2.1.5 Opérateurs Laplacien et de Helmholtz en basse dimension

Les propriétés précédentes des opérateurs de Laplace et de Helmholtz sont indépendantes de la dimension. Pour des raisons pratiques évidentes, nous avons parfois mis l'accent sur le cas tridimensionnel. Cela dit, il existe de nombreuses situations physiques, où tout se passe comme si l'espace était réduit à deux voire une seule dimension, soit pour des raisons de symétrie, soit par des effets de confinement. Pour ces basses dimensions, il existe des méthodes spécifiques qui sont très utiles. En fait, à une dimension, les EDP (2.18) et (2.42) deviennent des équations différentielles ordinaires dont la résolution explicite est élémentaire. À deux dimensions, les difficultés intrinsèques aux EDP apparaissent. Néanmoins, la méthode des transformations conformes permet de calculer explicitement les fonctions de Green d'intérêt dans des géométries fréquemment rencontrées en pratique, en introduisant un problème équivalent dans un domaine de forme très simple. Nous concluons cette section par une brève description des fonctions de Green pour un plan et une droite infinis.

Segment de longueur L

À une dimension, le domaine $\mathcal{D}$ est un segment de longueur L . Par commodité, nous choisissons l'origine au centre du segment de sorte que les bords décrivant $\partial\mathcal{D}$ se réduisent aux deux points d'abscisses respectives $x_- = -L/2$ et $x_+ = L/2$ (voir figure 2.4).

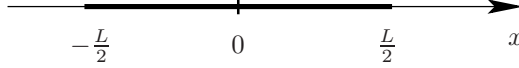


FIG. 2.4 – Segment de longueur L .

Opérateur de Helmholtz. Considérons d'abord l'opérateur de Helmholtz. L'intégration de l'équation différentielle

$$\left[-\frac{d^2}{dx^2} + m^2 \right] \phi(x) = \rho(x) \quad (2.50)$$

est élémentaire, par la méthode de la variation de la constante décrite dans l'annexe C, page 310. Ici, deux fonctions indépendantes ϕ_1 et ϕ_2 solutions de l'équation (2.50) homogène avec un second membre nul, sont $\phi_1(x) = e^{mx}$ et $\phi_2(x) = e^{-mx}$, dont le Wronskien $\phi_1\phi_2' - \phi_1'\phi_2$ est la constante $-2m$. Nous trouvons alors la solution générale de (2.50),

$$\begin{aligned} \phi(x) = & \left[c_1 - \frac{1}{2m} \int_{-L/2}^x dx' \rho(x') e^{-mx'} \right] e^{mx} \\ & + \left[c_2 + \frac{1}{2m} \int_{-L/2}^x dx' \rho(x') e^{mx'} \right] e^{-mx}, \end{aligned} \quad (2.51)$$

où c_1 et c_2 sont des constantes d'intégration déterminées par les C.L. imposées sur ϕ .

Les fonctions de Green sont aisément calculées en appliquant la formule (2.51), avec $\rho(x') = \delta(x' - x_0)$ et les C.L. appropriées. Ainsi, nous obtenons

$$\boxed{G_{DH}(x; x_0) = -\frac{1}{2m} \operatorname{sh}(m|x - x_0|) + \frac{1}{2m} \coth(mL) \operatorname{ch}(m(x - x_0)) - \frac{1}{2m \operatorname{sh}(mL)} \operatorname{ch}(m(x + x_0))}$$

(2.52)

pour les C.L. de Dirichlet homogènes, et

$$\boxed{
 \begin{aligned}
 G_{NH}(x; x_0) = & -\frac{1}{2m} \operatorname{sh}(m|x - x_0|) + \frac{1}{2m} \operatorname{coth}(mL) \operatorname{ch}(m(x - x_0)) \\
 & + \frac{1}{2m \operatorname{sh}(mL)} \operatorname{ch}(m(x + x_0))
 \end{aligned}
 } \quad (2.53)$$

pour les C.L. de Neumann homogènes. Conformément aux propriétés générales, nous vérifions que $G_{DH}(x; x_0)$ et $G_{NH}(x; x_0)$ sont bien réelles et symétriques dans l'échange de x et x_0 . Elles ne sont évidemment pas invariantes par translation à cause des bords.

Pour un domaine de grande taille ($L \gg 1/m$), si x et x_0 restent loin des deux bords ($|x - \pm L/2| \gg 1/m$ et $|x_0 - \pm L/2| \gg 1/m$), alors les effets de bord sur G_{DH} et G_{NH} deviennent exponentiellement petits, en accord avec la prédiction générale : ces deux fonctions tendent alors vers $e^{-m|x-x_0|}/(2m)$ qui n'est autre que la fonction de Green G_∞ pour une droite infinie comme nous le redémontrons plus loin. Enfin, le lecteur pourra vérifier que l'insertion des fonctions de Green (2.52) et (2.53) dans les formules respectives (2.37) et (2.49), redonne bien la solution générale (2.51), où les constantes c_1 et c_2 sont quant à elles ajustées à partir des C.L. correspondantes sur ϕ .

Laplacien. Pour l'opérateur Laplacien, le problème devient encore plus simple, puisqu'il suffit d'intégrer deux fois successivement la densité $\rho(x)$ pour obtenir

$$\phi(x) = c_1 + c_2 x + \int_{-L/2}^x dx' \rho(x') (x' - x). \quad (2.54)$$

La fonction de Green de Dirichlet homogène devient simplement

$$\boxed{
 G_{DH}(x; x_0) = -\frac{1}{2}|x - x_0| - \frac{xx_0}{L} + \frac{L}{4}
 } \quad (2.55)$$

alors qu'il n'existe pas de fonction de Green de Neumann homogène. Notons qu'on peut retrouver l'expression (2.55) en prenant la limite $m \rightarrow 0$ à L , x et x_0 fixés, de la formule (2.52) pour l'opérateur de Helmholtz.

Transformations conformes en deux dimensions

Dans ce paragraphe, nous présentons des méthodes spécifiques à la dimension deux et basées sur les transformations conformes. Nous allons montrer que l'intérêt de ces transformations est de permettre de transformer un domaine bidimensionnel en un autre de géométrie plus simple. De plus, l'opérateur Laplacien, ainsi que ses fonctions de Green, ont des propriétés de transformation remarquables.

Définition. Rappelons d'abord la définition des transformations conformes en dimension quelconque. Une transformation des coordonnées $\{\xi^i\}$ aux coordonnées $\{\eta^i\}$ est dite conforme, si les éléments de matrice, g_{ij} et $\widehat{g}_{ij}$, de la métrique respectivement pour les coordonnées $\{\xi^i\}$ et $\{\eta^i\}$ vérifient

$$\widehat{g}_{ij} = f(\{\xi^k\}) g_{ij}$$

avec $f(\{\xi^i\})$ une fonction scalaire¹¹. Il est facile d'identifier comme éléments

de ce groupe les translations, les rotations et les dilatations dans l'espace euclidien. La particularité de la dimension deux est que le groupe des transformations conformes y est de dimension infinie, contrairement aux cas des autres dimensions. Désormais, nous nous restreignons à cette dimension.

Transformations conformes et fonctions analytiques. Déterminons maintenant la nature des transformations conformes en deux dimensions qui préservent l'orientation. L'espace euclidien $\mathbb{R}^2$ est décrit par les coordonnées cartésiennes (x, y) . Pour ces coordonnées, la métrique g correspond tout simplement à la matrice identité $\mathcal{I}$, et l'élément de ligne se réduit à $ds^2 = dx^2 + dy^2$. Considérons la transformation de coordonnées

$$x \mapsto x'(x, y) \quad \text{et} \quad y \mapsto y'(x, y).$$

La métrique $\widehat{g}$ dans les coordonnées (x', y') est définie par la réécriture de l'élément de ligne comme

$$ds^2 = \widehat{g}_{x'x'} dx'^2 + 2\widehat{g}_{x'y'} dx' dy' + \widehat{g}_{y'y'} dy'^2.$$

Elle est donnée par (voir annexe F) la relation matricielle :

$$\widehat{g} = \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial x'} & \frac{\partial x}{\partial y'} \\ \frac{\partial y}{\partial x'} & \frac{\partial y}{\partial y'} \end{pmatrix}^T \mathcal{I} \begin{pmatrix} \frac{\partial x}{\partial x'} & \frac{\partial x}{\partial y'} \\ \frac{\partial y}{\partial x'} & \frac{\partial y}{\partial y'} \end{pmatrix},$$

où A^T désigne la transposée de la matrice A .

11. Voir l'annexe F pour des rappels sur les changements de coordonnées.

Il est alors possible de montrer[✱] à partir de cette équation que la transformation $(x, y) \mapsto (x', y')$ est conforme, i.e. : $\hat{g} = f(x, y) \mathcal{I}$, si et seulement si,

$$\frac{\partial x'}{\partial x} = \frac{\partial y'}{\partial y}, \quad (2.56)$$

$$\frac{\partial x'}{\partial y} = -\frac{\partial y'}{\partial x}$$

avec

$$f(x, y) = \left[\left(\frac{\partial x'}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial x'}{\partial y} \right)^2 \right]^{-1}.$$

Les équations (2.56) ne sont autres que les conditions de Cauchy-Riemann, qui imposent que la fonction

$$\mathcal{F}(x, y) = x'(x, y) + iy'(x, y)$$

est une fonction analytique de la seule variable complexe $z = x + iy$, i.e. $\mathcal{F}(x, y) = \mathcal{F}(z)$.

Par ailleurs, comme

$$\left(\frac{\partial x'}{\partial x} \right)^2 + \left(\frac{\partial x'}{\partial y} \right)^2 = \left| \frac{d\mathcal{F}}{dz} \right|^2,$$

il vient $\hat{g} = |d\mathcal{F}/dz|^{-2} \mathcal{I}$, ce qui nécessite $d\mathcal{F}/dz \neq 0$. En résumé, une transformation de coordonnées bidimensionnelle est conforme¹² si et seulement si $\mathcal{F}(z)$ est analytique en z et $d\mathcal{F}/dz \neq 0$. Autrement dit, à toute fonction analytique $\mathcal{F}(z)$ est associée une transformation conforme. C'est pourquoi le groupe des transformations conformes bi-dimensionnelles est de dimension infinie.

Interprétation géométrique. Il est utile de remarquer que les transformations conformes ont une interprétation géométrique locale très simple. En effet, au voisinage d'un point donné (x_0, y_0) , une transformation conforme

✱ **Commentaire 2.1.6.** Indiquons simplement quelques étapes de cette démonstration. En appelant

$$A_1 = \left(\frac{\partial x}{\partial x'} \right)^2 - \left(\frac{\partial y}{\partial x'} \right)^2$$

et

$$A_2 = \left(\frac{\partial x}{\partial y'} \right)^2 - \left(\frac{\partial y}{\partial y'} \right)^2,$$

on obtient dans un premier temps les conditions

$$A_1 = A_2 \quad (2.57)$$

et

$$\begin{aligned} \left(\frac{\partial x}{\partial x'} \right) \left(\frac{\partial x}{\partial y'} \right) \\ + \left(\frac{\partial y}{\partial x'} \right) \left(\frac{\partial y}{\partial y'} \right) = 0. \end{aligned} \quad (2.58)$$

Cette dernière condition implique

$$A_1 \left(\frac{\partial x}{\partial y'} \right)^2 = -A_2 \left(\frac{\partial y}{\partial y'} \right)^2. \quad (2.59)$$

Il faut alors étudier les conditions (2.57), (2.58) et (2.59) : tout d'abord se convaincre qu'il n'est pas possible d'avoir $A_i \neq 0$ (avec $i = 1, 2$) ; les conditions $A_1 = A_2 = 0$, (2.58), et de préservation de l'orientation mènent alors au résultat.

12. Dans le cas où la transformation inverse l'orientation, $\mathcal{F}(\bar{z})$ est une fonction antiholomorphe.

se réduit à la composition d'une rotation d'angle $\arg(d\mathcal{F}/dz(z_0))$ et d'une dilatation de facteur d'homothétie $|d\mathcal{F}/dz(z_0)|$. En conséquence, cette transformation conserve localement les angles (voir par exemple les angles du bord du domaine dans la figure 2.5). L'angle de rotation et le facteur d'homothétie dépendent du point considéré (x_0, y_0) . Ils ne sont constants dans tout l'espace que si $\mathcal{F}(z) = az + b$ avec a et b constantes complexes.

Considérons l'image d'un domaine $\mathcal{D}$ par une transformation conforme de fonction analytique associée $\mathcal{F}(z)$, analytique dans $\mathcal{D}$ et telle que $d\mathcal{F}/dz \neq 0$ pour $(x, y) \in \mathcal{D}$. La transformation est bijective, i.e. chaque point du domaine image a un seul point antécédent dans $\mathcal{D}$. De plus, le domaine image a la même topologie que $\mathcal{D}$. Lorsque la frontière (ici une courbe) $\partial\mathcal{D}$ présente des points anguleux, il est souvent utile d'introduire une transformation conforme qui devient singulière en ces points. Alors, au voisinage de tels points singuliers, la transformation ne conserve plus les angles. Ceci est mis alors à profit pour transformer une arête en surface lisse, via un choix judicieux de la fonction $\mathcal{F}(z)$: c'est le principe de la transformation de Schwartz-Cristoffel. Nous en donnons une illustration simple au §2.2.5, page 122.

Transformation du Laplacien et de la distribution de Dirac. Dans un changement de coordonnées conforme de fonction $\mathcal{F}(z)$, l'opérateur Laplacien, ainsi que la distribution de Dirac, se transforment comme

$$\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} = \left| \frac{d\mathcal{F}}{dz} \right|^2 \left(\frac{\partial^2}{\partial x'^2} + \frac{\partial^2}{\partial y'^2} \right), \quad (2.60)$$

et

$$\delta(x - x_0)\delta(y - y_0) = \left| \frac{d\mathcal{F}}{dz} \right|^2 \delta(x' - x'_0)\delta(y' - y'_0), \quad (2.61)$$

ces formules étant des applications des résultats généraux (F.5) et (F.2) de l'annexe F. Autrement dit, le Laplacien et la distribution de Dirac se transforment exactement de la même manière.

Fonctions de Green de Dirichlet. Les résultats précédents suggèrent d'utiliser des transformations conformes pour calculer des fonctions de Green du Laplacien dans des domaines de géométrie sans symétrie simple. Considérons d'abord une fonction de Green de Dirichlet G_D pour un domaine donné $\mathcal{D}$. L'idée consiste d'abord à chercher une transformation conforme,

$$\mathbf{r} = (x, y) \mapsto \mathbf{r}' = (x', y') \quad \text{avec} \quad x' = \operatorname{Re} \mathcal{F}(z) \quad \text{et} \quad y' = \operatorname{Im} \mathcal{F}(z),$$

par laquelle l'image de $\mathcal{D}$ soit un domaine $\mathcal{D}'$ de géométrie plus simple, comme illustré dans la figure 2.5. Dans les nouvelles coordonnées, définissons

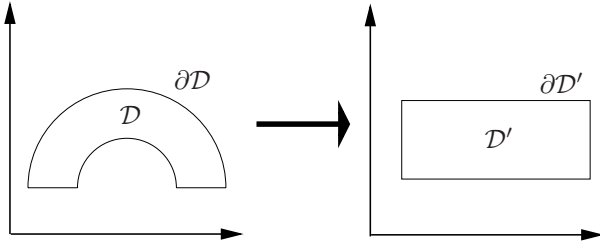


FIG. 2.5 – Transformation conforme dans le plan complexe permettant de passer d'un domaine $\mathcal{D}$ de bord $\partial\mathcal{D}$ de forme compliquée à un domaine $\mathcal{D}'$ de forme rectangulaire et de bord $\partial\mathcal{D}'$.

la fonction de Green G'_D , solution unique de

$$-\Delta_{\mathbf{r}'} G'_D(\mathbf{r}'; \mathbf{r}'_0) = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'_0)$$

avec les C.L. de Dirichlet¹³

$$G'_D(\mathbf{r}'; \mathbf{r}'_0)|_{\mathbf{r}' \in \partial\mathcal{D}'} = D'(\mathbf{r}') ,$$

où $\partial\mathcal{D}'$ est l'image de $\partial\mathcal{D}$ par la transformation conforme, et $D'(\mathbf{r}') = D(\mathbf{r})$. Par construction, cette fonction G'_D est alors plus simple à déterminer. De plus, la fonction G_D définie par

$$\boxed{G_D(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0) = G'_D(\mathbf{r}'; \mathbf{r}'_0)}$$

est la fonction de Green de Dirichlet du problème originel. En effet, elle satisfait aux C.L. et, compte tenu des propriétés de transformations (2.61) du Laplacien et de la distribution de Dirac, nous avons :

$$\begin{aligned} -\Delta_{\mathbf{r}} G_D(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0) &= -\left|\frac{d\mathcal{F}}{dz}\right|^2 \Delta_{\mathbf{r}'} G'_D(\mathbf{r}'; \mathbf{r}'_0), \\ &= \left|\frac{d\mathcal{F}}{dz}\right|^2 \delta(x' - x'_0) \delta(y' - y'_0), \\ &= \delta(x - x_0) \delta(y - y_0). \end{aligned}$$

Pour $D(\mathbf{r}) = 0$, nous obtenons ainsi la fonction de Green de Dirichlet homogène G_{DH} . Comme montré dans la section 2.1.3, la connaissance de G_{DH} donne accès à n'importe quel champ ϕ défini par des C.L. de Dirichlet. Lorsque les C.L. sur ϕ sont de type Neumann, l'utilisation de G_{DH} dans la formule générale (2.27), page 75, ne fournit pas explicitement ϕ . L'expression ainsi obtenue peut néanmoins aider à une résolution ultérieure.

13. Pour simplifier, nous nous sommes restreints au cas où la fonction $D(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0)$, définie p. 75 dans le cas général, ne dépend que de $\mathbf{r}$.

Fonctions harmoniques. En l'absence de source, le champ ϕ est une fonction harmonique, solution de l'équation de Laplace, $\Delta\phi = 0$. Il est alors parfois plus judicieux de chercher directement la solution de cette EDP par la méthode des transformations conformes, sans passer par les fonctions de Green. Supposons donc que l'on veuille résoudre $\Delta\phi = 0$ dans $\mathcal{D}$ avec des C.L., soit de Dirichlet, soit de Neumann. Le champ ϕ étant harmonique dans $\mathcal{D}$, il existe une fonction analytique de la forme

$$\mathcal{A}(z) = \phi(x, y) + i\psi(x, y)$$

dont ϕ est la partie réelle. Interprétons dans un premier temps les C.L. sur ϕ en termes de C.L. sur $\mathcal{A}$. Il est clair que les C.L. de Dirichlet (2.24) se réécrivent :

Dirichlet :	$\operatorname{Re} \mathcal{A}(z) = D(x, y)$	pour	$z = (x, y) \in \partial\mathcal{D}$.	(2.62)
-------------	--	------	--	--------

Pour les C.L. de Neumann (2.25), comme

$$d\psi = \frac{\partial\psi}{\partial x} dx + \frac{\partial\psi}{\partial y} dy = -\frac{\partial\phi}{\partial y} dx + \frac{\partial\phi}{\partial x} dy = \mathbf{n} \cdot \nabla\phi d\Sigma,$$

nous avons, pour $z \in \partial\mathcal{D}$,

$$\operatorname{Im} \mathcal{A}(z) - \operatorname{Im} \mathcal{A}(z_i) = \int_{\mathcal{C}} d\Sigma N(\mathbf{r})$$

où z_i est un point arbitraire sur le bord $\partial\mathcal{D}$, $\mathcal{C}$ un contour allant de z_i à z (voir figure 2.6), et $N(\mathbf{r})$ la fonction intervenant dans les C.L. de Neumann (2.25). En appelant

$$\mathcal{N}(x, y) = \int_{\mathcal{C}} d\Sigma N(\mathbf{r}),$$

les C.L. de Neumann se réécrivent :

$\operatorname{Im} \mathcal{A}(z) = \operatorname{Im} \mathcal{A}(z_i) + \mathcal{N}(x, y)$	pour	$z = (x, y) \in \partial\mathcal{D},$
Neumann :		
$\operatorname{Re} \mathcal{A}(z_0) = c$	pour	$z_0 = (x_0, y_0)$ fixé.

(2.63)

Notons que la constante arbitraire $\operatorname{Im} \mathcal{A}(z_i)$ n'apparaît que dans la partie imaginaire de $\mathcal{A}(z)$, et donc pas dans $\phi(x, y)$.

Les C.L. étant écrites en termes de $\mathcal{A}(z)$, il reste à effectuer, comme précédemment, un changement de coordonnées $z' = \mathcal{F}(z)$, défini par la fonction analytique $\mathcal{F}(z)$, vers un domaine plus simple. Le problème est donc ramené à la détermination du champ $\phi'(\mathbf{r}') = \phi(\mathbf{r})$, solution de l'équation de Laplace $\Delta'\phi' = 0$ dans le domaine $\mathcal{D}'$ avec les C.L. induites par celles portant sur ϕ . Bien entendu, le champ $\phi'(\mathbf{r}')$ est lui-même la partie réelle d'une fonction analytique $\mathcal{A}'(z')$, vérifiant les C.L. découlant des conditions (2.62) ou (2.63).

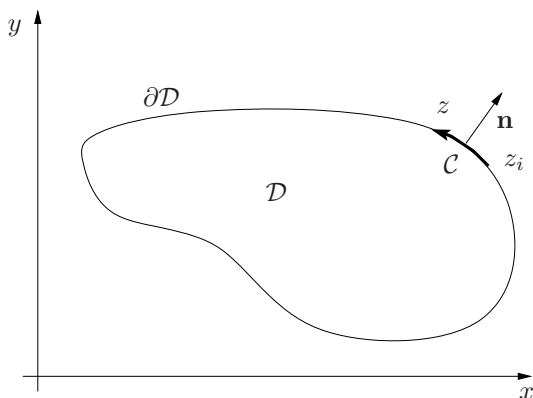


FIG. 2.6 – Contour d'intégration C allant d'un point fixe z_i du bord à un point quelconque z du bord.

Au final, la solution de l'équation de Laplace, $\Delta\phi = 0$, dans le domaine $\mathcal{D}$ s'écrit donc :

$$\boxed{\phi(x, y) = \operatorname{Re} \mathcal{A}(z) \quad \text{avec} \quad \mathcal{A}(z) = \mathcal{A}'(z') = \mathcal{A}'(\mathcal{F}(z)).}$$

Nous donnons au §2.2.5, page 122, une application de ces méthodes à un problème d'hydrodynamique.

Plan et droite infinis

Opérateur de Helmholtz dans un plan. Commençons par l'opérateur de Helmholtz en deux dimensions, le domaine $\mathcal{D}$ étant le plan infini. La fonction de Green de Dirichlet homogène correspondante a pour transformée de Fourier $\hat{G}_\infty(\mathbf{k}) = 1/(\mathbf{k}^2 + m^2)$, expression valable en toutes dimensions (voir page 85). Ici, en deux dimensions, nous avons donc

$$\begin{aligned} G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int d^2\mathbf{k} \, e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)} \frac{1}{\mathbf{k}^2 + m^2}, \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} \int_0^\infty dk \, k \int_0^{2\pi} d\theta \, e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| \cos \theta} \frac{1}{\mathbf{k}^2 + m^2}, \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_0^\infty dk \, \frac{k J_0(k|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|)}{\mathbf{k}^2 + m^2} \end{aligned} \quad (2.64)$$

où J_0 est la fonction de Bessel d'ordre zéro de première espèce. La dernière intégrale s'exprime en termes de la fonction de Bessel d'ordre zéro de troisième espèce notée K_0 , et également dite fonction de Hankel d'argument

imaginaire¹⁴. Nous trouvons ainsi

$$\boxed{G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) = \frac{1}{2\pi} K_0(m|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) .} \quad (2.65)$$

Aux grandes distances relatives, le comportement asymptotique de $G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|)$ est obtenu à partir du développement asymptotique de la fonction K_0 aux grands arguments et vaut

$$G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) \simeq \frac{e^{-m|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|}}{2(2\pi m|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|)^{1/2}} \quad \text{quand} \quad |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0| \rightarrow \infty .$$

Nous voyons donc que $G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|)$ décroît exponentiellement vite. Comme en trois dimensions, la présence de m induit l'effet d'écran, et G_∞ est à courte portée. Lorsque la distance relative $|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|$ devient petite devant $1/m$, nous trouvons un comportement logarithmique,

$$G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) \sim -\frac{1}{2\pi} \ln(m|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|) ,$$

à partir du développement aux petits arguments de la fonction K_0 . Comme l'écran ne devrait plus être opérant à courte distance, nous en déduisons que ce comportement devrait aussi être celui de la fonction de Green du Laplacien, similairement à ce qui est observé dans le cas tridimensionnel (voir page 86).

Opérateur de Helmholtz sur une droite. Passons au cas unidimensionnel où $\mathcal{D}$ est une droite infinie. La transformée inverse de $\hat{G}_\infty$ devient ici

$$G_\infty(|x - x_0|) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk e^{ik(x-x_0)} \frac{1}{k^2 + m^2} .$$

Le calcul de cette intégrale se fait par la méthode des résidus¹⁵ et donne

$$\boxed{G_\infty(|x - x_0|) = \frac{1}{2m} e^{-m|x-x_0|} .} \quad (2.66)$$

Comme annoncé précédemment, G_∞ est bien la limite commune des fonctions de Green G_{DH} (2.52) et G_{NH} (2.53) du système fini de taille L , quand $L \rightarrow \infty$ à positions fixés. Comme en trois et deux dimensions, $G_\infty(|x - x_0|)$ décroît exponentiellement vite aux distances relatives grandes devant $1/m$. À courte distance, et à des constantes près, $G_\infty(|x - x_0|)$ se comporte en $-|x - x_0|/2$, comme la fonction de Green de Dirichlet homogène du Laplacien (2.55) d'un grand (i.e. $L \gg x, x_0$) système fini.

14. Le lecteur pourra trouver les définitions et autres propriétés des fonctions de Bessel dans les ouvrages [Gradshteyn] ou [Arfken].

15. Ce calcul est similaire à celui de l'intégrale (2.47), page 85.

Laplacien. En ce qui concerne le Laplacien dans un plan ou une droite infinie, il se trouve qu'il n'existe pas de fonction de Green non-divergente à l'infini, donc pas de fonction de Green de Dirichlet homogène en particulier. Ceci est une conséquence de la non-existence de la transformée de Fourier inverse de la fonction $1/k^2$ en deux ou une dimensions, à cause de son comportement singulier non-intégrable en $\mathbf{k} = 0$. Cela dit, les fonctions

$$\boxed{-\frac{1}{2\pi} \ln(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/\ell)} \quad (2.67)$$

avec ℓ constante arbitraire, et

$$\boxed{-\frac{|x - x_0|}{2}} \quad (2.68)$$

sont bien des fonctions de Green du Laplacien en deux et une dimensions respectivement. Pour le cas bidimensionnel, le lecteur peut vérifier explicitement que la fonction (2.67) satisfait bien à l'EDP correspondante au sens des distributions, en appliquant une fonction test, comme proposé à l'exercice 2.3, p. 128. À une dimension, la vérification est immédiate en appliquant successivement les identités $(d/dx)|x| = \theta(x) - \theta(-x)$ et $(d/dx)\theta(x) = \delta(x)$ où $\theta(x)$ est la fonction de Heaviside. Soulignons que les fonctions de Green (2.67) et (2.68) apparaissent naturellement dans les comportements à courte distance des fonctions de Green G_∞ associées aux opérateurs de Helmholtz, qui sont eux-mêmes identiques à leurs formes limites quand $m \rightarrow 0^+$ à des constantes divergentes près.

Les fonctions de Green (2.67) et (2.68) ont une interprétation physique simple. En fait, elles correspondent, à des constantes infinies près provenant de la présence de sources non localisées, au potentiel en trois dimensions créé respectivement par une ligne et un plan uniformément chargés. En guise d'exercice, le lecteur peut calculer la différence de potentiel entre deux points d'observation $\mathbf{r}_1$ et $\mathbf{r}_2$,

$$\int d^3\mathbf{r}' \left[\frac{\rho(\mathbf{r}')}{4\pi|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}'|} - \frac{\rho(\mathbf{r}')}{4\pi|\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}'|} \right]$$

pour des distributions de charge linéaire $\rho(\mathbf{r}') = \delta(x' - x_0)$ et planaire $\rho(\mathbf{r}') = \delta(x' - x_0)\delta(y' - y_0)$ respectivement (voir figure 2.7). Il vérifiera que ces différences se réduisent bien aux fonctions de Green (2.67) et (2.68), à des constantes près. Notons que le champ électrique créé par les distributions de charge précédentes est fini, et il est évidemment donné par le gradient de ces fonctions de Green.

2.1.6 Opérateurs inhomogènes

Nous avons étudié en détail les fonctions de Green des opérateurs de Laplace et de Helmholtz, qui apparaissent très fréquemment dans des problèmes

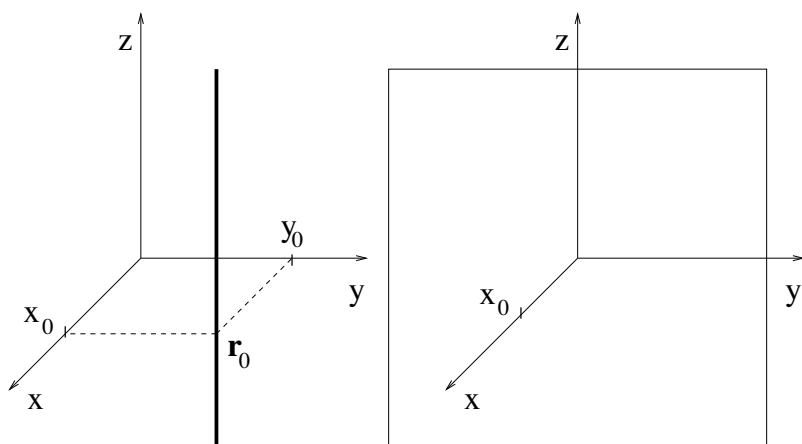


FIG. 2.7 – Distribution de sources linéaire et planaire qui interviennent dans la construction des fonctions de Green à deux et une dimensions respectivement.

stationnaires. Il existe cependant de nombreux cas où le champ que nous voulons étudier satisfait à une EDP inhomogène du type

$$[-\Delta + f(\mathbf{r})] \phi(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) \quad (2.69)$$

où l'opérateur

$$\mathcal{O} = -\Delta + f(\mathbf{r})$$

fait maintenant intervenir, en plus du Laplacien, une fonction $f(\mathbf{r})$ réelle, donnée par les caractéristiques du système considéré. Ce type d'EDP peut apparaître, par exemple, dans l'étude de plasmas inhomogènes. Il apparaît aussi en mécanique quantique. Dans ce dernier cas, l'opérateur $\mathcal{O}$ et l'EDP (2.69) sont respectivement reliés au Hamiltonien et à l'équation de Schrödinger stationnaire. Ainsi, les exemples des paragraphes 2.2.3 et 2.2.4 traités dans la seconde partie de ce chapitre sont des applications des propriétés générales discutées ci-dessous, respectivement à un calcul de densité d'états et de diffusion en mécanique quantique.

Revenons à l'EDP (2.69). Pour des fonctions $f(\mathbf{r})$ qui ne se réduisent pas à de simples constantes¹⁶, une étude systématique détaillée des propriétés de $\mathcal{O}$ et de ses fonctions de Green, devient très difficile. La raison principale en est le manque de symétries (de translation et rotation par exemple) de cet opérateur par suite de la présence de $f(\mathbf{r})$. Ici, nous nous contentons d'énoncer quelques résultats généraux simples.

16. Dans ce cas, et si cette constante est positive, $\mathcal{O}$ est évidemment l'opérateur de Helmholtz.

Dans un premier temps, nous abordons la problématique des conditions aux limites et de l'unicité de la solution de l'EDP (2.69). Ensuite, nous introduisons l'opérateur $\mathcal{O} + \lambda$, qui dépend d'un paramètre complexe λ . L'inverse de cet opérateur est appelé résolvante. Les fonctions de Green de l'opérateur $\mathcal{O} + \lambda$ s'interprètent alors comme les éléments de matrice de la résolvante et sont très utiles pour étudier les propriétés spectrales de $\mathcal{O}$; de plus, elles interviennent aussi naturellement dans des problèmes dynamiques comme cela sera montré au chapitre 3. Nous terminons cette section par la construction de développements perturbatifs de la résolvante et des fonctions de Green correspondantes.

Conditions aux limites et unicité

Nous allons voir que l'analyse des C.L. à imposer pour garantir l'unicité de ϕ est plus délicate que dans le cas du Laplacien. Pour commencer, nous pouvons de nouveau partir de la première formule de Green (2.19), page 72, pour obtenir des contraintes intéressantes. Soient donc ϕ_1 et ϕ_2 deux solutions de l'EDP (2.69) dans $\mathcal{D}$, et $\alpha = \phi_1 - \phi_2$ leur différence. L'application de cette formule, avec $u = \alpha^*$ et $v = \alpha$, donne :

$$\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} [f(\mathbf{r})|\alpha(\mathbf{r})|^2 + |\nabla\alpha(\mathbf{r})|^2] = \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma \alpha^*(\mathbf{r}) [\mathbf{n} \cdot \nabla\alpha(\mathbf{r})] . \quad (2.70)$$

Si f est une fonction à valeurs réelles strictement positive, $f(\mathbf{r}) > 0$ pour tout $\mathbf{r} \in \mathcal{D}$, alors, comme dans le cas de Helmholtz, nous voyons que les C.L. de Dirichlet (2.24), ou bien de Neumann simples (2.44), sont suffisantes pour impliquer que la différence α est identiquement nulle dans $\mathcal{D}$, i.e. pour garantir l'unicité.

Si la fonction $f(\mathbf{r})$ prend des valeurs réelles positives et négatives, alors l'identité (2.70) ne permet pas de conclure quant à l'unicité. En effet, si les C.L. de Dirichlet ou de Neumann impliquent que l'intégrale de volume soit nulle, l'intégrand n'est pas nécessairement identiquement nul car son signe n'est pas constant. En fait, comme la différence $\alpha = \phi_1 - \phi_2$ est solution de l'EDP (2.69) sans second membre,

$$[-\Delta + f(\mathbf{r})]\alpha(\mathbf{r}) = 0 ,$$

avec des C.L. de Dirichlet ou Neumann homogènes, la problématique de l'unicité est reliée à l'existence de la valeur propre $\lambda = 0$ dans le spectre de l'opérateur $\mathcal{O}$ avec la version homogène des C.L. choisies pour ϕ . Ainsi, pour des C.L. de type Dirichlet sur ϕ , on introduit le spectre avec des C.L. de Dirichlet homogènes. Si $\lambda = 0$ n'est pas valeur propre de $\mathcal{O}$ avec ces C.L., alors $\alpha(\mathbf{r})$ est nécessairement identiquement nulle, et l'unicité est assurée. Si $\lambda = 0$ est valeur propre de $\mathcal{O}$ avec ces C.L., alors $\alpha(\mathbf{r})$ est une fonction propre associée à $\lambda = 0$, et elle est non identiquement nulle. En d'autres termes, à partir d'une

solution particulière de l'EDP (2.69) avec des C.L. de Dirichlet données, nous pouvons construire une infinité d'autres solutions en lui ajoutant n'importe quelle fonction propre de $\mathcal{O}$ de valeur propre $\lambda = 0$ satisfaisant aux C.L. de Dirichlet homogènes. Pour des C.L. de Neumann sur ϕ , l'argumentation et les résultats sont identiques.

Une fois l'unicité garantie dans le cadre de C.L. d'un type donné, les fonctions de Green correspondant à ces C.L. sont bien définies. Une manipulation de la seconde formule de Green (2.20), analogue à celle introduite pour le Laplacien, conduit à une expression générale de la solution de l'EDP (2.69) en termes de ces fonctions de Green, qui se trouve être identique à la formule (2.27), page 75. À nouveau, un champ ϕ créé par une source quelconque avec des C.L. données, est entièrement déterminé par la connaissance des fonctions de Green appropriées. En particulier, si ces C.L. sont de type Dirichlet, alors ϕ est explicitement obtenu à partir de la formule (2.37) en termes de la fonction de Green de Dirichlet homogène.

Résolvante et fonctions de Green

Résolvante. Introduisons maintenant l'opérateur

$$(\mathcal{O} + \lambda) \quad (2.71)$$

où λ est un nombre complexe donné, avec $\text{Im } \lambda \neq 0$. L'EDP générale correspondante s'écrit

$$[\mathcal{O} + \lambda] \phi(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) \quad (2.72)$$

soit

$$[-\Delta + f(\mathbf{r}) + \lambda] \phi(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}). \quad (2.73)$$

Pour déterminer les C.L. garantissant l'unicité, il suffit de reprendre la manipulation précédente de la première formule de Green. En notant toujours $\alpha = \phi_1 - \phi_2$ la différence entre deux solutions possibles de l'EDP (2.73), nous trouvons pour la partie imaginaire de la première formule de Green

$$(\text{Im } \lambda) \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} |\alpha(\mathbf{r})|^2 = \text{Im} \left\{ \oint_{\partial \mathcal{D}} d\Sigma \alpha^*(\mathbf{r}) [\mathbf{n} \cdot \nabla \alpha(\mathbf{r})] \right\}. \quad (2.74)$$

Si les C.L. sont de type Dirichlet ou Neumann, l'intégrale de surface du membre de droite est toujours nulle, de sorte que, comme $\text{Im}(\lambda) \neq 0$, l'intégrale de volume du membre de gauche est également nulle. Comme $|\alpha(\mathbf{r})|^2$ garde un signe constant, $\alpha(\mathbf{r})$ est identiquement nulle, ce qui assure l'unicité. L'opérateur $\mathcal{O} + \lambda$ est alors inversible dans l'espace des fonctions satisfaisant les C.L. considérées et son inverse

Résolvante : $\frac{1}{\mathcal{O} + \lambda}$

est appelé résolvante associée à l'opérateur $\mathcal{O}$.

Fonctions de Green. Fixons des C.L. de Dirichlet ou Neumann homogènes sur la surface $\partial\mathcal{D}$ du domaine considéré. La fonction de Green $G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ de l'opérateur $\mathcal{O} + \lambda$ est la solution de l'EDP

$$[-\Delta_{\mathbf{r}} + f(\mathbf{r}) + \lambda] G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (2.75)$$

avec ces conditions aux limites. Comme cela a été montré dans le cas général, page 70, $G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ peut être interprétée comme l'élément de matrice de la résolvante entre les bra $\langle \mathbf{r} |$ et ket $|\mathbf{r}' \rangle$, i.e. :

$$G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \frac{1}{\mathcal{O} + \lambda} | \mathbf{r}' \rangle. \quad (2.76)$$

Si l'opérateur $\mathcal{O}$ admet, pour les C.L. retenues, une base complète de fonctions propres orthonormées ψ_n de valeurs propres λ_n , alors comme ces ψ_n sont évidemment aussi fonctions propres de la résolvante avec valeurs propres $1/(\lambda_n + \lambda)$, la représentation spectrale (2.13), page 69, s'écrit ici :

$$G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \sum_n \frac{1}{\lambda + \lambda_n} \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}'). \quad (2.77)$$

Même si cette représentation spectrale est utile, elle ne donne pas encore explicitement G_λ , car encore faut-il être capable de déterminer les valeurs propres et fonctions propres de $\mathcal{O}$! Notons que chaque terme dans cette représentation est bien défini, car $(\lambda + \lambda_n)$ ne peut jamais s'annuler puisque λ a une partie imaginaire non-nulle et que tous les λ_n sont réels en vertu du caractère hermitien de $\mathcal{O}$.

Intérêt des fonctions de Green

Comme pour l'opérateur de Helmholtz, la connaissance des fonctions de Green homogènes donne accès à la solution générale de l'EDP (2.73), via des formules identiques aux expressions (2.37), page 81, et (2.49), page 87, suivant la nature des C.L. imposées sur ϕ . Comme nous le verrons au chapitre suivant, ce type d'EDP avec paramètre complexe intervient naturellement dans la résolution de problèmes dynamiques, par transformée de Laplace ou de Fourier sur la variable temporelle.

Un autre intérêt majeur des fonctions de Green G_λ apparaît dans leur représentation spectrale (2.77). Si ces quantités, conçues maintenant comme des fonctions de λ , sont en général analytiques en dehors de l'axe réel ($\text{Im } \lambda \neq 0$), elles devraient présenter des singularités sur l'axe réel en $\lambda = -\lambda_n$ où λ_n est valeur propre de $\mathcal{O}$. En fait, comme nous le verrons au §2.2.3, page 113, dans un exemple spécifique à la mécanique quantique où $\mathcal{O}$ n'est autre qu'un Hamiltonien, la connaissance des propriétés analytiques de $G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ donne des informations sur le spectre de l'opérateur originel $\mathcal{O}$. C'est cette propriété qui justifie la dénomination de résolvante pour l'opérateur $1/(\mathcal{O} + \lambda)$.

Développement perturbatif

Pour une fonction $f(\mathbf{r})$ quelconque, la détermination explicite de G_λ reste un problème très ardu. Dans ce contexte, il est particulièrement utile de réécrire l'EDP (2.73) comme :

$$[-\Delta + \lambda] \phi(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) - f(\mathbf{r})\phi(\mathbf{r}) \quad (2.78)$$

où l'opérateur $\mathcal{O}$ a été séparé en une partie dite libre¹⁷, pour lequel les fonctions de Green $G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ sont plus accessibles, et une partie proportionnelle à $f(\mathbf{r})$. Supposons que $\phi(\mathbf{r})$ vérifie des C.L. homogènes. L'idée de départ est alors de considérer tout le membre de droite de l'EDP (2.78) comme une source, même si il dépend de ϕ . Ce raisonnement conduit immédiatement à l'équation intégrale

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') [\rho(\mathbf{r}') - f(\mathbf{r}')\phi(\mathbf{r}')]]$$

où $G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ est la fonction de Green satisfaisant les mêmes C.L. homogènes que ϕ . En appelant

$$\phi_0(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'),$$

l'équation précédente se réécrit :

$$\phi(\mathbf{r}) = \phi_0(\mathbf{r}) - \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') f(\mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}').$$

Cette équation intégrale présente l'avantage de pouvoir être réitérée et donne ainsi lieu à un développement de ϕ en puissances de f . Par exemple, une itération de cette procédure mène à :

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}) = \phi_0(\mathbf{r}) & - \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') f(\mathbf{r}') \phi_0(\mathbf{r}') \\ & + \int_{\mathcal{D}^2} d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') f(\mathbf{r}') G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}'') f(\mathbf{r}'') \phi_0(\mathbf{r}''). \end{aligned}$$

Si la fonction $f(\mathbf{r})$ peut être considérée comme une perturbation par rapport à la partie libre, ce raisonnement mène, au premier ordre en f , à :

$$\phi(\mathbf{r}) \simeq \phi_0(\mathbf{r}) - \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') f(\mathbf{r}') \phi_0(\mathbf{r}').$$

17. Cette appellation provient de la mécanique quantique où le terme libre fait référence au Hamiltonien d'une particule libre.

Le raisonnement précédent peut aussi être appliqué pour construire un développement perturbatif de la résolvante associée à l'opérateur $\mathcal{O}$ au voisinage de la résolvante libre. Pour cela, écrivons[✱] la tautologie

$$\begin{aligned} (\mathcal{O} + \lambda)(\mathcal{O} + \lambda)^{-1} &= \mathcal{I}, \\ (-\Delta + \lambda)(\mathcal{O} + \lambda)^{-1} + f(\mathcal{O} + \lambda)^{-1} &= \mathcal{I}, \end{aligned} \quad (2.79)$$

et multiplions les deux membres de l'équation ci-dessus par $(-\Delta + \lambda)^{-1}$ à gauche. Cela donne :

$$\frac{1}{\mathcal{O} + \lambda} = \frac{1}{-\Delta + \lambda} - \frac{1}{-\Delta + \lambda} f \frac{1}{\mathcal{O} + \lambda}.$$

En prenant les éléments de matrice de cette identité opératoire entre les bra $\langle \mathbf{r} |$ et ket $| \mathbf{r}' \rangle$, nous trouvons l'équation :

✱ Commentaire 2.1.7. Notez que l'équation (2.79) porte sur des opérateurs qui ne commutent pas entre eux. L'ordre des opérateurs est donc important. Par ailleurs, dans l'équation (2.79), f doit être compris comme l'opérateur associé à $f(\mathbf{r})$. Cet opérateur est diagonal dans la base des $|\mathbf{r}\rangle$ et ses éléments de matrice sont $f(\mathbf{r})$, de telle sorte que

$$f = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}_1 |\mathbf{r}_1\rangle f(\mathbf{r}_1) \langle \mathbf{r}_1|.$$

$$G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') - \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}_1 G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1) f(\mathbf{r}_1) G_\lambda(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}'). \quad (2.80)$$

Cette identité peut se réécrire graphiquement comme indiqué sur la figure 2.8.

Le développement perturbatif cherché est finalement obtenu en itérant l'identité (2.80) dans la forme de $G_\lambda(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}')$ du membre de droite de cette même identité, ce qui donne

$$\begin{aligned} G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}') &= G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') - \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}_1 G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1) f(\mathbf{r}_1) G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}') \\ &+ \int_{\mathcal{D}^2} d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1) f(\mathbf{r}_1) G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2) f(\mathbf{r}_2) G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}_2; \mathbf{r}') \\ &+ \dots \end{aligned} \quad (2.81)$$

À nouveau, nous pouvons donner une interprétation de ce développement perturbatif, en termes de diagrammes comme indiqué sur la figure 2.9.

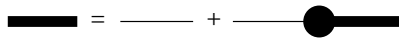


FIG. 2.8 – Représentation de l'équation (2.80) : les traits pleins et fins correspondent respectivement à G_λ et à $G_\lambda^{(0)}$ et le cercle à $-f$.

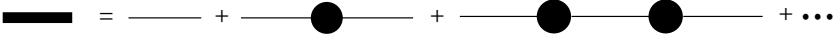


FIG. 2.9 – Représentation de l'équation (2.81) avec les mêmes conventions que pour la figure 2.8.

2.2 Applications et exemples

2.2.1 Origine de la méthode des images

Présentation

En électrostatique, il est fréquent de rencontrer une situation où un plan infini, pris par exemple en $x = 0$, est la paroi d'un conducteur maintenu à un potentiel nul (voir figure 2.10). Le conducteur remplit le demi-espace $x < 0$, l'autre demi-espace $x > 0$ étant vide. Si on veut calculer le potentiel électrostatique créé par une distribution de charge extérieure au conducteur, la fonction de Green la plus adéquate est définie par

$$-\Delta_{\mathbf{r}} G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

dans le demi-espace défini par $x > 0$, avec des C.L. de Dirichlet homogènes, $G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = 0$, sur la paroi conductrice en $x = 0$ d'une part, et à l'infini ($|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$) dans le demi-espace vide d'autre part. Le potentiel électrostatique créé par une distribution arbitraire localisée dans le demi-plan $x > 0$ est alors donné, au facteur $1/\epsilon_0$ près, par la formule générale (2.37), p. 81, où le terme de surface disparaît car ici $D(\mathbf{r}') = 0$. Nous allons déterminer la fonction de Green G_{DH} , et expliciter l'origine de la méthode des images.

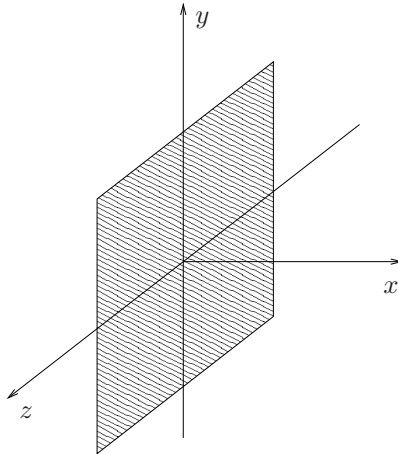


FIG. 2.10 – Plan conducteur en $x = 0$.

Étude et résolution

Afin de déterminer G_{DH} , on pourrait s'inspirer du calcul de la fonction de Green dans le système infini effectué page 78. Ici, le système est toujours invariant par toute translation le long des axes Oy et Oz , mais cette invariance est brisée le long de l'axe Ox par la présence de la paroi conductrice en $x = 0$. Une possibilité pour calculer G_{DH} , serait donc de commencer par effectuer une transformée de Fourier selon Oy et Oz . Cette méthode est proposée dans l'exercice 2.7, page 131. Cela dit, il existe une autre approche, efficace et systématique, exploitant la formule spectrale (2.13), p. 69. C'est cette méthode que nous présentons.

Détermination du spectre. Il est facile d'obtenir la base de fonctions propres du Laplacien avec les C.L. de Dirichlet homogènes en $x = 0$: les fonctions[✱]

$$\psi_{k_x, k_y, k_z}(\mathbf{r}) = \frac{2}{\sqrt{(2\pi)^3}} e^{i(k_y y + k_z z)} \sin(k_x x) \quad (2.82)$$

avec $k_x > 0$ forment une base orthonormée de l'espace des fonctions définies dans le demi-espace $x > 0$ s'annulant en $x = 0$. Ces fonctions vérifient bien la relation de complétude

$$\int_0^\infty dk_x \int_{-\infty}^\infty dk_y \int_{-\infty}^\infty dk_z \psi_{k_x, k_y, k_z}(\mathbf{r}) \psi_{k_x, k_y, k_z}^*(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \quad (2.83)$$

pour $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$ dans le domaine $x, x' > 0$, ainsi que la condition d'orthonormalité

$$\int_{x>0} d\mathbf{r} \psi_{k_x, k_y, k_z}(\mathbf{r}) \psi_{k'_x, k'_y, k'_z}^*(\mathbf{r}) = \delta(k_x - k'_x) \delta(k_y - k'_y) \delta(k_z - k'_z) \quad (2.84)$$

pour $k_x > 0$ et $k'_x > 0$. Pour s'en convaincre, il suffit de remarquer que l'expression (2.82) est une superposition d'ondes planes de vecteur d'ondes (k_x, k_y, k_z) et $(-k_x, k_y, k_z)$ respectivement.

✱ **Commentaire 2.2.1.** En toute rigueur, il faudrait introduire un domaine fini, et déterminer les fonctions propres correspondantes avec des C.L. de Dirichlet homogènes. Ensuite, on rejette à l'infini tous les bords autres que la paroi conductrice en $x = 0$ elle-même. Il se trouve que cette procédure est équivalente à construire des fonctions propres avec des C.L. périodiques dans les directions Oy et Oz . C'est cette équivalence qui justifie l'utilisation du jeu de fonctions (2.82).

Formule des images. En introduisant les fonctions propres (2.82) dans la formule spectrale (2.13), nous trouvons

$$G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \int_0^\infty dk_x \int_{-\infty}^\infty dk_y \int_{-\infty}^\infty dk_z \frac{\psi_{k_x, k_y, k_z}(\mathbf{r}) \psi_{k_x, k_y, k_z}^*(\mathbf{r}')}{\mathbf{k}^2} . \quad (2.85)$$

En remplaçant $\sin(k_x x)$ et $\sin(k_x x')$ par leurs expressions respectives en termes d'onde plane dans l'intégrale (2.85), il apparaît une somme de quatre termes. Le domaine d'intégration étant restreint aux $k_x > 0$, il est judicieux de regrouper ces termes deux par deux de façon à obtenir une intégrale en k_x sur tout l'axe réel. Ainsi, nous reconnaissons les intégrales sur $\mathbf{k}$ intervenant dans les expressions (2.35) p. 79 de $G_\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ et de $G_\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_{im})$ avec $\mathbf{r}'_{im} = (-x', y', z')$. Il vient en définitive

$$\boxed{G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = G_\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - G_\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_{im}).} \quad (2.86)$$

Nous retrouvons ainsi la célèbre formule des images : la fonction de Green $G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ est, au facteur q/ϵ_0 près, le potentiel produit par la charge ponctuelle q en $\mathbf{r}'$ et par une charge fictive opposée $-q$ en $\mathbf{r}'_{im}$.

Remarquons qu'il est tout aussi facile d'obtenir la fonction de Green satisfaisant les C.L. de Neumann homogènes $(\partial/\partial x)G_{NH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = 0$ pour $x = 0$. Une réalisation physique de ces C.L., est obtenue en remplaçant le conducteur dans le demi-espace $x < 0$ par un diélectrique de constante ϵ_1 , et le vide dans le demi-espace $x > 0$ par un autre diélectrique de constante ϵ_2 . Dans la limite $\epsilon_1 \ll \epsilon_2$, tout se passe comme si la composante E_x du champ électrique devenait nulle en $x = 0$ en vertu des conditions de raccordement $\epsilon_1 E_x^{(1)} = \epsilon_2 E_x^{(2)}$. Pour déterminer G_{NH} , il suffit d'utiliser une base de fonctions propres analogues aux précédentes, s'en déduisant par la simple substitution $\sin(k_x x) \rightarrow \cos(k_x x)$ dans la formule (2.82). Nous trouvons ainsi

$$\boxed{G_{NH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = G_\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}') + G_\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_{im}).}$$

Maintenant, la charge image de q est égale à q .

Interprétation

Nous avons montré que la méthode des images apparaît très simplement à partir de la représentation spectrale des fonctions de Green en termes des fonctions propres du Laplacien vérifiant les C.L. adéquates. Le lecteur peut comparer l'efficacité de cette méthode à celle d'un calcul direct par transformation de Fourier. Cette méthode des images est très générale : elle est ainsi utilisée dans les exercices 2.9, p. 132 et 2.15, p. 137, ainsi que dans le chapitre 3 pour l'opérateur d'Alembertien dans l'exemple du §3.2.2 relatif à la diffraction de Fraunhofer.

Effet d'écran. Si la charge image est fictive, l'effet d'écran résultant est bien observé pour un conducteur réel ! Autrement dit, à grande distance, le potentiel électrostatique produit par la charge q décroît plus rapidement que dans le vide tout entier. En fait, suite aux migrations induites de charges libres dans le conducteur, il se forme une distribution de charge de signe opposé à q

localisée au voisinage du plan $x = 0$. Au niveau mésoscopique, la densité de charge superficielle correspondante est simplement déterminée à partir de la composante E_x du champ électrique dans le vide en $x = 0^+$, le champ électrique étant identiquement nul dans le conducteur. Soulignons que cette prédiction de l'électrostatique macroscopique est en parfait accord avec une analyse microscopique des processus de polarisation au sein du conducteur. Une telle analyse peut être menée dans le cadre de la théorie de Debye, qui est une approche de champ moyen, tout à fait similaire à l'approximation de Vlasov présentée dans le chapitre 1. Ici, il faut déterminer la distribution de charge induite dans le conducteur par une charge ponctuelle extérieure, *via* l'équation de Poisson-Boltzmann. Cette théorie de champ moyen confirme la prédiction du point de vue macroscopique.

2.2.2 Boule en mouvement uniforme dans un fluide

Présentation

Il existe de nombreuses situations en hydrodynamique qui se ramènent à l'étude de fluides parfaits et incompressibles. Souvent l'écoulement est stationnaire et irrotationnel, de sorte que le champ de vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ est tel que

$$\nabla \times \mathbf{u} = \mathbf{0} .$$

Il dérive donc d'un potentiel ϕ , c'est-à-dire $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \nabla\phi(\mathbf{r})$. L'équation traduisant l'incompressibilité du fluide,

$$\nabla \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}) = 0 ,$$

implique alors l'équation de Laplace

$$\Delta\phi(\mathbf{r}) = 0 . \tag{2.87}$$

Précisons les C.L. que $\phi(\mathbf{r})$ doit satisfaire à la frontière $\partial\mathcal{D}$ du domaine où se trouve le fluide. Une partie $\partial\mathcal{D}_P$ de cette frontière, peut être constituée d'une paroi délimitant un matériau imperméable au fluide. Sur cette paroi, la vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{r})$ est nécessairement tangente à la paroi, comme indiqué sur la figure 2.11, de sorte que les C.L. s'écrivent

$$\mathbf{n} \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}) = 0 \text{ pour } \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}_P$$

où $\mathbf{n}$ est le vecteur normal à la paroi, orienté du fluide vers le matériau extérieur. En général, la paroi $\partial\mathcal{D}_P$ n'est pas fermée, comme par exemple pour le segment de tuyau représenté sur la figure 2.12. Il faut alors la compléter par une surface fictive $\partial\mathcal{D}_F$, sur laquelle la composante normale de la vitesse doit être connue, de telle sorte que $\partial\mathcal{D} = \partial\mathcal{D}_P \cup \partial\mathcal{D}_F$ soit fermée. Le potentiel des vitesses $\phi(\mathbf{r})$ est alors la solution de l'équation de Laplace sans sources (2.87) avec des C.L. de type Neumann

$$\mathbf{n} \cdot \nabla\phi(\mathbf{r}) = N(\mathbf{r}) \text{ pour } \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D} . \tag{2.88}$$

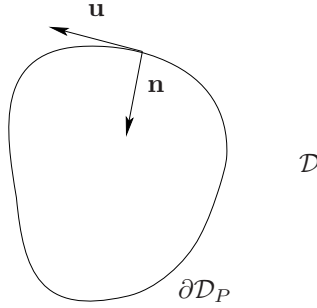


FIG. 2.11 – La vitesse $\mathbf{u}$ du fluide est tangente à la paroi $\partial\mathcal{D}_P$.

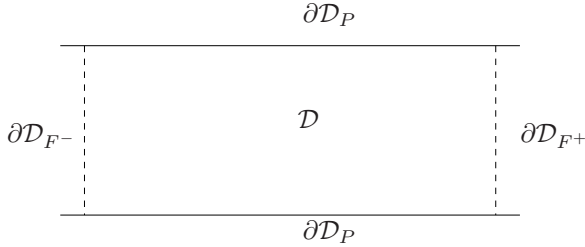


FIG. 2.12 – Dans cet exemple d'écoulement dans un tuyau, la paroi cylindrique $\partial\mathcal{D}_P$ est complétée par deux parois fictives $\partial\mathcal{D}_{F\pm}$ de telle manière que la surface totale $\partial\mathcal{D} = \partial\mathcal{D}_P \cup \partial\mathcal{D}_{F+} \cup \partial\mathcal{D}_{F-}$ soit fermée.

La fonction de bord $N(\mathbf{r})$, qui est une donnée du problème, satisfait à la contrainte

$$\oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma N(\mathbf{r}) = 0 ,$$

induite par la conservation de la matière.

Analogie avec la supraconductivité. La situation précédente est semblable à celle d'un matériau dans la phase supraconductrice, soumis à un champ magnétique de norme inférieure au champ critique. On observe alors l'effet Meissner, que nous pouvons résumer simplement de la façon suivante : les lignes de champ magnétique ne pénètrent pas dans le matériau, et le champ magnétique total y est identiquement nul ¹⁸. En vertu des conditions de raccordement du champ magnétique à la surface de séparation de deux milieux, la

18. Il apparaît donc un effet d'écran du champ magnétique, qu'on peut décrire phénoménologiquement en attribuant au supraconducteur une susceptibilité diamagnétique égale à -1 . Nous renvoyons le lecteur aux ouvrages mentionnés dans les notes bibliographiques pour une description détaillée de la supraconductivité.

composante normale à la paroi supraconductrice est nulle. Les lignes de champ magnétique sont donc tangentes à la surface du supraconducteur. Le champ magnétique $\mathbf{B}$ à l'extérieur du supraconducteur satisfait les mêmes équations que le champ de vitesse $\mathbf{u}$ précédent, à savoir $\nabla \cdot \mathbf{B} = 0$ et $\nabla \times \mathbf{B} = \mathbf{0}$ en supposant l'absence de densité de courant dans le domaine considéré. Les C.L. sont de type Neumann homogène sur la paroi du supraconducteur.

Boule en mouvement uniforme. Nous allons étudier comme exemple une boule immergée dans un fluide parfait et incompressible. Supposons qu'un opérateur extérieur impose à la boule un mouvement rectiligne uniforme à la vitesse constante $\mathbf{V}$. Ce mouvement induit un écoulement dans le fluide initialement au repos. Il est commode de raisonner dans le référentiel galiléen lié à la boule, car le champ de vitesse du fluide, qu'on notera toujours $\mathbf{u}$, y est stationnaire en régime irrotationnel (voir figure 2.13). Dans la pratique, pour un fluide réel, ce régime ne sera observé que si la vitesse $\mathbf{V}$ est suffisamment faible, de sorte qu'aucune turbulence n'apparaisse dans le sillage de la boule. Dans son référentiel, la boule est au repos, et elle voit un écoulement dont la vitesse est $-\mathbf{V}$ à l'infini. Notons que ce problème est semblable à celui d'une sphère supraconductrice soumise à un champ magnétique extérieur uniforme.

Étude et résolution

La paroi est ici formée par la sphère $S_R = \partial\mathcal{D}_P$ de rayon R . Elle est complétée par une très grande sphère dont on fera tendre le rayon vers l'infini, et nous noterons dans cette limite $S_\infty = \partial\mathcal{D}_F$. La frontière du domaine est donc ici $\partial\mathcal{D} = S_R \cup S_\infty$. Compte tenu de la géométrie du problème, nous utilisons les coordonnées sphériques indiquées sur la figure 2.13. Les C.L. de Neumann (2.88) s'écrivent alors

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \phi = 0 \quad \text{sur } S_R \quad \text{et} \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \phi = -V \cos \theta \quad \text{sur } S_\infty.$$

Pour la suite, il est judicieux de décomposer $\phi(\mathbf{r})$ comme

$$\phi(\mathbf{r}) = -Vr \cos \theta + \psi(\mathbf{r}),$$

où le premier terme donne le champ de vitesse constant $\mathbf{u}_0(\mathbf{r}) = -\mathbf{V}$ de l'écoulement en l'absence de boule. Le champ $\psi(\mathbf{r})$ satisfait également l'équation de Laplace

$$\Delta \psi(\mathbf{r}) = 0,$$

avec les C.L. de Neumann

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \psi = -V \cos \theta \quad \text{sur } S_R \quad \text{et} \quad \mathbf{n} \cdot \nabla \psi = 0 \quad \text{sur } S_\infty. \quad (2.89)$$

Passons à la détermination de $\psi(\mathbf{r})$. Comme expliqué dans la première partie de ce chapitre, il n'existe pas de fonction de Green de Neumann homogène du Laplacien. Plutôt que d'introduire les fonctions de Green de Neumann spéciales, qui ne sont de toute façon pas aisément accessibles, il est bien

plus efficace de travailler avec l'équation intégrale (2.40), p. 82, pour $\psi(\mathbf{r})$, construite avec la fonction de Green G_∞ du système infini. Ici, comme aucune source ρ n'est présente, les seules intégrales à considérer sont à prendre sur les surfaces S_R et S_∞ . En fait, le champ $\psi(\mathbf{r})$ décroissant à l'infini suffisamment rapidement, ce qui sera vérifié *a posteriori*, la contribution de S_∞ est nulle. Il vient alors, en tenant compte de la condition de bord sur S_R ,

$$\psi(\mathbf{r}) = -V \oint_{S_R} d\Sigma' G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) \cos \theta' + \oint_{S_R} d\Sigma' \psi(\mathbf{r}') \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}} G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|), \quad (2.90)$$

avec $G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = 1/(4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$. Nous allons résoudre cette équation intégrale en utilisant la décomposition de $1/|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ en polynômes de Legendre, et en exploitant l'indépendance de $\psi(\mathbf{r}) = \psi(r, \theta)$ dans l'angle φ , conséquence de la symétrie cylindrique du système.

Calcul des intégrales de surface. Considérons la première intégrale dans l'expression (2.90), analogue au potentiel électrostatique créé par une distribution de charge surfacique, et qu'on note dorénavant $\psi_c(\mathbf{r})$. Introduisons la décomposition[✶]

$$\begin{aligned} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{r} \sum_{n=0}^{+\infty} \left(\frac{R}{r}\right)^n & \left[P_n(\cos \theta) P_n(\cos \theta') \right. \\ & \left. + 2 \sum_{m=1}^n \frac{(n-m)!}{(n+m)!} P_n^m(\cos \theta) P_n^m(\cos \theta') \cos(m(\varphi - \varphi')) \right] \end{aligned} \quad (2.91)$$

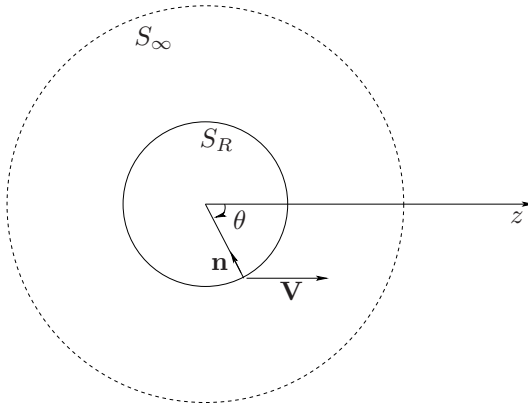


FIG. 2.13 – Boule de rayon R (délimitée par la sphère S_R) se déplaçant à la vitesse constante $\mathbf{V}$ selon l'axe des z dans un fluide. La surface S_∞ est une paroi fictive sphérique à l'infini.

pour $\mathbf{r}' \in S_R$, où P_n sont les polynômes de Legendre et P_n^m les fonctions de Legendre associées.

Comme

$$d\Sigma' = R^2 d\Omega' = R^2 \sin \theta' d\theta' d\varphi',$$

l'intégration en φ' sur $[0, 2\pi]$ des termes en $\cos(m(\varphi - \varphi'))$ donne zéro. Par ailleurs, comme $\cos \theta' = P_1(\cos \theta')$, l'intégration en $\cos \theta'$ sur $[-1, 1]$ est immédiate en vertu de l'orthogonalité de P_1 et P_n pour $n \neq 1$.

✱ **Commentaire 2.2.2.** La relation (2.91) provient de la décomposition de la fonction de Green $G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = 1/(4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)$ en harmoniques sphériques, avec $r' = R < r$. Elle peut être facilement obtenue à partir du résultat (2.128), p. 132 de l'exercice 2.8. Par ailleurs, l'annexe G contient des rappels sur les polynômes de Legendre.

Il vient finalement

$$\psi_c(\mathbf{r}) = -\frac{VR^3}{3r^2} \cos \theta. \quad (2.92)$$

Pour effectuer simplement la seconde intégrale, notée désormais $\psi_d(\mathbf{r})$, remarquons que celle-ci est analogue au potentiel électrostatique créé par une distribution surfacique de dipôle, comme déjà commenté dans la section 2.1.3. Il est alors particulièrement avantageux de concevoir chaque dipôle élémentaire strictement localisé comme la limite d'un dipôle étendu suivant $\mathbf{n}'$, constitué de deux charges superficielles opposées, i.e. :

$$\mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}} G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \lim_{\delta \rightarrow 0^+} (2\delta)^{-1} [G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}' + \delta \mathbf{n}'|) - G_\infty(|\mathbf{r} - \mathbf{r}' - \delta \mathbf{n}'|)].$$

En insérant cette identité dans l'expression de $\psi_d(\mathbf{r})$, nous obtenons

$$\begin{aligned} \psi_d(\mathbf{r}) = R^2 \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \frac{1}{2\delta} \left[\int_{-1}^1 d(\cos \theta') \psi(R, \cos \theta') \int_0^{2\pi} d\varphi' G_\infty(|\mathbf{r} + (R + \delta)\mathbf{n}'|) \right. \\ \left. - \int_{-1}^1 d(\cos \theta') \psi(R, \cos \theta') \int_0^{2\pi} d\varphi' G_\infty(|\mathbf{r} + (R - \delta)\mathbf{n}'|) \right]. \end{aligned}$$

Chacune de ces intégrales, pour une valeur finie de δ , est du même type que celle définissant $\psi_c(\mathbf{r})$, et elle est donc aisément calculée par la même méthode basée sur la décomposition (2.91). Après passage à la limite $\delta \rightarrow 0^+$, nous trouvons

$$\psi_d(\mathbf{r}) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^{+\infty} n(R/r)^{n+1} P_n(\cos \theta) \int_{-1}^1 d(\cos \theta') \psi(R, \cos \theta') P_n(\cos \theta'). \quad (2.93)$$

Résolution de l'équation intégrale. En remplaçant $\psi_c(\mathbf{r})$ et $\psi_d(\mathbf{r})$ par les formules respectives (2.92) et (2.93) dans

$$\psi(\mathbf{r}) = \psi_c(\mathbf{r}) + \psi_d(\mathbf{r}) ,$$

nous obtenons une expression valable de $\psi(\mathbf{r})$ en tout point $\mathbf{r}$ du domaine, qui ne dépend que de $\psi(R, \cos \theta')$ sur la surface S_R . Nous en déduisons une expression analogue pour $\nabla \psi$. Son insertion dans la condition de bord $\mathbf{n} \cdot \nabla \psi = -V \cos \theta$ en $r = R$, permet de déterminer la décomposition unique de $\psi(R, \cos \theta')$ sur la base orthogonale des $P_n(\cos \theta')$. En utilisant de nouveau $P_1(\cos \theta') = \cos \theta'$, nous trouvons

$$\psi(R, \cos \theta') = -\frac{VR}{2} \cos \theta' .$$

La formule (2.93) de $\psi_d(\mathbf{r})$ ne contient alors plus que le terme $n = 1$, ce qui donne en définitive

$$\boxed{\psi(r, \theta) = -\frac{VR^3 \cos \theta}{2r^2}} . \quad (2.94)$$

Nous vérifions que le potentiel $\psi(\mathbf{r})$ décroît bien suffisamment vite à l'infini, ce qui justifie *a posteriori* l'omission de la contribution de la surface fictive S_∞ dans la formule (2.90). Notons que $\psi(\mathbf{r})$ présente une structure dipolaire analogue à celle du potentiel électrostatique créé par une distribution de charge localisée de type dipôle.

Le champ de vitesse dans le référentiel lié à la boule est finalement obtenu en injectant la formule (2.94) dans

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}) = -\mathbf{V} + \nabla \psi(\mathbf{r}) .$$

Il est représenté sur la figure 2.14. Pour la sphère supraconductrice soumise à l'application d'un faible champ magnétique homogène, on retrouve les lignes de champ magnétique caractéristiques de l'effet Meissner.

Interprétation

Cet exemple illustre bien l'intérêt de la fonction de Green du système infini pour la résolution de problèmes avec des bord. Comme cette fonction de Green est proportionnelle au potentiel de Coulomb créé par une charge ponctuelle dans le vide, les contributions surfaciques admettent des interprétations électrostatiques très fructueuses. Cela dit, dans le cas présent sans source $\rho(\mathbf{r}) = 0$, une résolution directe de l'équation de Laplace, sans utiliser des fonctions de Green, est également possible comme brièvement décrit ci-dessous.

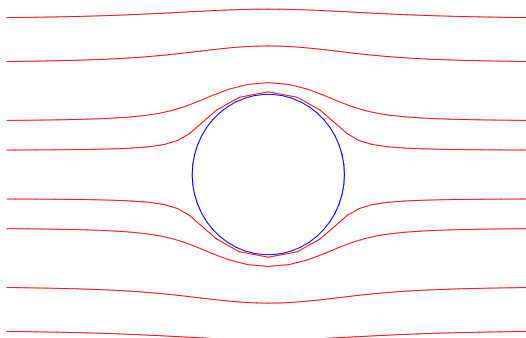


FIG. 2.14 – Champ de vitesse du fluide dans le référentiel lié à la boule.

Résolution par décomposition en harmoniques sphériques. Le champ $\psi(\mathbf{r})$, solution de l'équation de Laplace, est une fonction harmonique. De plus, il ne dépend que de r et de θ , par suite de la symétrie cylindrique du problème. Sa forme la plus générale peut donc s'écrire comme une combinaison linéaire infinie d'harmoniques sphériques¹⁹

$$\psi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{+\infty} (A_l r^l + B_l r^{-l-1}) P_l(\cos \theta) .$$

La condition de bord à l'infini impose $A_l = 0$ pour tout $l \neq 0$. Comme la vitesse est le gradient de ψ , nous pouvons fixer la constante $A_0 = 0$. La condition de bord sur S_R s'écrit alors

$$\sum_l (l+1) B_l R^{-l-2} P_l(\cos \theta) = -V \cos \theta .$$

Comme les P_l forment une base orthogonale, et comme $P_1(\cos \theta) = \cos \theta$, il vient $B_l = 0$ pour tout $l \neq 1$ et $B_1 = -VR^3/2$. On retrouve alors bien l'expression (2.94) de $\psi(\mathbf{r})$ obtenue précédemment. Dans les deux méthodes présentées, les propriétés des polynômes de Legendre $P_l(\cos \theta)$ constituent la clé de la résolution explicite du problème.

2.2.3 Densité d'états d'une particule quantique

Présentation

Comme exposé dans la partie générale de ce chapitre, la connaissance du spectre des opérateurs en jeu donne accès aux fonctions de Green. Inversement, un calcul direct des fonctions de Green peut permettre de déterminer

19. L'annexe G contient des rappels sur les harmoniques sphériques.

des propriétés spectrales. Ce point de vue inverse va être illustré dans cet exemple de mécanique quantique, où le formalisme des fonctions de Green fournit des informations très utiles sur le spectre du Hamiltonien, notamment en physique de la matière condensée.

Afin de fixer les idées, considérons une particule quantique de Hamiltonien

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) ,$$

enfermée dans un domaine $\mathcal{D}$. Une fonction propre $\psi_n(\mathbf{r})$ de H de valeur propre E_n est solution de l'EDP

$$[H - E_n]\psi_n(\mathbf{r}) = 0 , \quad (2.95)$$

avec des C.L. de Dirichlet homogènes sur la frontière $\partial\mathcal{D}$ de la boîte. Cette équation est de la forme générale (2.72), p. 100, avec $\mathcal{O} = H$, $\lambda = -E_n$ et $\rho(\mathbf{r}) = 0$. Pour cette valeur de λ , l'opérateur $[\lambda + H]$ ne saurait être inversible : autrement $\psi_n(\mathbf{r})$ serait identiquement nulle, car la fonction nulle est bien solution de l'EDP (2.95) avec les bonnes C.L. ! Par conséquent, nous pouvons annoncer que $\lambda = -E_n$ doit être une singularité de la fonction de Green $G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ associée à la résolvante $[\lambda + H]^{-1}$. Nous allons d'abord expliciter la nature de cette singularité, puis montrer comment en inférer la densité d'états de la particule. Ensuite, nous aborderons deux exemples unidimensionnels. Cette seconde étape servira de laboratoire pour appliquer certaines techniques générales.

Étude et résolution

La représentation spectrale (2.77) de $G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ s'écrit ici

$$G_\lambda(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{r})\psi_n^*(\mathbf{r}')}{\lambda + E_n} . \quad (2.96)$$

Clairement, $\lambda = -E_n$ apparaît bien comme un pôle simple de $G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$, conçue comme une fonction analytique de la variable complexe λ . Le résidu de ce pôle se réduit au produit $\psi_n(\mathbf{r})\psi_n^*(\mathbf{r}')$, ou bien à la somme de tels produits si l'énergie propre E_n est dégénérée. Ainsi, la connaissance *a priori* de $G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ dans le plan complexe en λ , donne accès au spectre de H par identification des positions et résidus des pôles simples sur l'axe réel.

Formule de la densité d'état. En application des considérations précédentes, montrons comment le comportement de $G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}' = \mathbf{r})$ lorsque λ s'approche de l'axe réel, permet de déterminer la densité d'états $\rho(E)$ définie par

$$\rho(E) = \text{Tr}\{\delta(H - E \mathcal{I})\} = \sum_n \delta(E_n - E),$$

où $\mathcal{I}$ est l'identité et où la seconde égalité correspond à l'expression de cette trace dans la base propre $\{\psi_n\}$ du Hamiltonien.

Posons $\lambda = -E + i\epsilon$ avec $\epsilon > 0$, et définissons

$$G_E^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} G_{-E+i\epsilon}(\mathbf{r}; \mathbf{r}).$$

En vertu de la relation (A.1), p. 303,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{E_n - E + i\epsilon} = \text{PP} \left(\frac{1}{E_n - E} \right) - i\pi \delta(E_n - E),$$

la représentation spectrale (2.96) devient dans la limite considérée

$$G_E^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}) = \text{PP} \left(\sum_n \frac{|\psi_n(\mathbf{r})|^2}{E_n - E} \right) - i\pi \sum_n |\psi_n(\mathbf{r})|^2 \delta(E_n - E). \quad (2.97)$$

Prenons la partie imaginaire membre à membre de cette égalité. Comme le premier terme dans le membre de droite de l'équation (2.97) est réel, seul le second terme contribue. Par ailleurs, après intégration sur $\mathbf{r}$ dans le domaine $\mathcal{D}$, la somme sur n se réduit à $\rho(E)$ par suite de la normalisation des fonctions propres $\psi_n(\mathbf{r})$. Nous en déduisons la formule

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} \, \text{Im} [G_E^+(\mathbf{r}; \mathbf{r})]. \quad (2.98)$$

Notons qu'il est aussi possible de définir $G_E^-(\mathbf{r}; \mathbf{r})$ en prenant la limite de $G_{-E+i\epsilon}(\mathbf{r}; \mathbf{r})$ quand $\epsilon \rightarrow 0^-$. On obtient alors une formule analogue à (2.98) exprimant $\rho(E)$ en termes de $G_E^-(\mathbf{r}; \mathbf{r})$, avec un préfacteur $1/\pi$ à la place de $-1/\pi$. Ceci implique que la partie de l'axe réel correspondant à la partie continue du spectre, est nécessairement une coupure pour $G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r})$. En effet, celle-ci y est discontinue car $G_E^+(\mathbf{r}; \mathbf{r})$ et $G_E^-(\mathbf{r}; \mathbf{r})$ sont de signe opposés.

Particule libre à une dimension. Considérons une particule libre sur une droite infinie, dont le Hamiltonien H_0 est simplement donné par

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2}.$$

Déterminons la fonction de Green $G_\lambda(x; x')$ à partir de l'équation différentielle ordinaire

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \lambda \right] G_\lambda(x; x') = \delta(x - x') \quad (2.99)$$

avec les C.L. $G_\lambda(\pm\infty; x') = 0$. Cette équation est de type Helmholtz à une dimension avec un paramètre complexe. Similairement au calcul menant à la

formule (2.66), p. 96, il est commode de procéder à une transformation de Fourier. Nous obtenons ainsi

$$G_\lambda(x; x') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{ik(x-x')}}{\lambda + \hbar^2 k^2 / (2m)} . \quad (2.100)$$

Dans cette formule, l'intégrant conçu comme une fonction analytique de la variable k , a deux pôles simples en $k_\pm(\lambda) = \pm(-2m\lambda/\hbar^2)^{1/2}$. La fonction $(-Z)^{1/2}$ est définie ici par le choix de détermination

$$(-Z)^{1/2} = \sqrt{|Z|} e^{i(\arg Z + \pi)/2}$$

avec une coupure sur le demi-axe réel négatif et $\arg Z \in]-\pi, \pi[$. Si $x - x'$ est positif, il est habile de compléter l'axe réel d'intégration sur k par un grand demi-cercle dans le demi-plan complexe supérieur. En effet, l'intégrant satisfait alors au lemme de Jordan sur ce demi-cercle, de sorte que l'application du théorème de Cauchy au contour fermé correspondant, fait seulement intervenir le pôle $k_+(\lambda)$. De même, si $x - x'$ est négatif, en bouclant dans le demi-plan complexe inférieur maintenant, seul le pôle $k_-(\lambda)$ contribue. En définitive, il vient

$$G_\lambda(x; x') = i \left(\frac{-m}{2\hbar^2 \lambda} \right)^{1/2} \exp[i|x - x'|(-2m\lambda/\hbar^2)^{1/2}], \quad (2.101)$$

qui peut être vue comme le prolongement analytique de la formule (2.66).

Quand $\lambda = -E + i\epsilon$ s'approche du demi-axe réel positif, que ce soit par au dessus ou par en dessous, $G_\lambda(x; x')$ tend vers la même valeur purement réelle

$$G_E^+(x; x') = G_E^-(x; x') = \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2 |E|}} e^{-|x-x'| \sqrt{2m|E|/\hbar^2}} \text{ pour } E < 0 . \quad (2.102)$$

L'application de la formule (2.98) donne bien alors $\rho(E) = 0$ pour $E < 0$. Par contre, quand $\lambda = -E + i\epsilon$ s'approche du demi-axe réel négatif, nous trouvons

$$G_E^\pm(x; x') = \mp i \sqrt{\frac{m}{2\hbar^2 E}} e^{\mp i|x-x'| \sqrt{2mE/\hbar^2}} \text{ pour } E > 0 . \quad (2.103)$$

Ces deux valeurs étant complexes conjuguées, $G_\lambda(x; x')$ n'est pas continue à la traversée du demi-axe réel négatif, qui est en fait une coupure partant du point de branchement $\lambda = 0$, en accord avec le continuum de valeurs propres E_n positives.

L'application brutale de la formule (2.98) conduit à une densité d'états infinie pour $E > 0$ car $G_\lambda(x; x)$ est une constante. Cette divergence est simplement due au caractère infini du domaine considéré. On peut reprendre cette étude dans un segment de longueur L . Alors, comme déjà remarqué pour

l'opérateur de Helmholtz à une dimension p. 89, les effets de bord deviennent négligeables quand L devient suffisamment grand. L'expression (2.101) est asymptotiquement correcte loin des bords, de sorte que la formule (2.98) donne pour $E > 0$

$$\rho(E) \simeq L \sqrt{\frac{m}{2\pi^2 \hbar^2 E}} \text{ quand } L \rightarrow \infty. \quad (2.104)$$

Nous retrouvons ainsi l'expression bien connue, qu'on peut obtenir directement par un simple comptage basé sur la quantification $E_n = n^2 \pi^2 \hbar^2 / (2mL^2)$ des énergies propres.

Particule dans un puits localisé. Soumettons la particule précédente au potentiel attractif $V(x) = -U\delta(x)$ avec $U > 0$, son Hamiltonien devenant

$$H = H_0 + V(x) = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + V(x).$$

Après avoir considéré le cas du spectre continu de H_0 , nous allons illustrer maintenant comment la détermination de la fonction de Green $G_\lambda(x; x')$ associée à $[\lambda + H]^{-1}$, permet aussi d'accéder à la partie discrète du spectre de H . Dorénavant, nous noterons $G_\lambda^{(0)}(x; x')$ la fonction de Green précédente associée à $[\lambda + H_0]^{-1}$.

Partons de l'identité (2.80) démontrée p. 103, qui s'écrit ici

$$G_\lambda(x; x') = G_\lambda^{(0)}(x; x') - \int_{-\infty}^{\infty} dx'' G_\lambda^{(0)}(x; x'') V(x'') G_\lambda(x''; x').$$

Comme $V(x'') = -U\delta(x'')$, cette équation intégrale pour $G_\lambda(x; x')$ prend la forme simple

$$G_\lambda(x; x') = G_\lambda^{(0)}(x; x') + U G_\lambda^{(0)}(x; 0) G_\lambda(0; x'). \quad (2.105)$$

En posant $x = 0$ dans cette relation, nous obtenons immédiatement $G_\lambda(0; x')$ en résolvant une équation algébrique élémentaire. En reportant la valeur trouvée dans la formule (2.105), nous trouvons finalement

$$G_\lambda(x; x') = G_\lambda^{(0)}(x; x') + \frac{U G_\lambda^{(0)}(x; 0) G_\lambda^{(0)}(0; x')}{1 - iU [(-m/(2\hbar^2 \lambda))]^{1/2}}, \quad (2.106)$$

avec la fonction de Green libre $G_\lambda^{(0)}(x; x')$ donnée par la formule (2.101). Ceci achève le calcul, exact et explicite, de $G_\lambda(x; x')$.

Intéressons-nous aux singularités de l'expression (2.106). Clairement, le demi-axe réel négatif en λ reste une coupure pour $G_\lambda(x; x')$, puisque c'en est une pour $G_\lambda^{(0)}(x; x')$. Par conséquent, le spectre de H comprend une partie

continue d'énergie $E > 0$, comme celui de H_0 . Pour λ réel positif, $G_\lambda^{(0)}(x; x')$ est bien analytique. En revanche, par suite de la présence du dénominateur

$$1 - iU \left((-m/(2\hbar^2\lambda)) \right)^{1/2}$$

dans la formule (2.106), il apparaît un pôle simple de $G_\lambda(x; x')$ pour la valeur λ_P qui annule ce dénominateur, à savoir

$$\lambda_P = \frac{mU^2}{2\hbar^2} . \quad (2.107)$$

Ce pôle simple isolé correspond à un état propre localisé d'énergie $E_0 = -\lambda_P = -mU^2/(2\hbar^2)$: c'est l'état fondamental de H , qui peut bien sûr être obtenu par une résolution directe de l'équation aux valeurs propres. Le lecteur pourra vérifier, en utilisant les formules (2.102) pour $G_{\lambda_P}^{(0)}(x; 0)$ et $G_{\lambda_P}^{(0)}(0; x')$, que le résidu du pôle λ_P redonne bien le produit $\psi_0(x)\psi_0^*(x')$.

Interprétation

Cet exemple simple illustre les mécanismes à l'œuvre dans la relation fondamentale entre les propriétés analytiques de la fonction de Green associée à la résolvante d'une part, et les propriétés spectrales du Hamiltonien d'autre part. Cette relation prend tout son intérêt dans des situations où une résolution directe de l'équation de Schrödinger n'est pas possible. C'est le cas des systèmes dits désordonnés, une particule quantique étant soumise à un potentiel dépendant d'un ou plusieurs paramètres aléatoires. C'est aussi le cas dans le cadre du problème à N corps, où il est utile d'étudier le spectre d'une particule habillée par les interactions avec ses consœurs à partir de la fonction de Green réduite à un corps²⁰.

À propos des développements perturbatifs. En général, un calcul exact de la fonction de Green reste évidemment très difficile. Il peut être alors bienvenu de procéder au développement perturbatif décrit dans la première partie de ce chapitre, en choisissant de plus judicieusement la fonction de Green de référence. Soulignons cependant que ces développements perturbatifs peuvent manquer un effet essentiel. Par exemple, dans le cas du puits de potentiel en δ traité précédemment, le développement perturbatif de $G_\lambda(x; x')$ en puissances de U ne capture pas la singularité en λ_P . En effet, ce développement donne par exemple, au premier ordre en U ,

$$G_\lambda(x; x') \simeq G_\lambda^{(0)}(x; x') + U G_\lambda^{(0)}(x; 0) G_\lambda^{(0)}(0; x')$$

de sorte que l'état fondamental localisé reste invisible, cette propriété restant valable à un ordre fini de la série de perturbation ! Par contre, notons que l'identité (2.80) peut fournir des informations non-perturbatives plus fiables.

20. Voir aussi le commentaire p. 171.

2.2.4 Diffusion par un potentiel répulsif

Présentation

Le formalisme de la fonction de Green est très utile aussi dans la théorie de la diffusion en mécanique quantique. Considérons une particule soumise à un potentiel répulsif à courte portée $V(\mathbf{r})$ produit par un centre diffuseur. Classiquement, la problématique de la diffusion consiste à étudier la déviation de la trajectoire de la particule par ce centre, lorsque celle-ci arrive de l'infini avec une vitesse initiale $\mathbf{v}_0$. En mécanique quantique, il existe une formulation dynamique analogue de la diffusion, que nous présentons à la fin de cette section. Il se trouve qu'il en existe également une formulation stationnaire, qui consiste à chercher les fonctions propres du Hamiltonien

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) . \quad (2.108)$$

De plus, on suppose que le potentiel diffuseur $V(\mathbf{r})$ est suffisamment faible, de sorte que ces fonctions propres sont déterminées perturbativement par rapport aux ondes planes, fonctions propres du Hamiltonien libre

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta .$$

C'est ce point de vue que nous développons dans un premier temps.

Soit $\psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r})$ l'onde plane

$$\psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) = \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} ,$$

fonction propre de H_0 avec l'énergie $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2\mathbf{k}^2/(2m)$. Comme $V(\mathbf{r})$ est répulsif et décroît à l'infini, il existe une fonction propre $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ de H avec la même énergie propre $E_{\mathbf{k}} = \hbar^2\mathbf{k}^2/(2m)$. En posant

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}) + \delta\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) ,$$

nous obtenons l'équation exacte

$$(H_0 - E_{\mathbf{k}})\delta\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -V(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) . \quad (2.109)$$

Comme déjà remarqué dans la section 2.2.3, ce type d'EDP n'est pas immédiatement soluble en termes de fonctions de Green, car la résolvante correspondante $[H_0 - E_{\mathbf{k}}]^{-1}$ est singulière! Cela dit, comme nous allons le voir, l'introduction de la résolvante $[H_0 + \lambda]^{-1}$ permet de construire le développement perturbatif cherché de la déviation $\delta\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$.

Étude et résolution

La méthode repose sur l'introduction de l'EDP

$$(H_0 + \lambda)\phi_\lambda(\mathbf{r}) = -V(\mathbf{r})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) , \quad (2.110)$$

où λ est un paramètre complexe, avec $\text{Im}(\lambda) \neq 0$ de sorte que la fonction de Green $G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ associée à la résolvante $[H_0 + \lambda]^{-1}$ soit bien définie. Nous établissons rapidement l'expression de $G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ en nous inspirant du calcul unidimensionnel p. 115. Puis nous montrons comment un processus de limite adéquat où $\lambda \rightarrow -E_{\mathbf{k}}$ permet d'obtenir $\delta\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ à partir de l'expression de $\phi_\lambda(\mathbf{r})$ solution de l'EDP (2.110). Ceci engendre la série perturbative recherchée de $\delta\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ en puissances du potentiel, dont nous calculons explicitement le premier terme à grande distance du centre diffuseur.

Calcul de la fonction de Green libre. La fonction de Green $G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ est solution de l'EDP de type Helmholtz avec paramètre complexe,

$$\left[-\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + \lambda\right]G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \quad (2.111)$$

avec les C.L. de Dirichlet homogènes à l'infini. La résolution peut être effectuée par une transformation de Fourier, comme dans le calcul menant à la formule (2.48), p. 86. Nous obtenons ainsi une expression très similaire

$$G_\lambda^{(0)}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = \frac{me^{i|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|(-2m\lambda/\hbar^2)^{1/2}}}{2\pi\hbar^2|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} . \quad (2.112)$$

Comme dans le cas unidimensionnel, la fonction $(-Z)^{1/2}$ est définie par le choix de détermination

$$(-Z)^{1/2} = \sqrt{|Z|}e^{i(\arg Z + \pi)/2}$$

avec une coupure sur le demi-axe réel négatif et $\arg Z \in]-\pi, \pi[$.

Processus de limite. Le champ auxiliaire $\phi_\lambda(\mathbf{r})$ solution de l'EDP (2.110), est simplement donné par la formule de superposition

$$\phi_\lambda(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r}' G_\lambda^{(0)}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) V(\mathbf{r}') \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')$$

valable pour le système infini²¹. À ce niveau, il est tentant de prendre la limite $\lambda \rightarrow -E_{\mathbf{k}}$, car les EDP (2.110) et (2.109) devenant alors identiques, la limite

21. En toute rigueur, il faudrait travailler dans un grand domaine, puis envoyer les bords à l'infini. De nouveau, nous nous affranchissons de cette étape en raisonnant directement dans le système infini, sans nous préoccuper des C.L. Ici, cette procédure est ultimement bien légitime.

de $\phi_\lambda(\mathbf{r})$ devrait donner $\delta\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$! Cela dit, le point $-E_{\mathbf{k}}$ est singulier car le demi-axe réel négatif est une coupure pour $G_\lambda^{(0)}(|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|)$. Autrement dit, nous n'obtiendrons pas le même résultat suivant que l'on arrive au-dessus ou bien en dessous de la coupure. Ici, nous prenons la limite avec $\text{Im}(\lambda) < 0$, étant entendu que nous justifierons ce choix à partir de l'analyse dynamique, et que nous commenterons brièvement la signification de l'autre choix $\text{Im}(\lambda) > 0$. Nous obtenons ainsi l'équation intégrale

$$\delta\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') [\psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r}') + \delta\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}')]. \quad (2.113)$$

Approximation de Born. En itérant l'équation intégrale (2.113), nous engendrons le développement perturbatif de $\delta\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ en puissances du potentiel. À l'approximation de Born, qui consiste à ne conserver que le premier terme, nous trouvons

$$\delta\psi_{\mathbf{k}}^B(\mathbf{r}) = -\frac{m}{(2\pi)^{5/2}\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} V(\mathbf{r}') e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} . \quad (2.114)$$

Il est intéressant d'étudier la structure de cette déviation à grande distance r du centre diffuseur. Les contributions dominantes à l'intégrale (2.114) proviennent des distances finies $|\mathbf{r}'|$ d'ordre la portée du potentiel V , qui sont très petites devant r . Nous pouvons alors développer la phase

$$k|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = kr - k\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'/r + O(1/r),$$

ce qui conduit à la formule asymptotique

$$\psi_{\mathbf{k}}^B(\mathbf{r}) \simeq \frac{1}{(2\pi)^{3/2}} \left[e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} + f_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{r}}) \frac{e^{ikr}}{r} \right] \text{ quand } r \rightarrow \infty, \quad (2.115)$$

avec

$$f_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{r}}) = -\frac{m}{2\pi\hbar^2} \int d\mathbf{r}' \exp[i(\mathbf{k} - k\hat{\mathbf{r}}) \cdot \mathbf{r}'] V(\mathbf{r}'), \quad (2.116)$$

$\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$ étant le vecteur unitaire suivant $\mathbf{r}$. D'après ces formules, nous voyons que la déviation à l'onde plane est une onde sphérique anisotrope, dont l'amplitude s'éteint en $1/r$ à l'infini. Cette structure est bien celle de la fonction d'onde exacte à grande distance, mais le facteur d'amplitude anisotrope $f_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{r}})$ obtenu par l'approximation de Born n'est pas exact en général à cause des diffusions multiples.

Interprétation

Il est instructif de montrer qu'une approche dynamique de la diffusion, plus en rapport avec la situation expérimentale, redonne bien les résultats obtenus par la méthode purement stationnaire. Nous résumons brièvement cette approche, puis nous concluons par un calcul explicite pour le potentiel de Yukawa à titre d'illustration.

Approche dynamique perturbative. Afin de mimer le processus dynamique de diffusion, il est commode d'imaginer que la particule soit dans un état initial de fonction d'onde $\psi_{\mathbf{k}}^{(0)}(\mathbf{r})$ à $t_0 = -\infty$. Le potentiel $V(\mathbf{r})$ est alors enclenché par branchement adiabatique à $t_0 = -\infty$. Autrement dit, on soumet la particule au potentiel dépendant du temps $W(\mathbf{r}, t) = e^{\epsilon t} V(\mathbf{r})$. L'évolution de sa fonction d'onde peut alors être obtenue par les développements perturbatifs construits dans le chapitre 3. Leur ingrédient de base est la fonction de Green causale libre $G^{+(0)}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|; \tau)$. Nous invitons le lecteur à appliquer le développement (3.73), p. 176, en ne conservant que le terme du premier ordre en W . En prenant ensuite la limite $\epsilon \rightarrow 0^+$, il pourra vérifier explicitement

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \phi(\mathbf{r}, t) e^{iE_{\mathbf{k}}(t-t_0)/\hbar} = \psi_{\mathbf{k}}^B(\mathbf{r})$$

en utilisant l'identité fondamentale

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_0^{+\infty} d\tau G^{+(0)}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|; \tau) e^{-i(-E_{\mathbf{k}} - i\epsilon\hbar)\tau/\hbar} = -i\hbar \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} G_{-E_{\mathbf{k}} - i\epsilon\hbar}^{(0)}(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) .$$

Donc, la particule après diffusion par le potentiel $V(\mathbf{r})$ se trouve bien dans l'état propre d'énergie $E_{\mathbf{k}}$ du Hamiltonien H . De plus, si l'onde entrante est une onde plane se propageant suivant $\mathbf{k}$, l'onde sortante présente une composante diffusée de type onde sphérique sortante. Ceci achève la justification du choix de signe de $\text{Im}(\lambda)$ dans la méthode stationnaire : l'autre choix correspond à une onde sphérique entrante, qui n'est pas permise par la causalité.

Application au potentiel de Yukawa. Le potentiel répulsif de Yukawa est $V(\mathbf{r}) = Ue^{-\alpha r}/r$. L'amplitude anisotrope $f_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{r}})$ donnée par la formule (2.116) est simplement proportionnelle à la transformée de Fourier du potentiel $V(\mathbf{r})$. Ici, le calcul est évidemment identique à celui relatif à la fonction de Green de l'opérateur de Helmholtz. On obtient

$$f_{\mathbf{k}}(\hat{\mathbf{r}}) = \frac{-2mU}{\hbar^2} \frac{1}{4k^2 \sin^2(\theta/2) + \alpha^2}$$

où θ est l'angle entre $\mathbf{k}$ et $\mathbf{r}$. La section efficace différentielle de diffusion est aisément obtenue à partir de cette expression. Soulignons que, dans la limite $\alpha \rightarrow 0^+$, on retrouve la formule exacte de la section efficace de Rutherford pour le potentiel de Coulomb. Celle-ci peut être obtenue en cherchant les solutions stationnaires de l'équation de Schrödinger pour des énergies positives. De plus, elle coïncide avec la valeur classique.

2.2.5 Modélisation simple du vent soufflant sur un mur

Présentation

Cet exemple est une mise en pratique de la méthode basée sur les transformations conformes à deux dimensions, et exposée p. 89-95. Imaginons le vent

soufflant sur une plaine dénudée, avec pour seul abri possible un mur... Nous aimerions bien savoir quel côté du mur est le meilleur refuge ! Pour répondre à cette question, nous allons utiliser un modèle simplifié, mais représentatif de la situation.

Considérons le problème bidimensionnel suivant : un fluide incompressible coule de manière irrotationnelle dans un domaine $\mathcal{D}$ formé par le demi-plan $\mathbb{C}^+$, mais un mur vertical de hauteur a se trouve en $x = 0$. À l'infini, la vitesse du fluide est donnée par $\mathbf{u} = u_0 \mathbf{e}_x$. Comme montré au début du §2.2.2, il existe alors un potentiel $\phi(\mathbf{r})$ dont dérive la vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{r}) = \nabla\phi(\mathbf{r})$. De plus, ce potentiel est solution de l'équation de Laplace

$$\Delta\phi = 0$$

dans $\mathcal{D}$. Pour spécifier les conditions au bord que doit satisfaire ϕ , nous introduisons trois parois fictives à l'infini : Σ_h est horizontale et les deux parois $\Sigma_v^\pm$ sont verticales (voir figure 2.15). Les conditions au bord sont donc de type Neumann,

$$\mathbf{n} \cdot \nabla\phi = 0 \text{ sur le sol, le mur et } \Sigma_h ; \quad \mathbf{n} \cdot \nabla\phi = u_0 \text{ sur } \Sigma_v.$$

Étude et résolution

Comme nous l'avons vu à la page 94, il existe une fonction analytique $\mathcal{A}$ de la variable $z = x + iy$,

$$\mathcal{A} = \phi + i\psi,$$

dont ϕ est la partie réelle. D'abord, nous implémentons les conditions de bord en termes de $\mathcal{A}$. Puis nous effectuons une transformation conforme qui permet

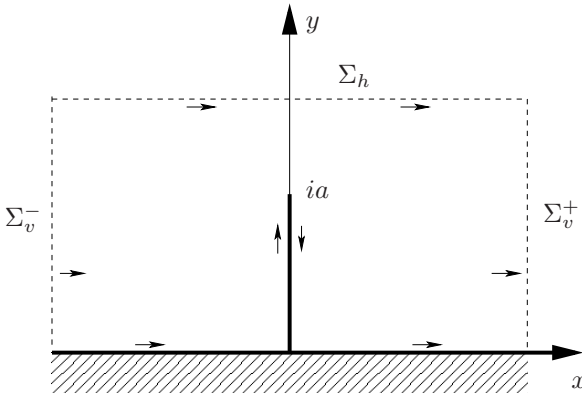


FIG. 2.15 – Géométrie du problème : le mur de hauteur a est en $x = 0$; Σ_h et $\Sigma_v^\pm$ sont des parois fictives à l'infini.

de reformuler le problème dans un domaine plus simple, et de déterminer alors le champ de vitesse dans le domaine $\mathcal{D}$ originel.

Réécriture des conditions aux limites. Par rapport à l'étude générale menée page 94, l'interprétation des conditions aux limites est ici plus simple. En effet, comme

$$u_x = \frac{\partial \phi}{\partial x} = \frac{\partial \psi}{\partial y} \quad \text{et} \quad u_y = \frac{\partial \phi}{\partial y} = -\frac{\partial \psi}{\partial x}, \quad (2.117)$$

en vertu des relations de Cauchy, la dérivée de $\mathcal{A}$ par rapport à z est simplement reliée au champ de vitesse,

$$\boxed{\mathcal{A}'(z) = u_x - iu_y.} \quad (2.118)$$

Les C.L. peuvent donc être réécrites sur $\mathcal{A}$ comme suit.

Montrons que sur le sol et de chaque côté du mur, *i.e.* respectivement pour $z = x$ et pour $z = 0^\pm + iy$ avec $0 \leq y \leq a$, il suffit d'imposer

$$\text{Im}[\mathcal{A}(z)] = \alpha \quad (2.119)$$

où α est une constante. En effet, comme $\text{Im} \mathcal{A} = \psi$, et que x varie avec $y = 0$ fixé sur le sol, la condition (2.119) implique donc

$$\frac{\partial \psi}{\partial x} = 0 \text{ pour } y = 0 \text{ et } x \neq 0.$$

Compte-tenu des relations de Cauchy (2.117), cela donne bien $u_y = 0$ sur le sol. Sur le mur, c'est par contre y qui varie à $x = 0^\pm$ fixé : la condition (2.119) implique maintenant $(\partial \psi / \partial y) = 0$, soit $u_x = 0$ en vertu des relations de Cauchy (2.117). Il est clair à ce niveau que la constante α apparaissant dans la condition (2.119) peut être fixée à zéro²². En résumé, on écrit donc sur le sol et sur le mur les C.L.

$$\boxed{\text{Im}[\mathcal{A}(z)] = 0 \quad \text{pour } z = x \text{ et pour } z = 0^\pm + iy \text{ avec } 0 \leq y \leq a.}$$

Ces C.L. sont complétées par les conditions sur les parois fictives verticales $\Sigma_v^\pm$ et horizontale Σ_h , qui s'écrivent de manière évidente comme

$$\boxed{\text{Re}[\mathcal{A}'(z)] = u_0 \quad \text{quand } x \rightarrow \pm\infty \quad ; \quad \text{Im}[\mathcal{A}'(z)] = 0 \quad \text{quand } y \rightarrow +\infty.}$$

²². C'est l'analogue de la remarque faite dans le cas général page 94. Cette possibilité provient de la liberté dans le choix de $\mathcal{A}$, à laquelle on peut ajouter une constante sans modifier le champ de vitesse.

Transformation conforme. Essayons maintenant de trouver une transformation conforme dont l'image du domaine $\mathcal{D}$ soit le demi-plan supérieur sans le mur. Pour cela, procédons par étapes avec trois transformations, dont nous pouvons visualiser les effets sur la figure 2.16. Dans la première transformation,

$$z \mapsto w = z^2,$$

le sol et le mur deviennent le demi-axe réel $[-a^2, +\infty[$. Ensuite, par la simple translation,

$$w \mapsto t = w + a^2,$$

l'image du demi-axe précédent devient $\mathbb{R}^+$. Finalement, la transformation

$$t \mapsto \tilde{z} = t^{1/2}$$

permet d'obtenir comme domaine final le demi-plan supérieur sans mur !

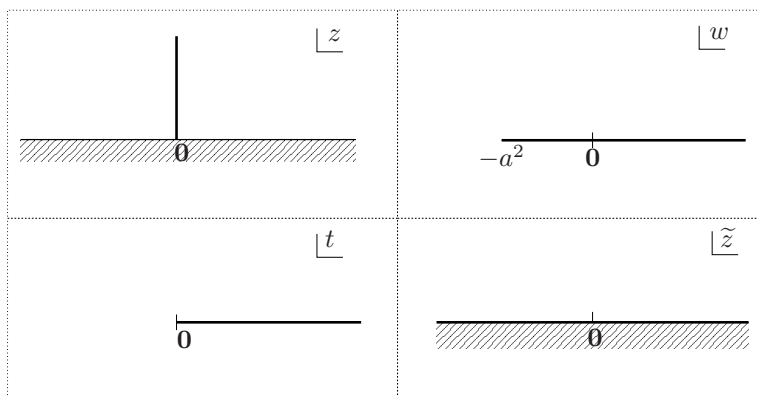


FIG. 2.16 – Visualisation des transformations conformes $z \rightarrow w \rightarrow t \rightarrow \tilde{z}$ successives.

La composition de toutes ces transformations est donc la fonction $\mathcal{F}(z)$ définie par

$$z \mapsto \tilde{z} = \mathcal{F}(z) = (z^2 + a^2)^{1/2}$$

avec les points de branchement $\pm ia$ et la coupure se réduisant au segment imaginaire pur $[-ia, ia]$. De plus, la détermination choisie est telle que²⁵

$$\mathcal{F}(x) = \sqrt{x^2 + a^2} \text{ si } x > 0$$

et

$$\mathcal{F}(x) = -\sqrt{x^2 + a^2} \text{ si } x < 0.$$

Noter que la partie de l'espace sous le sol et à l'intérieur (!) du mur d'épaisseur nulle, a bien son image par $\mathcal{F}(z)$ sous le nouveau sol horizontal. La partie vide où souffle le vent reste bien elle au-dessus de ce sol.

✱ **Commentaire 2.2.3.** Le changement de signe de $\mathcal{F}(x)$ est dû à la présence de la coupure $[-ia, ia]$ qui ne saurait être traversée. Pour passer de $x = 0^+$ à $x = 0^-$, il faut contourner cette coupure, en passant au-dessus du point de branchement ia par exemple. Le long d'un tel chemin, l'argument du nombre complexe $Z = z^2 + a^2$ tourne de 2π , de sorte que le facteur $e^{i \arg Z/2}$ qui définit la détermination change bien de signe.

Calcul du champ de vitesse. Le problème du demi-plan est élémentaire. La fonction analytique

$$\tilde{\mathcal{A}}(\tilde{z}) = u_0 \tilde{z},$$

satisfait évidemment les conditions au bord $\text{Im}[\tilde{\mathcal{A}}(\tilde{z})] = 0$ sur l'axe réel, et $(d\tilde{\mathcal{A}}/d\tilde{z}) = u_0$ sur les parois fictives. Nous obtenons ainsi la fonction analytique $\mathcal{A}(z)$ dans le domaine $\mathcal{D}$ originel,

$$\mathcal{A}(z) = \tilde{\mathcal{A}}[\mathcal{F}(z)] = u_0 (z^2 + a^2)^{1/2},$$

ainsi que sa dérivée qui nous donne le vecteur vitesse en tout point via

$$\mathcal{A}'(z) = u_0 \frac{z}{(z^2 + a^2)^{1/2}}$$

et l'équation (2.118). Nous pouvons maintenant analyser la forme du vecteur vitesse sur diverses surfaces, avec les résultats :

$$u_x = u_0 \frac{|x|}{\sqrt{x^2 + a^2}} \quad ; \quad u_y = 0$$

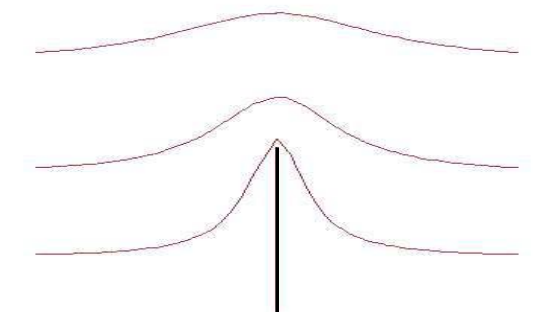
sur le sol,

$$u_x = 0 \quad ; \quad u_y = \pm u_0 \frac{y}{\sqrt{a^2 - y^2}}$$

sur les cotés gauche et droit du mur respectivement et

$$u_x = u_0 \frac{y}{\sqrt{y^2 - a^2}} \quad ; \quad u_y = 0$$

sur l'axe vertical $x = 0$ et avec $y > a$. Les lignes de champ de vitesse sont tracées sur la figure 2.17.

FIG. 2.17 – *Lignes de champ de la vitesse.*

Interprétation

Le profil du champ de vitesse montre qu'il est inutile de se réfugier derrière le mur pour se protéger du vent, puisqu'il souffle aussi fort en amont qu'en aval. Une autre observation importante concerne la singularité du champ de vitesse à l'extrémité du mur. C'est un effet de pointe qui donne lieu à des vitesses très grandes. Dans la réalité, pour un mur d'épaisseur finie, l'écoulement cessera d'être laminaire et deviendra turbulent pour des vitesses u_0 suffisamment grandes.

2.3 Exercices

■ Exercice 2.1. Fonction de Green G_∞ du Laplacien en 3d

Le but de cet exercice est de déterminer, à trois dimensions, et par une autre méthode que celle présentée page 78, la fonction de Green G_∞ du Laplacien qui s'annule à l'infini. Il s'agit donc de trouver la fonction $G_\infty(\mathbf{r})$ solution de

$$-\Delta G_\infty(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r}) \quad (2.120)$$

avec $G_\infty(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ quand $r \rightarrow \infty$

1. Il est rappelé que cette fonction G_∞ ne dépend que de $r = |\mathbf{r}|$. En déduire l'équation différentielle satisfaite par $G_\infty(r)$ pour $r \neq 0$.

2. Quelle est la solution la plus générale de cette équation différentielle qui soit compatible avec la condition aux limites en l'infini ?

3. Le raisonnement précédent permet de trouver la fonction $G_\infty(r)$ à un facteur près. Comment fixer ce facteur ? Retrouver ainsi la fonction de Green $G_\infty(r) = 1/(4\pi r)$.

Solution page 343.

■ Exercice 2.2. Fonction de Green G_∞ du Laplacien en dimension $d \geq 3$

Appliquer la méthode de l'exercice précédent pour déterminer en dimension $d \geq 3$ la fonction de Green $G_\infty(r)$ du Laplacien s'annulant à l'infini en fonction de $r = |\mathbf{r}|$ et de l'angle solide total Ω_d à d dimensions. Pour cela, utiliser le fait que le Laplacien de la fonction $G_\infty(r)$, qui ne dépend que de $r = |\mathbf{r}|$, s'écrit :

$$\Delta G_\infty = \frac{d-1}{r} \frac{dG_\infty}{dr} + \frac{d^2 G_\infty}{dr^2} = \frac{1}{r^{d-1}} \frac{d}{dr} \left(r^{d-1} \frac{dG_\infty}{dr} \right). \quad (2.121)$$

Solution page 343.

■ Exercice 2.3. Fonctions de Green du Laplacien en 1d et 2d

1. Vérifier explicitement que la fonction

$$G(x-x') = -\frac{|x-x'|}{2}$$

est une fonction de Green du Laplacien à une dimension. Cette vérification sera faite en appliquant une fonction test (qui s'annule à l'infini) à ΔG .

2. Même question pour le cas bi-dimensionnel et la fonction

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\frac{\ln(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|)}{2\pi}.$$

Il sera utile de se servir de l'expression (2.121) indiquée à l'exercice 2.2.

Solution page 344.

■ Exercice 2.4. Symétrie des fonctions de Green du Laplacien avec C.L. de Dirichlet homogènes

Montrer que les fonctions de Green du Laplacien avec C.L. de Dirichlet homogènes sont symétriques.

Solution page 345.

■ Exercice 2.5. Fonctions de Green de Neumann spéciales du Laplacien

Soit $G_{\bar{N}}$ une fonction de Green de Neumann spéciale du Laplacien dans un domaine $\mathcal{D}$ de bord $\partial\mathcal{D}$. Elle vérifie comme C.L.

$$\mathbf{n} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} G_{\bar{N}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = -\frac{1}{S}, \quad (2.122)$$

$$G_{\bar{N}}(\mathbf{r}_0; \mathbf{r}') = c(\mathbf{r}') \quad \forall \mathbf{r}' \in \mathcal{D}. \quad (2.123)$$

1. En utilisant la seconde formule de Green, montrer que

$$G_{\bar{N}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') - G_{\bar{N}}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) - F(\mathbf{r}')$$

et donner l'expression de F . En déduire que la fonction

$$\tilde{G}_{\bar{N}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = G_{\bar{N}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') + F(\mathbf{r}')$$

est une fonction de Green de Neumann spéciale symétrique.

2. $\phi(\mathbf{r}, t)$ est solution de l'équation de Laplace avec des C.L. de Neumann sur $\partial\mathcal{D}$. Vérifier que les expressions obtenues à partir de l'équation (2.39), page 81, soit avec $\tilde{G}_{\bar{N}}$, soit avec $G_{\bar{N}}$, coïncident.

Solution page 345.

■ Exercice 2.6. Règles de somme et résolvante

Soit G_λ la fonction de Green satisfaisant à l'équation

$$(\mathcal{O} + \lambda) G_\lambda(x; x') = \delta(x - x') \quad (2.124)$$

et à des conditions de Dirichlet homogènes en $x = 0$ et $x = 1$. Imaginons que l'opérateur $\mathcal{O}$ ait une base complète et orthonormée de fonctions propres $\psi_n(x)$ de valeurs propres λ_n satisfaisant les mêmes conditions de Dirichlet homogènes.

1. En utilisant la représentation spectrale de G_λ , exprimer

$$\int_0^1 \prod_{i=1}^m dy_i \, G_\lambda(y_1; y_2) G_\lambda(y_2; y_3) \cdots G_\lambda(y_{m-1}; y_m) G_\lambda(y_m; y_1)$$

en termes de λ , m et des λ_n .

2. Prenons pour $\mathcal{O}$ le Laplacien à une dimension, $\mathcal{O} = -(\partial^2/\partial x^2)$. Montrer que pour $\lambda = \omega^2\pi^2$ avec ω réel,

$$G_\lambda(x; x') = -\frac{\text{sh } \omega\pi x_{<}}{\omega\pi} \frac{\text{sh } \omega\pi(x_{>} - 1)}{\omega\pi}$$

avec $x_{<} = \inf(x, x')$ et $x_{>} = \sup(x, x')$.

3. Une base complète et orthonormée de fonctions propres de l'opérateur $\mathcal{O}$, et satisfaisant les conditions de Dirichlet homogènes en $x = 0$ et $x = 1$, est donnée par les fonctions $\psi_n(x) = \sqrt{2} \sin n\pi x$ pour $n \in \mathbb{N}^*$. Montrer alors la relation mathématique :

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2 + \omega^2} = \frac{1}{2\omega^2} (\omega\pi \coth(\omega\pi) - 1).$$

4. Obtenir aussi la forme explicite de $G_0(x; x')$ et en déduire que

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} = \frac{\pi^2}{6}.$$

Solution page 345.

■ Exercice 2.7. Plan conducteur

Dans cet exercice, nous reprenons la configuration électrostatique traitée dans l'exemple 2.2.1, page 104. Soit donc un plan conducteur placé en $x = 0$ et maintenu à un potentiel nul : nous nous proposons de calculer la fonction de Green de l'opérateur Laplacien, avec des C. L. de Dirichlet homogènes, G_{DH} , sans utiliser la méthode des images.

1. Soit $\hat{G}_{DH}(x; x'; \mathbf{k})$ la transformée de Fourier selon y et z de G_{DH} . Quels sont l'équation différentielle et les conditions aux limites satisfaites par $\hat{G}_{DH}$?

2. Calculer $\hat{G}_{DH}$ en utilisant par exemple la méthode de variation de la constante.

3. Effectuer alors la transformée de Fourier inverse en utilisant les coordonnées polaires et ensuite le théorème des résidus.

Solution page 346.

■ Exercice 2.8. Fonctions de Green du Laplacien en coordonnées sphériques

Nous nous proposons de déterminer l'expression, en coordonnées sphériques, de la fonction de Green du Laplacien G_∞ . Pour cela, écrivons, de manière générale, une fonction de Green G du Laplacien sous la forme :

$$G(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l g_{lm}(r; r') Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

où les Y_{lm} sont les harmoniques sphériques dont les propriétés sont rappelées dans l'annexe G.

1. Déterminer l'EDP satisfaite par $g_{lm}(r; r')$ en utilisant le résultat (G.3), page 329, pour réécrire $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ en termes des harmoniques sphériques. Que valent les solutions de l'équation homogène associée à cette EDP ?

2. Restreignons-nous dans un premier temps au volume compris entre les sphères concentriques de rayons a et $b > a$, et cherchons la fonction de Green $G_{a,b}$ satisfaisant des C.L. de Dirichlet homogènes. En utilisant le résultat (C.6), page 311, de la méthode de variation de la constante, montrer que

$$G_{a,b}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi)}{(2l+1) \left[1 - \left(\frac{a}{b}\right)^{2l+1}\right]} \left(r_{<}^l - \frac{a^{2l+1}}{r_{<}^{l+1}} \right) \left(\frac{1}{r_{>}^{l+1}} - \frac{r_{>}^l}{b^{2l+1}} \right) \quad (2.125)$$

avec

$$r_{<} = \min\{r, r'\} \text{ et } r_{>} = \max\{r, r'\}.$$

3. En déduire que la fonction de Green G_b pour la boule de rayon b et des C.L. de Dirichlet homogènes vaut

$$G_b(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(\frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} - \frac{(rr')^l}{b^{2l+1}} \right) \frac{Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi)}{(2l+1)}. \quad (2.126)$$

4. En déduire aussi que la fonction de Green G_a pour le domaine $r > a$ et des C.L. de Dirichlet homogènes vaut

$$G_a(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \left(\frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} - \frac{a^{2l+1}}{(rr')^{l+1}} \right) \frac{Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi)}{(2l+1)}. \quad (2.127)$$

5. Conclure alors en montrant que

$$\boxed{\frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \frac{r_{<}^l}{(2l+1)r_{>}^{l+1}} Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi).} \quad (2.128)$$

puis

$$\frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{r_{<}^l}{r_{>}^{l+1}} P_l(\cos \tilde{\theta}) \quad (2.129)$$

où $\tilde{\theta}$ est l'angle entre $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$.

Solution page 348.

■ Exercice 2.9. Charge ponctuelle dans une sphère conductrice

Cet exercice complète l'exercice 2.8 précédent. En effet, il y est proposé de partir cette fois de l'expression (2.128) de la fonction de Green du Laplacien $G_{\infty}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ pour déterminer, par la méthode des images, la fonction de Green G_a du Laplacien dans la boule de rayon a avec des C.L. de Dirichlet homogènes.

1. Obtenir la fonction de Green G_a en plaçant une charge fictive dans la même direction radiale que $\mathbf{r}'$ mais pour un rayon plus grand que a .

2. Obtenir de la même façon la fonction de Green avec conditions aux bord de Dirichlet homogènes dans le domaine formé par la demi-sphère $r < a$, $x > 0$.

3. En déduire la fonction de Green du demi-volume infini $x > 0$ avec les conditions de Dirichlet homogènes en prenant une limite appropriée.

Solution page 348.

■ Exercice 2.10. Charge ponctuelle et sphère diélectrique

Nous cherchons à déterminer le potentiel électrique $\phi(\mathbf{r})$ produit par une charge q ponctuelle située en $\mathbf{r}_0$ en présence d'une sphère diélectrique de rayon R , avec $R < r_0$, et dont le centre se situe en $r = 0$ (voir figure 2.18).

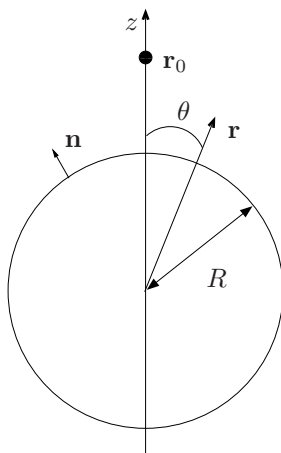


FIG. 2.18 – Sphère diélectrique de rayon R et charge ponctuelle en $\mathbf{r}_0$.

L'axe des z est choisi de sorte à ce qu'il passe par la position de la charge ponctuelle et le centre de la sphère. Nous avons donc un problème avec symétrie azimutale.

L'équation satisfaite par $\phi(\mathbf{r})$ est²³ $\Delta\phi = -q\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$. Les conditions au bord sont choisies de telle sorte que $\phi(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ lorsque $r \rightarrow \infty$. Les conditions de passage à la surface de la sphère sont données par

$$\phi(R^+, \theta) = \phi(R^-, \theta) \quad \text{et} \quad \mathbf{n} \cdot \nabla\phi(R^+, \theta) = \epsilon \mathbf{n} \cdot \nabla\phi(R^-, \theta)$$

où $\mathbf{n}$ est le vecteur normal à la sphère, ϵ est la permittivité relative de la sphère et $R^\pm$ est une notation abrégée pour désigner la limite $r \rightarrow R^\pm$.

1. Écrivons $\phi = \phi_0 + \psi$ où ϕ_0 correspond au potentiel en l'absence de la sphère. Indiquer l'équation différentielle et les conditions aux limites satisfaites par ψ . Donner, en coordonnées sphériques, à l'intérieur et à l'extérieur de la sphère, la forme générale des fonctions satisfaisant ces conditions.

2. Achever alors la détermination de ϕ en utilisant le résultat (2.129) de l'exercice 2.8 et les conditions de passage en $r = R$.

Solution page 349.

23. En prenant $\epsilon_0 = 1$.

■ Exercice 2.11. Fonction de Green G_∞ du Laplacien en coordonnées cylindriques

Le but de cet exercice est de déterminer l'expression de G_∞ en coordonnées cylindriques.

1. Montrer que

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{\rho} \delta(\rho - \rho') \frac{1}{2\pi^2} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\varphi - \varphi')} \int_0^{+\infty} dk \cos k(z - z') \quad (2.130)$$

où (ρ, z, φ) et (ρ', z', φ') sont les coordonnées cylindriques respectives de $\mathbf{r}$ et de $\mathbf{r}'$. Il est indiqué à ce propos que, pour des variables angulaires φ et φ' :

$$2\pi\delta(\varphi - \varphi') = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{im(\varphi - \varphi')}.$$

2. Soit $G_\infty(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ la fonction de Green du Laplacien s'annulant à l'infini. Posons :

$$G_\infty(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\varphi - \varphi')} \int_0^{+\infty} dk g_{mk}(\rho; \rho') \cos k(z - z').$$

Quelle est l'EDP satisfaite par g_{mk} ? Les solutions de l'EDP homogène associée à cette EDP correspondent aux fonctions de Bessel modifiées²⁴. Ainsi les fonctions de Bessel modifiées $I_m(k\rho)$ et $K_m(k\rho)$ sont deux solutions de Wronskien $-1/\rho$. De plus $I_m(x)$ est finie lorsque $x \rightarrow 0$ et $K_m(x) \rightarrow 0$ lorsque $x \rightarrow +\infty$. En étudiant d'abord le cas $\rho < \rho'$, montrer que

$$\frac{1}{4\pi} \frac{1}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} = \frac{1}{2\pi^2} \sum_{m=-\infty}^{+\infty} e^{im(\varphi - \varphi')} \int_0^{+\infty} dk I_m(k\rho_{<}) K_m(k\rho_{>}) \cos k(z - z')$$

avec $\rho_{<} = \inf(\rho, \rho')$ et $\rho_{>} = \sup(\rho, \rho')$.

Solution page 350.

■ Exercice 2.12. Tenseur d'Oseen

Le comportement d'un fluide avec un nombre de Reynolds très petit en présence d'une vésicule peut être modélisé par les équations :

$$\eta \Delta \mathbf{v} - \nabla p = \mathbf{f},$$

et

$$\nabla \cdot \mathbf{v} = 0,$$

²⁴. Le lecteur pourra trouver les définitions et autres propriétés des fonctions de Bessel dans les ouvrages [Gradshteyn] ou [Arfken].

où $\mathbf{v}$ et p représentent les champ de vitesse et de pression respectivement et $\mathbf{f}$ une source (la vésicule).

1. On se place dans un domaine $\mathcal{D}$ de $\mathbb{R}^n$, de bord $\partial\mathcal{D}$. Quelles conditions est il possible d'imposer sur $\mathbf{v}$ et p pour qu'elles soient déterminées univoquement dans tout $\mathcal{D}$?

2. On suppose $\mathbf{f}$ localisée, et on cherche des solutions pour $\mathbf{v}$ et p qui s'annulent à l'infini. Obtenir p en fonction de $\mathbf{f}$. Comment est modifiée p si on change $\mathbf{f}$ par $\mathbf{f} + \mathbf{g}$ avec $\nabla \cdot \mathbf{g} = 0$?

3. Obtenir enfin $\mathbf{v}$ en fonction de $\mathbf{f}$. Comment est-elle modifiée si $\mathbf{f}$ est changée en $\mathbf{f} + \nabla h$ avec h une fonction arbitraire ?

Solution page 351.

■ Exercice 2.13. Fonction de Green en théorie de l'élasticité

En théorie de l'élasticité, le vecteur de déformations locales $\mathbf{u}$ satisfait à l'équation

$$\Delta \mathbf{u} + \frac{1}{1-2\sigma} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{u}) = \mathbf{F}(\mathbf{r}) \quad (2.131)$$

où σ est le coefficient de Poisson qui relie le taux de contraction transversale avec le taux de dilatation longitudinale. $\mathbf{F}$ est une fonction vectorielle donnée par les contraintes auxquelles est soumis le solide ainsi que les variations locales de température. Nous nous proposons de calculer la fonction de Green vectorielle $\mathbf{G}^i(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, avec des C. L. à l'infini, qui satisfait à l'équation :

$$\Delta \mathbf{G}^i(\mathbf{r}) + \frac{1}{1-2\sigma} \nabla (\nabla \cdot \mathbf{G}^i(\mathbf{r})) = -\mathbf{e}_i \delta(\mathbf{r}) \quad (2.132)$$

où $\mathbf{e}_i$ est le vecteur unitaire suivant la direction i . Les composantes du vecteur $\mathbf{G}^i$ sont notées G^{ij} .

1. Écrivons $\mathbf{G}^i(\mathbf{r})$ comme $\mathbf{G}^i(\mathbf{r}) = \mathbf{g}_0^i(\mathbf{r}) + \mathbf{g}_1^i(\mathbf{r})$, avec $\mathbf{g}_0^i(\mathbf{r})$ et $\mathbf{g}_1^i(\mathbf{r})$ asymptotiquement nulles pour $r \rightarrow \infty$ et où $\mathbf{g}_0^i(\mathbf{r})$ est solution de :

$$\Delta \mathbf{g}_0^i(\mathbf{r}) = -\mathbf{e}_i \delta(\mathbf{r}). \quad (2.133)$$

Obtenir $\mathbf{g}_0^i(\mathbf{r})$ et l'équation satisfaite par $\mathbf{g}_1^i(\mathbf{r})$.

2. En déduire que $\Delta (\nabla \wedge \mathbf{g}_1^i(\mathbf{r})) = 0$. Il est rappelé qu'une fonction harmonique dans tout l'espace et asymptotiquement nulle à l'infini est nulle partout. En déduire que $\mathbf{g}_1^i(\mathbf{r})$ peut s'écrire comme

$$\mathbf{g}_1^i(\mathbf{r}) = \nabla \phi^i(\mathbf{r})$$

où ϕ^i est une fonction scalaire.

3. Écrire l'équation satisfaite par ϕ^i et montrer que la solution est :

$$\phi^i(\mathbf{r}) = -\frac{1}{16\pi(1-\sigma)} \frac{\partial}{\partial x_i} r. \quad (2.134)$$

4. En déduire les composantes du tenseur de Green $G^{ij}(\mathbf{r})$.

Solution page 352.

■ Exercice 2.14. Laplacien discret et réseau de résistances

Considérons un réseau infini à d dimensions constitué par tous les points $\mathbf{r}$ dont la position est spécifiée par d nombres entiers $l_1, \dots, l_d$ i.e. :

$$\mathbf{r} = \sum_{i=1}^d l_i \mathbf{e}_i, \quad \text{avec} \quad \mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = \delta_{ij}.$$

Chaque lien entre sites voisins du réseau correspond à un fil conducteur de résistance électrique R (voir figure 2.19). Le but de cet exercice est de calculer la résistance électrique entre deux points arbitraires du réseau.

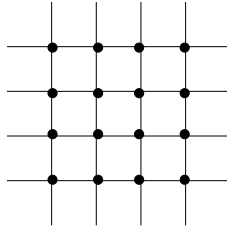


FIG. 2.19 – Réseau de résistances dans le cas bidimensionnel : chaque fil entre deux points $\bullet$ a une résistance R .

1. Soit $V(\mathbf{r})$ le potentiel électrique au site $\mathbf{r}$ du réseau. Montrer que les lois d'Ohm et de Kirchhoff impliquent que $\Delta V(\mathbf{r})$, défini par,

$$\Delta V(\mathbf{r}) = \sum_{i=1}^d [V(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i) + V(\mathbf{r} - \mathbf{e}_i) - 2V(\mathbf{r})]$$

est nul. L'opérateur Δ correspond au Laplacien discret.

2. Pour mesurer la résistance $R(\mathbf{r}_0)$ entre les points 0 et $\mathbf{r}_0$ du réseau, nous branchons un ohmmètre qui injecte un courant I sur le site $\mathbf{r}_0$ et en extrait la même quantité au site $\mathbf{0}$. Obtenir l'équation satisfaite par $V(\mathbf{r})$.

3. Obtenir l'expression de $R(\mathbf{r}_0)$ en termes de R et de la fonction de Green $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ du Laplacien discret, solution de

$$\Delta_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}.$$

4. Donner l'expression de $R(\mathbf{r}_0)$ en termes des modes de Fourier du réseau :

$$\frac{1}{(2\pi)^{d/2}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}}, \quad -\pi \leq k_i \leq \pi,$$

avec

$$\int_{-\pi}^{\pi} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')} = \delta_{\mathbf{r}, \mathbf{r}'}.$$

Calculer alors $R(\mathbf{r}_0)$ dans le cas uni-dimensionnel.

5. Donner le terme dominant de l'expression asymptotique de $R(\mathbf{r}_0)$ quand $r_0 \gg 1$ pour $d = 2$. Montrer aussi, toujours pour $d = 2$, que la résistance entre deux sites voisins vaut $R/2$.

Solution page 352.

■ Exercice 2.15. Méthode des images pour un problème bidimensionnel

Imaginons que nous voulions calculer le potentiel électrique pour une géométrie bidimensionnelle définie par le demi-plan $x > 0$. Plus spécifiquement, nous voulons calculer le potentiel électrique qui satisfait à

$$\Delta \Phi(x, y) = 0, \quad \forall x > 0,$$

et à la condition $\Phi(0, y) = f(y)$ imposée par un matériau conducteur en $x = 0$.

1. Obtenir une expression intégrale pour le potentiel Φ en fonction de $f(y)$ et de la fonction de Green appropriée que l'on calculera.

2. Vérifier explicitement que l'expression finale obtenue pour Φ satisfait bien aux conditions au bord imposées.

3. En utilisant des arguments d'analyticité, vérifier aussi que $\Delta \Phi(x, y) = 0$ pour tout x strictement positif.

Solution page 354.

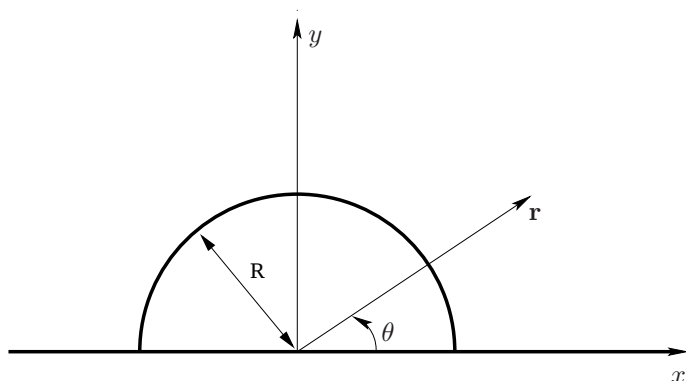


FIG. 2.20 – Hangar semi-cylindrique.

■ Exercice 2.16. Hangar semi-cylindrique soumis au vent

Considérons l'air comme un fluide parfait incompressible de densité massique ρ . Nous voulons étudier l'écoulement stationnaire et irrotationnel sur un hangar de rayon R , comme représenté sur la figure 2.20. La longueur L du hangar suivant Oz est suffisamment grande de sorte que le problème soit purement bidimensionnel dans le plan (xOy) . On notera $\mathbf{u}$ le champ de vitesse et ϕ le potentiel correspondant tel que $\mathbf{u} = \nabla\phi$.

1. Quelles sont les conditions aux limites vérifiées par $\mathbf{u}$?
2. Trouver la représentation conforme qui transforme la zone accessible à l'écoulement en le demi-plan complexe supérieur.
3. En déduire le potentiel $\phi(r, \theta)$ puis le champ de vitesse $\mathbf{u}$.
4. Retrouver le résultat précédent en décomposant $\phi(r, \theta)$ sur une base judicieuse de fonctions.
5. On suppose que le toit du hangar présente une petite ouverture (par exemple une fenêtre ouverte). Calculer la force exercée par le vent sur le toit en admettant que le champ de vitesse à l'intérieur du hangar reste identiquement nul. Quelles sont la nature et les conséquences de cette force ?

Solution page 355.

■ Exercice 2.17. Opérateur de Dirac

Nous nous proposons d'étudier l'équation différentielle dans $\mathbb{R}^2$:

$$\begin{pmatrix} \partial_x f_1(\mathbf{r}) + \partial_y f_2(\mathbf{r}) \\ \partial_y f_1(\mathbf{r}) - \partial_x f_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \partial_x & \partial_y \\ \partial_y & -\partial_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} f_1(\mathbf{r}) \\ f_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} S_1(\mathbf{r}) \\ S_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix}. \quad (2.135)$$

Supposons que les $S_i(\mathbf{r})$ soient de support compact (localisées) et introduisons la matrice de Green,

$$G = \begin{pmatrix} G_{11} & G_{12} \\ G_{21} & G_{22} \end{pmatrix},$$

solution de

$$\begin{pmatrix} \frac{\partial_x}{\partial_y} & \frac{\partial_y}{-\partial_x} \end{pmatrix} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \delta(x - x')\delta(y - y')\mathcal{I} = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\mathcal{I}$$

où $\mathcal{I}$ est la matrice identité 2×2 , et avec comme C.L. $G_{ij} \rightarrow 0$ pour $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$.

1. Montrer que

$$f_i(\mathbf{r}) = \int_{\mathbb{R}^2} dx' dy' \sum_j [G_{ij}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') S_j(\mathbf{r}')] \quad ; \quad i = 1, 2$$

est solution de l'équation (2.135) avec les C.L. $f_i(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ pour $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$.

2. Obtenir la matrice de Green $G(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ avec les C.L. spécifiées ci-dessus.

3. Soit $h(x, y)$ une fonction de support compact. Comment sont modifiées f_1 et f_2 si $S_1 \rightarrow S_1 + \partial_x h$ et $S_2 \rightarrow S_2 + \partial_y h$?

Solution page 355.

■ Exercice 2.18. Avance du périhélie de Mercure

On montre en relativité générale que l'équation de la trajectoire d'une planète (supposée ponctuelle) autour du Soleil peut s'écrire

$$\ddot{u} + u = \frac{MG}{L^2} + \frac{3MG}{c^2} u^2 \quad (2.136)$$

où $(1/u, \phi)$ sont les coordonnées polaires dans le plan de la trajectoire, $\dot{u} = (du/d\phi)$, M la masse du Soleil, G la constante de Newton, c la vitesse de la lumière et L le moment cinétique orbital de la planète divisé par sa masse²⁵. Le terme proportionnel à u^2 s'interprète comme la correction provenant de la Relativité Générale à la loi classique de Newton. Dans la suite, on note

$$\alpha = \frac{MG}{L^2} \quad \text{et} \quad \beta = \frac{3MG}{c^2}.$$

25. Rappelons brièvement que pour obtenir cette équation, il faut écrire l'équation des géodésiques de genre temps dans la métrique de Schwarzschild associée au Soleil (voir par exemple [Weinberg]).

Comme $(\beta u^2/\alpha) = 3(L^2 u^2/c^2)$, ce quotient est de l'ordre de v^2/c^2 où v est la vitesse de la planète ; il est donc très petit. Pour la planète Mercure, on a par exemple

$$\frac{MG}{c^2} = 1,475 \text{ km} \quad \text{et} \quad \frac{L^2}{MG} = 55,3 \cdot 10^6 \text{ km}.$$

1. Soit $G(\phi - \phi')$ la fonction de Green solution de

$$\ddot{G} + G = \delta(\phi - \phi')$$

avec $G(\phi - \phi') = 0$ pour $\phi < \phi'$. Déterminer G .

2. Montrer que la solution de l'équation (2.136) est solution de l'équation intégrale

$$u(\phi) = h(\phi) + \int_0^\phi d\phi' G(\phi - \phi') [\alpha + \beta u^2(\phi')]. \quad (2.137)$$

où $h(\phi)$ est solution de l'équation homogène.

3. Dans le cas où $\beta = 0$, déterminer la fonction $h(\phi)$ correspondant à la solution $u(\phi) = \alpha(1 + e \cos \phi)$. On rappelle alors que

$$a = \frac{L^2}{MG} \frac{1}{1 - e^2}$$

est le demi-grand axe de l'ellipse.

4. Revenons au cas $\beta \neq 0$ en gardant les conditions initiales précédentes. En effectuant un développement perturbatif, montrer que

$$u(\phi) \simeq \alpha [(1 + e \cos \phi) + \beta \alpha \{A + B \cos \phi + C \cos 2\phi + D \sin \phi\}].$$

Donner les expressions de A , B , C et D . Discuter la validité du développement.

5. Le périhélie correspond au point de la trajectoire le plus éloigné du Soleil. Lorsque $\beta = 0$, la trajectoire est périodique et la différence $\Delta\phi$ entre deux passages au périhélie vaut donc 2π . Lorsque $\beta \neq 0$, la trajectoire n'est plus périodique et on a alors $\Delta\phi = 2\pi + \epsilon$. Montrer que

$$\epsilon \simeq \frac{2\pi D \beta \alpha}{e}.$$

6. Conclure alors par une application numérique pour la planète Mercure : donner l'avance du périhélie en secondes d'arc par siècle sachant que la période de révolution de Mercure est de 87,97 jours.

Solution page 356.

■ Exercice 2.19. Oscillateur harmonique en présence d'une impureté

Considérons une particule quantique de masse m soumise à un potentiel harmonique $U(x) = \frac{1}{2}m\omega^2 x^2$. Le Hamiltonien correspondant $\mathcal{H}_0$ s'écrit

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2}{dx^2} + \frac{1}{2}m\omega^2 x^2.$$

Le spectre de $\mathcal{H}_0$ est entièrement discret. Les niveaux d'énergie sont de la forme $E_n = (n + \frac{1}{2})\hbar\omega$ avec $n \in \mathbb{N}$ et les fonctions d'onde normalisées correspondantes s'écrivent

$$\psi_n(x) = \frac{1}{\pi^{1/4} 2^{n/2} (n!)^{1/2} l^{1/2}} e^{-\frac{x^2}{2l^2}} H_n\left(\frac{x}{l}\right)$$

avec $l = \sqrt{\hbar/m\omega}$ et où $H_n(\xi)$ est le polynôme d'Hermite de degré n . Dans la suite, il sera uniquement nécessaire de savoir que, pour $p \in \mathbb{N}$,

$$H_{2p}(0) = (-1)^p 2^p (2p-1)!!, \quad H_{2p+1}(0) = 0.$$

1. Définissons la fonction de Green thermique comme

$$G_0(x_a, x_b; \beta) = \langle x_a | e^{-\beta \mathcal{H}_0} | x_b \rangle$$

avec $\beta = 1/(kT)$. Écrire la transformée de Laplace

$$\hat{G}_0(x_a, x_b; z) = \int_0^{+\infty} d\beta e^{-\beta z} G_0(x_a, x_b; \beta)$$

en termes des fonctions d'onde ψ_n et des niveaux d'énergie E_n . Calculer $\hat{G}_0(0, 0; z)$ et $G_0(0, 0; \beta)$. Pour cela, resommer la série définissant $G_0(0, 0; \beta)$ en utilisant

$$\frac{d^p}{d\xi^p} (1 - \xi)^{-\frac{1}{2}} \Big|_{\xi=0} = \left(p - \frac{1}{2}\right) \left(p - \frac{3}{2}\right) \cdots \frac{1}{2}.$$

2. Exprimer la densité d'états $\rho_0(E)$ en termes d'une série, à partir de la formule générale

$$\rho_0(E) = \frac{-1}{\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} dx \hat{G}_0(x, x; -E + i\epsilon).$$

3. Introduisons ensuite une impureté à l'origine, qui crée un potentiel de la forme $V\delta(x)$. Le Hamiltonien $\mathcal{H}$ de la particule en présence de l'impureté s'écrit

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V\delta(x).$$

Soient G et $\hat{G}$ les fonctions de Green correspondantes. Montrer que $\hat{G}$ satisfait l'équation

$$\hat{G}(x_a, x_b; z) = \hat{G}_0(x_a, x_b; z) - V l \hat{G}(x_a, 0; z) \hat{G}_0(0, x_b; z). \quad (2.138)$$

En déduire $\hat{G}$ en fonction de $\hat{G}_0$, V et l .

4. Montrer que l'équation (2.138) implique que la fonction de Green a toujours des pôles pour $z = -(2p + 1 + \frac{1}{2})\hbar\omega$ mais n'a plus de pôles en $z = -(2p + \frac{1}{2})\hbar\omega$. En déduire que la nouvelle densité d'états est de la forme

$$\rho(E) = \sum_{n=0}^{+\infty} \delta(E - E_n(V))$$

où les $E_n(V)$ sont les nouvelles énergies propres. Donner l'équation implicite (faisant intervenir une série) qui détermine les $E_{2p}(V)$.

5. Nous nous intéressons dorénavant au seul fondamental $E_0(V)$. Obtenir les comportements suivants

$$\begin{aligned} E_0(V) &\simeq -\frac{V^2}{2\hbar\omega} && \text{quand } V \rightarrow -\infty, \\ E_0(V) &= \frac{1}{2}\hbar\omega + \frac{V}{\sqrt{\pi}} + O(V^2) && \text{quand } V \rightarrow 0, \\ E_0(V) &= E_0^\infty - \frac{\sqrt{\pi}}{S(E_0^\infty)V} + O\left(\frac{1}{V^2}\right) && \text{quand } V \rightarrow +\infty \end{aligned}$$

avec $\frac{1}{2}\hbar\omega < E_0^\infty < \frac{5}{2}\hbar\omega$. Il est utile pour cela d'écrire l'équation implicite définissant E_0^∞ et $S(E_0^\infty)$ en termes d'une série.

Solution page 357.

Chapitre 3

Fonctions de Green dépendantes du temps

Ce chapitre est consacré aux fonctions de Green pour des situations avec dépendance temporelle. La motivation, l'intérêt et la définition des fonctions de Green étudiées sont similaires à ceux du chapitre précédent. Le lecteur est donc renvoyé à l'introduction de ce dernier pour un exposé général sur l'intérêt des fonctions de Green. *A contrario*, insistons ici sur l'aspect nouveau qui est lié à la dépendance temporelle. En effet, pour chaque situation physique étudiée, les fonctions de Green correspondantes donnent, en un point $\mathbf{r}$ de l'espace et à l'instant t , la valeur du champ créé par une source ponctuelle localisée à la fois dans l'espace et dans le temps, *i.e.* en un point $\mathbf{r}_0$ et à un instant t_0 . Par exemple, en électromagnétisme, cette source élémentaire particulière est un flash lumineux. La différence essentielle par rapport au cas stationnaire réside donc dans la propagation du champ entre les points $(\mathbf{r}_0, t_0)$ et $(\mathbf{r}, t)$ de l'espace-temps. Cette remarque en amène immédiatement une autre qui a des conséquences importantes : la propagation entre ces deux points de l'espace-temps doit respecter le principe de causalité. Or, comme cela est montré au chapitre 1 dans le cadre de la réponse linéaire, la causalité se traduit par certaines propriétés d'analyticité. Ainsi, nous allons voir qu'ici sont réunies d'une part les propriétés générales des fonctions de Green statiques vues au chapitre 2, et d'autre part celles des fonctions de réponse exposées au chapitre 1.

Dans la première partie de ce chapitre, nous exposons tout d'abord la problématique générale des conditions aux limites pour une EDP linéaire quelconque faisant intervenir simultanément les variables spatiales et temporelle. Le principe de causalité nous conduit à formuler la partie temporelle de ces conditions en termes de conditions initiales. Ce principe confère aussi un intérêt essentiel aux fonctions de Green dites causales, qui s'interprètent alors naturellement comme des fonctions de réponse caractéristiques du champ étudié.

Nous expliquons ensuite comment la forme particulière de la plupart des opérateurs étudiés permet de séparer les dépendances spatiales et temporelle. Les fonctions de Green causales homogènes de ces opérateurs admettent alors des représentations spectrales simples. De plus, par transformation de Laplace, nous nous ramenons à une EDP purement statique, dont les propriétés ont déjà été étudiées au chapitre 2.

Dans un second temps, nous étudions séparément divers opérateurs. Comme au chapitre 2, les questions abordées concernent les conditions aux limites et l'unicité des solutions, les relations de réciprocity, ainsi que l'expression de la solution générale pour une source quelconque en termes des fonctions de Green. Le premier opérateur considéré est associé à l'équation de diffusion, qui gouverne l'évolution de quantités physiques très variées. Nous passons ensuite à une équation à la base de la mécanique quantique, l'équation de Schrödinger. L'équation de Bloch, qui intervient en mécanique statistique, est ensuite brièvement présentée. Nous terminons par l'opérateur d'Alembertien, qui est un opérateur fondamental décrivant la propagation d'ondes progressives, et que l'on retrouve notamment, mais pas exclusivement, en électromagnétisme. Soulignons dès à présent que l'équation de d'Alembert conduit à des propriétés de propagation très différentes de celles régies par l'équation de diffusion. Comme cela est montré, cette différence de nature se retrouve dans la structure des fonctions de Green correspondantes.

L'analyse des EDP précédentes dévoile la double nature des fonctions de Green dynamiques. Lorsque des sources sont présentes, comme dans l'équation de d'Alembert, elles apparaissent naturellement comme les fonctions de réponse du champ au forçage des ces sources. En l'absence de sources, comme dans l'équation de Schrödinger, les fonctions de Green décrivent la propagation intrinsèque d'une entité élémentaire associée au champ d'intérêt. Au-delà de cette dualité d'interprétation, les transformées de Fourier des fonctions de Green causales ont des propriétés analytiques semblables à celles relatives aux susceptibilités. De plus, leurs singularités sont également induites par les modes propres du système libre sans source, et leur position dans le plan complexe dépend crucialement du caractère dissipatif de l'évolution.

Les applications et les exemples traités dans la seconde partie de ce chapitre sont les suivants : le premier exemple est la diffusion dans un segment unidimensionnel qui met en lumière simplement les propriétés générales décrites dans la première partie ; nous traitons ensuite une application fondamentale des fonctions de Green du d'Alembertien, à savoir la diffraction de Fraunhofer, et nous prenons soin dans cet exemple de discuter précisément le rôle et le choix des conditions aux limites ; l'exemple suivant traite de l'émission d'ondes sonores par un objet en mouvement dans un fluide ; une autre application intéressante des fonctions de Green du d'Alembertien concerne l'analyse de la propagation de l'onde de choc émise par un objet supersonique ; ensuite, nous étudions l'équation de Cattaneo qui présente simultanément des

caractères propagatif et diffusif ; enfin, nous déterminons la polarisabilité de l'atome d'hydrogène par des méthodes perturbatives.

3.1 Propriétés générales

3.1.1 Fonctions de Green et causalité

Considérons un système contenu dans un domaine $\mathcal{D}$, partie d'un espace de dimension d . Contrairement à la situation étudiée dans le précédent chapitre, la densité de sources $\rho(\mathbf{r}, t)$ dépend, cette fois-ci, aussi du temps t . Ces sources induisent le champ $\phi(\mathbf{r}, t)$, qui est une solution particulière de l'EDP

$$\mathcal{O}\phi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \quad (3.1)$$

où $\mathcal{O}$ est un opérateur linéaire dépendant des coordonnées spatiales et temporelles.

Naturellement, le champ ϕ est déterminé par cette EDP et par les conditions aux limites spécifiques au problème étudié. Sur un plan mathématique, tout se passe *a priori* comme s'il fallait simplement considérer une EDP dans un espace de dimension $d + 1$. Cela dit, la dimension temporelle joue en fait un rôle particulier par suite de l'existence de la flèche du temps. En vertu du principe de causalité, l'évolution d'un système physique est en partie déterminée par les conditions initiales à un certain temps t_0 pris pour origine. Pour un système de mécanique classique, la trajectoire d'un point matériel soumis à une force donnée dépend uniquement des valeurs initiales de sa position et de sa vitesse. Ici, de manière similaire, la partie temporelle des conditions aux limites consiste donc à fixer les valeurs du champ et d'un certain nombre de ses dérivées partielles temporelles au temps origine t_0 , et en tout point du domaine $\mathcal{D}$. Ces conditions initiales seront notées C.I.(t_0).

En plus des conditions initiales, il faut bien sûr ajouter des conditions aux limites spatiales. Typiquement, et comme dans le cas statique, elles consistent à imposer ϕ et/ou ses dérivées partielles spatiales sur le bord $\partial\mathcal{D}$ du domaine. Soulignons que ces valeurs fixées au bord peuvent dépendre du temps, suite à l'action d'un observateur extérieur au système. Par exemple, en électromagnétisme, un générateur peut imposer une tension alternative de dépendance temporelle donnée entre les armatures d'un condensateur contenant un milieu diélectrique. Les conditions de bord seront notées C.L.($\phi|\partial\mathcal{D}$). En définitive, le champ d'intérêt est la solution unique du système

$$\boxed{\begin{array}{c} \mathcal{O}\phi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t) \\ \text{C.L.}(\phi|\partial\mathcal{D}) \quad \text{et} \quad \text{C.I.}(\phi|t_0) . \end{array}} \quad (3.2)$$

Définition des fonctions de Green

La vision de l'EDP (3.1) dans un espace de dimension $d+1$, nous amène à une généralisation naturelle de la définition (2.3) du cas stationnaire. Ici, une fonction de Green dynamique est le champ créé par une source ponctuelle de type flash avec des conditions aux limites appropriées, *i.e.*

$$\boxed{\begin{array}{l} \mathcal{O}_{\mathbf{r},t}G(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = \delta(\mathbf{r}-\mathbf{r}')\delta(t-t'), \\ \text{C.L.}(G) \end{array}} \quad (3.3)$$

Comme dans le cas statique, les conditions aux limites sur G peuvent être choisies arbitrairement, indépendamment de celles imposées sur ϕ . Cependant, dans la détermination du champ physique ϕ , il semble très raisonnable d'anticiper que les fonctions de Green causales, notées G^+ , qui satisfont au principe de causalité, vont jouer un rôle particulièrement intéressant. Comme la source flash est éteinte pour tout temps $t < t'$, une fonction de Green causale est nécessairement identiquement nulle avant l'allumage du flash. Alors, la condition

$$\boxed{\text{Fonction de Green causale : } G^+(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t') = 0 \text{ pour } t < t',} \quad (3.4)$$

est attendue définir entièrement la partie temporelle des conditions aux limites C.L.(G). En d'autres termes, il n'est plus nécessaire alors d'introduire des conditions initiales supplémentaires ¹ en $t = t'$. Bien sûr, pour déterminer univoquement une fonction de Green causale, il faut encore imposer des conditions de bord sur la frontière du domaine.

La source flash étant active uniquement à l'instant t' , une fonction de Green causale apparaît comme un champ élémentaire émis à cet instant t' en un point $\mathbf{r}'$, et observé à un instant ultérieur $t > t'$ en un point $\mathbf{r}$. Ainsi, $G^+(\mathbf{r},t;\mathbf{r}',t')$ prend en compte la propagation[✕] du signal émis entre les points $\mathbf{r}'$ et $\mathbf{r}$ pendant une durée $t - t'$.

Cet aspect propagatif met en lumière l'intérêt majeur des fonctions de Green causales dans la caractérisation et la compréhension du système étudié.

Notons qu'il n'est pas interdit d'introduire des conditions temporelles qui ne satisfont pas au principe de causalité.

✕ Commentaire 3.1.1. Employer à ce niveau le terme de propagation pour un opérateur $\mathcal{O}$ général implique qu'il n'est pas exclu que la vitesse de propagation soit infinie. Cela est possible en physique non-relativiste, mais est exclu en relativité restreinte. Cette nuance se reflète dans la comparaison des fonctions de Green causales associées à l'équation de diffusion (§3.1.3), à l'opérateur d'Alembertien (§3.1.6), et à l'équation de Cataneo (§3.2.5).

1. Pour les opérateurs considérés au §3.1.2, il sera montré que la condition de causalité implique que G^+ et un certain nombre de ses dérivées temporelles sont nulles en $t = t'$.

Si les fonctions de Green acausales correspondantes n'ont pas d'interprétation physique, elles peuvent néanmoins être utiles dans la résolution de certains problèmes. En fait, toutes les fonctions de Green dynamiques sont potentiellement intéressantes, car le champ de superposition

$$\int_{-\infty}^{\infty} dt' \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' G(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') \rho(\mathbf{r}', t') \quad (3.5)$$

est toujours une solution particulière de l'EDP originelle (3.1). Pour s'en convaincre, il suffit d'appliquer l'opérateur $\mathcal{O}_{\mathbf{r}, t}$ à cette expression intégrale, et d'exploiter la linéarité de cet opérateur.

Fonctions de Green causales et théorie de la réponse linéaire

Plaçons-nous maintenant dans le contexte général de la théorie de la réponse linéaire décrit au chapitre 1. Ici, l'observable d'intérêt est le champ ϕ , et le rôle du forçage extérieur est tenu par les sources. Alors, une fonction de Green causale donnée apparaît comme une fonction de réponse particulière associée à cette observable : en effet, la source flash est l'exacte analogue d'une excitation de type pulse. Cette analogie peut être poursuivie et précisée comme suit, *modulo* des hypothèses supplémentaires sur la nature des conditions de bord et l'invariance par translation dans le temps du système.

Considérons donc un opérateur $\mathcal{O}$ invariant par translation temporelle. De plus, pour illustrer cette analogie, supposons que les conditions de bord $C.L.(\phi|\partial\mathcal{D})$ soient de type Dirichlet, avec une fonction de bord indépendante du temps,

$$\phi(\mathbf{r}, t) = D(\mathbf{r}) \quad \text{pour } \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D} \quad \forall t. \quad (3.6)$$

Imaginons qu'à l'instant initial $t_0 = -\infty$, aucune source ne soit présente, et que le champ $\phi_0(\mathbf{r})$ initial soit une solution statique de l'EDP (3.1) sans sources

$$\mathcal{O}\phi_0(\mathbf{r}) = 0$$

et satisfaisant bien aux conditions de bord (3.6). Clairement, ce champ statique ϕ_0 représente la valeur de l'observable dans l'état stationnaire non-perturbé et joue donc le rôle de la quantité A_0 introduite page 3. Branchons alors une source $\rho(\mathbf{r}, t)$ adiabatiquement à partir de $t_0 = -\infty$, i.e. telle que $\rho(\mathbf{r}, t)$ tende exponentiellement vite vers 0 quand $t \rightarrow -\infty$. Cette source tient le rôle du forçage, et elle induit une modification du champ ϕ , qui est la solution de l'EDP (3.1) avec les conditions de bord (3.6) et la condition initiale²

$$\lim_{t \rightarrow -\infty} \phi(\mathbf{r}, t) = \phi_0(\mathbf{r}). \quad (3.7)$$

2. Cette condition limite est suffisante pour assurer l'unicité. Noter que toutes les dérivées partielles temporelles de ϕ s'annulent en $t_0 = -\infty$, ce qui est bien compatible avec la décroissance exponentiellement rapide de la source quand $t \rightarrow -\infty$.

Introduisons alors la fonction de Green causale de Dirichlet homogène G_{DH}^+ définie par les conditions de bord

$$G_{DH}^+(\mathbf{r}, t; \mathbf{r}', t') = 0 \quad \text{pour } \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}. \quad (3.8)$$

L'opérateur $\mathcal{O}$, la condition de causalité (3.4), et la C.L. (3.8) étant tous les trois invariants par translation dans le temps, G_{DH}^+ ne dépend que de la différence $t - t'$. Il est alors clair que

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \phi_0(\mathbf{r}) + \int_{-\infty}^t dt' \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') \rho(\mathbf{r}', t') \quad (3.9)$$

est solution de l'EDP (3.1) avec la C.L. (3.6) et la C.I. (3.7). Cette formule est la forme particulière de la réponse générale (1.30), page 19, d'un système à une perturbation inhomogène. La fonction de Green causale de Dirichlet homogène est donc bien la fonction de réponse pour la quantité ϕ . Notons que la formule (3.9) est exacte car la dynamique interne du système considéré est linéaire, alors que l'expression générale (1.30) est le premier terme d'un développement perturbatif en puissances du forçage.

En tant que fonction de réponse, G_{DH}^+ doit posséder les propriétés décrites dans le chapitre 1. En particulier, si le domaine $\mathcal{D}$ est l'espace tout entier, et si l'opérateur $\mathcal{O}$ est invariant par translation spatiale, la transformée de Fourier de G_{DH}^+ devient une fonction de réponse pour le mode $\mathbf{k}$. En conséquence, sa transformée de Laplace par rapport à la variable temporelle doit vérifier les propriétés générales d'analyticité semblables à celles vues au chapitre 1, parmi lesquelles les relations de Kramers-Kronig.

3.1.2 Opérateurs à variables séparables

Dans nombre de situations physiques, l'opérateur $\mathcal{O}$ est de la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{O} &= \mathcal{O}_{\mathbf{r}} + \mathcal{O}_t, \\ \mathcal{O}_t &= a_p \frac{\partial^p}{\partial t^p} + a_{p-1} \frac{\partial^{p-1}}{\partial t^{p-1}} + \cdots + a_1 \frac{\partial}{\partial t} = P_p\left(\frac{\partial}{\partial t}\right) \end{aligned} \quad (3.10)$$

où $\mathcal{O}_{\mathbf{r}}$ et $\mathcal{O}_t$ sont des opérateurs linéaires ne faisant intervenir respectivement que la position $\mathbf{r}$ et le temps t . De plus, la partie temporelle $\mathcal{O}_t$ est une combinaison linéaire à coefficients constants de dérivées partielles par rapport au temps. En d'autres termes, $\mathcal{O}_t$ est invariant par toute translation temporelle. Dans la suite de ce chapitre, nous considérons uniquement des opérateurs de la forme (3.10). Cette structure permet d'aller plus loin dans la discussion générale. Dans un premier temps, nous montrons que les fonctions de Green causales homogènes de $\mathcal{O}$ s'expriment simplement en termes du spectre de la partie spatiale (statique) $\mathcal{O}_{\mathbf{r}}$ de l'opérateur $\mathcal{O}$. Nous montrons ensuite comment la partie temporelle de l'EDP (3.2) peut être intégrée par transformation de Laplace.

Représentation spectrale

Introduction du spectre de l'opérateur statique. Considérons une fonction de Green causale homogène G_H^+ satisfaisant à des conditions de bord homogènes, du type Dirichlet ou Neumann par exemple. Supposons alors qu'avec ces conditions de bord homogènes l'opérateur statique $\mathcal{O}_{\mathbf{r}}$ possède une base orthonormale complète de fonctions propres $\psi_n(\mathbf{r})$ associées aux valeurs propres λ_n . Ceci signifie que chaque $\psi_n(\mathbf{r})$ obéit à l'EDP statique

$$\mathcal{O}_{\mathbf{r}}\psi_n(\mathbf{r}) = \lambda_n\psi_n(\mathbf{r})$$

d'une part, et que l'ensemble des $\psi_n(\mathbf{r})$ vérifie la relation de complétude

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \sum_n \psi_n(\mathbf{r})\psi_n^*(\mathbf{r}')$$

d'autre part.

Fixons t et t' . Comme dans le cas statique, $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ peut alors être décomposée en (voir annexe D, p. 315)

$$G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = \sum_{m,n} g_{mn}(t - t')\psi_m(\mathbf{r})\psi_n^*(\mathbf{r}'). \quad (3.11)$$

La dépendance spatiale de $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ est contrôlée par les fonctions propres ψ_n de l'opérateur statique $\mathcal{O}_{\mathbf{r}}$. La dépendance temporelle est entièrement contenue dans les fonctions g_{mn} , que nous allons déterminer.

Fonctions de Green temporelles réduites. Le double développement analogue à (3.11) pour la distribution de Dirac $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ est simplement donné par la relation de complétude (D.1). En injectant ceux-ci dans l'EDP satisfaite par G_H^+ , et en utilisant l'équation aux valeurs propres de $\mathcal{O}_{\mathbf{r}}$, nous obtenons

$$\sum_{m,n} (\mathcal{O}_t g_{mn} + \lambda_m g_{mn} - \delta_{mn} \delta(t - t')) \psi_m(\mathbf{r})\psi_n^*(\mathbf{r}') = 0$$

où δ_{mn} est le symbole de Kronecker, $\delta_{mn} = 0$ pour $m \neq n$ et $\delta_{mm} = 1$. En vertu de l'unicité de la représentation (3.11) appliquée à la fonction identiquement nulle, nous trouvons pour $m \neq n$ l'équation différentielle ordinaire

$$\mathcal{O}_t g_{mn}(t - t') + \lambda_m g_{mn}(t - t') = 0 ,$$

dont la solution satisfaisant la condition de causalité $g_{mn}(t - t') = 0$ pour $t < t'$ n'est autre que la fonction toujours nulle. En rebaptisant g_n la fonction g_{nn} , il vient par ailleurs

$$(\mathcal{O}_t + \lambda_n) g_n(t - t') = \delta(t - t') \quad (3.12)$$

avec $g_n(t - t') = 0$ pour $t < t'$. Cette équation différentielle ordinaire montre que g_n peut être vue comme une fonction de Green réduite purement temporelle. Dans le contexte de la réponse linéaire, g_n s'interprète également comme une fonction de réponse associée à l'opérateur $\mathcal{O}_t + \lambda_n$.

Rappelons que l'opérateur temporel $\mathcal{O}_t$ est supposé être un polynôme de degré p (voir équation (3.10)) dans la dérivée partielle $(\partial/\partial t)$. Il existe alors une méthode systématique pour déterminer g_n en termes d'une solution particulière Z_n de la version homogène de l'équation différentielle (3.12),

$$(\mathcal{O}_t + \lambda_n) Z_n(t - t') = 0. \quad (3.13)$$

Cette méthode, rappelée dans l'annexe C, page 309, donne

$$g_n(t - t') = \theta(t - t') Z_n(t - t')$$

où θ est la fonction de Heaviside, et Z_n est la solution particulière de l'équation homogène avec les conditions initiales

$$Z_n(0) = 0, \quad Z_n^{(1)}(0) = 0, \quad \dots \quad Z_n^{(p-2)}(0) = 0, \quad Z_n^{(p-1)}(0) = 1/a_p, \quad (3.14)$$

et la notation $Z_n^{(j)} = (\partial^j Z_n / \partial t^j)$. Ceci achève la détermination des fonctions g_{mn} dans le double développement (3.11), qui devient

$$G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = \theta(t - t') \sum_n Z_n(t - t') \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}'). \quad (3.15)$$

Cette représentation spectrale est l'analogue de celle obtenue dans le chapitre 2, page 69, pour les fonctions de Green homogènes statiques.

Réinterprétation de la condition de causalité. À partir de la représentation (3.15), il est aisé de montrer que G_H^+ et ses $p - 2$ premières dérivées partielles par rapport au temps, tendent toutes vers zéro quand $t - t' \rightarrow 0^+$,

$$\begin{aligned} \lim_{t-t' \rightarrow 0^+} G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') &= 0, \\ \lim_{t-t' \rightarrow 0^+} \frac{\partial^j}{\partial t^j} G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') &= 0, \quad 1 \leq j \leq p - 2, \end{aligned} \quad (3.16)$$

ce qui assure la continuité des fonctions correspondantes en $t = t'$. En effet, un raisonnement identique à celui de la page 310 mène à

$$\frac{\partial^j}{\partial t^j} G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = \theta(t - t') \sum_n Z_n^{(j)}(t - t') \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}')$$

pour $j \leq p - 2$. Par contre, la dérivée $(p - 1)$ -ème est discontinue en $t = t'$, suite au comportement limite

$$\lim_{t-t' \rightarrow 0^+} \frac{\partial^{p-1}}{\partial t^{p-1}} G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = \frac{1}{a_p} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (3.17)$$

conséquence de la condition $Z_n^{(p-1)}(0) = 1/a_p$ combinée à la relation de complétude. Cette discontinuité est bien sûr induite par l'allumage du flash en $t = t'$. Notons que la condition de causalité (3.4) est en définitive bien équivalente à imposer p conditions initiales suffisantes qui garantissent l'unicité de la fonction de Green causale envisagée.

La représentation spectrale (3.15) est un premier moyen de calculer les fonctions de Green causales G_H^+ . Avant de poursuivre, revenons en arrière quelques instants et reposons-nous la question : comment déterminer *a priori* ces fonctions de Green causales ? Deux autres méthodes viennent immédiatement à l'esprit.

L'invariance par translation temporelle à la fois de l'EDP (3.3) et de la condition de causalité (3.4) incite à effectuer une transformation de Fourier sur la variable temporelle $t - t'$. Cependant, cette transformée de Fourier peut éventuellement être mal définie selon que la physique sous-jacente ait ou non un caractère dissipatif. Cela ne surprendra pas le lecteur. En effet, nous avons remarqué à la page 148, que les fonctions de Green G_H^+ peuvent être interprétées comme des fonctions de réponse. Par ailleurs, nous avons vu au chapitre 1, page 9, que dans ce cas, la transformée de Fourier

$$\int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{i\omega\tau} G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau)$$

peut être singulière à cause des modes propres non-amortis. Aussi, $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \omega)$ doit en fait être définie par un processus de limite comme

$$\hat{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{iz\tau} G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) \quad (3.18)$$

avec $z = \omega + i\epsilon$, la partie imaginaire positive de z garantissant la convergence de l'intégrale en $\tau \rightarrow +\infty$. Notons que cette partie imaginaire positive ne pose pas de problème en $\tau \rightarrow -\infty$, puisque la causalité de $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau)$ restreint le domaine d'intégration à $[0, +\infty[$.

L'autre méthode est suggérée par la remarque suivante. Pour $t > t'$, G_H^+ est solution de la version homogène de l'EDP (3.1), c'est-à-dire de

$$\mathcal{O}_{\mathbf{r},t} G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = 0$$

avec les conditions initiales (3.16) et (3.17). Ainsi formulée, la détermination de la fonction de Green causale apparaît alors plutôt comme la résolution

d'une EDP avec conditions initiales, exactement comme pour le champ $\phi(\mathbf{r}, t)$. Or, une méthode standard pour résoudre une EDP avec C.I. est d'effectuer une transformation de Laplace. C'est cette méthode que nous mettons en œuvre ci-dessous avant d'établir le dictionnaire entre représentation spectrale, transformées de Laplace et de Fourier.

Transformation de Laplace

Comme indiqué ci-dessus, par suite de la structure (3.10) très simple de l'opérateur $\mathcal{O}$, la partie temporelle de l'EDP générale (3.1) s'intègre facilement par la méthode usuelle de transformation de Laplace. Ainsi, dans le monde de Laplace, cette EDP devient purement spatiale, avec un terme de source supplémentaire incorporant automatiquement les conditions initiales C.I. ($\phi|_{t_0}$). Nous sommes ainsi ramenés à la problématique d'un opérateur purement statique décrite dans le chapitre 2.

L'EDP statique dans le monde de Laplace. La définition et les propriétés de la transformation de Laplace sont indiquées dans l'annexe B. Par commodité, rappelons ici que la transformée de Laplace de n'importe quelle fonction $f(\tau)$ définie pour $\tau \geq 0$ est la fonction $\mathcal{L}[f](s)$ du paramètre³ s ,

$$\mathcal{L}[f](s) = \int_0^{+\infty} d\tau e^{-s\tau} f(\tau),$$

aussi notée $\tilde{f}(s)$.

Prenons la transformée de Laplace membre à membre de l'EDP (3.1),

$$\mathcal{O}\phi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t),$$

sur la variable $\tau = t - t_0$. Le terme de droite donne bien sûr la transformée de Laplace du terme de source, $\tilde{\rho}(\mathbf{r}, s)$. En vertu du caractère linéaire de cette transformation, le terme de gauche donne la somme des transformées de chaque terme *i.e.*

$$\mathcal{L}[\mathcal{O}\phi](\mathbf{r}, s) = \mathcal{L}[\mathcal{O}_{\mathbf{r}}\phi](\mathbf{r}, s) + \mathcal{L}[\mathcal{O}_t\phi](\mathbf{r}, s).$$

En exploitant à nouveau la linéarité de l'opérateur spatial $\mathcal{O}_{\mathbf{r}}$, nous obtenons

$$\mathcal{L}[\mathcal{O}_{\mathbf{r}}\phi](\mathbf{r}, s) = \mathcal{O}_{\mathbf{r}}\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s).$$

Concentrons nous alors sur le calcul de $\mathcal{L}[\mathcal{O}_t\phi](\mathbf{r}, s)$ et rappelons nous que $\mathcal{O}_t = P_p(\frac{\partial}{\partial t})$, où P_p est un polynôme de degré p . La transformée de Laplace de[✶]

$$\frac{\partial^j}{\partial t^j} \phi(\mathbf{r}, t)$$

3. Voir l'annexe B pour le domaine de définition de $\tilde{f}(s)$.

est de la forme

$$s^j \tilde{\phi}(\mathbf{r}, s),$$

plus un polynôme en s de degré $j - 1$ dont les coefficients sont des dérivées partielles temporelles de $\phi(\mathbf{r}, t)$ d'ordre l avec $0 \leq l \leq j - 1$, prises à l'instant initial t_0 . En conséquence ces coefficients sont parfaitement déterminés par les C.I. $(\phi|t_0)$. Il vient alors que la transformée de Laplace de la partie temporelle de l'EDP s'écrit :

✱ **Commentaire 3.1.2.** Donnons comme guide un exemple explicite,

$$\mathcal{O}_t = a_2 \frac{\partial^2}{\partial t^2} + a_1 \frac{\partial}{\partial t},$$

et notons $\dot{\phi} = (\partial\phi/\partial t)$ par commodité. Dans ce cas, la propriété (B.1), page 306, donne

$$\mathcal{L}[\dot{\phi}](\mathbf{r}, s) = s\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s) - \phi(\mathbf{r}, t_0),$$

$$\mathcal{L}[\ddot{\phi}](\mathbf{r}, s) = s^2\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s) - s\phi(\mathbf{r}, t_0) - \dot{\phi}(\mathbf{r}, t_0).$$

Ainsi, la transformée de Laplace

$$\mathcal{L}[\mathcal{O}_t\phi](\mathbf{r}, s)$$

est bien de la forme (3.19) avec

$$P_2(s) = a_2 s^2 + a_1 s,$$

$$I_1(\mathbf{r}, s) = -a_2 s \phi(\mathbf{r}, t_0) - a_2 \dot{\phi}(\mathbf{r}, t_0) - a_1 \phi(\mathbf{r}, t_0).$$

$$\mathcal{L}[\mathcal{O}_t\phi](\mathbf{r}, s) = P_p(s)\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s) + I_{p-1}(\mathbf{r}, s), \quad (3.19)$$

où $I_{p-1}(\mathbf{r}, s)$ est un polynôme en s de degré $p - 1$. Les coefficients de $P_p(s)$ sont les constantes du polynôme en $\partial/\partial t$ définissant $\mathcal{O}_t$. Les coefficients de $I_{p-1}(\mathbf{r}, s)$ sont entièrement déterminés par les C.I. $(\phi|t_0)$, et ils dépendent de $\mathbf{r}$.

Dans le monde de Laplace, il vient alors

$$\boxed{[P_p(s) + \mathcal{O}_{\mathbf{r}}]\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s) = \tilde{\rho}(\mathbf{r}, s) - I_{p-1}(\mathbf{r}, s),} \quad (3.20)$$

$$\text{C.L.}(\tilde{\phi}|\partial\mathcal{D})$$

où les C.L. $(\tilde{\phi}|\partial\mathcal{D})$ se déduisent de celles sur ϕ simplement par transformée de Laplace. En conclusion, pour chaque valeur de s donnée, $\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s)$ est solution d'une EDP statique de la forme (2.73), page 100, étudiée dans le chapitre 2, c'est-à-dire associée à l'opérateur

$$\lambda + \mathcal{O}_{\mathbf{r}} \quad \text{avec} \quad \lambda = P_p(s).$$

Ici la source fait intervenir, en plus de la contribution évidente $\tilde{\rho}(\mathbf{r}, s)$, le terme $-I_{p-1}(\mathbf{r}, s)$ qui prend en compte automatiquement les conditions initiales sur le champ originel $\phi(\mathbf{r}, t)$ en $t = t_0$.

Insistons sur le fait qu'il y a une EDP (3.20) différente pour chaque C.I. $(\phi|t_0)$ puisque le polynôme I_{p-1} dépend de ces conditions initiales⁴. Toujours à propos des conditions aux limites, la problématique du choix des conditions de bord C.L. $(\phi|\partial\mathcal{D})$ garantissant l'unicité de $\phi(\mathbf{r}, t)$, se ramène simplement à l'étude des conditions aux limites pour l'opérateur statique $\lambda + \mathcal{O}_{\mathbf{r}}$! Celle-ci a déjà été faite dans le chapitre 2, pour les formes simples courantes de $\mathcal{O}_{\mathbf{r}}$ qui interviennent dans la suite de ce chapitre.

De manière plus générale, l'EDP (3.20) pour $\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s)$, est particulièrement utile dans la résolution du problème originel. Ainsi, les expressions correspondantes de la solution générale en termes des fonctions de Green permettront d'obtenir facilement, par transformation de Laplace inverse, des expressions similaires pour $\phi(\mathbf{r}, t)$. Ces fonctions de Green sont les éléments de matrice de la résolvante $[\lambda + \mathcal{O}_{\mathbf{r}}]^{-1}$. Dans le paragraphe suivant, nous montrons qu'elles coïncident bien avec les transformées de Laplace des fonctions de Green causales.

Fonctions de Green causales dans le monde de Laplace. Introduisons maintenant la transformée de Laplace $\tilde{G}_H^+$ de la fonction de Green causale homogène G_H^+ ,

$$\tilde{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s) = \int_0^{+\infty} d\tau e^{-s\tau} G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau),$$

avec $\tau = t - t'$. Comme indiqué plus haut, pour $t > t'$, $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ est solution de la version homogène de l'EDP (3.1). Par conséquent, dans l'EDP de type (3.20) satisfaite par $\tilde{G}_H^+$, la source effective se réduit au terme $-I_{p-1}$. Comme G_H^+ et ses $p-2$ premières dérivées partielles temporelles sont nulles en $t = t'$, la seule contribution des conditions initiales au polynôme I_{p-1} provient de $\partial^{p-1}G_H^+/\partial t^{p-1}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; 0^+)$. Plus précisément⁵,

$$I_{p-1}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s) = -a_p \frac{\partial^{p-1}G_H^+}{\partial t^{p-1}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; 0^+).$$

En utilisant l'expression limite (3.17), nous obtenons ici

$$I_{p-1}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s) = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Ainsi, l'EDP satisfaite par $\tilde{G}_H^+$ est simplement

$$\boxed{[P_p(s) + \mathcal{O}_{\mathbf{r}}] \tilde{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').} \quad (3.21)$$

Comme le montre l'EDP (3.21), la transformée de Laplace $\tilde{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s)$ est bien la fonction de Green $G_{\lambda}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ associée à la résolvante $[\lambda + \mathcal{O}_{\mathbf{r}}]^{-1}$, avec

4. Ainsi, une notation plus correcte, mais plus lourde, aurait été $I_{p-1}(\mathbf{r}; s; \text{C.I.}(\phi|t_0))$.

5. Le raisonnement est mené pour une position donnée $\mathbf{r}'$ de la source flash. Les conditions initiales dépendant à la fois de $\mathbf{r}$ et de $\mathbf{r}'$, le polynôme I_{p-1} dépend aussi de ces deux points.

$\lambda = P_p(s)$ et les mêmes conditions de bord homogènes sur la frontière $\partial\mathcal{D}$ du domaine, soit :

$$\boxed{\tilde{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s) = G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}') \quad \text{avec} \quad \lambda = P_p(s).} \quad (3.22)$$

Représentation spectrale, transformées de Fourier et de Laplace.

Indiquons d'abord le lien entre la représentation spectrale (3.15), page 150, et la transformation de Laplace. En utilisant la représentation spectrale (2.77), page 101, de $G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ obtenue au chapitre 2, il vient

$$\boxed{\tilde{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s) = \sum_n \frac{1}{P_p(s) + \lambda_n} \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}').} \quad (3.23)$$

Cette représentation peut également être obtenue en prenant directement la transformée de Laplace de l'expression (3.15). En effet, nous obtenons ainsi tout d'abord

$$\tilde{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s) = \sum_n \tilde{Z}_n(s) \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}'),$$

puis, à partir de l'EDP (3.13) et des C.I. (3.14) satisfaites par $Z_n(t - t')$,

$$\tilde{Z}_n(s) = \frac{1}{P_p(s) + \lambda_n}.$$

Passons maintenant au lien entre transformations de Laplace et de Fourier. Comme la fonction de Green causale $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau)$ vérifie $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) = 0$ pour $\tau < 0$, nous avons

$$\int_0^{+\infty} d\tau e^{-s\tau} G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\tau e^{-s\tau} G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau). \quad (3.24)$$

Pour $s = -iz$, l'expression précédente coïncide avec la définition de la transformée de Fourier $\hat{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; z)$, soit

$$\tilde{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; -iz) = \hat{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; z).$$

En prenant en compte le résultat (3.18), il vient :

$$\boxed{\hat{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \tilde{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s = -i\omega + \epsilon).} \quad (3.25)$$

3.1.3 Équation de diffusion

L'équation de diffusion est présente dans de nombreux domaines. Elle est connue sous le nom d'équation de la chaleur en thermodynamique, car elle

régit l'évolution de la température locale dans les matériaux. Elle intervient aussi très souvent en physique statistique ou en mécanique des fluides dans l'étude de mélange de liquides. Aussi, elle tient un rôle important dans la théorie du mouvement Brownien, en décrivant la probabilité de présence induite par une marche au hasard. Sa forme explicite s'écrit

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - D \Delta_{\mathbf{r}} \right] \phi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t). \quad (3.26)$$

Comme évoqué ci-dessus, $\phi(\mathbf{r}, t)$ représente, par exemple, une température ou bien une densité de particules. Dans ces exemples, le terme de source $\rho(\mathbf{r}, t)$ prend en compte une injection locale d'énergie ou bien de matière. Souvent, ce terme est identiquement nul, et la version homogène de l'EDP (3.26) décrit alors la diffusion libre. L'opérateur $\mathcal{O}$ en jeu exhibe bien la structure (3.10), avec $\mathcal{O}_t = \partial/\partial t$ et $\mathcal{O}_{\mathbf{r}} = -D\Delta_{\mathbf{r}}$, où la constante D est le coefficient de diffusion toujours positif. Par conséquent, les méthodes exposées dans la section précédente sont bien applicables à l'étude de l'EDP (3.26).

Conditions aux limites

Comme l'opérateur $\mathcal{O}_t$ est du premier ordre par rapport à la variable temporelle, i.e. $p = 1$, les conditions initiales C.I. $(\phi|_{t_0})$ se réduisent ici à fixer la valeur du champ pour un temps initial t_0 en tout point du domaine,

$$\phi(\mathbf{r}, t_0) = \phi_0(\mathbf{r}) \quad \text{pour tout } \mathbf{r} \in \mathcal{D}. \quad (3.27)$$

Dans le monde de Laplace, l'opérateur statique $(P_p(s) + \mathcal{O}_{\mathbf{r}})$ devient ici

$$s - D\Delta_{\mathbf{r}}.$$

Il est donc tout simplement, pour les valeurs réelles positives de s , proportionnel à l'opérateur de Helmholtz ! Alors, comme montré dans le chapitre 2, parmi les diverses conditions de bord C.L. $(\phi|\partial\mathcal{D})$ qui garantissent l'unicité de l'EDP (3.26), figurent les conditions de Dirichlet d'une part, et les conditions de Neumann d'autre part.

Conditions de Dirichlet. Dans le monde de Laplace, il faut fixer $\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s)$ sur la frontière $\partial\mathcal{D}$ égale à une fonction $\tilde{D}(\mathbf{r}, s)$ donnée, pour tout s . Par transformation de Laplace inverse, ceci revient à imposer

$$\phi(\mathbf{r}, t) = D(\mathbf{r}, t) \quad \text{pour } \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D} \text{ et tout } t. \quad (3.28)$$

Soulignons que la fonction de bord $D(\mathbf{r}, t)$ peut non seulement varier lorsque la position décrit $\partial\mathcal{D}$, mais elle peut aussi évoluer arbitrairement dans le temps, en restant cependant compatible avec la C.I. $(\phi|_{t_0})$, ce qui signifie que pour $\mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}$, $D(\mathbf{r}, t_0) = \phi_0(\mathbf{r})$. Les conditions aux limites définies par la réunion des contraintes (3.27) et (3.28) déterminent univoquement le champ ϕ .

Conditions de Neumann. Par inversion des conditions de Neumann simples dans le monde de Laplace, nous trouvons les contraintes correspondantes sur $\phi(\mathbf{r}, t)$,

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, t) = N(\mathbf{r}, t) \quad \text{pour } \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D} \text{ et tout } t, \quad (3.29)$$

où la fonction de bord donnée $N(\mathbf{r}, t)$ varie arbitrairement sur $\partial\mathcal{D}$ et dans le temps, la condition de compatibilité avec la C.I. ($\phi|_{t_0}$) étant ici $N(\mathbf{r}, t_0) = \mathbf{n} \cdot \nabla \phi_0(\mathbf{r})$ pour $\mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}$. Les conditions (3.27) et (3.29) garantissent l'unicité du champ ϕ .

L'exercice 3.1 propose de retrouver ces résultats sur l'unicité de l'équation de diffusion, par des manipulations de la première formule de Green analogues à celles effectuées dans la section 2.1.3.. Notons aussi que les exercices 3.9 et 3.10 présentent d'autres C.L., appelées de Robin.

Équation intégrale et fonctions de Green

Dans le monde de Laplace, l'EDP (3.20) pour $\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s)$ devient ici

$$[s - D\Delta_{\mathbf{r}}] \tilde{\phi}(\mathbf{r}, s) = \tilde{\rho}(\mathbf{r}, s) + \phi_0(\mathbf{r}) \quad (3.30)$$

où nous avons utilisé $I_0(\mathbf{r}, s) = -\phi_0(\mathbf{r})$. Par ailleurs, l'équation (3.22) donne ici $\tilde{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s) = G_s(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$, l'EDP satisfaite par cette fonction de Green étant

$$[s - D\Delta_{\mathbf{r}}] G_s(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') .$$

Comme $[s - D\Delta_{\mathbf{r}}]$ est proportionnel à l'opérateur de Helmholtz $[-\Delta_{\mathbf{r}} + s/D]$, $\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s)$ satisfait alors l'équation intégrale

$$\begin{aligned} \tilde{\phi}(\mathbf{r}, s) &= \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \tilde{\rho}(\mathbf{r}', s) \tilde{G}_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; s) + \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \phi_0(\mathbf{r}') \tilde{G}_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; s) \\ &\quad - D \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \tilde{\phi}(\mathbf{r}', s) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \tilde{G}_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; s) \\ &\quad + D \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \tilde{G}_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; s) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \tilde{\phi}(\mathbf{r}', s), \end{aligned} \quad (3.31)$$

qui est l'analogue⁶ de l'équation (2.27) établie page 75 pour un champ solution de l'EDP de Helmholtz (2.42).

Prenons la transformée de Laplace inverse de l'équation intégrale (3.31). Cette inversion étant linéaire, la transformée inverse d'une intégrale spatiale est égale à l'intégrale de la transformée inverse de l'intégrant : en d'autres termes, l'opérateur d'inversion $\mathcal{L}^{-1}$ peut être passé sous le signe somme. De

6. L'équation intégrale (2.27) est directement applicable à $\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s)$ en divisant les termes de source par D . Dans cette équation, la fonction de Green utilisée est égale à D fois G_s , ce qui conduit à la formule (3.31).

plus, la transformée inverse du produit de deux fonctions quelconques $\tilde{f}_1(s)$ et $\tilde{f}_2(s)$ est donnée par la formule de convolution

$$\mathcal{L}^{-1}[\tilde{f}_1 \tilde{f}_2](t) = \int_0^{t-t_0} d\tau \, f_1(t_0 + \tau) f_2(t - \tau) .$$

Avec ces règles de calcul, nous obtenons finalement

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \, \rho(\mathbf{r}', t - \tau) G_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; \tau) \\ & + \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \, \phi_0(\mathbf{r}') \, G_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; t - t_0) \\ & - D \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \, \phi(\mathbf{r}', t - \tau) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} G_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; \tau) \\ & + D \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \, G_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; \tau) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}', t - \tau) . \end{aligned} \quad (3.32)$$

Le lecteur est invité à retrouver cette équation intégrale sans passer dans le monde de Laplace. Pour cela il faut exploiter la seconde formule de Green (2.20) comme dans le raisonnement conduisant à la formule (2.27) ; il est de plus nécessaire de procéder à une intégration temporelle des identités obtenues entre l'instant initial t_0 et un instant $t_f > t$.

Chaque terme de la formule (3.32) a une interprétation physique simple. Le premier terme est la contribution de la superposition des sources flash. En plus de l'intégrale spatiale ainsi attendue sur tout le domaine $\mathcal{D}$, il apparaît une intégrale temporelle sur le temps retardé τ de la contribution émise par chaque source flash. La densité $\rho(\mathbf{r}', t - \tau)$ est à évaluer en un temps retardé, comme conséquence de la causalité. Le second terme décrit, en quelque sorte, la diffusion de la condition initiale ϕ_0 . Les troisième et quatrième termes sont les analogues des termes de surface déjà rencontrés dans la formule (2.27). Ils prennent en compte la contribution de sources superficielles induites, et naturellement leur structure incorpore la diffusion et la causalité comme le premier terme de volume.

Similairement à la formule (2.27) pour un champ statique, l'expression (3.32) n'est pas complètement explicite car le terme de surface dépend des valeurs du champ ϕ et de sa dérivée normale $\mathbf{n} \cdot \nabla \phi$ sur la frontière $\partial\mathcal{D}$, qui ne peuvent être simultanément imposées par des conditions de bord. Néanmoins, comme dans le cas statique, la liberté dans le choix de la fonction de Green causale G^+ , lui confère un grand intérêt comme nous allons le voir.

Fonctions de Green causales

Les fonctions de Green causales G^+ sont solution de l'EDP

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - D\Delta_{\mathbf{r}} \right] G^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')\delta(t - t'), \quad (3.33)$$

et elles satisfont la condition de causalité $G^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = 0$ pour $t < t'$. Elles se différencient entre elles par la nature des conditions de bord choisies. Nous considérons successivement des conditions de Dirichlet homogènes, puis des conditions de Neumann homogènes sur $\partial\mathcal{D}$.

Conditions de Dirichlet homogènes. Ces conditions stipulent que $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ s'annule identiquement pour $\mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}$. Comme montré dans la section générale précédente, $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ est décomposable en termes des fonctions propres ψ_n de l'opérateur $-\Delta$ définies par des conditions de Dirichlet homogènes, de valeurs propres λ_n . Ces fonctions propres sont supposées former une base orthonormale de l'espace des fonctions s'annulant sur la frontière $\mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}$. Dans la représentation spectrale (3.15) correspondante, la fonction $Z_n(\tau)$ est la solution de l'équation différentielle ordinaire⁷

$$\frac{d}{d\tau} Z_n(\tau) + D \lambda_n Z_n(\tau) = 0$$

avec la condition initiale $Z_n(0) = 1$. Nous obtenons immédiatement $Z_n(\tau) = e^{-D\lambda_n\tau}$, de sorte que la représentation spectrale (3.15) devient ici

$$\boxed{G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = \theta(t - t') \sum_n e^{-D\lambda_n(t-t')} \psi_n(\mathbf{r})\psi_n^*(\mathbf{r}').} \quad (3.34)$$

Cette formule n'est complètement explicite, qu'à condition de déterminer le spectre du Laplacien dans le domaine fini $\mathcal{D}$ considéré, ce qui reste un problème très ardu comme évoqué page 77. Néanmoins, elle permet de comprendre certaines propriétés importantes de G_{DH}^+ .

Aux temps courts, $t \rightarrow t'$, le comportement de G_{DH}^+ est obtenu à partir de la formule générale (3.17) avec $p = 1$, i.e. :

$$\boxed{\lim_{\tau \rightarrow 0^+} G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').} \quad (3.35)$$

Comme montré par la représentation spectrale (3.34), le comportement de G_{DH}^+ aux temps longs $t \rightarrow +\infty$ est contrôlé par la plus petite valeur propre λ_0 de l'opérateur $-\Delta$. Ce dernier étant strictement défini positif avec les conditions de Dirichlet homogènes, λ_0 est strictement positive. Par conséquent

7. Précisons par rapport à la discussion générale que les valeurs propres des fonctions $\psi_n(\mathbf{r})$ sont définies ici comme valeurs propres de l'opérateur $\mathcal{O}_{\mathbf{r}}/D$ plutôt que de $\mathcal{O}_{\mathbf{r}}$.

$G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ décroît exponentiellement vite vers zéro quand $t \rightarrow +\infty$. Enfin, G_{DH}^+ obéit à la relation de réciprocité

$$G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = G_{DH}^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; t - t'), \quad (3.36)$$

que le lecteur pourra montrer soit en manipulant la seconde formule de Green (2.20), soit en exploitant le caractère réel des fonctions propres du Laplacien.

Les propriétés précédentes se comprennent aisément du point de vue physique. Le comportement limite (3.35) montre que $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ est proportionnelle à une densité de particules qui diffusent, ces particules étant toutes localisées en $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ au temps initial $t = t'$. La décroissance de $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ aux temps longs entraîne alors la diminution du nombre de particules contenues dans le domaine $\mathcal{D}$. Ceci est bien compatible avec l'interprétation des conditions de Dirichlet homogènes : elles décrivent une paroi absorbante, car la condition d'annulation de $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ sur $\partial\mathcal{D}$ signifie que toute particule qui l'atteint disparaît ! Enfin, la relation de réciprocité traduit l'équivalence entre les diffusions de $\mathbf{r}$ à $\mathbf{r}'$ d'une part, et de $\mathbf{r}'$ à $\mathbf{r}$ d'autre part.

Conditions de Neumann homogènes. Ces conditions imposent la nullité de $\mathbf{n} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ pour tout $\mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}$. La forme de la représentation spectrale de G_{NH}^+ est identique à celle (3.34) de G_{DH}^+ , avec maintenant des fonctions propres et valeurs propres de l'opérateur $-\Delta$ définies par des conditions de Neumann homogènes.

Quand $t - t' \rightarrow 0^+$, $G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ exhibe le même comportement limite (3.35) que $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$. Par contre, quand $t \rightarrow +\infty$, nous trouvons

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = \frac{1}{V} \quad (3.37)$$

où $V = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}$ est le volume du domaine $\mathcal{D}$. Ce résultat est la conséquence de l'existence de la valeur propre nulle $\lambda_0 = 0$ avec la fonction propre associée $\psi_0(\mathbf{r}) = 1/V^{1/2}$ pour des conditions de Neumann homogènes. Toutes les autres valeurs propres λ_n sont strictement positives, et leurs contributions dans la représentation spectrale de $G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ deviennent exponentiellement plus petites que celle de $\lambda_0 = 0$, qui est bien la constante $1/V$. La représentation spectrale de G_{NH}^+ s'écrit donc :

$$G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = \theta(t - t') \left[\frac{1}{V} + \sum_{n \neq 0} e^{-D\lambda_n(t-t')} \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') \right]. \quad (3.38)$$

En relation avec cette expression, $G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ vérifie également la règle de somme

$$\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = 1 \quad (3.39)$$

pour tout temps $t > t'$. Ce résultat peut être démontré en remarquant que, pour $n \neq 0$,

$$\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} \psi_n(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\lambda_n} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} \Delta \psi_n(\mathbf{r}) = -\frac{1}{\lambda_n} \int_{\partial \mathcal{D}} d\Sigma \mathbf{n} \cdot \nabla \psi_n(\mathbf{r}) = 0,$$

du fait des C.L. de Neumann homogènes satisfaites par les fonctions ψ_n .

Enfin, le caractère réel des fonctions propres de $-\Delta$ conduit aussi à l'invariance de $G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ dans l'échange de $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$.

Similairement au cas de Dirichlet, $G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ décrit la diffusion de particules initialement toutes localisées en $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. La différence essentielle dans l'évolution ultérieure provient de la nature complètement différente des conditions de bord. Les conditions de Neumann homogènes reviennent à annuler la composante du courant de particules normale à la paroi, car ce courant est proportionnel à $\nabla_{\mathbf{r}} G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ d'après la loi de Fick. Elles correspondent donc à une paroi réfléchissante. Ainsi, les particules diffusantes restent à l'intérieur du domaine $\mathcal{D}$. La règle de somme (3.39) traduit alors la conservation du nombre total de particules. Le comportement (3.37) traduit simplement l'équiprobabilité de présence à la limite $t \rightarrow +\infty$.

Notons que les comportements mis en évidence ci-dessus sont bien illustrés par l'exemple de la diffusion dans un segment, traité au §3.2.1, page 199.

Fonction de Green causale du système infini

Considérons le cas où le domaine $\mathcal{D}$ est maintenant l'espace tout entier $\mathbb{R}^d$. Soit G_{∞}^+ la fonction de Green causale avec des conditions de Dirichlet homogènes à l'infini, i.e. $G_{\infty}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') \rightarrow 0$ quand $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. Par suite de l'invariance par translation spatiale de l'opérateur de diffusion, G_{∞}^+ ne dépend que de la différence $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$.

Calcul explicite par double transformation de Fourier et de Laplace.

La transformée de Laplace $\tilde{G}_{\infty}^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; s)$ n'est autre que la fonction de Green homogène du système infini associée à l'opérateur $s - D\Delta$. La transformée de Fourier de celle-ci est alors simplement calculée à partir de la formule (2.46), page 85,

$$\widehat{\tilde{G}}_{\infty}^+(\mathbf{k}; s) = \frac{1}{D\mathbf{k}^2 + s}. \quad (3.40)$$

La transformée de Laplace inverse de l'expression (3.40) donne immédiatement

$$\hat{G}_{\infty}^+(\mathbf{k}; t - t') = e^{-D\mathbf{k}^2(t-t')},$$

dont la transformée de Fourier inverse s'écrit

$$G_{\infty}^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t') = \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k} e^{[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - D\mathbf{k}^2(t-t')]}.$$

Il ne reste plus qu'à calculer l'intégrale sur $\mathbf{k}$, i.e. la transformée de Fourier d'une fonction gaussienne. Comme détaillé dans l'annexe E, le résultat est aussi une fonction gaussienne, ce qui donne ici

$$G_{\infty}^{+}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t') = \frac{1}{(4\pi D(t - t'))^{d/2}} \exp \left[-\frac{(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{4D(t - t')} \right]. \quad (3.41)$$

Notons que le résultat (3.25), page 155, donne ici pour la transformée de Fourier spatio-temporelle de G_{∞}^{+} ,

$$\hat{G}_{\infty}^{+}(\mathbf{k}; \omega) = \frac{1}{D\mathbf{k}^2 - i\omega}.$$

L'absence de singularité pour ω réel est due au caractère dissipatif de la diffusion, caractère qui est illustré à maintes reprises dans la suite.

Interprétation et règles de somme. Comme les fonctions de Green causales dans un domaine fini, G_{∞}^{+} peut être interprétée comme proportionnelle à la densité de particules diffusantes, toutes initialement localisées en $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$. De manière équivalente, G_{∞}^{+} décrit également la distribution de probabilité en $\mathbf{r}$ et à l'instant t d'une particule brownienne se trouvant en $\mathbf{r}'$ à l'instant initial t' . Il est facile de montrer à partir de l'expression (3.41) quelques résultats simples. Tout d'abord, nous obtenons par simple intégration spatiale d'une gaussienne,

$$\int d\mathbf{r} G_{\infty}^{+}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t') = 1 \quad \forall t > t', \quad (3.42)$$

qui est l'exact analogue de la règle de somme (3.39) pour les conditions de Neumann homogènes. En fait, dans le système infini, les conditions de Dirichlet et de Neumann homogènes sont équivalentes et conduisent à la même fonction de Green causale G_{∞}^{+} . La formule (3.42) traduit donc la normalisation invariable de la distribution de probabilité de la particule brownienne.

Le second moment spatial de G_{∞}^{+} , aussi dit parcours quadratique moyen, est simplement relié à la variance de l'expression gaussienne (3.41),

$$\langle (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 \rangle = \int d\mathbf{r} (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 G_{\infty}^{+}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t')$$

et vaut

$$\langle (\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2 \rangle = 6D(t - t').$$

Ce résultat important et bien connu signifie que l'éloignement moyen de la particule de son point de départ augmente comme la racine carrée du temps seulement (voir figure 3.1).

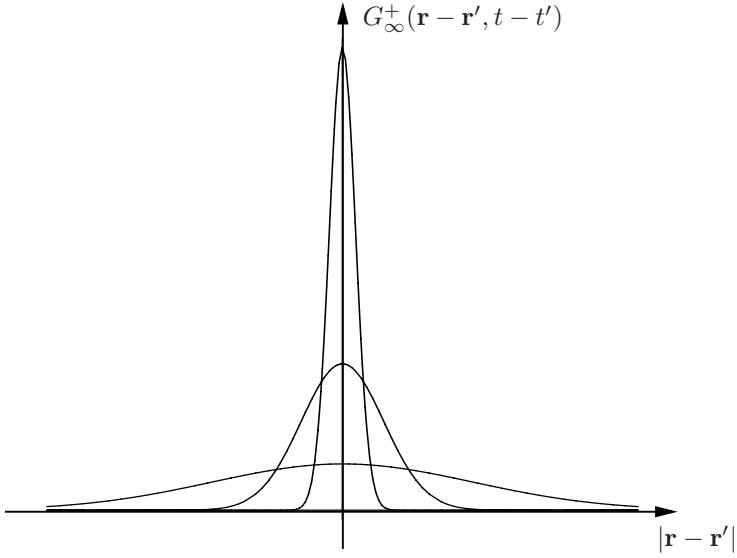


FIG. 3.1 – Représentation de la fonction de Green (3.41) en fonction de $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$ pour divers intervalles de temps $t - t'$: entre chaque courbe, l'intervalle de temps a été multiplié par dix.

Solution de l'équation de diffusion

Revenons au champ ϕ induit par une densité de source ρ arbitraire et satisfaisant des conditions de bord C.L. $(\phi|\partial\mathcal{D})$. Nous allons montrer qu'un choix adéquat de la fonction de Green causale dans l'équation intégrale (3.32), fournit immédiatement une représentation explicite de ϕ .

Conditions de Dirichlet. Supposons que les C.L. $(\phi|\partial\mathcal{D})$ soient du type Dirichlet (3.28). L'application de la formule (3.32) avec la fonction de Green causale de Dirichlet homogène G_{DH}^{+} donne⁸

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}', t - \tau) G_{DH}^{+}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) \\ & + \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \phi_0(\mathbf{r}') G_{DH}^{+}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t_0) \\ & - D \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' D(\mathbf{r}', t - \tau) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} G_{DH}^{+}(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; \tau) \end{aligned} \quad (3.43)$$

qui constitue une expression explicite de la solution de l'EDP (3.26), *modulo* la connaissance de G_{DH}^{+} bien sûr.

8. Pour écrire cette formule, nous avons utilisé la symétrie en $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$ de la fonction de Green $G_{DH}^{+}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau)$.

Remarquons que pour $t \rightarrow t_0^+$, seul le terme de diffusion de la condition initiale contribue. De plus, en vertu du résultat (3.35), page 159, la relation (3.43) donne bien $\phi(\mathbf{r}, t) \rightarrow \phi_0(\mathbf{r})$ dans cette limite. Cette propriété est l'exacte analogue de celle discutée dans le cas statique pour le Laplacien, page 81.

En l'absence de sources, $\rho(\mathbf{r}', t) = 0$, la formule (3.43) se réduit au terme de diffusion de la condition initiale

$$\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \phi_0(\mathbf{r}') G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t_0) , \quad (3.44)$$

plus le terme de surface

$$-D \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' D(\mathbf{r}', t - \tau) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} G_{DH}^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; \tau) . \quad (3.45)$$

Aux grands temps $t \rightarrow +\infty$, le terme de condition initiale (3.44) disparaît comme conséquence de la décroissance de $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t_0)$. Il ne reste alors que le terme de surface (3.45). Ainsi, après disparition du régime transitoire dépendant de la condition initiale, c'est uniquement le champ imposé au bord $D(\mathbf{r}', t')$ qui force l'évolution de ϕ dans le domaine $\mathcal{D}$. Ce forçage est diffusé via G_{DH}^+ dans tout le domaine, conformément à l'interprétation générale des fonctions de Green causales en termes de fonctions de réponse. Un exemple pratique de cette situation est celui d'un échantillon dont on fait varier la température des parois grâce à des thermostats extérieurs.

Toujours en l'absence de sources, pour des conditions homogènes, c'est-à-dire avec $D(\mathbf{r}', t') = 0$, le champ ϕ est entièrement déterminé par le terme de condition initiale (3.44). Alors, quelque soit le champ initial $\phi_0(\mathbf{r})$, le champ $\phi(\mathbf{r}, t)$ tend vers zéro en tout point du domaine quand $t \rightarrow +\infty$. Si ϕ décrit la densité de particules qui diffusent, cette propriété traduit l'évasion complète de toutes les particules par suite du caractère absorbant des parois. Ceci constitue une manifestation du caractère irréversible de la diffusion.

Conditions de Neumann. Imaginons maintenant que les C.L. $(\phi|\partial\mathcal{D})$ soient du type Neumann (3.29). L'application de la formule (3.32) avec la fonction de Green causale de Neumann homogène G_{NH}^+ permet alors de déterminer ϕ à travers l'expression explicite

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}', t - \tau) G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) \\ & + \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \phi_0(\mathbf{r}') G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t_0) \\ & + D \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' G_{NH}^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; \tau) N(\mathbf{r}', t - \tau). \end{aligned} \quad (3.46)$$

En l'absence de sources, seuls les termes de condition initiale et de surface contribuent à ϕ . Supposons de plus que les conditions de Neumann soient

homogènes, c'est-à-dire $N(\mathbf{r}', t) = 0$. Alors, il ne reste plus que le terme de condition initiale. À la différence du cas de Dirichlet, ce dernier ne disparaît pas aux grands temps. En effet, en vertu du comportement limite (3.37) de $G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t_0)$ quand $t \rightarrow +\infty$, le champ $\phi(\mathbf{r}, t)$ tend alors vers la constante

$$\frac{\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \phi_0(\mathbf{r}')}{V}. \quad (3.47)$$

Lorsque ϕ décrit une densité locale de particules, ceci traduit l'homogénéisation de cette densité au bout d'un temps suffisamment long, et ce quelque soit la forme de la densité initiale. Ce comportement remarquable est une autre manifestation de l'irréversibilité de la diffusion.

Utilisation de la fonction de Green causale du système infini. La formule (3.32) reste valable lorsque la fonction de Green causale du système infini G_{∞}^+ est utilisée. Cette formule ne fournit pas alors explicitement le champ ϕ , mais la forme gaussienne simple (3.41) de $G_{\infty}^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t')$ facilite les analyses de comportements aux grands temps, ou bien loin des bords du domaine fini considéré. Plus généralement, l'utilisation de G_{∞}^+ permet de mieux comprendre l'évolution des différentes contributions au champ ϕ , étant entendu que cette fonction de Green incorpore les mécanismes essentiels de la diffusion.

Pour conclure cette section consacrée à l'équation de diffusion, considérons à nouveau le cas sans source, c'est-à-dire $\rho = 0$, avec des C.L. $(\phi|\partial\mathcal{D})$ homogènes, par exemple de Dirichlet. Oublions ce que nous avons appris et imaginons que nous revenions au début du chapitre 2. L'EDP à résoudre étant homogène, on pourrait se demander pourquoi introduire des fonctions de Green dans ce cas simple. Comme indiqué plus haut, le résultat (3.43) montre cependant que

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \phi_0(\mathbf{r}') G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t_0)$$

et donc qu'un calcul préalable de G_{DH}^+ donne accès à la solution ϕ . En fait, comme discuté page 153, dans le monde de Laplace, la condition initiale se traduit par un terme de source associé à cette C.I. En résumé, la connaissance des fonctions de Green causales est donc aussi adaptée pour résoudre l'équation de diffusion homogène avec C.I. Cette remarque va prendre tout son sens dans la section suivante, consacrée à l'équation de Schrödinger.

3.1.4 Équation de Schrödinger

L'équation de Schrödinger est la principale équation de la mécanique quantique. Nous l'avons déjà rencontrée dans le chapitre 2, où nous avons montré au paragraphe 2.2.3 comment les états propres et valeurs propres d'un

Hamiltonien H donné, pouvaient être déterminées à partir des fonctions de Green associées à la résolvante $[\lambda + H]^{-1}$. Dans la suite, nous considérons tout d'abord le Hamiltonien non-relativiste d'une particule de masse m soumise à un potentiel indépendant du temps $V(\mathbf{r})$,

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}). \quad (3.48)$$

L'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t} = H\phi, \quad (3.49)$$

engendre alors l'évolution temporelle de la fonction d'onde $\phi(\mathbf{r}, t)$ de la particule. Cette équation est de la forme générale (3.1) sans sources, i.e. :

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - \frac{H}{i\hbar} \right] \phi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.50)$$

Le champ ϕ correspond donc à la fonction d'onde. Comme cela a été annoncé à la fin de la section précédente, notons que cette EDP est homogène. Par ailleurs, puisque le potentiel est indépendant du temps, l'opérateur $\mathcal{O}$ est bien de la forme additive (3.10) avec $\mathcal{O}_t = (\partial/\partial t)$ et $\mathcal{O}_{\mathbf{r}} = -(H/i\hbar)$. Les méthodes introduites dans la section 3.1.2 sont donc applicables. Elles permettent de préciser d'abord les conditions aux limites à imposer sur ϕ pour garantir l'unicité de la solution de l'EDP (3.50). Nous étudions ensuite les propriétés des fonctions de Green causales associées. Puis nous considérons le cas d'une particule quantique libre. Vient ensuite le paragraphe donnant l'expression standard de la solution de l'EDP considérée, ici l'équation de Schrödinger. Enfin, nous mettons en lumière l'intérêt des fonctions de Green dans la construction de développements perturbatifs.

Conditions aux limites

Considérons donc l'équation de Schrödinger (3.50) dans un domaine fini $\mathcal{D}$, et déterminons les conditions aux limites permettant d'obtenir une solution unique dans $\mathcal{D}$. L'opérateur $\mathcal{O}_t$ étant du premier ordre, les conditions initiales C.I. $(\phi|t_0)$ consistent, comme dans le cas de l'équation de diffusion, à fixer la valeur de la fonction d'onde pour un temps initial t_0 en tout point du domaine,

$$\phi(\mathbf{r}, t_0) = \phi_0(\mathbf{r}) \quad \text{pour tout } \mathbf{r} \in \mathcal{D}. \quad (3.51)$$

Pour déterminer la nature des conditions de bord C.L. $(\phi|\partial\mathcal{D})$ qui garantissent l'unicité, il est commode de passer à nouveau dans le monde de Laplace. Ici, l'opérateur statique $[P_1(s) + \mathcal{O}_{\mathbf{r}}]$, introduit page 153, vaut

$$s - \frac{H}{i\hbar}.$$

Il est donc, à une constante multiplicative près[✱], de la forme des opérateurs étudiés page 100, dans la section 2.1.6 du chapitre 2. En particulier, comme montré page 100, les conditions de Dirichlet, ou les conditions de Neumann, sont suffisantes pour assurer l'unicité de ϕ .

✱ Commentaire 3.1.3. L'identification avec l'opérateur intervenant dans l'équation (2.73) est complète en écrivant

$$[s - (H/i\hbar)] = (i\hbar/2m)[- \Delta + f(\mathbf{r}) + \lambda]$$

avec

$$f(\mathbf{r}) = \frac{2mV(\mathbf{r})}{\hbar^2} \quad \text{et} \quad \lambda = -\frac{2mis}{\hbar}.$$

En particulier, on a bien $\text{Im } \lambda \neq 0$ pour s réel.

Sur un plan mathématique, les conditions de bord de Dirichlet ou de Neumann sont également acceptables. Il se trouve, que les conditions de Dirichlet homogènes sont les plus courantes en mécanique quantique, car ce sont celles qui décrivent les réalisations physiques où la particule reste enfermée dans le domaine $\mathcal{D}$ au cours de l'évolution. En effet, le potentiel $V(\mathbf{r})$ doit alors être strictement confinant en dehors de ce domaine, *i.e.* $V(\mathbf{r}) = +\infty$ pour $\mathbf{r} \notin \mathcal{D}$. La fonction d'onde s'annulant identiquement en dehors de $\mathcal{D}$, par continuité elle est également nulle sur la frontière $\partial\mathcal{D}$. Les conditions de Dirichlet homogènes correspondantes

$$\phi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \text{pour } \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D} \text{ et tout } t, \quad (3.52)$$

plus les conditions initiales (3.51), définissent bien univoquement la solution de l'équation de Schrödinger dans le domaine $\mathcal{D}$. Seules ces conditions aux limites sur ϕ seront utilisées dans la suite de cette section.

Fonction d'onde et fonctions de Green

Commençons par écrire l'EDP (3.20) pour $\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s)$, transformée de Laplace de $\phi(\mathbf{r}, t)$. Elle prend la forme

$$\left[s - \frac{H}{i\hbar} \right] \tilde{\phi}(\mathbf{r}, s) = \phi_0(\mathbf{r}), \quad (3.53)$$

car $\tilde{\rho} = 0$ et $I_0(\mathbf{r}, s) = -\phi_0(\mathbf{r})$. De plus, l'équation (3.22) donne ici $\tilde{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s) = G_s(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$. Comme indiqué page 100 dans la section 2.1.6, $\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s)$ satisfait alors l'équation intégrale

$$\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \phi_0(\mathbf{r}') \tilde{G}_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; s) + \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \tilde{G}_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; s) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \tilde{\phi}(\mathbf{r}', s). \quad (3.54)$$

La transformation de Laplace inverse membre à membre de la formule précédente est analogue à celle effectuée page 157 dans le cas de la diffusion.

Nous obtenons :

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \phi_0(\mathbf{r}') G_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; t - t_0) \\ & + \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' G_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; \tau) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}', t - \tau), \end{aligned} \quad (3.55)$$

où $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}', t - t')$ est une fonction de Green causale homogène de l'opérateur $[(\partial/\partial t) - (H/i\hbar)]$, solution de l'EDP,

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - i \frac{\hbar}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} - \frac{V(\mathbf{r})}{i\hbar} \right] G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}', t - t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t'), \quad (3.56)$$

avec la condition de causalité $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}', t - t') = 0$ pour $t < t'$.

L'expression (3.55) est semblable à celle obtenue page 158 pour la diffusion. Dans le cas de la mécanique quantique, le terme de surface dépendant de la valeur de $\phi(\mathbf{r}', t - \tau)$ sur les bords, n'apparaît pas, en vertu des conditions de Dirichlet homogènes (3.52). Par contre, celui impliquant $\nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}', t - \tau)$ est présent en général, car $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}', \tau)$ peut prendre des valeurs non-nulles sur la frontière du domaine.

Fonctions de Green causales

Nous présentons ici seulement les fonctions de Green causales satisfaisant les mêmes C.L. que la fonction d'onde, i.e. des conditions de Dirichlet homogènes.

Cas du domaine fini. La fonction de Green $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ s'annule identiquement sur la frontière $\partial\mathcal{D}$ du domaine. Supposons que les fonctions propres ψ_n du Hamiltonien H définies par des conditions de Dirichlet homogènes forment une base orthonormale. Dans la représentation spectrale (3.15) correspondante de $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$, chaque fonction $Z_n(\tau)$ est la solution de l'équation différentielle ordinaire

$$\frac{d}{d\tau} Z_n(\tau) - \frac{E_n}{i\hbar} Z_n(\tau) = 0$$

avec la condition initiale $Z_n(0) = 1$, E_n étant l'énergie associée à la fonction propre ψ_n . Une intégration élémentaire donne le pur facteur de phase $Z_n(\tau) = e^{-iE_n\tau/\hbar}$, de sorte que $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ s'écrit

$$G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = \theta(t - t') \sum_n e^{-iE_n(t-t')/\hbar} \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}'). \quad (3.57)$$

Notons que la formule (3.57) peut être retrouvée en prenant la transformée de Laplace inverse de la représentation spectrale

$$\tilde{G}_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s) = G_s(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \sum_n \frac{\psi_n(\mathbf{r})\psi_n^*(\mathbf{r}')}{s - \frac{E_n}{i\hbar}}. \quad (3.58)$$

Comme montré dans la section 2.1.6, page 101, dans le langage opératoire, $G_s(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ est un élément de matrice de la résolvante $[s - (H/i\hbar)]^{-1}$,

$$G_s(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = \langle \mathbf{r} | \frac{1}{s - (H/i\hbar)} | \mathbf{r}' \rangle.$$

Dans ce même langage, la représentation (3.57) devient

$$\boxed{G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = \theta(t - t') \langle \mathbf{r} | e^{-iH(t-t')/\hbar} | \mathbf{r}' \rangle.} \quad (3.59)$$

Donc, la fonction de Green causale $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ n'est autre, pour $t > t'$, que l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution $e^{-iH(t-t')/\hbar}$ entre le bra $\langle \mathbf{r} |$ et le ket $| \mathbf{r}' \rangle$. Autrement dit, $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ est l'amplitude de probabilité pour la particule de passer de la position $\mathbf{r}'$ en t' à la position $\mathbf{r}$ en $t > t'$. Cette interprétation est bien compatible avec le comportement aux temps courts

$$\lim_{\tau \rightarrow 0^+} G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'), \quad (3.60)$$

qui traduit qu'à l'instant t' , la particule est strictement localisée en $\mathbf{r}'$ dans l'état quantique décrit par le ket $| \mathbf{r}' \rangle$.

Cas de l'espace tout entier. Pour obtenir la fonction de Green causale de Dirichlet homogène $G_\infty^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ dans $\mathbb{R}^d$, il faut procéder par un processus de limite en introduisant un domaine fini dont on fait tendre la taille vers l'infini. Une fois cette limite prise, le spectre du Hamiltonien se compose, en général, d'une partie discrète et d'un continuum. Les fonctions propres dans la partie discrète du spectre sont de carré sommable, i.e. $\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} |\psi_n(\mathbf{r})|^2 < \infty$, et elles décrivent des états localisés tels que $\psi_n(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ quand $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. La représentation spectrale de $G_\infty^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ est de la forme (3.57), en convenant que la sommation sur les états du continuum se ramène à une intégrale sur la variable continue E_n faisant intervenir la densité d'états. Pour un Hamiltonien général, le calcul explicite de $G_\infty^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ n'est pas un problème simple. Nous revenons plus loin sur ce problème dans le paragraphe consacré aux développements perturbatifs et présentons ci-dessous le cas d'une particule libre.

Particule quantique libre

Cas de l'espace $\mathbb{R}^3$ tout entier. Pour une particule libre de Hamiltonien $H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta$, le calcul de G_∞^+ , solution de l'équation (3.56) est élémentaire. Il n'existe pas d'état localisé car le potentiel $V(\mathbf{r})$ est identiquement nul. Le spectre se compose uniquement d'une partie continue, où n peut être remplacé par le nombre d'onde $\mathbf{k}$, et l'énergie E_n correspondante devient $E(\mathbf{k}) = \hbar^2 \mathbf{k}^2 / (2m)$. Par ailleurs les fonctions d'onde ψ_n sont des combinaisons linéaires d'ondes planes $e^{\pm i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$, et la somme sur n devient une intégrale sur $\mathbf{k}$ avec une densité d'états indépendante de $\mathbf{k}$. Nous obtenons ainsi à partir de l'équation (3.57), et à trois dimensions,

$$G_\infty^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t') = \frac{1}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \exp[i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - i\frac{\hbar \mathbf{k}^2}{2m}(t - t')] \quad (3.61)$$

pour $t > t'$. Il nous reste encore, comme pour le cas de la fonction de Green de la diffusion libre, des intégrales gaussiennes découplées, mais cette fois-ci avec des arguments purement imaginaires. En faisant appel à la méthode exposée dans l'annexe E, et en introduisant un simple changement de variables, nous obtenons

Particule libre : $G_\infty^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t') = \left(\frac{m}{2\pi i \hbar (t - t')} \right)^{3/2} e^{\frac{im(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{2\hbar(t - t')}}.$

(3.62)

La fonction analytique $Z^{3/2}$ qui intervient dans la formule (3.62) est définie *modulo* le choix de détermination

$$Z^{3/2} = |Z|^{3/2} e^{i\frac{3}{2} \arg Z} \quad \text{avec } \arg Z \in]-\pi, \pi[,$$

le demi-axe réel négatif étant une coupure partant du point singulier $Z = 0$.

L'expression (3.62) est similaire à l'équation (3.41) obtenue page 162 pour la diffusion. En fait, pour passer de l'une à l'autre, il suffit de faire la substitution $D \rightarrow i(\hbar/2m)$, comme suggéré par l'examen des opérateurs définissant les fonctions de Green respectives. Autrement dit, le problème de la particule libre en mécanique quantique est équivalent à la diffusion libre avec une constante de diffusion imaginaire pure. Ainsi, l'analogie de la relation (3.40) est

$$\widehat{G}_\infty^+(\mathbf{k}; s) = \frac{1}{\frac{i\hbar}{2m} \mathbf{k}^2 + s}.$$

(3.63)

Nous revenons en détail sur cette analogie plus loin. Soulignons que l'expression (3.62) est un ingrédient essentiel de l'intégrale de chemins qui représente $G_\infty^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ en présence d'un potentiel $V(\mathbf{r})$ non-nul, comme exposé au chapitre 4.

Dans le cas de la particule quantique libre, la règle (3.25), page 155, appliquée au résultat (3.63) donne alors

$$\widehat{G}_{\infty}^{+}(\mathbf{k}; \omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^{+}} \frac{1}{\frac{i\hbar}{2m}\mathbf{k}^2 - i\omega + \epsilon}.$$

Ainsi, cette fois-ci, contrairement à la diffusion, la transformée de Fourier spatio-temporelle de G_{∞}^{+} est singulière en $\omega = \hbar\mathbf{k}^2/(2m)$ où elle présente un pôle simple[✱]. Cette singularité provient du caractère oscillant, sans décroissance aux temps longs de $\widehat{G}_{\infty}^{+}(\mathbf{k}; \tau)$. Cela n'est pas surprenant car l'équation de Schrödinger engendre une évolution conservative, sans dissipation.

✱ Commentaire 3.1.4. Pour un système de N particules en interaction décrit par un Hamiltonien H_N indépendant du temps, la fonction de Green à N corps peut être définie comme l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution $e^{-iH_N(t-t')/\hbar}$ dans l'espace des configurations de positions. En intégrant sur toutes les positions des particules sauf une, on introduit alors la fonction de Green à une particule. Cette quantité décrit la propagation d'une particule interagissant avec toutes les autres. Les propriétés analytiques de sa double transformée de Fourier-Laplace sont semblables à celles de $\widehat{G}_{\infty}(\mathbf{k}; -iz)$. En général, sur l'axe réel, les interactions gommant la singularité du cas libre en $\omega = \hbar\mathbf{k}^2/(2m)$. Si les interactions sont faibles, il apparaît un pic très pointu de largeur finie à la place. Ceci permet de définir la notion de quasi-particule, en identifiant sa masse effective par la position du pic, ainsi que son temps de vie via sa largeur. La notion de fonction de Green à une particule joue donc un rôle fondamental dans l'étude du problème quantique à N corps.

Comparaison avec la diffusion. Poursuivons cette comparaison entre diffusion et particule quantique libre. Bien que l'équation de Schrödinger correspondante

$$\frac{\partial}{\partial t}\phi(\mathbf{r}, t) = i\frac{\hbar}{2m}\Delta_{\mathbf{r}}\phi(\mathbf{r}, t),$$

soit de la même forme que l'équation de diffusion d'une densité $n(\mathbf{r}, t)$ de particules classiques

$$\frac{\partial}{\partial t}n(\mathbf{r}, t) = D\Delta_{\mathbf{r}}n(\mathbf{r}, t),$$

les évolutions respectives de $\phi(\mathbf{r}, t)$ et de $n(\mathbf{r}, t)$ sont extrêmement différentes ! Avant toute chose, remarquons que les conditions de bord ont des significations diamétralement opposées. Ainsi, les conditions de Dirichlet homogènes traduisent le confinement de la particule quantique dans la boîte, alors qu'elles entraînent l'évasion des particules diffusantes ! Pour confiner celles-ci, il faut en fait imposer des conditions de Neumann homogènes...

Pour ce qu'il en est de l'évolution elle-même, si la fonction d'onde initiale $\phi(\mathbf{r}, t_0) = \phi_0(\mathbf{r})$ est une fonction propre $\psi_n(\mathbf{r})$ du Hamiltonien avec l'énergie propre E_n , alors

$$\phi(\mathbf{r}, t) = e^{-iE_n(t-t_0)/\hbar} \psi_n(\mathbf{r}) ,$$

et $|\phi(\mathbf{r}, t)|^2$ reste constante au fil du temps en tout point du domaine, et égale à $|\psi_n(\mathbf{r})|^2$. Il existe donc une infinité de configurations initiales de la densité de probabilité quantique $|\phi(\mathbf{r}, t)|^2$ qui restent invariantes dans l'évolution ! Ce n'est pas le cas de la diffusion comme cela peut déjà se voir sur le comportement limite

$$\lim_{t \rightarrow +\infty} n(\mathbf{r}, t) = \frac{\int d\mathbf{r} n_0(\mathbf{r})}{V} ,$$

obtenu p. 165 dans le cas des C.L. de Neumann homogènes.

En fait, les natures profondément différentes des évolutions précédentes sont reliées aux propriétés d'invariance des équations correspondantes par rapport au renversement du temps, i.e. la transformation $t \rightarrow -t$. Pour l'équation de Schrödinger, cette transformation est équivalente à considérer l'évolution de ϕ^* , qui est bien sûr analogue à celle de ϕ : ceci traduit la réversibilité de l'évolution quantique. Au contraire, l'équation de diffusion n'est pas invariante sous la transformation $t \rightarrow -t$, d'où son caractère irréversible !

Le grand responsable d'effets autant dissemblables n'est autre que le nombre complexe $i \dots$. En conclusion, si formellement l'équation de Schrödinger pour la particule libre se déduit de l'équation de diffusion par la simple substitution $D \rightarrow i\hbar/(2m)$, le prolongement analytique correspondant n'est pas anodin, et il réserve bien des surprises.

Solution de l'équation de Schrödinger

Revenons au cas d'un potentiel $V(\mathbf{r})$ quelconque et à l'expression (3.55). L'utilisation de $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ dans cette expression fournit la fonction d'onde cherchée, alors que l'introduction de $G_{\infty}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ aide à une meilleure compréhension des effets de bord. C'est ce que nous allons montrer maintenant.

Forme explicite de la fonction d'onde. Comme $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ s'annule sur la frontière $\partial\mathcal{D}$ du domaine, le terme de surface disparaît dans l'équation intégrale (3.55), ce qui conduit à la forme explicite

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t_0) \phi_0(\mathbf{r}'). \quad (3.64)$$

Soulignons qu'en insérant l'expression (3.59), obtenue page 169, de $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ en termes de l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution, nous retrouvons la formule bien connue,

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \langle \mathbf{r} | e^{-iH(t-t_0)/\hbar} | \phi_0 \rangle ,$$

qui peut être obtenue par une intégration formelle de l'équation de Schrödinger réécrite sous la forme

$$\frac{\partial}{\partial t}|\phi\rangle = -\frac{iH}{\hbar}|\phi\rangle.$$

La formule (3.64) nous permet de compléter l'interprétation de la fonction de Green $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$. Tout d'abord, conformément à l'analyse du paragraphe précédent, nous vérifions que si la particule est strictement localisée en $\mathbf{r}_0$ à l'instant t_0 , c'est-à-dire si $\phi_0(\mathbf{r}') = \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}_0)$, alors $\phi(\mathbf{r}, t) = G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; t - t_0)$. Pour une fonction d'onde initiale quelconque, il faut superposer les amplitudes de probabilité $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t_0)$ pour passer de $\mathbf{r}'$ à $\mathbf{r}$, pondérées par la distribution initiale $\phi_0(\mathbf{r}')$. Si aux temps courts, le comportement (3.60) garantit que ϕ se réduit à la condition initiale ϕ_0 , l'analyse des temps longs est bien plus difficile. Cette difficulté provient de la sommation de facteurs de phase oscillants contenus dans $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t_0)$ qui interfèrent de manière extrêmement complexe, même dans le cas le plus simple de la particule libre.

Effets de bord. En utilisant $G_\infty^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$, l'équation intégrale (3.55) devient

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \phi_0(\mathbf{r}') G_\infty^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t_0) \\ & + i \frac{\hbar}{2m} \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' G_\infty^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}', t - \tau). \end{aligned}$$

(3.65)

L'intégrale de volume décrit l'évolution intrinsèque en l'absence de bords. L'intégrale de surface prend en compte toutes les réflexions sur les bords entre l'instant initial t_0 et l'instant t , ces réflexions étant propagées dans le volume via l'évolution intrinsèque gouvernée par $G_\infty^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau)$. À nouveau, ces ondes réfléchies interfèrent de manière complexe.

L'itération de l'équation intégrale (3.65) fournit un développement perturbatif de $\phi(\mathbf{r}, t)$, dont le p -ème terme peut être interprété comme décrivant les interférences induites par p réflexions sur la frontière $\partial\mathcal{D}$ du domaine. L'estimation de chacun de ces termes passe par la connaissance de $G_\infty^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$, dont le calcul explicite est déjà un problème en soi ! En fait, même dans le cas de la particule libre où l'expression simple (3.62) est disponible, il reste alors à déterminer des intégrales de surface assez difficiles par suite de la présence de facteurs oscillants.

Développements perturbatifs

Comme évoqué précédemment, il est illusoire de penser qu'il est possible de calculer de manière exacte les fonctions de Green pour un potentiel quelconque $V(\mathbf{r})$. Dans certaines circonstances, le potentiel V peut être considéré

comme proche⁹ d'un potentiel de référence $V^{(0)}$, pour lequel il est possible d'obtenir des représentations analytiques relativement simples des fonctions de Green correspondantes. Alors, il est judicieux de traiter perturbativement la différence $W = V - V^{(0)}$. Dans un premier temps, nous établissons le développement perturbatif de la fonction d'onde $\phi(\mathbf{r}, t)$, obtenu en insérant celui de la fonction de Green causale dans la formule (3.64). Ensuite, nous montrons que la structure de ce développement reste inchangée si la perturbation W dépend explicitement du temps.

Nous construirons les développements perturbatifs dans le cas où le domaine est l'espace tout entier. L'extension de ces derniers à un domaine fini est immédiate. Par commodité d'écriture, nous omettons l'indice ∞ dans la notation des fonctions de Green causales du système infini.

Utilisation de la résolvante. Déterminons tout d'abord le développement perturbatif de $G^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$ en puissances de W . Celui-ci est simplement obtenu en partant du développement (2.81), p. 103 des éléments de matrice de la résolvante $[\lambda + H^{(0)} + W]^{-1}$,

$$\begin{aligned} G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}') &= G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') - \int d\mathbf{r}_1 G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1) W(\mathbf{r}_1) G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}') \\ &\quad + \int d\mathbf{r}_1 \int d\mathbf{r}_2 G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1) W(\mathbf{r}_1) G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2) W(\mathbf{r}_2) G_\lambda^{(0)}(\mathbf{r}_2; \mathbf{r}') \\ &\quad + \dots \end{aligned}$$

établi dans la section 2.1.6, page 103. Le développement perturbatif de G^+ s'obtient aisément via l'identité $G^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = -i\hbar \mathcal{L}^{-1}[G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}')] avec $\lambda = -i\hbar s$. En utilisant la formule de convolution pour la transformée de Laplace inverse d'un produit, nous trouvons[✱]$

$$\begin{aligned} G^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) &= G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) \\ &\quad - \frac{i}{\hbar} \int d\mathbf{r}_1 \int_0^\tau d\tau_1 G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; \tau - \tau_1) W(\mathbf{r}_1) G^{+(0)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}'; \tau_1) \\ &\quad - \frac{1}{\hbar^2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \int_0^\tau d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; \tau - \tau_1) W(\mathbf{r}_1) \\ &\quad \times G^{+(0)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2; \tau_1 - \tau_2) W(\mathbf{r}_2) G^{+(0)}(\mathbf{r}_2; \mathbf{r}'; \tau_2) + \dots \quad (3.66) \end{aligned}$$

Le développement cherché de $\phi(\mathbf{r}, t)$ est immédiatement donné par l'injection de la série perturbative (3.66) dans la formule (3.64), avec pour résultat :

✱ Commentaire 3.1.5. Cette série perturbative peut également être obtenue à partir de l'identité (3.59), en utilisant la formule de Dyson pour le développement de l'opérateur d'évolution $e^{-i\tau(H_0+W)/\hbar}$ en puissances de W .

9. Cette hypothèse doit être vérifiée *a posteriori* en comparant les corrections engendrées par la perturbation $V - V^{(0)}$, aux quantités de référence.

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & \int d\mathbf{r}_1 G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; t - t_0) \phi_0(\mathbf{r}_1) \\ & - \frac{i}{\hbar} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \int_0^{t-t_0} d\tau_1 G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; \tau_1) W(\mathbf{r}_1) \\ & \times G^{+(0)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2; t - \tau_1 - t_0) \phi_0(\mathbf{r}_2) + \cdots \quad (3.67) \end{aligned}$$

Le premier terme, d'ordre zéro en W , décrit l'évolution sous la seule action du Hamiltonien de référence $H^{(0)}$. Le second terme, linéaire en W , représente la première correction à cette évolution de référence. La seule prise en compte de celle-ci est souvent suffisante pour capturer des effets intéressants, comme illustré au §2.2.4 consacré à la diffusion par un potentiel répulsif.

Perturbation dépendant du temps. Considérons maintenant le cas d'une perturbation $W(\mathbf{r}, t)$ dépendant explicitement du temps. Le Hamiltonien H est donc de la forme $H = H^{(0)} + W$, où $H^{(0)}$ est un Hamiltonien de référence de la forme (3.48) avec un potentiel $V(\mathbf{r})$ statique. Soulignons que l'opérateur

$$\mathcal{O} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} H$$

associé à l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \phi = (H^{(0)} + W)\phi, \quad (3.68)$$

n'est plus de la forme additive (3.10)! Donc les méthodes précédentes employant la résolvante ne sont plus applicables ici. Pour s'affranchir de cette difficulté, inspirons nous de ce qui a été fait page 102 et réécrivons l'équation de Schrödinger (3.68) sous la forme

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} - i \frac{\hbar}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + \frac{i}{\hbar} V(\mathbf{r}) \right] \phi(\mathbf{r}, t) = - \frac{i}{\hbar} W(\mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{r}, t). \quad (3.69)$$

Ainsi, en notant

$$\mathcal{O}^{(0)} = \frac{\partial}{\partial t} + \frac{i}{\hbar} H^{(0)}$$

l'opérateur associé au Hamiltonien $H^{(0)}$, nous sommes ramenés à l'étude de l'EDP

$$\mathcal{O}^{(0)} \phi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t), \quad (3.70)$$

avec le terme de source $\rho(\mathbf{r}, t) = -(i/\hbar)W(\mathbf{r}, t)\phi(\mathbf{r}, t)$.

Afin de résoudre l'EDP (3.70) avec la condition initiale $\phi(\mathbf{r}, t_0) = \phi_0(\mathbf{r})$ et les conditions de bord $\phi(\mathbf{r}, t) \rightarrow 0$ quand $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$, il suffit de reprendre les méthodes introduites pour l'équation de diffusion d'une part, et pour l'équation

de Schrödinger avec $H^{(0)}$ d'autre part. Nous obtenons

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & \int d\mathbf{r}_1 G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; t - t_0) \phi_0(\mathbf{r}_1) \\ & + \int d\mathbf{r}_1 \int_0^{t-t_0} d\tau_1 G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; \tau_1) \rho(\mathbf{r}_1, t - \tau_1) \end{aligned} \quad (3.71)$$

où $G^{+(0)}$ est de nouveau la fonction de Green causale associée à $H^{(0)}$. En remplaçant la densité de source $\rho(\mathbf{r}, \tau_1)$ par $-(i/\hbar)W(\mathbf{r}, \tau_1)\phi(\mathbf{r}, \tau_1)$, l'expression (3.71) devient une équation intégrale pour la fonction d'onde,

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & \int d\mathbf{r}_1 G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; t - t_0) \phi_0(\mathbf{r}_1) \\ & - \frac{i}{\hbar} \int d\mathbf{r}_1 \int_0^{t-t_0} d\tau_1 G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; \tau_1) W(\mathbf{r}_1, t - \tau_1) \phi(\mathbf{r}_1, t - \tau_1). \end{aligned} \quad (3.72)$$

Bien sûr l'équation intégrale (3.72) n'est pas plus simple à résoudre que l'équation originelle de Schrödinger (3.68). Cela dit, son itération permet d'obtenir simplement le développement perturbatif de la fonction d'onde en puissances de W . Plus précisément, en remplaçant $\phi(\mathbf{r}_1, t - \tau_1)$ par son expression intégrale dans l'équation ci-dessus, nous obtenons encore une équation intégrale, mais où les termes linéaire et d'ordre supérieur en W sont clairement séparés. Il suffit alors de répéter cette itération $n + 1$ fois et de garder tous les termes sauf le dernier pour obtenir le développement au n -ième ordre en W . Ainsi, nous trouvons au premier ordre en W ,

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & \int d\mathbf{r}_1 G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; t - t_0) \phi_0(\mathbf{r}_1) \\ & - \frac{i}{\hbar} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \int_0^{t-t_0} d\tau_1 G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; \tau_1) W(\mathbf{r}_1, t - \tau_1) \\ & \times G^{+(0)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2; t - \tau_1 - t_0) \phi_0(\mathbf{r}_2) + \cdots \end{aligned} \quad (3.73)$$

Soulignons que le développement (3.73) pour une perturbation dépendant du temps, présente la même structure que la série (3.67) relative à une perturbation purement statique ! Il suffit en effet de remplacer, dans chaque terme de cette dernière série, $W(\mathbf{r}_i)$ par $W(\mathbf{r}_i, t - \tau_i)$. Ainsi, l'utilisation de la fonction de Green causale $G^{+(0)}$ associée au Hamiltonien de référence $H^{(0)}$, fournit un cadre unifié et élégant pour la théorie générale des perturbations.

Le développement (3.73) est particulièrement utile, et il est applicable avec une bonne précision à de nombreuses situations. Nous y avons ainsi fait référence au §1.2.5 pour établir la formule de Kubo[Ⓐ]. Il est aussi appliqué au §3.2.6 pour l'atome d'hydrogène soumis à un champ électrique alternatif. Ceci

étant dit, les séries perturbatives ne sont évidemment pas toujours suffisantes pour capturer toute la physique présente dans le système étudié¹⁰.

✱ **Commentaire 3.1.6.** Pour cet exemple, il est utile de réécrire ce développement en termes de kets. Par commodité, nous indiquons donc ici l'analogue de l'équation (3.72),

$$|\phi(t)\rangle = e^{-i\frac{H^{(0)}(t-t_0)}{\hbar}}|\phi_0\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^{t-t_0} d\tau_1 e^{-i\frac{H^{(0)}\tau_1}{\hbar}} W(t-\tau_1) |\phi(t-\tau_1)\rangle, \quad (3.74)$$

et de l'équation (3.73)

$$|\phi(t)\rangle \simeq e^{-i\frac{H^{(0)}(t-t_0)}{\hbar}}|\phi_0\rangle - \frac{i}{\hbar} \int_0^{t-t_0} d\tau_1 e^{-i\frac{H^{(0)}\tau_1}{\hbar}} W(t-\tau_1) e^{-i\frac{H^{(0)}(t-\tau_1-t_0)}{\hbar}} |\phi_0\rangle, \quad (3.75)$$

où nous avons utilisé la relation (3.59), p. 169. Soulignons que ces deux relations restent valables dans le cas plus général où l'opérateur W n'est pas diagonal dans l'espace des positions. De manière plus générale, il existe des relations analogues pour des opérateurs qui ne sont plus séparables, mais de la forme $\mathcal{O} = \mathcal{O}^{(0)} + \mathcal{P}$, où la partie $\mathcal{P}$ est une faible perturbation.

3.1.5 Équation de Bloch

Dans ce paragraphe, nous revenons au cas d'une particule quantique de Hamiltonien indépendant du temps H , et confinée dans le domaine $\mathcal{D}$. En mécanique statistique, l'opérateur de Gibbs $e^{-H/(k_B T)}$ est l'objet fondamental qui détermine les quantités thermodynamiques d'équilibre. Il se trouve que cet opérateur se déduit, formellement, de l'opérateur d'évolution $e^{-itH/\hbar}$ par la substitution $t \rightarrow -i\beta\hbar$ avec la température inverse $\beta = 1/(k_B T)$. C'est pourquoi, l'opérateur $e^{-\beta H}$ est dit décrire l'évolution en temps imaginaire... Ses éléments de matrice définissent le propagateur thermique

$$\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta) = \langle \mathbf{r} | e^{-\beta H} | \mathbf{r}' \rangle, \quad (3.76)$$

Ici, nous établissons l'équation d'évolution, par rapport à la variable β , de ce propagateur thermique : elle est semblable à l'équation de diffusion, comme on peut s'y attendre suite aux considérations du précédent paragraphe. Ensuite, nous montrons que $\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$ s'identifie à une fonction de Green, et nous énumérons quelques propriétés essentielles.

10. Voir le cas de la série de perturbation pour la fonction de Green associée à la résolvante, illustré par l'exemple traité dans la section 2.2.3.

Propagateur thermique et fonctions de Green

Ici, nous considérons β comme un paramètre variable, et nous nous intéressons aux variations correspondantes de $\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$. En utilisant le formalisme opératoire dont les règles de calcul sont rappelées dans l'annexe D. Nous trouvons aisément

$$\left[\frac{\partial}{\partial \beta} - \frac{\hbar^2}{2m} \Delta_{\mathbf{r}} + V(\mathbf{r}) \right] \rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta) = 0. \quad (3.77)$$

Cette EDP, appelée équation de Bloch, peut être vue comme une équation d'évolution pour le propagateur thermique par rapport au temps fictif $\beta > 0$. Par construction, $\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$ satisfait la condition initiale

$$\lim_{\beta \rightarrow 0^+} \rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') , \quad (3.78)$$

et les conditions de Dirichlet homogènes

$$\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta) = 0 \text{ pour tout } \mathbf{r} \in \partial \mathcal{D} . \quad (3.79)$$

L'EDP (3.77) est du même type que l'équation de diffusion (3.26). Pour une particule libre, nous avons les correspondances $\beta \leftrightarrow t$ et $\hbar^2/(2m) \leftrightarrow D$ entre quantités réelles, sans intervention dissonante du nombre imaginaire pur i . Ainsi, l'évolution de le propagateur thermique libre $\rho^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$ par rapport à β , est identique à celle de $n(\mathbf{r}, t)$ par rapport à t avec des conditions de Dirichlet homogènes. En présence d'un potentiel $V(\mathbf{r})$ non-nul, tout se passe comme si la diffusion libre était modifiée par une injection ($V(\mathbf{r}) < 0$) ou bien une absorption ($V(\mathbf{r}) > 0$) locales de particules. Les conséquences de ce processus supplémentaire sur l'évolution sont étudiés dans le paragraphe suivant.

Par une simple adaptation du raisonnement conduisant à prouver l'unicité de la solution de l'équation de diffusion, le lecteur se convaincra que l'EDP (3.77) avec les conditions aux limites (3.78) et (3.79), définissent univoquement le propagateur thermique pour tout $\beta > 0$. Comme la condition initiale (3.78) est la même que la condition (3.17) relative à la fonction de Green causale de Dirichlet homogène de l'opérateur

$$\mathcal{O} = \frac{\partial}{\partial \beta} + H ,$$

$\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$ est précisément égale à cette fonction de Green.

Lien avec la résolvante associée au Hamiltonien. Partant de l'identification précédente de $\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$, et appliquant les résultats généraux de la section 3.1.2, nous trouvons que sa transformée de Laplace sur β est égale à

la fonction de Green de Dirichlet homogène associée à la résolvante $[s + H]^{-1}$, i.e. :

$$\tilde{\rho}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s) = \langle \mathbf{r} | \frac{1}{s + H} | \mathbf{r}' \rangle . \quad (3.80)$$

Cette écriture peut être également obtenue en prenant les éléments de matrice de l'identité opératorielle

$$\int_0^\infty ds \, e^{-\beta s} e^{-\beta H} = \frac{1}{s + H} .$$

Noter que l'intégrale sur β définissant la transformée de Laplace n'est convergente que si $\text{Re } s > -E_0$ où E_0 est l'énergie de l'état fondamental du Hamiltonien. Il est supposé ici que H est borné inférieurement, autrement dit que $E_0 > -\infty$, ce qui est réalisé en pratique. L'expression (3.80) est valable, par prolongement analytique, pour n'importe quelle valeur de s , hormis $s = -E_n$ où $\tilde{\rho}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s)$ présente une singularité. Rappelons que cette singularité des éléments de matrice de la résolvante a déjà été évoquée dans le chapitre 2 à travers la discussion générale de la section 2.1.6, page 101, et l'exemple du §2.2.3.

Propriétés essentielles du propagateur thermique

Appliquons la formule générale (3.15) spécifique à la fonction de Green causale évaluée ici avec β à la place de $t - t'$. Un calcul élémentaire donne $Z_n(\beta) = e^{-\beta E_n}$, soit

$$\boxed{\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta) = \sum_n e^{-\beta E_n} \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}')} . \quad (3.81)$$

Cette représentation spectrale est aisément retrouvée en insérant la relation de complétude sur les ψ_n dans la définition (3.76) du propagateur thermique.

Par suite du caractère réel des ψ_n , $\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$ est réelle et symétrique dans l'échange de $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$. Aux petits β , i.e. à haute température, le comportement de $\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$ est donné par la limite (3.78). Aux grands β , i.e. à basse température, la contribution dominante dans la représentation spectrale (3.81) provient de l'état fondamental. En supposant qu'il est non-dégénéré, et qu'il existe un gap $E_1 - E_0 > 0$ avec le premier état excité, nous obtenons

$$\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta) \simeq e^{-\beta E_0} \psi_0(\mathbf{r}) \psi_0^*(\mathbf{r}') \quad \text{quand } \beta \rightarrow \infty. \quad (3.82)$$

Si $E_0 > 0$, $\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$ s'évanouit exponentiellement vite. Dans le langage de la diffusion de particules classiques, ceci signifie que l'évasion à travers la frontière $\partial\mathcal{D}$ l'emporte sur tout autre processus. En particulier, comme $E_0 > 0$ dans le cas libre c'est-à-dire $V(\mathbf{r}) = 0$, nous retrouvons bien le résultat de la section 3.1.3. Par contre, si $E_0 < 0$, ce qui n'est possible que si le

potentiel $V(\mathbf{r})$ est négatif dans partie du domaine $\mathcal{D}$, alors $\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$ explose exponentiellement vite aux grands β . Alors, en termes de diffusion, l'injection de particules dans les régions où $V(\mathbf{r}) < 0$ l'emporte sur l'évasion par les bords!

De manière tout à fait similaire au cas du propagateur d'évolution en temps réel, il est possible de construire des développements perturbatifs de la matrice densité, pour $H = H^{(0)} + W$ où $W(\mathbf{r})$ est un potentiel supposé faible. Nous laissons le soin au lecteur, par la méthode de son choix, d'obtenir le développement

$$\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta) = \rho^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta) - \int d\mathbf{r}_1 \int_0^\beta d\beta_1 \rho^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; \beta - \beta_1) W(\mathbf{r}_1) \rho^{(0)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}'; \beta_1) + \cdots \quad (3.83)$$

qui est le strict analogue de la série (3.66). Souvent, le Hamiltonien libre est choisi comme référence, *i.e.* $H^{(0)} = -\hbar^2/(2m)\Delta$, et le domaine considéré est l'espace tout entier. L'ingrédient essentiel est alors le propagateur thermique libre du système infini¹¹

$$\rho^{(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta) = \left(\frac{m}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{d/2} \exp \left[-\frac{m(\mathbf{r} - \mathbf{r}')^2}{2\beta\hbar^2} \right], \quad (3.84)$$

obtenue par les simples substitutions dans la formule (3.41), de la constante de diffusion D par $\hbar^2/(2m)$ d'une part, et de $t - t'$ par β d'autre part. Les développements perturbatifs du propagateur thermique présentent un grand intérêt, en particulier pour le problème à N corps[✱].

✱ Commentaire 3.1.7. Considérons à nouveau un système de N particules en interaction décrit par un Hamiltonien H_N indépendant du temps. Le propagateur thermique à N corps est l'élément de matrice de l'opérateur d'évolution $e^{-\beta H_N}$. En intégrant sur les positions de $N - p$ particules, on introduit les matrices densité réduites à p particules. Ces quantités donnent accès aux fonctions thermodynamiques, ainsi qu'aux corrélations. Elles peuvent être représentées par des séries perturbatives analogues au développement (3.83). Leur construction est simplifiée par l'introduction du formalisme de la seconde quantification, qui prend en compte automatiquement la statistique fermionique ou bosonique des particules [Fetter-Walecka, Martin-Rothen]. Les ingrédients fondamentaux sont les propagateurs fermioniques/bosoniques, analogues du propagateur thermique libre (3.84) pour une particule seule.

11. L'expression libre (3.84) joue un rôle crucial dans la construction de la représentation de $\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$ en termes d'intégrale de chemins, comme exposé dans le chapitre 4. Elle permet aussi de déterminer les développements dits de Wigner-Kirkwood de la partie diagonale $\rho(\mathbf{r}; \mathbf{r}; \beta)$, au voisinage du facteur de Boltzmann classique $e^{-\beta V(\mathbf{r})}$ [Landau V].

3.1.6 Équation de d'Alembert

L'équation de d'Alembert est l'équation la plus simple décrivant un phénomène de propagation dans un milieu homogène sans atténuation. De ce fait, elle est l'équation d'onde par excellence, et elle est omniprésente dans des domaines variés allant de l'électrodynamique à la théorie de l'élasticité ou la mécanique des fluides, incluant l'optique ondulatoire ou l'acoustique par exemple. Elle intervient également dans le cadre de théories quantiques relativistes, sous l'appellation d'équation de Klein-Gordon, dans la description de particules sans spin et de masse nulle. Sa forme générale est

$$\boxed{\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right] \phi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t),} \quad (3.85)$$

où c est un paramètre donné, dépendant du milieu et de la nature du champ ϕ considérés. Comme nous le verrons par la suite, c représente la vitesse de propagation de ϕ . Par exemple, dans le cas du champ électromagnétique se propageant dans le vide, c est la vitesse de la lumière.

L'opérateur $\mathcal{O}$ en jeu ici, est

$$\mathcal{O} = \left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right] = -\square \quad (3.86)$$

en notant

$$\square = \Delta - \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$$

l'opérateur de d'Alembert, aussi dit d'Alembertien. L'opérateur $\mathcal{O}$ est de nouveau de la forme additive (3.10), avec

$$\mathcal{O}_t = \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \quad (3.87)$$

et

$$\mathcal{O}_{\mathbf{r}} = -\Delta_{\mathbf{r}}. \quad (3.88)$$

Contrairement aux opérateurs intervenant dans l'équation de diffusion ou l'équation de Schrödinger, $\mathcal{O}_t$ est du second ordre par rapport au temps. Comme nous allons le montrer plus loin, cette différence a des conséquences majeures sur les comportements induits par l'évolution.

Comme dans les sections précédentes, nous commençons par l'étude des conditions aux limites puis par la transformation de l'EDP (3.85) en une équation intégrale faisant intervenir les fonctions de Green causales. Pour des conditions au bord homogènes, nous déterminons les représentations spectrales de ces fonctions de Green causales, à l'aide de la méthode générale exposée dans la section 3.1.2. Leur structure est analysée et comparée à celle des fonctions correspondantes obtenues pour la diffusion ou l'équation de

Schrödinger. Nous donnons ensuite l'expression de la solution de l'équation de d'Alembert en termes de ces fonctions de Green et discutons quelques conséquences provenant de cette expression. Vient ensuite le calcul de la fonction de Green du d'Alembertien pour le système infini. En particulier, il en ressort la notion d'onde progressive se propageant à la vitesse finie c .

Conditions aux limites

Ouvrons donc la voie avec l'examen des conditions aux limites. Ici, l'opérateur $\mathcal{O}_t$ est du second ordre par rapport à la variable temps, *i.e.* $p = 2$ avec les notations de la page 148. Il faut donc spécifier, à un instant initial t_0 , à la fois $\phi(\mathbf{r}, t_0)$ et sa dérivée $(\partial/\partial t)\phi(\mathbf{r}, t_0)$ en tout point du domaine, soit

$$\phi(\mathbf{r}, t_0) = \phi_0(\mathbf{r}) \text{ et } \frac{\partial}{\partial t}\phi(\mathbf{r}, t_0) = \pi_0(\mathbf{r}) \text{ pour tout } \mathbf{r} \in \mathcal{D} . \quad (3.89)$$

À ces conditions initiales, il faut ajouter des conditions de bord. Comme argumenté dans la section 3.1.2, celles-ci peuvent être aisément déterminées en passant dans le monde de Laplace. L'opérateur statique correspondant, $[P_2(s) + \mathcal{O}_r]$ vaut

$$\frac{s^2}{c^2} - \Delta_{\mathbf{r}} , \quad (3.90)$$

et se réduit donc simplement à l'opérateur de Helmholtz avec $m = s/c$. Alors, d'après les résultats établis dans le chapitre 2, les conditions de Dirichlet, ou bien les conditions de Neumann, suffisent pour garantir l'unicité de la solution de l'équation de Helmholtz, autrement dit ici l'unicité du champ $\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s)$. Les conditions correspondantes pour le champ $\phi(\mathbf{r}, t)$ sont immédiatement obtenues par transformation de Laplace inverse, à savoir

$$\phi(\mathbf{r}, t) = D(\mathbf{r}, t) \text{ pour } \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D} \text{ et tout } t ,$$

pour Dirichlet, ou bien

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, t) = N(\mathbf{r}, t) \text{ pour } \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D} \text{ et tout } t ,$$

pour Neumann. Chacune de ces conditions de bord C.L. $(\phi|\partial\mathcal{D})$, combinée aux conditions initiales (3.89) déterminent univoquement le champ $\phi(\mathbf{r}, t)$.

Notons que les conditions de bord précédentes sont identiques aux conditions (3.28) et (3.29) introduites pour la diffusion. Naturellement, les fonctions de bord $D(\mathbf{r}, t)$ et $N(\mathbf{r}, t)$ doivent être compatibles avec les conditions initiales (3.89) : dans le cas contraire, il n'existe pas de solution ! Enfin, comme proposé dans l'exercice 3.1, p. 236, on peut vérifier, sans passer dans le monde de Laplace, que les conditions aux limites précédentes garantissent effectivement l'unicité, en s'inspirant de la démonstration établie pour l'opérateur Laplacien dans la section 2.1.3.

Fonctions de Green causales et équation intégrale

Comme pour la diffusion ou l'équation de Schrödinger, nous allons transformer l'EDP originelle satisfaite par $\phi(\mathbf{r}, t)$ en une équation intégrale faisant intervenir une fonction de Green causale, appelée aussi retardée, G_H^+ solution de l'EDP

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta_{\mathbf{r}} \right] G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t, t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t') , \quad (3.91)$$

avec la condition de causalité $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t, t') = 0$ pour $t < t'$. *A priori*, il serait possible d'obtenir une équation intégrale pour n'importe quelle fonction de Green causale, indépendamment des conditions aux bords la définissant. Ici, nous nous restreignons aux fonctions de Green causales homogènes, qui sont d'un usage plus simple et plus transparent. Rappelons en particulier leur propriété d'invariance temporelle établie dans la section 3.1.1, à savoir $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t, t') = G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t')$. De plus, leur transformée de Laplace $\tilde{G}_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; s)$ est une fonction de Green de l'opérateur de Helmholtz statique (3.90) avec les mêmes conditions de bord homogènes.

Comme pour la diffusion ou l'équation de Schrödinger, l'équation cherchée est facilement obtenue en raisonnant dans le monde de Laplace. Le point de départ est encore l'équation intégrale (2.27), page 75, établie dans le chapitre 2 pour un champ solution de l'EDP de Helmholtz (2.42). Ici, il suffit d'appliquer cette équation à $\tilde{\phi}(\mathbf{r}, s)$. La seule différence avec la diffusion réside maintenant dans la structure de la source effective $I_1(\mathbf{r}, s)$ prenant en compte les conditions initiales,

$$I_1(\mathbf{r}, s) = -\frac{1}{c^2} \pi_0(\mathbf{r}) - \frac{s}{c^2} \phi_0(\mathbf{r}) .$$

Pour revenir au champ $\phi(\mathbf{r}, t)$, les opérations de transformation de Laplace inverse des différents termes sont identiques à celles effectuées dans la section 3.1.3. La transformée inverse du terme de condition initiale fait apparaître en particulier

$$\mathcal{L}^{-1}[s \tilde{G}_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; s)] = \frac{\partial}{\partial \tau} G_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; \tau) ,$$

où nous avons utilisé la condition initiale $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; 0^+) = 0$, qui est une conséquence de la condition de causalité comme prouvé dans la section 3.1.2,

page 150. Il vient finalement

$$\begin{aligned}
 \phi(\mathbf{r}, t) = & \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}', t - \tau) G_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; \tau) \\
 & + \frac{1}{c^2} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \pi_0(\mathbf{r}') G_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; t - t_0) \\
 & + \frac{1}{c^2} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \phi_0(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial t} G_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; t - t_0) \\
 & - \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \phi(\mathbf{r}', t - \tau) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} G_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; \tau) \\
 & + \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' G_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; \tau) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}', t - \tau).
 \end{aligned} \tag{3.92}$$

Dans l'équation intégrale (3.92), les termes de source et de surface ont exactement la même structure que dans la relation (3.32) correspondant à la diffusion. Ils admettent des interprétations analogues. La seule différence entre ces deux équations tient à la forme de la propagation de la condition initiale. Ici, le champ initial ϕ_0 est propagé via la dérivée partielle temporelle $(\partial/\partial t)G_H^+$, alors que la dérivée partielle initiale π_0 est propagée via G_H^+ elle-même. Signalons que la relation (3.92) peut aussi être démontrée en exploitant la seconde formule de Green.

Fonctions de Green causales homogènes d'un domaine fini

Ce paragraphe est consacré à l'étude des fonctions de Green causales, définies par des conditions aux bords de Dirichlet homogène

$$G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) = 0 \text{ pour } \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D} \text{ et tout } \tau ,$$

ou bien de Neumann homogènes

$$\mathbf{n} \cdot \nabla_{\mathbf{r}} G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) = 0 \text{ pour } \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D} \text{ et tout } \tau .$$

Nous déterminons d'abord leurs représentations spectrales, puis nous examinons brièvement leurs propriétés essentielles.

Représentation spectrale. Indiquons ici rapidement comment obtenir la représentation spectrale de chaque fonction de Green causale homogène, en suivant l'analyse générale de la section 3.1.2. Pour cela, nous choisissons une base complète orthonormale de fonctions propres ψ_n de l'opérateur $\mathcal{O}_{\mathbf{r}} = -\Delta_{\mathbf{r}}$, et satisfaisant aux mêmes conditions aux bords homogènes que la fonction de Green considérée. L'hermiticité de l'opérateur Laplacien dans l'espace des fonctions qui satisfont des conditions aux bords homogènes du type Dirichlet ou Neumann nous garantit que les valeurs propres λ_n sont réelles. Comme déjà remarqué dans l'étude de la diffusion, ces valeurs propres sont toutes positives ou nulles, ce qui permet de pouvoir définir $\sqrt{\lambda_n}$.

Chaque G_H^+ est décomposable suivant la représentation spectrale (3.15) générale, avec ici $Z_n(\tau)$ solution de l'équation différentielle ordinaire

$$\frac{1}{c^2} \frac{d^2}{d\tau^2} Z_n(\tau) + \lambda_n Z_n(\tau) = 0$$

avec les conditions initiales $Z_n(0) = 0$ et $(dZ_n/d\tau)(0) = c^2$. Un calcul élémentaire donne

$$Z_n(\tau) = c \frac{\sin(c\sqrt{\lambda_n}\tau)}{\sqrt{\lambda_n}}.$$

En appliquant la formule spectrale (3.15), nous en déduisons

$$G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = \theta(t - t') \sum_n c \frac{\sin(c\sqrt{\lambda_n}(t - t'))}{\sqrt{\lambda_n}} \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}'). \quad (3.93)$$

Comme déjà souligné à maintes reprises, la détermination du spectre de l'opérateur Laplacien dans un domaine quelconque reste un problème à part entière. Néanmoins, la représentation (3.93) se révèle utile. Elle permet même de calculer explicitement les fonctions G_H^+ pour certaines géométries simples. Par exemple, comme utilisé dans l'exemple du §3.2.2 relatif à la diffraction de Fraunhofer, la formule spectrale (3.93) indique qu'il est possible de calculer G_H^+ , pour un domaine semi-infini délimité par une paroi plane, par la méthode des images.

Propriétés générales. Les fonctions de Green causales homogènes G_H^+ satisfont la relation de réciprocité $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = G_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; t - t')$. Cette relation est une conséquence immédiate du caractère réel des fonctions propres ψ_n de l'opérateur Laplacien dans la formule (3.93). Elle se démontre également en appliquant la seconde formule de Green, comme cela est proposé dans l'exercice 3.2. Notons aussi que G_H^+ est à valeurs réelles.

Aux temps courts, les fonctions G_{DH}^+ et G_{NH}^+ ont le même comportement, déterminé par les conditions initiales établies dans la section 3.1.2, page 150, à savoir

$$G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; 0^+) = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial G_H^+}{\partial \tau}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; 0^+) = c^2 \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (3.94)$$

La condition sur la dérivée temporelle est obtenue à partir de la formule générale (3.17) avec $p = 2$ et $a_2 = 1/c^2$. Contrairement au cas de la diffusion, ce n'est pas $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau)$ elle-même, mais sa dérivée temporelle, qui se réduit, au facteur c^2 près, à la distribution de Dirac quand $\tau \rightarrow 0^+$.

Aux temps longs, la situation est semblable au cas de l'équation de Schrödinger. L'évolution de chaque fonction G_H^+ est complexe, car elle met en jeu

des sommes de facteurs oscillants. Comme nous le verrons par la suite, ceci résulte de multiples réflexions sur les bords, dont il est très difficile d'examiner les interférences au sein du domaine. À ce stade, remarquons qu'il apparaît une différence importante entre G_{DH}^+ et G_{NH}^+ . Si avec les conditions de Dirichlet homogènes, les valeurs propres λ_n sont toutes strictement positives, la plus petite valeur propre λ_0 est nulle avec les conditions de Neumann homogènes. Dans le cas de la diffusion, nous avons vu que cette particularité induit des comportements aux temps longs très différents suivant la nature des conditions de bord. Ici, le terme $n = 0$ dans la représentation spectrale de $G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau)$ se réduit à

$$\frac{c^2 \tau}{V}.$$

Contrairement aux autres termes de la formule (3.93), cette contribution de l'état fondamental n'oscille en aucune manière, et de plus elle diverge quand $\tau \rightarrow +\infty$! Il faut donc s'attendre à un comportement singulier de G_{NH}^+ aux temps longs. Ceci est relié à la non-existence de la fonction de Green de Neumann homogène statique du Laplacien, comme argumenté dans le paragraphe suivant.

Solution de l'équation de d'Alembert

Dans la plupart des situations physiques rencontrées, les conditions de bord sur $\phi(\mathbf{r}, t)$ sont de type Dirichlet ou bien Neumann. Dans chacun des cas, la solution de l'équation de d'Alembert est explicitement exprimée en termes de la fonction de Green causale homogène adéquate. Pour des conditions de Dirichlet, nous étudions quelques formes particulières du champ obtenu, correspondant à des ondes stationnaires d'une part, et au branchement adiabatique d'une source statique d'autre part.

Conditions de Dirichlet. Fixons les conditions de bord de Dirichlet (3.28) sur $\phi(\mathbf{r}, t)$. Alors, il est judicieux d'insérer la fonction de Green causale homogène G_{DH}^+ dans la relation (3.92). En utilisant de plus la propriété de symétrie de G_{DH}^+ , nous obtenons ainsi l'expression

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}', t - \tau) G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) \\ & + \frac{1}{c^2} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \pi_0(\mathbf{r}') G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t_0) \\ & + \frac{1}{c^2} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \phi_0(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial t} G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t_0) \\ & - \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial \mathcal{D}} d\Sigma' D(\mathbf{r}', t - \tau) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) \end{aligned} \quad (3.95)$$

où la symétrie de $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau)$ en $\mathbf{r}$ et $\mathbf{r}'$ a été utilisée. *Modulo* la connaissance de G_{DH}^+ , cette représentation de $\phi(\mathbf{r}, t)$ est explicite, car elle fait intervenir

uniquement les conditions initiales ϕ_0 et π_0 , la fonction de bord $D(\mathbf{r}, t)$ et la source $\rho(\mathbf{r}, t)$, qui sont des données du problème.

Comme dans le cas statique de l'opérateur Laplacien, les effets de bord interviennent implicitement dans chacun des termes de l'expression (3.95), via la fonction G_{DH}^+ qui incorpore elle-même déjà des contributions surfaciques. L'analyse de ces effets, incluant en particulier les réflexions sur la frontière $\partial\mathcal{D}$, est mise en œuvre plus loin.

Modes propres et ondes stationnaires. Considérons une situation sans sources avec une fonction de bord identiquement nulle, i.e. $\rho(\mathbf{r}, t) = 0$ et $D(\mathbf{r}, t) = 0$ pour $t \geq t_0$. Imaginons qu'à l'instant initial t_0 le champ et sa dérivée temporelle soient proportionnels à une fonction propre ψ_l du Laplacien. Autrement dit, les décompositions des fonctions ϕ_0 et π_0 sur la base des ψ_n n'ont qu'une seule composante suivant ψ_l ,

$$\phi_0(\mathbf{r}) = a\psi_l(\mathbf{r}) \quad \text{et} \quad \pi_0(\mathbf{r}) = b\psi_l(\mathbf{r}) .$$

Dans l'expression (3.95), les termes de source et de surface disparaissent, et il reste uniquement les termes d'évolution des conditions initiales. Dans ces derniers, remplaçons G_{DH}^+ par sa représentation spectrale (3.93), et permutons l'intégrale sur $\mathbf{r}'$ et la somme sur n . En utilisant la condition d'orthonormalité des fonctions propres,

$$\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} \, \psi_l(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}) = \delta_{ln} ,$$

nous trouvons

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \left[c^2 a \cos \left(c\sqrt{\lambda_l}(t - t_0) \right) + \frac{cb}{\sqrt{\lambda_l}} \sin \left(c\sqrt{\lambda_l}(t - t_0) \right) \right] \psi_l(\mathbf{r}) . \quad (3.96)$$

L'expression (3.96) décrit une onde stationnaire, avec la factorisation usuelle des dépendances temporelle et spatiale. Il existe une infinité d'ondes stationnaires possibles, associées aux différents modes propres l . La situation est donc tout à fait semblable au cas de l'équation de Schrödinger. Comme en mécanique quantique, les fréquences $\omega_l = c\sqrt{\lambda_l}$ des modes propres ne peuvent prendre que des valeurs discrètes.

Branchement adiabatique d'une source statique. Imaginons maintenant qu'une source statique $\rho_S(\mathbf{r})$ ait été branchée adiabatiquement à $t_0 = -\infty$. En d'autres termes, posons $\rho(\mathbf{r}, t) = e^{\epsilon t} \rho_S(\mathbf{r})$ avec $\epsilon > 0$ fixé pour le moment. Supposons que la fonction de bord soit toujours identiquement nulle, $D(\mathbf{r}, t) = 0$, et qu'initialement il n'y ait aucun champ présent, i.e. :

$$\phi_0(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{et} \quad \pi_0(\mathbf{r}) = 0 .$$

Dans l'expression (3.95), seul le terme de volume contribue, et il vient

$$\phi(\mathbf{r}, t) = e^{\epsilon t} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho_S(\mathbf{r}') \int_0^\infty d\tau e^{-\epsilon\tau} G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) . \quad (3.97)$$

La structure de la formule (3.97) est en accord avec l'interprétation générale des fonctions de Green causales homogènes comme des fonctions de réponse. Ici, en prenant la limite du branchement adiabatique $\epsilon \rightarrow 0^+$, il apparaît la susceptibilité statique à fréquence nulle,

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_0^\infty d\tau e^{-\epsilon\tau} G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) . \quad (3.98)$$

La représentation spectrale de cette susceptibilité est obtenue en utilisant la formule (3.93) pour G_{DH}^+ . Après permutation de l'intégrale sur τ et de la somme sur n , l'intégration temporelle devient immédiate pour chaque mode. Nous reconnaissons alors la représentation spectrale établie dans le chapitre 2 pour la fonction de Green de Dirichlet homogène du Laplacien $G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$. Il vient donc la règle de somme

$$\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_0^\infty d\tau e^{-\epsilon\tau} G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) = G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') , \quad (3.99)$$

et l'expression (3.97) redonne, dans la limite $\epsilon \rightarrow 0^+$, la solution statique de l'équation de Poisson avec conditions de Dirichlet homogènes,

$$\phi_S(\mathbf{r}) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho_S(\mathbf{r}') G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') .$$

Conditions de Neumann. Imposons maintenant les conditions de bord de Neumann (3.29) sur $\phi(\mathbf{r}, t)$. En utilisant la fonction de Green causale homogène G_{NH}^+ dans la relation (3.92), ainsi que sa propriété de symétrie, nous trouvons

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}', t - \tau) G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) \\ & + \frac{1}{c^2} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \pi_0(\mathbf{r}') G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t_0) \\ & + \frac{1}{c^2} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \phi_0(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial t} G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t_0) \\ & + \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) N(\mathbf{r}', t - \tau) . \end{aligned}$$

(3.100)

Comme dans le cas de Dirichlet, et pourvu maintenant que G_{NH}^+ soit connue, cette représentation fournit explicitement la solution de l'équation de d'Alembert.

En l'absence de sources, et avec des conditions de bord homogènes, des ondes stationnaires peuvent exister dans le domaine. Elles sont de nouveau associées aux modes propres, *i.e.* leur partie spatiale est proportionnelle à $\psi_l(\mathbf{r})$ et leur partie temporelle oscille à la fréquence $\omega_l = c\sqrt{\lambda_l}$. Soulignons que l'ensemble des fréquences discrètes possibles est différent de celui relatif aux conditions de Dirichlet homogènes. De plus, ici, il existe un mode de fréquence nulle associée à la valeur propre nulle $\lambda_0 = 0$ du Laplacien. En fait, le champ correspondant n'est pas stationnaire, car sa partie temporelle peut croître linéairement avec le temps !

L'étude de la convergence éventuelle de $\phi(\mathbf{r}, t)$ vers une solution statique de l'équation de Poisson fait ressortir des particularités spécifiques aux conditions de Neumann homogènes. Par exemple, l'équivalent de la susceptibilité statique (3.98) introduite dans le cas de Dirichlet, diverge à cause de la contribution du mode fondamental de fréquence nulle ! L'apparition de cette singularité, est une manifestation de la non-existence de la fonction de Green de Neumann homogène du Laplacien comme cela a été discuté au chapitre 2, page 77.

Fonction de Green causale du système infini

Nous poursuivons et terminons cette étude générale des fonctions de Green du d'Alembertien, par le cas où le domaine $\mathcal{D}$ est l'espace tout entier $\mathbb{R}^d$. Tout d'abord, nous calculons la fonction de Green causale G_∞^+ , avec les conditions de Dirichlet homogènes à l'infini,

$$G_\infty^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') \rightarrow 0 \text{ quand } |\mathbf{r}| \rightarrow \infty .$$

Ces conditions de bord, ainsi que l'opérateur d'Alembertien, étant invariants par toute translation spatiale, G_∞^+ ne dépend spatialement que de la différence $\mathbf{r} - \mathbf{r}'$. Nous nous restreignons au cas tridimensionnel, les calculs en dimension $d = 1$ et $d = 2$ étant proposés respectivement dans les exercices 3.6 et 3.5.

Calcul par transformation de Laplace. Dans le monde de Laplace, la transformée de Laplace $\tilde{G}_\infty^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; s)$ est la fonction de Green homogène de l'opérateur de Helmholtz

$$\frac{s^2}{c^2} - \Delta_{\mathbf{r}} ,$$

dans l'espace $\mathbb{R}^d$. Cette fonction a été déterminée dans le chapitre 2. En trois dimensions, l'application de la formule (2.48), page 86, avec $m = s/c$ pour $s > 0$, donne

$$\tilde{G}_\infty^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; s) = \frac{e^{-s|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} .$$

La transformation de Laplace inverse de cette expression est élémentaire en vertu de l'identité

$$\mathcal{L}^{-1}[e^{-as}](\tau) = \delta(\tau - a) ,$$

où a est une constante strictement positive. Nous obtenons ainsi

$$G_{\infty}^{+}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t') = \frac{c}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \delta(c(t - t') - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|). \quad (3.101)$$

Calcul par transformation de Fourier. L'expression (3.101) peut être retrouvée par une autre méthode, reposant sur l'introduction de la transformée de Fourier dans l'espace-temps[✱] de dimension $3 + 1$,

$$\widehat{G}_{\infty}^{+}(\mathbf{k}, z) = \int d\mathbf{r} \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') + iz(t - t')} G_{\infty}^{+}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t').$$

Comme discuté page 155, afin d'assurer la convergence de l'intégrale sur t , il est crucial d'introduire une partie imaginaire dans la fréquence complexe z , i.e. $z = \omega + i\epsilon$ avec $\epsilon > 0$. Cette procédure garantit la convergence de l'intégrale temporelle quand $t \rightarrow +\infty$. Pour les temps $t < t'$, c'est la condition de causalité assurant la nullité de $G_{\infty}^{+}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t')$ qui évite l'explosion de l'intégrant quand $t \rightarrow -\infty$.

✱ Commentaire 3.1.8. En électromagnétisme, cette transformation est naturelle du fait de la structure de l'espace-temps définie par la théorie de la relativité restreinte. Remarquons à ce titre que le d'Alembertien est l'opérateur scalaire le plus simple qui reste invariant par les transformations de Lorentz associées aux changements de référentiel d'inertie. L'opérateur d'Alembertien est ainsi pour un espace-temps de Minkowski l'analogue de l'opérateur Laplacien pour un espace euclidien.

Effectuons alors la transformation de Fourier de chaque membre de l'EDP

$$-\square_{\mathbf{r},t} G_{\infty}^{+}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t') = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \delta(t - t').$$

On obtient ainsi :

$$\left(-\frac{z^2}{c^2} + \mathbf{k}^2\right) \widehat{G}_{\infty}^{+}(\mathbf{k}, z) = 1.$$

Les singularités en $\omega = \pm c|\mathbf{k}| - i\epsilon$ proviennent des modes propres et de l'absence de dissipation. Nous vérifions aussi, en accord avec les résultats du chapitre 1, que ces singularités sont dans le demi-plan complexe inférieur. Nous avons donc, à ce stade,

$$\widehat{G}_{\infty}^{+}(\mathbf{k}, \omega) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^{+}} \frac{1}{\mathbf{k}^2 - \frac{(\omega + i\epsilon)^2}{c^2}}.$$

Il faut alors prendre la transformation de Fourier inverse et calculer

$$G_{\infty}^{+}(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^{+}} \frac{1}{(2\pi)^4} \int d\mathbf{k} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}') - i\omega(t - t')}}{(\mathbf{k}^2 - (\omega + i\epsilon)^2/c^2)}. \quad (3.102)$$

L'intégrale sur ω se fait à partir du lemme de Jordan et du théorème des résidus. Pour $t - t' < 0$, le contour utilisé est représenté sur la figure 3.2. Les singularités étant dans le demi-plan complexe inférieur, l'intégrale (3.102)

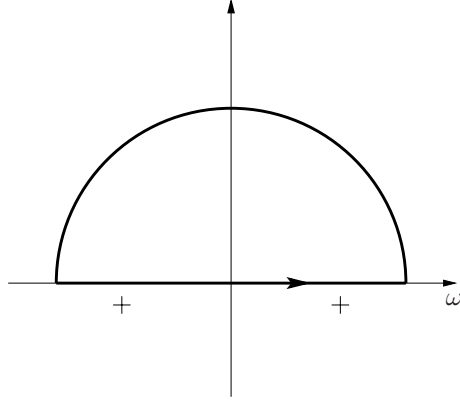


FIG. 3.2 – Contour utilisé pour effectuer l'intégrale sur ω dans le cas $t - t' < 0$. Les pôles $\omega = \pm|\mathbf{k}|c - i\epsilon$ de l'intégrant, représentés par des croix sont en dehors du contour.

s'annule, ce qui correspond à la condition de causalité. Pour $t - t' > 0$, le contour utilisé est représenté sur la figure 3.3. Le calcul des résidus en $\omega =$

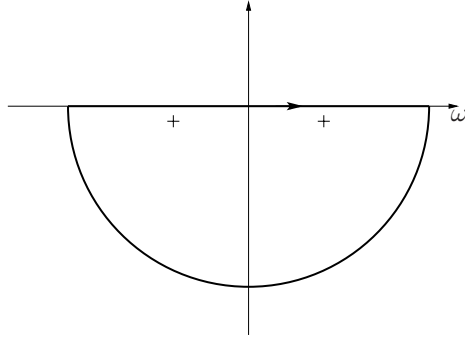


FIG. 3.3 – Contour utilisé pour effectuer l'intégrale sur ω dans le cas $t - t' > 0$ avec les mêmes conventions que dans la figure 3.2.

$\pm|\mathbf{k}|c - i\epsilon$ donne alors

$$G_{\infty}^{+}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t') = \frac{c}{(2\pi)^3} \int d\mathbf{k} \frac{\sin(kc(t - t'))}{k} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} - \mathbf{r}')},$$

où la limite $\epsilon \rightarrow 0^+$ a été prise. L'intégrale sur $\mathbf{k}$ se calcule alors facilement. Nous laissons le soin au lecteur de vérifier que nous retrouvons bien ainsi la formule (3.101).

Remarquons que la fonction de Green anti-causale (appelée aussi avancée) homogène $G_\infty^-(\mathbf{r}-\mathbf{r}'; t-t')$, est définie par la condition d'anti-causalité $G_\infty^-(\mathbf{r}-\mathbf{r}'; t-t') = 0$ pour $t > t'$, avec les mêmes conditions de bord de Dirichlet homogènes que G_∞^+ . La méthode de transformation de Fourier dans l'espace-temps peut lui être appliquée en prenant $\epsilon < 0$, avec le résultat

$$G_\infty^-(\mathbf{r}-\mathbf{r}'; t-t') = \frac{c}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \delta(c(t-t') + |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|).$$

Noter que toute combinaison linéaire $\alpha G_\infty^+ + (1-\alpha)G_\infty^-$ est aussi une fonction de Green de l'opérateur $-\square$.

Interprétation. L'expression (3.101), montre que la fonction de Green causale se réduit à un front d'onde à symétrie sphérique, sortant à la vitesse c . Par ailleurs, l'amplitude de ce front décroît en $1/R$, où R est la distance entre le point d'observation et la source.

La signification physique de ces comportements apparaît clairement dans le cadre de l'électromagnétisme. Imaginons la situation où un flash lumineux serait émis à un instant t' en un point $\mathbf{r}'$. Quel signal serait reçu par la rétine d'un observateur situé en un point $\mathbf{r}$? Le résultat (3.101) donne les deux caractéristiques de ce signal. La rétine ne reçoit aucun signal, sauf au temps t tel que $c(t-t') = |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$, en accord avec la propagation de la lumière à la vitesse c . Ensuite, plus l'observateur est éloigné du point d'émission, plus l'intensité du signal reçu est faible, ce que tout un chacun peut constater tous les jours... On pourrait avoir tendance à interpréter la première caractéristique de manière erronée, en croyant que le signal émis par une source ponctuelle dans l'espace-temps, est lui même nécessairement localisé sur la surface sphérique se déplaçant à la vitesse c . Une telle croyance est démentie par le calcul explicite de G_∞^+ en dimensions inférieures $2+1$ et $1+1$, calcul proposé à la sagacité du lecteur dans les exercices 3.5 et 3.6. La seule affirmation correcte concerne *a priori* le front d'onde avant qui se propage à la vitesse c , et donc le fait que la rétine ne reçoit aucun signal avant le temps t tel que $c(t-t') = |\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$. Par contre, de manière générale, l'onde décrite par G_∞^+ peut s'étaler vers l'arrière, en amont du sens de propagation.

Les considérations précédentes sont bien entendu valables dans n'importe quel contexte mettant en jeu l'opérateur d'Alembertien. Mentionnons l'émission d'ondes sonores en hydrodynamique, qui constitue d'ailleurs un exemple d'application traité dans la seconde partie de ce chapitre, page 209. Cela dit, en électromagnétisme, les propriétés structurelles de G_∞^+ prennent un relief particulier en relation avec la théorie de la relativité[✱].

✱ **Commentaire 3.1.9.** Dans l'espace-temps de dimension $3 + 1$, la surface où est localisée G_{∞}^{+} s'identifie au cône de lumière d'équation $c(t - t') = |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Il est assez naturel de voir, en arrière plan de G_{∞}^{+} , une entité électromagnétique élémentaire qui se déplace à la vitesse c . Cette interprétation prend toute sa force dans la reformulation des équations de Maxwell en termes d'une théorie des champs, à savoir l'électrodynamique classique [Landau II]. Le champ électromagnétique est alors conçu comme une entité à part entière, certes couplé aux charges présentes dans la matière, mais pouvant « vivre sa vie en toute indépendance ». Dans cette construction, la fonction de Green causale homogène G_{∞}^{+} caractérise la propagation de l'entité électromagnétique d'un point à un autre dans un temps donné. C'est ce point de vue qui ouvre la voie à l'électrodynamique quantique : l'entité électromagnétique élémentaire devient tout simplement un photon ! En particulier les modes propres mis en évidence page 190 donnent la relation de dispersion des photons $\omega^2 = c^2 \mathbf{k}^2$. On peut alors introduire la fonction de Green décrivant la propagation du photon dans le vide, comme, grossièrement parlant, la probabilité du photon de passer d'un point $\mathbf{r}'$ à l'instant t' à un autre point $\mathbf{r}$ à l'instant t . Cette fonction de Green est analogue à celle introduite dans la section 3.1.4 pour décrire la propagation d'une particule quantique suivant l'équation de Schrödinger. Par construction [Heitler, Landau IV], elle fait intervenir G_{∞}^{+} , qui est donc amenée à jouer un rôle fondamental en électrodynamique quantique également !

Propriétés remarquables de la propagation

Considérons un domaine $\mathcal{D}$ dans l'espace physique à trois dimensions. L'introduction de la fonction de Green causale G_{∞}^{+} dans la relation (3.92) conduit à

$$\begin{aligned}
 \phi(\mathbf{r}, t) = & \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}', t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \theta(t - t_0 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c) \\
 & + \frac{1}{c^2} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \pi_0(\mathbf{r}') \frac{\delta(t - t_0 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\
 & + \frac{1}{c^2} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \phi_0(\mathbf{r}') \frac{\delta'(t - t_0 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\
 & - \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \phi(\mathbf{r}', t - \tau) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \frac{\delta(\tau - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\
 & + \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \frac{\delta(\tau - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}', t - \tau),
 \end{aligned} \tag{3.103}$$

en ayant explicité ¹² les différents termes à l'aide de l'expression (3.101) de $G_{\infty}^{+}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \tau)$, et avec la notation $\delta'(\xi) = (d/d\xi)\delta(\xi)$. Cette formule est particulièrement intéressante, car elle se prête à des interprétations simples, tout en mettant en lumière quelques propriétés remarquables de la propagation

12. Rappelons que $\delta(ct) = (1/c)\delta(t)$. Notons aussi que, dans les termes de surface, l'intégration sur τ ne peut être immédiatement effectuée, par suite de l'action de l'opérateur $\mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'}$.

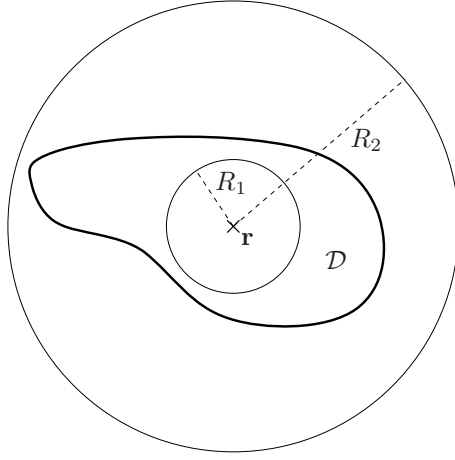


FIG. 3.4 – Représentation de la sphère de centre $\mathbf{r}$ de rayon $R = c(t - t_0)$ pour deux temps $t_2 > t_1 > t_0$: au temps $t = t_1$, la sphère est à l'intérieur du domaine $\mathcal{D}$ tandis qu'au temps $t = t_2$, elle est en dehors de $\mathcal{D}$ de telle sorte que le terme (3.104) s'annule.

gouvernée par le d'Alembertien. De plus, elle se révèle fort utile en pratique, comme illustré dans la seconde partie de ce chapitre.

Propagation des conditions initiales. La contribution

$$\begin{aligned} \frac{1}{c^2} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \pi_0(\mathbf{r}') \frac{\delta(t - t_0 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ + \frac{1}{c^2} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \phi_0(\mathbf{r}') \frac{\delta'(t - t_0 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \end{aligned} \quad (3.104)$$

décrit la propagation du champ initial ϕ_0 et de sa dérivée temporelle π_0 . Elle s'effectue via G_{∞}^{+} et sa dérivée temporelle $(\partial/\partial t)G_{\infty}^{+}$, qui présente également une structure de type front localisé avançant à la vitesse c . Ainsi, les points $\mathbf{r}'$ qui contribuent au terme (3.104) sont situés sur la sphère de centre $\mathbf{r}$ et de rayon $R = c(t - t_0)$. Pour des temps suffisamment longs, cette sphère est complètement en dehors du domaine $\mathcal{D}$, comme indiqué sur la figure 3.4. Alors, le terme de condition initiale (3.104) s'annule identiquement dans le domaine. En quelque sorte, les conditions initiales sont oubliées, du moins à un niveau explicite ¹³ dans la formule (3.103).

13. Les conditions initiales sont toujours présentes implicitement dans l'évolution des contributions de surface au champ total (3.103).

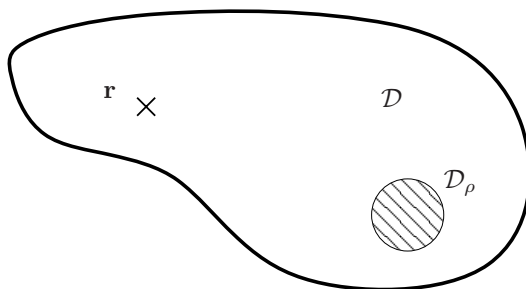


FIG. 3.5 – Sur cette figure, les sources sont localisées dans la partie $\mathcal{D}_\rho$ du domaine $\mathcal{D}$. Au point $\mathbf{r}$, le signal (3.105) provenant de ces sources est non nul uniquement pour t suffisamment grand par rapport à t_0 .

Finitude de la vitesse de propagation et retard. Dans la formule (3.103), le terme

$$\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}', t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \theta(t - t_0 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c) \quad (3.105)$$

décrit le champ de superposition au point $\mathbf{r}$ et à l'instant t , créé par les sources élémentaires distribuées avec la densité ρ . La contribution élémentaire de chaque source localisée en $\mathbf{r}'$ a été émise au temps retardé $t_{ret} = t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c$. Ceci résulte de la propagation du signal émis à la vitesse invariable c , ainsi que de sa structure de type front localisé. La densité $\rho(\mathbf{r}', t')$ doit donc être évaluée en $t' = t_{ret}$.

Comme il faut uniquement prendre en compte les signaux émis entre les instants t_0 et t , seuls les temps retardés $t_{ret} > t_0$ sont acceptables, ce qui se traduit par la présence du facteur $\theta(t - t_0 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)$ dans l'intégrale (3.105). Ainsi, si les sources sont localisées dans une partie $\mathcal{D}_\rho$ du domaine, comme indiqué sur la figure 3.5, alors en tout point suffisamment éloigné, le champ de superposition (3.105) est nul pour t proche de t_0 car aucun signal n'a eu le temps d'y arriver. Notons qu'il n'y a pas de contradiction car les contributions aux temps $t < t_0$ sont prises en compte dans les conditions initiales. Remarquons aussi que cette propriété est une différence essentielle par rapport à la diffusion. En effet, dans ce dernier cas, même pour des points $\mathbf{r}$ loin des sources, le champ de superposition comporte des contributions non-nulles dès $t = t_0^+$.

Réflexions multiples dans un domaine fini. Les termes de surface

$$\begin{aligned}
 & - \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \phi(\mathbf{r}', t-\tau) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \frac{\delta(\tau - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\
 & + \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \frac{\delta(\tau - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}', t-\tau) , \quad (3.106)
 \end{aligned}$$

représentent les champs émis par les sources induites localisées sur la frontière $\partial\mathcal{D}$. Leurs distributions surfaciques sont semblables à celles des sources superficielles contribuant au potentiel électrostatique, dont l'étude a été présentée dans le chapitre 2. De nouveau, les signaux émis sont des fronts localisés se propageant à la vitesse c . En conséquence, seuls les temps retardés $t_{ret} = t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c$ contribuent aux intégrales temporelles, à condition d'être compris entre t_0 et t bien sûr.

Les contributions de surface peuvent être également interprétées comme fruits de la réflexion sur la frontière $\partial\mathcal{D}$ des champs émis par les sources en volume. Ce point de vue est étayé par l'argumentaire suivant. Considérons le cas d'une source pulse, de densité

$$\rho^{pulse}(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0) \delta(t - t_0) ,$$

branchée à l'instant t_0 , le champ ϕ^{pulse} étant identiquement nul aux instants antérieurs. Supposons que les conditions aux bords soient de type Dirichlet homogènes. Par définition, ce champ n'est autre que la fonction de Green causale de Dirichlet homogène,

$$\phi^{pulse}(\mathbf{r}, t) = G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; t - t_0) .$$

Par ailleurs, la fonction $G_{\infty}^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0; t - t_0)$ est aussi solution de l'équation de d'Alembert avec ρ^{pulse} . Or, pour tout temps tel que $c(t - t_0)$ soit inférieure à la distance minimale ℓ de $\mathbf{r}_0$ à la frontière, $G_{\infty}^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0; t - t_0)$ satisfait également à la condition de Dirichlet homogène sur $\partial\mathcal{D}$. Comme G_{∞}^+ satisfait aussi aux mêmes conditions initiales que ϕ^{pulse} , le théorème d'unicité implique que G_{∞}^+ et G_{DH}^+ coïncident exactement aux temps t suffisamment proches de t_0 ,

$$G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; t - t_0) = G_{\infty}^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0; t - t_0) \text{ pour } t < t_0 + \frac{\ell}{c} . \quad (3.107)$$

L'identification (3.107) admet une interprétation très simple. Comme illustré sur la figure 3.6, pour $t < t_0 + \ell/c$ le champ élémentaire G_{∞}^+ émis par la source pulse n'a pas eu le temps d'atteindre la frontière, et aucun champ réfléchi ne vient s'y ajouter! Cette interprétation est confortée par l'analyse suivante. Spécifions l'expression (3.103) à la présente situation, en remarquant que ϕ^{pulse} est solution de l'équation de d'Alembert homogène pour $t > t_0$, avec

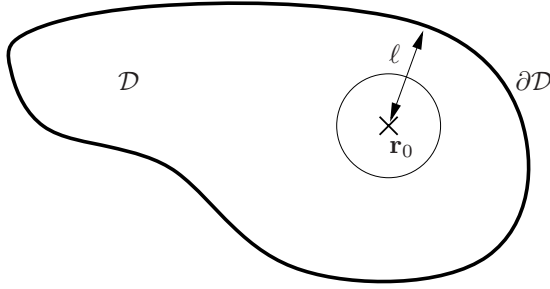


FIG. 3.6 – Sur cette figure, ℓ est la distance minimale entre $\mathbf{r}_0$ et $\partial\mathcal{D}$. Le cercle représente la sphère de centre $\mathbf{r}_0$ et de rayon $R = c(t - t_0)$. Pour $t < t_0 + \ell/c$, cette sphère n'a pas atteint le bord $\partial\mathcal{D}$.

les conditions initiales $\phi_0^{pulse} = 0$ et $\pi_0^{pulse} = c^2\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)$, ainsi que la condition de bord $\phi^{pulse}(\mathbf{r}, t) = 0$ pour $\mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}$. Il vient alors

$$G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}_0; t - t_0) = \frac{\delta(t - t_0 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|/c)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|} + \int_0^{t-t_0} d\tau \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \frac{\delta(\tau - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} G_{DH}^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}_0; t - t_0 - \tau). \quad (3.108)$$

En itérant cette équation intégrale, nous obtenons un développement perturbatif des effets de bord, où le p -ème terme décrit en quelque sorte la contribution de p réflexions. Pour $t < t_0 + \ell/c$, chacun de ces termes de surface est bien nul, car $G_{\infty}^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}_0; t - t_0 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)$ s'annule sur la frontière. Ceci implique que G_{DH}^+ se réduit alors effectivement à G_{∞}^+ , en accord avec le raisonnement précédent invoquant l'unicité. De plus, le terme de surface apparaît effectivement dès que le front décrit par G_{∞}^+ atteint la frontière.

L'argumentation précédente est applicable aussi au champ pulse avec des conditions de Neumann homogènes. Nous trouvons alors $G_{NH}^+ = G_{\infty}^+$ pour $t < t_0 + \ell/c$. Le terme de surface qui intervient dans l'équivalent de la relation (3.108) ne devient actif qu'aux temps ultérieurs $t > t_0 + \ell/c$. Donc, en définitive, nous retenons que les contributions de surface (3.106) incorporent les réflexions sur les bords du champ émis par les sources de volume. Au bout d'un temps suffisamment long, ces réflexions sont évidemment multiples.

Ondes progressives. Considérons pour finir le cas où les bords sont rejetés à l'infini, le domaine $\mathcal{D}$ étant alors l'espace $\mathbb{R}^3$. Rejetons également les conditions initiales à $t_0 = -\infty$, et imposons l'absence de champ initial, $\phi_0(\mathbf{r}) = 0$ et $\pi_0(\mathbf{r}) = 0$, ainsi que l'annulation de $\phi(\mathbf{r}, t)$ quand $|\mathbf{r}| \rightarrow \infty$. Dans la formule (3.103), les termes de condition initiale et de surface disparaissent. Nous

retrouvons alors la fameuse formule dite des potentiels retardés, à savoir

$$\boxed{\phi(\mathbf{r}, t) = \int d\mathbf{r}' \frac{\rho(\mathbf{r}', t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}. \quad (3.109)$$

Parmi les nombreuses applications possibles de la formule (3.109), mentionnons la détermination de la forme asymptotique du champ à grande distance des sources, en supposant celles-ci localisées dans une portion finie de l'espace. Celle-ci est obtenue par un calcul tout à fait standard. Par exemple, cette analyse intervient en électromagnétisme, dans l'établissement des formules du rayonnement dipolaire. Plaçons-nous au voisinage d'un point $\mathbf{R}$ situé loin des sources, défini par les conditions $|\mathbf{r} - \mathbf{R}| \ll R$ et $r' \ll R$ pour $\rho(\mathbf{r}', t') \neq 0$. Notons x et x' les projections de $\mathbf{r} - \mathbf{R}$ et $\mathbf{r}'$ suivant le vecteur unitaire $\mathbf{n} = \mathbf{R}/|\mathbf{R}|$. Le champ est localement de la forme¹⁴

$$\phi(\mathbf{r}, t) \sim f(x - ct), \quad (3.110)$$

avec

$$f(\xi) = \frac{1}{4\pi R} \int d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}', \frac{x' - R - \xi}{c}). \quad (3.111)$$

Le champ possède donc, localement, une structure de type onde plane progressive, se déplaçant, sans déformation, à la vitesse c dans la direction de $\mathbf{n}$.

Naturellement, la structure d'onde plane progressive se retrouve dans les géométries spatiales unidimensionnelles. Un champ $\phi(x, t)$ solution de l'équation de d'Alembert homogène, est alors nécessairement de la forme bien connue

$$\phi(x, t) = f_1(x - ct) + f_2(x + ct).$$

Il se réduit donc à la superposition de deux ondes planes progressives se déplaçant en sens inverse l'une de l'autre. Cette superposition peut conduire à la formation d'une onde stationnaire, pour des conditions de bord adéquates.

Conclusion. L'équation de d'Alembert présente un caractère réversible par suite de son invariance sous le changement $t \rightarrow -t$. Ainsi, en particulier, comme pour l'équation de Schrödinger, elle peut engendrer des ondes stationnaires. Ceci étant, la symétrie de l'équation de d'Alembert vis à vis des coordonnées spatiales et temporelle lui confère des propriétés spécifiques, notamment la propagation d'ondes progressives à vitesse finie, qui n'ont pas leur équivalent en mécanique quantique.

14. La forme (3.110) est obtenue à $\mathbf{R}$ fixé. Bien entendu, la fonction $f(\xi)$ définie par la formule (3.111) dépend aussi de R et de $\mathbf{n}$.

3.2 Applications et exemples

3.2.1 Diffusion dans un segment

Présentation

Étudions le problème unidimensionnel de diffusion confinée au segment $0 \leq x \leq L$. À travers cet exemple, nous allons montrer comment mettre en œuvre la construction systématique des fonctions de Green causales à partir de leurs représentations spectrales. De plus, les comportements obtenus illustrent bien l'ensemble des propriétés générales mises en évidence au §3.1.3.

Ici, nous nous intéressons uniquement aux fonctions de Green causales $G_{DH}^+(x; x'; \tau)$ et $G_{NH}^+(x; x'; \tau)$ avec des conditions aux bords homogènes de Dirichlet et de Neumann respectivement, c'est-à-dire

$$\begin{aligned} G_{DH}^+(x; x'; \tau) &= 0 & \text{pour } x = 0, L & \quad \forall \tau > 0, \\ \frac{\partial}{\partial x} G_{NH}^+(x; x'; \tau) &= 0 & \text{pour } x = 0, L & \quad \forall \tau > 0. \end{aligned}$$

Rappelons que ces conditions aux bords correspondent à la présence de parois absorbantes ou réfléchissantes respectivement. Par ailleurs, la connaissance de ces fonctions de Green permet de déterminer explicitement la solution générale de l'équation de diffusion, avec présence éventuelle d'un terme de source quelconque, ainsi que des conditions de bord de Dirichlet ou Neumann faisant intervenir des fonctions à dépendance temporelle arbitraire. Parmi les nombreuses applications possibles, citons, par exemple, la diffusion de la densité avec injection de particules en un point du segment. On peut aussi mentionner la diffusion de la chaleur dans un système compris entre deux plaques parallèles, en réponse aux variations imposées de la température des plaques. Dans ce cas, les symétries du système font apparaître les fonctions de Green à une dimension.

Étude et résolution

Nous avons montré p. 159-160 que la représentation spectrale des fonctions de Green homogènes s'écrit

$$G_H^+(x; x'; \tau) = \theta(\tau) \sum_n e^{-D\lambda_n \tau} \psi_n(x) \psi_n^*(x')$$

où les $\{\psi_n\}$ forment une base de fonctions propres orthonormées de $-(\partial^2/\partial x^2)$ vérifiant les mêmes C.L. que G_H^+ . Dans un premier temps, nous déterminons les forme explicites de ces représentations pour G_{DH}^+ et G_{NH}^+ , avant d'en étudier le comportement aux grands temps.

Formules spectrales explicites. Dans le cas présent, les fonctions propres ψ_n et les valeurs propres associées λ_n s'obtiennent facilement, à savoir pour les C.L. de Dirichlet homogènes

$$\psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \sin\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad \lambda_n = \frac{n^2\pi^2}{L^2}, \quad n \in \mathbb{N}^*$$

et pour les C.L. de Neumann homogènes

$$\psi_0(x) = \sqrt{\frac{1}{L}}, \quad \lambda_0 = 0 \quad \text{et} \quad \psi_n(x) = \sqrt{\frac{2}{L}} \cos\left(\frac{n\pi x}{L}\right), \quad \lambda_n = \frac{n^2\pi^2}{L^2}, \quad n \in \mathbb{N}^*.$$

Un calcul simple conduit alors aux résultats

$$G_{DH}^+(x; x'; \tau) = \frac{\theta(\tau)}{2L} \left[\vartheta_3\left(\frac{\pi(x-x')}{2L}, e^{-\frac{\tau}{\tau_0}}\right) - \vartheta_3\left(\frac{\pi(x+x')}{2L}, e^{-\frac{\tau}{\tau_0}}\right) \right], \quad (3.112)$$

et

$$G_{NH}^+(x; x'; \tau) = \frac{\theta(\tau)}{2L} \left[\vartheta_3\left(\frac{\pi(x-x')}{2L}, e^{-\frac{\tau}{\tau_0}}\right) + \vartheta_3\left(\frac{\pi(x+x')}{2L}, e^{-\frac{\tau}{\tau_0}}\right) \right], \quad (3.113)$$

où nous avons introduit le temps caractéristique de diffusion $\tau_0 = L^2/(\pi^2 D)$, ainsi que la fonction Theta ϑ_3 définie par

$$\vartheta_3(u, q) = 1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} q^{n^2} \cos(2nu).$$

Remarquons que les transformées de Laplace des fonctions (3.112) et (3.113) sont les fonctions de Green homogènes de l'opérateur de Helmholtz sur le segment $[0, L]$, comme montré dans la discussion générale, page 161. Ces fonctions de Green ont été calculées dans le segment $[-(L/2), (L/2)]$, page 88. Le lecteur est invité à reprendre les résultats (2.52) et (2.53) pour obtenir des formules sommatoires intéressantes, exprimant des séries de fonctions trigonométriques en termes de fonctions hyperboliques.

Comportements aux temps longs. Considérons un temps τ grand devant le temps caractéristique τ_0 , pour lequel $q = e^{-\frac{\tau}{\tau_0}} \ll 1$. En utilisant le comportement asymptotique de la fonction Theta,

$$\lim_{q \rightarrow 0} \vartheta_3(u, q) = 1 + 2q \cos(2u) + O(q^4),$$

nous obtenons

$$G_{DH}^+(x; x'; \tau) \simeq \frac{1}{L} \left[\cos \left(\frac{\pi(x - x')}{L} \right) - \cos \left(\frac{\pi(x + x')}{L} \right) \right] e^{-\frac{\tau}{\tau_0}} \quad (3.114)$$

et

$$G_{NH}^+(x; x'; \tau) - \frac{1}{L} \simeq \frac{1}{L} \left[\cos \left(\frac{\pi(x - x')}{L} \right) + \cos \left(\frac{\pi(x + x')}{L} \right) \right] e^{-\frac{\tau}{\tau_0}}, \quad (3.115)$$

quand $\tau \rightarrow \infty$. Les comportements asymptotiques (3.114) et (3.115) montrent que $G_{DH}^+(x; x'; \tau)$ décroît exponentiellement vite vers zéro, tandis que $G_{NH}^+(x; x'; \tau)$ tend, tout aussi rapidement, vers la constante $(1/L)$. Nous retrouvons là les propriétés établies de manière générale dans le paragraphe 3.1.3, qui sont liées aux caractères respectivement absorbant et réfléchissant des parois du domaine $[0, L]$. Le temps τ_0 peut être interprété comme le temps à partir duquel le système a oublié les conditions initiales. Il contrôle aussi le processus de relaxation exponentiel vers l'état stationnaire final.

Interprétation

Les fonctions de Green étudiées peuvent représenter l'évolution de différentes quantités physiques. Dans la suite, nous les voyons comme les densités de probabilité d'une particule effectuant un mouvement brownien. Leurs évolutions sont comparées et interprétées dans ce contexte.

Les fonctions $G_{DH}^+(x; x'; \tau)$ et $G_{NH}^+(x; x'; \tau)$ sont tracées sur la figure 3.7 en fonction de x , et pour des temps τ croissants. L'application numérique a été faite avec $L = 1$ et $x' = (1/2)$ de telle sorte que le point de départ de la particule brownienne soit au milieu du segment. Aux bords du segment, les fonctions G_{DH}^+ s'annulent, tandis que la tangente des fonctions G_{NH}^+ y est horizontale. Ensuite, pour le temps de calcul le plus court, ces deux fonctions de Green homogènes sont resserrées autour du point de départ de la particule, et il y a peu de différence entre elles. Cela se comprend bien dans la mesure où les effets de bord ont peu d'influence aux temps courts. Par contre, lorsque τ augmente, G_{DH}^+ diminue et finit par s'éteindre complètement, alors que G_{NH}^+ devient uniforme et égale à 1.

Continuons nos observations en prenant un point de départ plus proche d'un des bords. Prenons par exemple $x' = 0,8$, toujours avec $L = 1$. Les fonctions de Green correspondantes sont tracées sur la figure 3.8 pour les mêmes temps τ que précédemment. Comme attendu, la présence des parois a un effet beaucoup plus rapide. Tout d'abord, pour le temps le plus court considéré, il y a une différence notable entre les fonctions de Green G_{DH}^+ et G_{NH}^+ , contrairement au cas précédent. Ensuite, pour une paroi absorbante, la probabilité de présence de la particule s'éteint plus rapidement que dans le cas précédent. À l'opposé, pour une paroi réfléchissante, la particule reste en

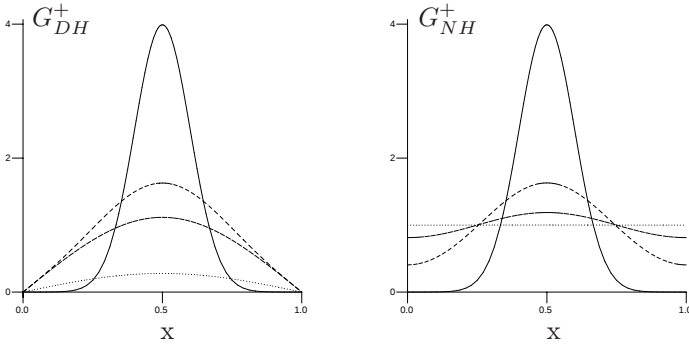


FIG. 3.7 – Tracé des fonctions $G_{DH}^+(x; x'; \tau)$ et $G_{NH}^+(x; x'; \tau)$ données par les équations (3.112) et (3.113) en fonction de x , avec $L = 1$ et $x' = (1/2)$, et pour quatre temps τ de plus en plus grands.

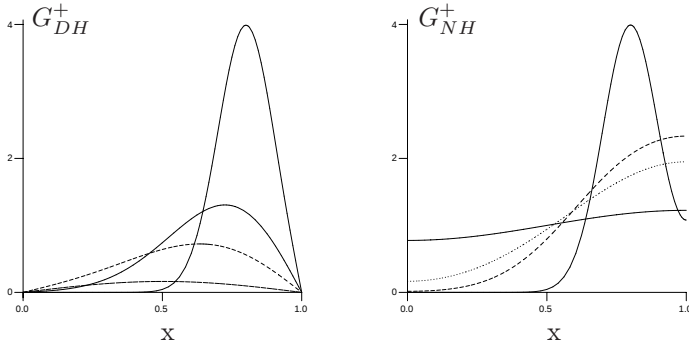


FIG. 3.8 – Tracé des fonctions $G_{DH}^+(x; x'; \tau)$ et $G_{NH}^+(x; x'; \tau)$ données par les équations (3.112) et (3.113) en fonction de x , avec $L = 1$ et $x' = 0,8$ pour les mêmes temps τ que ceux de la figure 3.7. Les échelles des axes sont les mêmes que celles de la figure 3.7.

moyenne plus longtemps au voisinage de la paroi, et donc la probabilité de présence s'homogénéise un peu moins rapidement.

Il est clair que cette méthode s'applique avec la même simplicité aux problèmes de diffusion en dimension arbitraire d , et dans l'hyper-rectangle $0 \leq x_i \leq L_i$, $i = 1, \dots, d$. Cette généralisation est aussi valide pour des conditions aux bords mixtes, certaines parois étant réfléchissantes et d'autres

absorbantes. Le résultat final peut toujours être exprimé en termes de la fonction ϑ .

3.2.2 Diffraction de Fraunhofer

Présentation

La diffraction de Fraunhofer est une application fondamentale des fonctions de Green du d'Alembertien à la théorie de l'optique ondulatoire. Dans le cadre d'un modèle simple, nous allons établir une formulation mathématique du principe de Huygens-Fresnel, suivant la nature des conditions de bord choisies. Ensuite, nous procéderons à une discussion des formules de Kirchhoff pour de faibles angles de diffraction.

La lumière étant une onde électromagnétique, une approche fondamentale de la diffraction par un obstacle exigerait de partir des équations de Maxwell. On pourrait alors envisager de modéliser les propriétés électromagnétiques du matériau constituant cet obstacle, à l'aide d'une constante diélectrique ou d'une conductivité... En fait, un tel programme se révèle déjà d'une formidable complexité. Par exemple, les conditions de bord sur les champs électrique $\mathbf{E}$ et magnétique $\mathbf{B}$ sont des conditions de type raccordement, plutôt que de type Dirichlet ou Neumann, par suite de la présence d'ondes transmises dans le matériau. Aussi, les angles vifs de l'obstacle peuvent induire des effets de pointe délicats à prendre en compte.

Nous allons nous contenter ici d'une approche bien plus modeste ! Tout d'abord, nous nous affranchissons de la nature tensorielle du champ électromagnétique, en adoptant le modèle dit scalaire de la lumière. Celle-ci est caractérisée alors par un champ ϕ , appelé vibration lumineuse, qui satisfait l'équation de propagation dans le vide

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right] \phi(\mathbf{r}, t) = 0, \quad (3.116)$$

où c désigne la vitesse de la lumière. Naturellement, le champ ϕ peut être assimilé à l'une quelconque des composantes de $\mathbf{E}$ ou $\mathbf{B}$. Dans le cadre de cette description minimaliste, il est raisonnable de postuler des conditions de Dirichlet homogènes, ou bien de Neumann homogènes, sur l'obstacle considéré. Leur intérêt pour des applications réalistes est certainement assez limité, mais ces hypothèses permettent d'étudier le processus de diffraction sans faire d'approximations incontrôlées. Les modèles ainsi obtenus allient la simplicité à une certaine richesse de contenu, et ils tiennent donc une place importante dans la compréhension des phénomènes complexes à l'œuvre dans les situations réelles.

Nous considérons la situation standard représentée sur la figure 3.9. Une plaque, que nous supposons infinie, est placée en $z = 0$. Cette plaque est

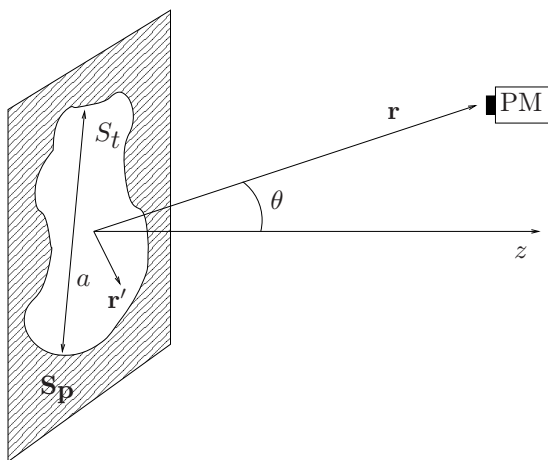


FIG. 3.9 – Représentation de la situation physique étudiée dans cet exemple : la plaque S_p est percée d'un trou S_t . L'origine des axes est choisie en un point de cet orifice. Un photo-multiplieur (PM) permet de mesurer le signal loin de la plaque.

percée d'un trou de forme arbitraire, et dont la taille est donnée par une longueur caractéristique a . L'origine des coordonnées est prise en un point de ce trou. Une vibration lumineuse monochromatique arrive du côté des $z < 0$ sur la plaque. Dans les conditions dites de Fraunhofer, on suppose que cette vibration incidente est produite par une source très lointaine. Elle est donc de type onde plane,

$$\phi(\mathbf{r}, t) = A_0 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r} - i\omega t},$$

où $\mathbf{k}$ est le vecteur d'onde, $\omega = ck$ la fréquence et A_0 une amplitude constante. Nous considérons une incidence normale par rapport à la plaque, i.e. $\mathbf{k}$ est selon l'axe des z . Nous voulons déterminer la vibration diffractée en un point situé dans le demi-espace $z > 0$ et à une distance très grande devant a . En pratique, la mesure correspondante de l'intensité lumineuse est effectuée à l'aide d'un dispositif optique, constitué d'une lentille mince et d'un photo-multiplieur ou d'une photodiode situés dans son plan focal.

Étude et résolution

Ici, il est commode de raisonner dans le demi-espace $z > 0$. Dans ce domaine $\mathcal{D}$, il n'y a pas de source, et $\phi(\mathbf{r}, t)$ y satisfait l'équation de d'Alembert (3.116). Supposons que la source contenue dans l'autre demi-espace $z < 0$ ait été allumée en t_0 . Alors, les conditions initiales (3.89), p. 182, dans $\mathcal{D}$ sont simplement

$$\phi_0(\mathbf{r}) = 0 \quad \text{et} \quad \pi_0(\mathbf{r}) = 0. \quad (3.117)$$

La frontière $\partial\mathcal{D}$ du domaine est constituée du plan $z = 0$ et d'une surface fictive S_∞ à l'infini, par exemple définie en prenant la limite d'une demi-sphère de grand rayon centrée à l'origine. Vu les conditions initiales et la position de la source, la vibration $\phi(\mathbf{r}, t)$ ainsi que toutes ses dérivées spatiales et temporelles sont nulles sur S_∞ . L'équation intégrale (3.92) pour $\phi(\mathbf{r}, t)$, faisant intervenir n'importe quelle fonction de Green causale de Dirichlet ou de Neumann homogène du d'Alembertien G_H^+ , prend alors la forme

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \int_0^\infty d\tau \int_{z'=0} d\Sigma' G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}', t - \tau) - \int_0^\infty d\tau \int_{z'=0} d\Sigma' \phi(\mathbf{r}', t - \tau) \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau), \quad (3.118)$$

obtenue en rejetant t_0 à $-\infty$. Sur le plan $z = 0$, nous devons distinguer la partie S_p correspondant à la plaque, et la partie S_t correspondant au trou. Sur S_t qui est une surface libre, la vibration ne sera pas imposée *a priori*. Sur S_p , elle, ou son gradient normal, seront fixés par des conditions de bord de Dirichlet ou de Neumann homogènes.

Les conditions de bord sur S_p étant choisies, il convient de travailler avec la fonction de Green la mieux adaptée. Il s'agit clairement de la fonction de Green de Dirichlet ou de Neumann, avec des conditions homogènes sur toute la frontière¹⁵ $\partial\mathcal{D}$, à savoir sur S_∞ et sur le plan $z = 0$. En premier lieu, nous déterminons ces fonctions de Green, puis nous en déduisons l'expression de $\phi(\mathbf{r}, t)$ en fonction d'une intégrale sur la surface du trou S_t .

Fonctions de Green de Dirichlet et de Neumann. Commençons par les conditions de Dirichlet homogènes. Dans le cas statique du Laplacien, nous avons déjà déterminé la fonction de Green pour une telle configuration au §2.2.1, page 106 : elle donne le potentiel électrostatique créé par une charge ponctuelle au voisinage d'un plan conducteur. Dans la situation présente, la fonction de Green G_{DH}^+ peut également être obtenue par la méthode des images, avec le résultat

$$G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) = G_\infty^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \tau) - G_\infty^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_{im}; \tau) \quad (3.119)$$

où G_∞^+ est la fonction de Green du d'Alembertien du système infini (3.101), et $\mathbf{r}'_{im}$ est le symétrique de $\mathbf{r}'$ par rapport au plan $z = 0$. Soulignons à nouveau que les conditions de bord définissant G_{DH}^+ sont prises sur le plan $z = 0$ tout entier.

Il existe au moins deux méthodes permettant de comprendre pourquoi la méthode des images vue dans le cas statique au chapitre 2 se généralise au cas

15. Définir une autre fonction de Green, avec des conditions différenciées sur S_p et S_t , ne présente pas d'intérêt car il est difficile de déterminer cette fonction.

présent. La première est basée sur la représentation spectrale (3.93) obtenue page 185,

$$G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) = \theta(\tau) \sum_n c \frac{\sin(c\sqrt{\lambda_n}\tau)}{\sqrt{\lambda_n}} \psi_n(\mathbf{r}) \psi_n^*(\mathbf{r}') .$$

En effet, dans cette expression, les $\psi_n(\mathbf{r})$ sont les fonctions propres du Laplacien avec C.L. de Dirichlet homogènes. Par conséquent, le raisonnement mené page 106 peut être appliqué ici aussi. La seconde méthode consiste à remarquer, que la transformée de Laplace sur τ de $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau)$ est la fonction de Green de Dirichlet homogène d'un opérateur de Helmholtz (voir page 182), pour laquelle la méthode des images vue au §2.2.1 est également appropriée.

Notons également, que l'expression (3.119) illustre bien les mécanismes de réflexion sur les bords décrits dans la section 3.1.6. Aux temps τ suffisamment courts, $G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau)$ se réduit effectivement à $G_\infty^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau)$ car $|\mathbf{r} - \mathbf{r}'_{im}| > |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$. Après une seule réflexion sur le plan $z = 0$, il apparaît dans G_{DH}^+ la contribution supplémentaire de l'onde réfléchie, qui coïncide avec le champ élémentaire créé par la source image. Aucune autre réflexion n'intervient plus car les autres bords sont à l'infini.

Pour des conditions de Neumann homogènes, nous trouvons de manière similaire

$$\boxed{G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) = G_\infty^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \tau) + G_\infty^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_{im}; \tau)} \quad (3.120)$$

La seule différence avec la la formule (3.119) est le signe de la contribution de l'onde réfléchie ou image, qui maintenant s'ajoute à celle de l'onde directe.

Vibration lumineuse avec conditions de Dirichlet. Supposons que $\phi(\mathbf{r}, t)$ satisfasse des conditions de Dirichlet homogènes, $\phi(\mathbf{r}, t) = 0$ sur S_p . Compte tenu de la forme de ces conditions de bord, ainsi que de la linéarité de l'équation de d'Alembert, nous pouvons affirmer que la dépendance temporelle de $\phi(\mathbf{r}, t)$ en un point donné, est de la forme

$$\phi(\mathbf{r}, t) = A_D(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} ,$$

où $A_D(\mathbf{r})$ est une amplitude complexe. En utilisant G_{DH}^+ dans l'équation (3.118), nous obtenons alors ¹⁶

$$A_D(\mathbf{r}) = \int_0^\infty d\tau \int_{S_t} d\Sigma' A_D(\mathbf{r}') e^{i\omega\tau} \frac{\partial}{\partial z'} G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) . \quad (3.121)$$

L'amplitude de la vibration lumineuse en tout point de $\mathcal{D}$ est donc entièrement déterminée par la valeur de celle-ci sur le trou S_t . Cette dernière n'est

16. Rappelons que le vecteur $\mathbf{n}'$ est orienté vers l'extérieur de $\mathcal{D}$ et donc vers les $z' < 0$.

elle-même pas aisément accessible, car il faudrait résoudre complètement le problème dans l'espace tout entier...

L'expression intégrale (3.121) peut être simplifiée comme suit en exploitant les propriétés de G_∞^+ . En partant de la formule (3.119), nous trouvons facilement

$$\frac{\partial}{\partial z'} G_{DH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) = -2 \frac{\partial}{\partial z} G_\infty^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; \tau) \quad \text{en } z' = 0 .$$

Ceci permet de réécrire l'intégrale (3.121) comme

$$A_D(\mathbf{r}) = -2 \frac{\partial}{\partial z} \int_0^\infty d\tau \int_{S_t} d\Sigma' A_D(\mathbf{r}') e^{i\omega\tau} \frac{c}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \delta[c\tau - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|]$$

où nous avons utilisé la formule (3.101), page 190, pour G_∞^+ . L'intégration sur τ est immédiate et donne le résultat exact

$$A_D(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\pi} \int_{S_t} d\Sigma' A_D(\mathbf{r}') \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right]. \quad (3.122)$$

Vibration lumineuse avec conditions de Neumann. Les conditions de bord de Neumann homogènes stipulent que $\partial\phi/\partial z = 0$ sur S_p . Comme dans le cas de Dirichlet, la vibration lumineuse prend la forme

$$\phi(\mathbf{r}, t) = A_N(\mathbf{r}) e^{-i\omega t} .$$

En suivant la même démarche que ci-dessus, et comme proposé à l'exercice 3.4, le lecteur peut montrer que l'amplitude $A_N(\mathbf{r})$ en tout point de $\mathcal{D}$ est simplement donnée par la formule exacte

$$A_N(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\pi} \int_{S_t} d\Sigma' \frac{\partial A_N}{\partial z'}(\mathbf{r}') \frac{e^{ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (3.123)$$

Interprétation

Le contenu des formules (3.122) et (3.123) est discuté en relation avec le principe de Huygens-Fresnel, puis nous en déduisons les patrons d'interférence respectifs à l'infini. Enfin, nous concluons par un bref commentaire sur d'autres approches.

Principe de Huygens-Fresnel. Ce principe dit que chaque point d'une surface d'onde se comporte comme une source secondaire émettant une onde sphérique. Sur un plan historique, il a joué un rôle capital, et aujourd'hui il est encore souvent utilisé comme point de départ des calculs de diffraction en optique ondulatoire, car il se révèle suffisant pour décrire précisément nombre de

situations pratiques. Dans un point de vue plus fondamental basé sur l'équation de d'Alembert, il apparaît néanmoins plus comme une recette, même si elle est de très bon goût !

Dans le cas des conditions de Neumann sur la plaque, la formule (3.123) semble bien à première vue une traduction mathématique du principe de Huygens-Fresnel. En effet, chaque point du trou S_t émet une onde sphérique d'amplitude $e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$. Cela dit, ces points n'appartiennent pas forcément à une surface d'onde car l'onde plane incidente est certainement déformée au niveau du trou. Pour des conditions de Dirichlet sur S_p , la formule (3.122) présente des distorsions encore plus sévères avec les prédictions du principe de Huygens-Fresnel, car l'onde émise par chaque point du trou S_t n'est plus isotrope. Cela dit, nous verrons plus avant que ces distorsions deviennent négligeables à l'infini dans les directions proches de l'axe Oz suivant lequel se propage l'onde incidente.

Patron d'interférences à l'infini. Plaçons-nous maintenant à des distances du trou beaucoup plus grandes que sa taille caractéristique a . Alors, dans chacune des intégrales (3.122) et (3.123), pour tous les points $\mathbf{r}'$ appartenant à S_t , nous pouvons remplacer le facteur d'enveloppe en $1/|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|$ par $1/r$ d'une part, et utiliser le développement asymptotique

$$|\mathbf{r}-\mathbf{r}'| = r - \frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{r}'}{r} + O(r'/r) \quad (3.124)$$

dans le facteur de phase $e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}$ d'autre part. En notant θ l'angle de $\mathbf{r}$ avec la direction Oz (voir figure 3.9) et $\mathbf{k}_\theta$ le nombre d'onde dirigé suivant le vecteur unitaire $\mathbf{r}/r$ et de module k , nous trouvons finalement

$$A_D(\mathbf{r}) \simeq -\frac{ik \cos \theta}{2\pi r} e^{ikr} \int_{S_t} d\Sigma' A_D(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k}_\theta \cdot \mathbf{r}'} \quad (3.125)$$

et

$$A_N(\mathbf{r}) \simeq -\frac{e^{ikr}}{2\pi r} \int_{S_t} d\Sigma' \frac{\partial A_N}{\partial z'}(\mathbf{r}') e^{-i\mathbf{k}_\theta \cdot \mathbf{r}'} \quad (3.126)$$

quand $r \rightarrow \infty$.

Le patron d'interférences est obtenu en calculant l'intensité I lumineuse qui est proportionnelle à $|A_D(\mathbf{r})|^2$ ou $|A_N(\mathbf{r})|^2$. La différence principale entre les deux expressions provient du facteur anisotrope en $\cos^2 \theta$ qui est présent dans I_D . En conséquence, la nature des conditions de bord est moins importante pour les petits angles de diffraction θ .

Comparaison avec d'autres approches. Il n'est pas rare de trouver dans la littérature des applications du principe de Huygens-Fresnel, où l'on impose à la fois des conditions de Dirichlet et de Neumann sur la vibration lumineuse. Soulignons que ce choix est en général mathématiquement incohérent, car il n'existe pas de solution de l'équation de d'Alembert satisfaisant à ces deux conditions simultanément. En fait, il n'est point nécessaire d'invoquer ces conditions de bord pour obtenir l'approximation dite de Kirchhoff. Dans le cas étudié ici, il suffit de procéder comme suit.

Imaginons que la taille a du trou soit grande devant la longueur d'onde $\lambda = 2\pi/k$ de l'onde incidente. Il est alors légitime de considérer que $\phi(\mathbf{r}, t)$ est extrêmement petit au voisinage immédiat de la plaque S_p dans le domaine $\mathcal{D}$. En effet, la diffraction devrait alors être faible dans les directions faisant un angle important avec la direction Oz de l'onde incidente. Ceci est bien observé expérimentalement, pourvu que la plaque soit opaque, et indépendamment de la forme précise des conditions de bord. Avec le même niveau d'approximation, il est également légitime d'affirmer que la surface d'onde est peu perturbée au voisinage du trou, sauf à une distance d'ordre λ de son contour. Dans l'équation intégrale (3.92), p. 184, pour $\phi(\mathbf{r}, t)$ avec G_∞^+ , ceci revient à ne conserver que la contribution de S_t , et à remplacer $\phi(\mathbf{r}', t)$ par sa forme incidente $A_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} - i\omega t$ sur S_t . Il vient alors la formule de Kirchhoff pour l'amplitude diffractée dans des directions voisines de Oz ,

$$A_K(\mathbf{r}) \simeq -\frac{ikA_0 e^{ikr}}{2\pi r} \int_{S_t} d\Sigma' e^{-i\mathbf{k}_\theta \cdot \mathbf{r}'}.$$

Cette formule est bien identique aux expressions (3.125) et (3.126) pour θ petit : il suffit d'identifier $A_D(\mathbf{r}')$ et $A_N(\mathbf{r}')$ à $A_0 e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'}$ au voisinage de S_t , ce qui est conforme à l'hypothèse de faible déformation de la surface d'onde incidente dans ce voisinage.

3.2.3 Émission d'ondes sonores

Présentation

Considérons un corps effectuant des oscillations dans un fluide parfait. Ces oscillations peuvent concerner aussi bien son volume V_c variable dans le temps que la position de son centre de gravité. Dans les deux cas, qui peuvent être présents simultanément, on suppose que l'amplitude des oscillations est de l'ordre de la taille caractéristique ℓ du corps. Ces oscillations induisent des variations de la densité locale du fluide, qui vont naturellement se propager. Ainsi, le corps émet des ondes sonores, dont nous allons étudier la forme à grande distance.

Excepté au voisinage immédiat du corps, nous supposons que les variations de densité $\delta\rho$ du fluide restent petites devant la densité homogène ρ_0

du fluide au repos, c'est-à-dire $\delta\rho \ll \rho_0$. Nous admettons également que les transformations locales sont réversibles et adiabatiques. Ceci permet de relier la variation de pression δP à $\delta\rho$ via $\delta P = c^2\delta\rho$, où c est la vitesse du son donnée par $c = [(\partial P/\partial\rho)_S]^{1/2}$, la dérivée partielle étant prise à entropie constante. Il est alors possible de montrer, à partir de l'équation d'Euler et de l'équation de continuité, que l'écoulement induit dérive d'un potentiel. Autrement dit, il existe un potentiel $\phi(\mathbf{r}, t)$ tel que le champ de vitesse $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t)$ dans le fluide soit de la forme $\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) = \nabla\phi(\mathbf{r}, t)$. De plus, ϕ satisfait à l'EDP

$$\left[\frac{1}{c^2}\frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta\right]\phi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (3.127)$$

L'équation de propagation des ondes sonores (3.127) est du type d'Alembert (3.85) sans source. Elle est valable en tout point du fluide qui n'est pas atteint par le corps oscillant. Noter que dans la région où la surface du corps évolue, la densité du fluide varie brutalement de 0 à ρ_0 de sorte que l'approximation $\delta\rho \ll \rho_0$ n'y est pas valable. De plus, les conditions de bord à la surface du corps, qui sont de type Neumann, doivent être formulées sur une surface mobile, leur exploitation devenant ainsi plus délicate. Similairement à l'étude de la diffraction de Fraunhofer, il est bien plus approprié de travailler dans un domaine à l'extérieur d'une surface fermée fixe Σ_f , le corps étant entièrement contenu à l'intérieur de Σ_f à tout instant. Alors, l'utilisation de la fonction de Green causale G_∞^+ du d'Alembertien permet de déterminer le comportement des quantités d'intérêt à grande distance.

Nous nous plaçons dans le régime $\ell \ll cT$, où T est l'échelle de temps caractéristique de variation de forme et/ou de position du corps, ce qui est réalisé pour un objet suffisamment petit ou des oscillations suffisamment lentes. En notant $\lambda = cT$ la longueur d'onde caractéristique des ondes sonores émises, nous avons donc $\ell \ll \lambda$. Remarquons que cette condition implique que le champ de vitesse induit dans le fluide, qui est au plus d'ordre ℓ/T est très petit devant la vitesse du son c . Le nombre de Mach correspondant d'ordre u/c est très petit devant 1, et la condition $\delta\rho \ll \rho_0$ est bien observée en dehors du voisinage immédiat du corps.

Étude et résolution

Introduisons le domaine $\mathcal{D}$ compris entre la surface fermée Σ_f et une surface fictive Σ_∞ rejetée à l'infini. Supposons que le corps ait été mis en mouvement à un instant t_0 , auquel le fluide était au repos. Le potentiel des vitesses et toutes ses dérivées temporelles seront donc prises identiquement nulles en tout point de $\mathcal{D}$. À un instant ultérieur t , on supposera que les ondes émises n'ont pas eu le temps d'atteindre les parois du système considéré, de sorte que le potentiel des vitesses et toutes ses dérivées seront identiquement nulles sur Σ_∞ (voir figure 3.10). En premier lieu, nous montrons que $\phi(\mathbf{r}, t)$

s'exprime simplement en termes de $\phi(\mathbf{r}', t)$ et $\nabla' \phi(\mathbf{r}', t)$ avec $\mathbf{r}' \in \Sigma_f$. Puis, nous en déduisons sa forme asymptotique à grande distance.

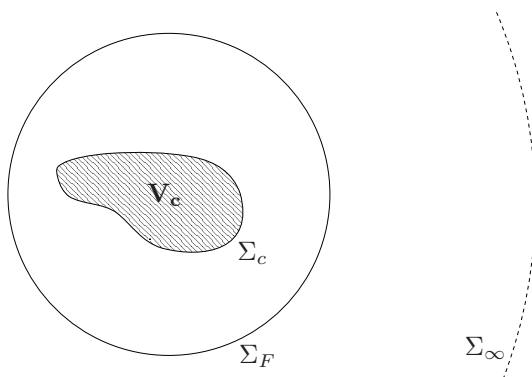


FIG. 3.10 – Corps de volume V_c en mouvement dans un fluide. Σ_c est la surface délimitant le corps. Σ_f est une surface fixe dans laquelle s'effectue tout le mouvement du corps et Σ_∞ une paroi fictive à l'infini.

Expression du potentiel en termes d'une intégrale de surface. Le potentiel des vitesses ϕ satisfait l'équation de d'Alembert sans source (3.127) dans tout le domaine $\mathcal{D}$. Il s'exprime donc en termes de n'importe quelle fonction de Green causale du d'Alembertien via une équation intégrale de la forme (3.92), p. 184. Il est plus commode ici d'utiliser la fonction de Green G_∞^+ du système infini, plutôt que les fonctions de Green de Dirichlet ou de Neumann dans $\mathcal{D}$. En effet, la surface Σ_f étant libre, les valeurs de $\phi(\mathbf{r}, t)$ ou de $\nabla \phi(\mathbf{r}, t)$ n'y sont pas imposées *a priori*. De plus, ces fonctions restent elles-mêmes à déterminer...

Appliquons donc la formule (3.103), page 193. Ici, aucune source n'est présente dans $\mathcal{D}$, alors que les conditions initiales (3.89), p. 182, sont $\phi_0(\mathbf{r}') = 0$ et $\pi_0(\mathbf{r}') = 0$. Par ailleurs, la surface Σ_∞ ne donnant aucune contribution, il reste uniquement la contribution de Σ_f , soit

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & \int_{\Sigma_f} d\Sigma' \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}', t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c) \frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \\ & + \nabla_{\mathbf{r}} \cdot \left[\int_{\Sigma_f} d\Sigma' \mathbf{n}' \phi(\mathbf{r}', t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c) \frac{1}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right]. \end{aligned} \quad (3.128)$$

Pour établir cette expression, nous avons utilisé $\nabla_{\mathbf{r}'} G_\infty^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') = -\nabla_{\mathbf{r}} G_\infty^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t')$, et nous considérons un temps t suffisamment long de sorte que l'onde sonore ait atteint le point $\mathbf{r}$ considéré, i.e. $t > t_0 + |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c$

pour tout $\mathbf{r}'$ sur Σ_f . Le premier terme est une contribution monopolaire qui décroît en $1/r$ aux grandes distances. Le second terme comprend une partie dipolaire en $1/r^2$, et également une partie monopolaire résultant de l'action, sous le signe somme, de l'opérateur $\nabla_{\mathbf{r}}$ sur $\phi(\mathbf{r}', t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)$. Comme dans l'étude de la diffraction de Fraunhofer au §3.2.2, nous voyons que chaque point de Σ_f se comporte comme une source secondaire, émettant des ondes sphériques de types monopolaire et dipolaire se propageant à la vitesse c .

Développement à grande distance. La surface Σ_f est complètement arbitraire. Nous la choisissons assez proche du corps en mouvement, de sorte que $|\mathbf{r}'|$ sur Σ_f est d'ordre ℓ . Posons alors $R = |\mathbf{r}|$ avec $R \gg \ell$. Nous pouvons utiliser le même type de développement asymptotique qu'à la page 208 pour la diffraction de Fraunhofer. Ainsi, nous obtenons

$$\nabla_{\mathbf{r}} \left[\frac{\phi(\mathbf{r}', t - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|/c)}{|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \right] = -\frac{\mathbf{n}}{Rc} \frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{r}', t - R/c + \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'/c) + O\left(\frac{1}{R^2}\right),$$

avec le vecteur unitaire $\mathbf{n} = \mathbf{r}/r$. Le champ $\phi(\mathbf{r}, t)$ s'écrit alors, à des termes en $O(1/R^2)$ près,

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & \frac{1}{4\pi R} \oint_{\Sigma_f} d\Sigma' \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}', t - R/c + \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'/c) \\ & - \frac{\mathbf{n}}{4\pi c R} \cdot \oint_{\Sigma_f} d\Sigma' \mathbf{n}' \frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{r}', t - R/c + \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'/c). \quad (3.129) \end{aligned}$$

À grande distance, le champ ϕ décroît donc en $1/R$, avec des coefficients qui sont des fonctions de ses valeurs sur Σ_f aux instants retardés $t - R/c + \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'/c$, en accord avec la propagation à la vitesse c . Les formes de ces coefficients sont déterminées dans le paragraphe suivant.

Amplitude des termes dominants à grande distance. Le temps $(\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'/c)$ est d'ordre ℓ/c . Par conséquent, en vertu de l'hypothèse $\ell \ll \lambda$ il est petit devant T , qui est l'échelle temporelle caractéristique de variation de ϕ . Ainsi, les fonctions en jeu dans les deux intégrales de surface impliquées dans l'expression asymptotique (3.129) peuvent être développées au voisinage du même temps retardé $t - R/c$ commun à tous les points de Σ_f ,

$$\begin{aligned} \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}', t - R/c + \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'/c) &= \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}', t - R/c) + \frac{\mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'}{c} \frac{\partial}{\partial t} [\nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}', t - R/c)] + \dots \\ \frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{r}', t - R/c + \mathbf{n} \cdot \mathbf{r}'/c) &= \frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{r}', t - R/c) + \dots \end{aligned}$$

Ceci engendre un développement en puissances de ℓ/λ de chacune des intégrales de surface correspondantes. Le terme d'ordre zéro se réduit au flux du champ de vitesse à travers Σ_f , évalué à l'instant $t - R/c$. Or dans la région

comprise entre la surface du corps Σ_c et Σ_f , le fluide se comporte plutôt de manière incompressible car $\ell \ll \lambda$, de sorte que

$$\oint_{\Sigma_f} d\Sigma' \mathbf{n}' \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}', t - R/c) = -\dot{V}_c(t - R/c) + \dots$$

Les termes ici négligés sont d'ordre $(\ell/\lambda)^2$ au moins, comme montré par une simple estimation de l'ordre de grandeur de $\delta\rho/\rho_0$ au voisinage du corps¹⁷. En remplaçant les intégrales de surface dans l'expression asymptotique (3.129) par leurs développements en puissances de ℓ/λ , nous trouvons finalement

$$\phi(\mathbf{r}, t) = -\frac{1}{4\pi R} [\dot{V}_c(t - R/c) + \dot{\mathbf{A}}(t - R/c) \cdot \mathbf{n}/c + O(\frac{\ell^2}{\lambda^2})] + O(\frac{1}{R^2}) . \quad (3.130)$$

avec

$$\mathbf{A}(t - R/c) = -\oint_{\Sigma_f} d\Sigma' [\mathbf{n}' \cdot \mathbf{u}(\mathbf{r}', t - R/c)] \mathbf{r}' + \oint_{\Sigma_f} d\Sigma' \phi(\mathbf{r}', t - R/c) \mathbf{n}' . \quad (3.131)$$

Noter que le terme faisant intervenir $\dot{\mathbf{A}}(t - R/c)$, est plus petit que le terme en $\dot{V}_c(t - R/c)$ par un facteur d'ordre ℓ/λ .

Interprétation

L'utilisation de la fonction de Green G_∞^+ du système infini nous a donc permis de déterminer le comportement asymptotique du potentiel des vitesses à grande distance, qui décroît en $1/R$. Si les oscillations du corps s'accompagnent de variations de volume engendrés par des contractions ou des dilatations, comme représentés sur la figure 3.11 par exemple, alors $\phi(\mathbf{r}, t)$ est isotrope quand $R \rightarrow \infty$, avec une amplitude en $\dot{V}_c$. Le champ de vitesse correspondant est radial et isotrope,

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \sim \frac{\dot{V}_c(t - R/c)}{4\pi c R} \mathbf{n} \quad \text{quand } R \rightarrow \infty .$$

S'il n'y a pas de variation de volume, c'est-à-dire si $\dot{V}_c = 0$, alors la contribution dominante est celle du terme anisotrope en $\dot{\mathbf{A}}$. Cette situation est observée pour un corps indéformable effectuant des oscillations autour de sa position d'équilibre, comme représenté sur la figure 3.12. Le champ de vitesse correspondant est radial et anisotrope,

$$\mathbf{u}(\mathbf{r}, t) \sim \frac{\mathbf{n} \cdot \ddot{\mathbf{A}}(t - R/c)}{4\pi c^2 R} \mathbf{n} \quad \text{quand } R \rightarrow \infty .$$

17. Comme $\mathbf{u}$ varie sur une échelle temporelle T , alors que la surpression δP varie sur une échelle spatiale ℓ au voisinage du corps, l'équation d'Euler permet de relier les ordres de grandeur de $\mathbf{u}$ et δP . En utilisant par ailleurs la relation d'adiabaticité $\delta P = c^2 \delta\rho$, ainsi que l'estimation $|\mathbf{u}| \propto \ell/T$ au voisinage du corps, nous trouvons que $\delta\rho/\rho_0$ est d'ordre ℓ^2/λ^2 .

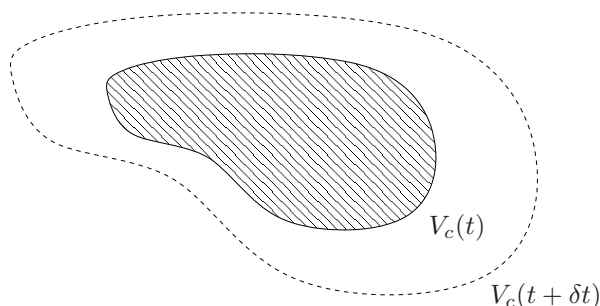


FIG. 3.11 – Corps en dilatation ou contraction.

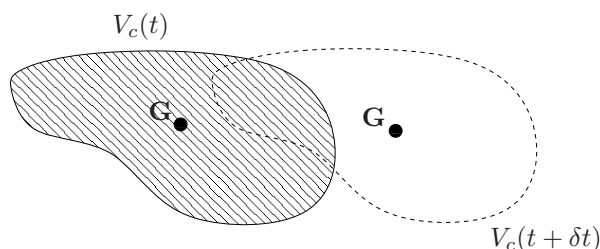


FIG. 3.12 – Corps oscillant autour de sa position d'équilibre.

Son amplitude s'annule dans la direction perpendiculaire à $\vec{\mathbf{A}}$, et elle est maximale dans la direction de $\vec{\mathbf{A}}$. Notons que la connaissance complète de $\mathbf{A}$ est délicate, car il faudrait déterminer le champ de vitesse près du corps. Cela dit, en admettant que l'ajustement du champ de vitesse dans le fluide soit instantané, on a nécessairement $|\mathbf{A}| \propto V_c |\mathbf{V}|$ où $\mathbf{V}$ est la vitesse du corps. Par exemple, si le corps est une boule sphérique effectuant des oscillations suivant l'axe Ox , l'hypothèse d'ajustement instantané nous conduit à utiliser au voisinage de la boule, le champ de vitesse (2.94) calculé au §2.2.2, page 112, pour un mouvement uniforme dans un fluide incompressible ! Nous trouvons alors

$$\mathbf{A} = \frac{3}{2} V_c \mathbf{V} .$$

Analogie avec le rayonnement électromagnétique. À la lumière des résultats précédents, le rayonnement d'ondes sonores n'est donc possible que si le corps, ou certaines de ses parties, sont accélérés. La situation est donc tout à fait semblable à celle observée en électromagnétisme, où seules les charges accélérées rayonnent. Comme les champs électrique $\mathbf{E}$ et magnétique $\mathbf{B}$, le champ de vitesse rayonnée décroît en $1/R$ seulement. Ainsi, le flux d'énergie traversant une grande sphère de rayon R reste constant quand $R \rightarrow \infty$, en

accord avec l'absence de dissipation pour un fluide parfait. Notons que $\mathbf{u}$ ne présente bien sûr pas les mêmes symétries que $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$. En particulier, il peut apparaître un champ de vitesse isotrope radial en $1/R$, cette géométrie étant exclus par la conservation de la charge en électromagnétisme. En l'absence de variation de volume du corps, $\mathbf{u}$ est relativement semblable aux champs de rayonnement dipolaire $\mathbf{E}$ et $\mathbf{B}$. Cela dit, en hydrodynamique, l'émission est alors maximale dans la direction de l'accélération du corps, alors qu'elle est orthogonale à celle des charges en électromagnétisme.

3.2.4 Front d'onde en régime supersonique

Présentation

Il est bien connu que les avions supersoniques donnent lieu à une onde de choc sonore très violente, ce qui explique pourquoi les vols supersoniques sont interdits au-dessus des agglomérations. L'étude du mouvement supersonique dans un fluide est un problème complexe, qui fait appel à divers aspects de la mécanique des fluides et de la turbulence. Ici, nous ne considérons pas ces aspects dans toute leur complexité. Nous partons d'un modèle très simplifié, mais qui possède néanmoins les caractéristiques suffisantes pour décrire la structure du front d'onde.

Supposons donc qu'un objet ponctuel se déplace dans un fluide homogène à une vitesse v constante et plus grande que la vitesse c du son dans ce milieu. L'énorme perturbation causée dans le fluide au voisinage de l'objet se propage en induisant des variations de pression et de densité. Suffisamment loin de l'objet, ces déformations s'atténuent. Il devient alors raisonnable de les assimiler à une onde sonore de faible amplitude, dont l'évolution linéarisée est gouvernée par l'équation de d'Alembert sans source. En toute rigueur, la forme précise de cette onde devrait être déterminée par une procédure de raccordement faisant intervenir la forme des quantités d'intérêt au voisinage de l'objet, similairement à la méthode utilisée dans l'exemple précédent pour un corps émetteur dans le régime subsonique. Ici, une telle procédure est extrêmement difficile à mettre en œuvre. Nous nous contentons d'une approche beaucoup plus rudimentaire, qui consiste à introduire un terme de source phénoménologique dans l'équation de propagation ! Le champ $\phi(\mathbf{r}, t)$, qui décrit par exemple la surpression, est alors admis satisfaire l'EDP

$$\left[\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} - \Delta \right] \phi(\mathbf{r}, t) = \rho_p(\mathbf{r}, t), \quad (3.132)$$

où la source $\rho_p(\mathbf{r}, t)$ modélise le processus complexe d'émission induite par l'objet ponctuel. À ce niveau de modélisation, il est naturel d'identifier $\rho_p(\mathbf{r}, t)$ à la densité associée à l'objet ponctuel, i.e. :

$$\rho_p(\mathbf{r}, t) = \rho_0 \delta(x - vt) \delta(y) \delta(z), \quad (3.133)$$

l'axe Ox coïncidant avec la trajectoire rectiligne de la particule. Dans la forme heuristique (3.133), la constante arbitraire ρ_0 a les dimensions d'une masse fois le carré d'une fréquence. Dans la suite, nous étudions la forme du front d'onde engendré par l'objet supersonique via l'équation de d'Alembert (3.132).

Étude et résolution

Le domaine $\mathcal{D}$ considéré est l'espace tout entier. La frontière $\partial\mathcal{D}$ est donc rejetée à l'infini. Sur $\partial\mathcal{D}$, la surpression $\phi(\mathbf{r}, t)$ est prise nulle, autrement dit le fluide est au repos infiniment loin de l'objet. Le fluide est également au repos à l'instant initial t_0 , avec une pression homogène et un champ de vitesse identiquement nul. Les conditions initiales (3.89) correspondantes sont donc $\phi_0(\mathbf{r}) = 0$ et $\pi_0(\mathbf{r}) = 0$ dans tout le domaine. L'expression générale (3.92), page 184, pour la solution de l'équation de d'Alembert, se réduit ici au terme de source. En utilisant la fonction de Green causale G_∞^+ du système infini donnée par la formule (3.101), et en rejetant t_0 à $-\infty$, nous obtenons

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^t dt' \int d\mathbf{r}' \frac{c}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|} \delta[c(t - t') - |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|] \rho_p(\mathbf{r}', t'). \quad (3.134)$$

L'intégration de l'expression (3.134) sur $\mathbf{r}'$ est immédiate par suite de la présence des distributions de Dirac dans ρ_p , avec le résultat

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho_0 c}{4\pi} \int_{-\infty}^t dt' \frac{\delta[c(t - t') - \sqrt{y^2 + z^2 + (x - vt')^2}]}{\sqrt{y^2 + z^2 + (x - vt')^2}}. \quad (3.135)$$

Afin d'effectuer la dernière intégration sur t' , il faut d'abord déterminer le support de la distribution de Dirac concernée. Nous en déduisons ensuite la forme explicite de $\phi(\mathbf{r}, t)$.

Support de la distribution de Dirac. Dans l'intégrale (3.135), il est utile de faire le changement de variable $t'' = t' - x/v$ pour la réécrire comme

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho_0 c}{4\pi} \int_{-\infty}^{t-x/v} dt'' \frac{\delta[c(t - x/v - t'') - \sqrt{d^2 + v^2 t''^2}]}{\sqrt{d^2 + v^2 t''^2}}, \quad (3.136)$$

où $d = \sqrt{y^2 + z^2}$ est la distance du point $\mathbf{r}$ à l'axe Ox . Le support de la distribution de Dirac dans l'intégrale (3.136) est l'ensemble des temps t'' tels que

$$c(t - x/v - t'') = \sqrt{d^2 + v^2 t''^2}. \quad (3.137)$$

En élevant cette équation au carré, nous obtenons une équation du second degré pour t'' qui a des solutions réelles si et seulement si son discriminant est positif, soit

$$(x - vt)^2 \geq (v^2/c^2 - 1)d^2. \quad (3.138)$$

Les deux solutions de l'équation (3.137) sont alors

$$t''_{\pm} = \frac{1}{v(v^2/c^2 - 1)} \left[x - vt \pm (v/c) \sqrt{(x - vt)^2 - (v^2/c^2 - 1)d^2} \right]. \quad (3.139)$$

Donc, le support à valeurs réelles de la distribution de Dirac d'intérêt se réduit aux deux points $t''_{\pm}$ si la condition (3.138) est satisfaite, et à l'ensemble vide autrement.

Calcul des contributions des deux racines $t''_{\pm}$. Pour que les racines $t''_{\pm}$ contribuent à l'intégrale (3.136), elles doivent naturellement se situer dans l'intervalle d'intégration, autrement dit elles doivent vérifier $t''_{\pm} \leq t - x/v$. Si $t - x/v < 0$, alors $x - vt$ est positif, et la simple inspection de la formule (3.139) montre alors que $t''_{\pm} > 0$. Dans ce cas, les racines sont donc en dehors de l'intervalle d'intégration, et l'intégrale (3.135) est identiquement nulle. De plus, cette intégrale est évidemment aussi nulle si la condition (3.138) n'est pas satisfaite. Il vient donc en définitive

$$\phi(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \text{pour} \quad x > vt - d\sqrt{v^2/c^2 - 1}.$$

Si $t - x/v > 0$, comme $x - vt$ est négatif, il est clair que les expressions (3.139) sont négatives, de sorte que les racines $t''_{\pm}$ sont bien dans l'intervalle d'intégration, pourvu que la condition (3.138) d'existence soit également satisfaite. Ceci est réalisé pour

$$x < vt - d\sqrt{v^2/c^2 - 1}.$$

Il suffit alors d'appliquer l'identité (A.2), page 303. Indiquons juste qu'en définissant

$$f(t'') = c(t - x/v - t'') - \sqrt{d^2 + v^2 t''^2} \quad \text{et} \quad g(t'') = \frac{1}{\sqrt{d^2 + v^2 t''^2}}$$

un résultat intermédiaire est

$$\frac{g(t''_{\pm})}{|f'(t''_{\pm})|} = \frac{1}{\left| c\sqrt{d^2 + v^2 t''_{\pm}^2} + v^2 t''_{\pm} \right|} = \frac{1}{c\sqrt{(vt - x)^2 - d^2(v^2/c^2 - 1)}}.$$

Nous obtenons ainsi l'expression finale de $\phi(\mathbf{r}, t)$,

$$\phi(\mathbf{r}, t) = \frac{\rho_0}{2\pi} \frac{\theta(vt - x - d\sqrt{v^2/c^2 - 1})}{\sqrt{(vt - x)^2 - d^2(v^2/c^2 - 1)}}. \quad (3.140)$$

Interprétation

La formule (3.140) pour $\phi(\mathbf{r}, t)$ met en évidence une structure remarquable du front d'onde, que nous allons maintenant interpréter, tout en discutant sa pertinence physique. Nous concluons par une analogie avec l'effet Cherenkov.

Forme du front d'onde. Commençons par tirer parti de la fonction de Heaviside apparaissant dans le résultat final (3.140). Celle-ci donne en fait l'équation du front d'onde à l'instant t ,

$$x = vt - d\sqrt{v^2/c^2 - 1} \quad \text{avec} \quad d = \sqrt{y^2 + z^2}. \quad (3.141)$$

Ainsi, le front d'onde est un cône ayant pour sommet la position de la particule à l'instant t , et dirigé vers l'arrière de l'objet. Cette dernière particularité est due au fait que l'objet se déplace plus vite que la vitesse du son. Elle peut être interprétée avec une image inspirée de l'électromagnétisme. Dans ce domaine, comme indiqué à la page 193, la fonction de Green G_∞^+ du d'Alembertien décrit la propagation d'un photon. L'analogue du photon pour la présente modélisation des ondes sonores est un phonon. Dans ce langage, le front d'onde est derrière l'objet, tout simplement parce que les phonons vont moins vite que cet objet !

Le demi-angle θ du cône (voir figure 3.13) est obtenu facilement à partir de l'équation (3.141). Il est tel que

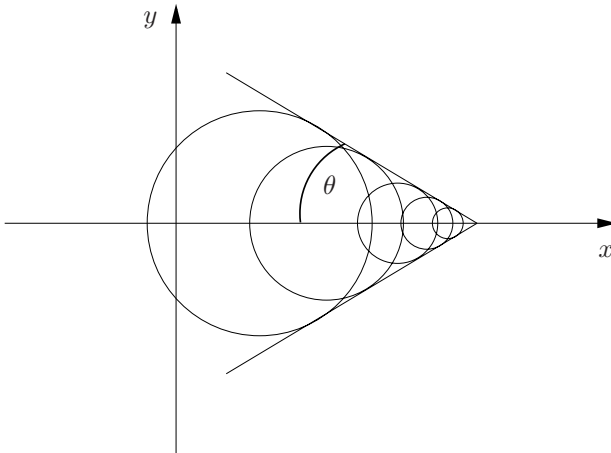


FIG. 3.13 – Onde de choc provoquée par un objet se déplaçant à une vitesse $v > c$.

$$\sin \theta = \frac{d}{\sqrt{(x - vt)^2 + d^2}} = \frac{c}{v}. \quad (3.142)$$

Cet angle ne dépend donc que du rapport entre les vitesses du son et de l'objet. Il décroît lorsque la vitesse de l'objet augmente, conformément à l'intuition. Ce résultat s'interprète aussi très bien en termes de propagation de phonons, comme indiqué sur la figure 3.14. Sur cette figure, un phonon, émis en un

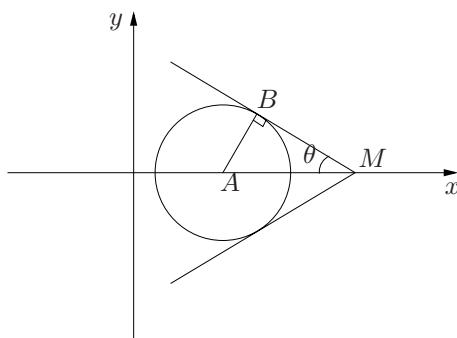


FIG. 3.14 – À l'instant t_1 , l'objet est en A et émet un phonon. À l'instant t ultérieur, le phonon est en B et l'objet en M . L'angle θ vérifie donc $\sin \theta = (c\Delta t/v\Delta t) = (c/v)$ avec $\Delta t = t - t_1$.

instant t_1 par l'objet au point A se retrouve à l'instant t au point B du front d'onde. Au même instant t , l'objet est en M . La relation (3.142) signifie que pendant l'intervalle de temps $\Delta t = t - t_1$, le phonon et l'objet ont parcouru respectivement les distances $c\Delta t$ et $v\Delta t$.

Bien que le modèle utilisé ici soit très grossier, il reproduit correctement la forme conique du front d'onde réel. En effet, le mécanisme sous-jacent est purement cinématique, en relation avec le déplacement de l'objet source à une vitesse plus grande que c . Il est peu dépendant du modèle considéré, et repose sur l'hypothèse raisonnable que les surpressions se déplacent bien à la vitesse c en dehors du régime linéaire de l'acoustique standard. Ainsi, chaque point reçoit simultanément la contribution de deux signaux se propageant respectivement à l'avant et à l'arrière de l'objet (voir figure 3.15) et émis aux deux temps (3.139) obtenus par une construction purement géométrique.

Singularité sur le front d'onde. Le champ (3.140) devient singulier sur le front d'onde conique, ce qui est la signature d'une onde de choc. Si le simple résultat (3.140) suggère l'apparition d'une telle onde de choc, il ne saurait la décrire quantitativement, en particulier car il est obtenu en supposant que les surpressions deviennent faibles loin de l'objet ! Cette incohérence du modèle pourrait être levée par une approche plus réaliste, prenant en compte notamment la taille finie de l'objet en déplacement. Notons enfin qu'à l'intérieur du cône de l'onde de choc, la valeur du champ décroît asymptotiquement en $(1/t)$.

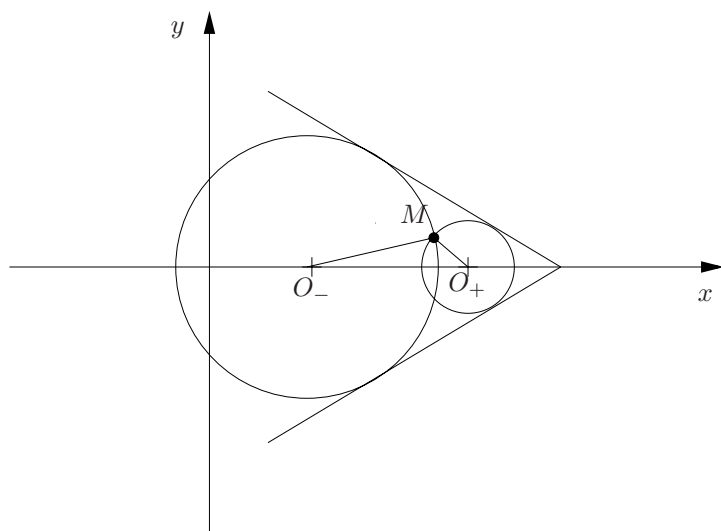


FIG. 3.15 – Chaque point M à l'intérieur du cône est à l'intersection de deux cercles centrés sur l'axe des x . Les centres O_+ et O_- de ces cercles sont de chaque côté du point considéré et correspondent aux points où ont été émis les deux phonons reçus en M à l'instant t . Ces phonons ont été respectivement émis aux temps $t'_\pm = t''_\pm + (x/v)$.

Effet Cherenkov. Le phénomène mis en évidence à travers ce modèle simple apparaît dans d'autres domaines de la physique. Par exemple, si nous considérons maintenant le champ électromagnétique produit par une particule chargée en mouvement, nous devons aussi étudier l'équation de d'Alembert avec un terme de source analogue à ρ_p . Soulignons que cette équation est elle fondamentale, alors que l'EDP (3.132) n'a pas le même statut bien sûr. Imaginons maintenant que la particule se déplace à la vitesse v dans un milieu diélectrique. La vitesse c de la lumière dans ce milieu dépend de la fréquence du rayonnement, et elle est liée à la vitesse c_0 de la lumière dans le vide par la relation $c = c_0/n$ où n est l'indice du matériau diélectrique. Il est alors possible, typiquement dans des expériences de physique des hautes énergies où les vitesses des particules sont élevées, d'avoir des vitesses $v > c$. Le rayonnement électromagnétique ainsi produit présente des caractéristiques semblables à celles de l'onde de choc précédente : c'est l'effet Cherenkov.

Indépendamment de la valeur du champ à l'intérieur du cône formé par le front d'onde, c'est la forme du cône en elle-même, et notamment l'angle θ , qui est d'une grande utilité dans les détecteurs de particules. En effet, le vecteur d'onde correspondant au rayonnement Cherenkov est perpendiculaire au front d'onde, et il fait donc un angle $\pi/2 - \theta$ avec l'axe Ox . La mesure de

cet angle permet alors de remonter à la vitesse de la particule. Donnons un ordre de grandeur. Pour détecter une vitesse v telle que $(v/c_0) \simeq 0,99$, et avec un des matériaux utilisés dans un des détecteurs du *Large Hadron Collider* d'indice $n = 1,03$, on obtient $\pi/2 - \theta \simeq 11$ degrés.

3.2.5 Sur l'instantanéité de la propagation de la chaleur

Présentation

L'équation de diffusion présente un caractère instantané qui n'est pas compatible avec la théorie de la relativité d'Einstein. La fonction de Green $G_{\infty}^{+}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t - t')$ associée à cette équation, donnée par la formule (3.41), page 162, est non nulle pour tout temps t supérieur au temps initial t' . Considérons alors un problème de diffusion de la température par exemple. La propriété précédente de la fonction de Green G_{∞}^{+} implique que la température est modifiée à des distances arbitrairement lointaines du point source, à tout instant ultérieur au temps initial. Or la théorie de la relativité impose que nul objet, ou signal, ne puisse se propager plus vite que la vitesse de la lumière dans le vide. Ainsi, l'équation de diffusion ne respecte pas un des principes fondamentaux de la physique. Cela dit, elle est néanmoins très utile dans des conditions non-relativistes !

Ici, nous allons étudier une version plus élaborée de l'équation de diffusion de la chaleur, qui prenne en compte les effets de propagation à vitesse finie. Pour cela, nous considérons un matériau en phase solide. D'un point de vue microscopique, l'agitation thermique est propagée, entre autres, par les phonons, qui se déplacent à la vitesse du son du matériau. Une modification naturelle de l'équation de la chaleur conduit alors à l'équation de Cattaneo, qui inclut un terme de propagation supplémentaire faisant intervenir la vitesse du son c . Cette équation est en quelque sorte la conjonction des équations de d'Alembert et de diffusion, et elle s'écrit

$$\left(-\Delta + a^2 \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) \phi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t), \quad (3.143)$$

où a^2 joue le rôle de l'inverse du coefficient de diffusion, ϕ est la température et ρ est une source. Dans la limite $a \rightarrow 0$ nous retrouvons l'équation de d'Alembert, tandis que dans la limite $c \rightarrow \infty$ nous obtenons l'équation de diffusion.

Nous allons calculer la fonction de Green causale G_{∞}^{+} associée à l'équation de Cattaneo (3.143). Nous nous restreignons au cas unidimensionnel infini. Nous mettons ainsi simplement en évidence l'impossibilité d'une propagation à des vitesses plus grandes que c . Le cas en trois dimensions est proposé à l'exercice 3.11, page 242.

Étude et résolution

L'opérateur de Cattaneo

$$\mathcal{O} = -\frac{\partial^2}{\partial x^2} + a^2 \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}$$

étant invariant par translations dans l'espace et le temps, la fonction de Green causale homogène du système infini est de la forme

$$G_{\infty}^+(x, x'; t, t') = G_{\infty}^+(x - x'; t - t').$$

Il suffit donc de déterminer G_{∞}^+ pour $x' = 0$ et $t' = 0$. L'EDP correspondante s'écrit

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + a^2 \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) G_{\infty}^+(x; t) = \delta(x) \delta(t) \quad (3.144)$$

avec la condition de causalité $G_{\infty}^+(x; t) = 0$ pour $t < 0$.

Pour rendre l'équation (3.144) plus symétrique, il est utile de poser

$$G_{\infty}^+(x; t) = e^{-\frac{c^2 a^2 t}{2}} g_{\infty}^+(x; t).$$

L'EDP pour g_{∞}^+ devient alors

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} - m^2 + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2} \right) g_{\infty}^+(x; t) = \delta(x) \delta(t) \quad (3.145)$$

où $m^2 = c^2 a^4 / 4$. Cette équation a une forme familière aux physiciens des particules : si on change le signe de m^2 , elle devient l'équation de Klein-Gordon, très connue en théorie des champs. Nous proposons d'ailleurs à l'exercice 3.12, page 242, d'adapter la méthode utilisée ci-dessous pour obtenir la fonction de Green de l'opérateur de Klein-Gordon. Cette méthode consiste à prendre la transformée de Fourier spatio-temporelle de l'EDP (3.145) comme nous l'avons fait à la page 190 pour le d'Alembertien.

Transformation de Fourier. Introduisons donc

$$\hat{g}_{\infty}^+(k; z) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{izt - ikx} g_{\infty}^+(x; t) = \int_0^{\infty} dt \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{izt - ikx} g_{\infty}^+(x; t)$$

où la condition de causalité sur g_{∞}^+ a été utilisée. Comme la fonction g_{∞}^+ décrit la propagation-diffusion d'un signal, il n'est pas assuré qu'elle décroisse aux grands temps pour toute valeur de x . Il est alors plus approprié de travailler avec une fréquence complexe $z = \omega + i\gamma$, dont la partie imaginaire γ soit strictement positive. Ceci garantit la convergence de l'intégrale temporelle quand $t \rightarrow +\infty$.

Prenons la transformée de Fourier membre à membre de l'EDP (3.145). Les opérateurs de dérivation partielle par rapport au temps et à l'espace deviennent de simples multiplications par des puissances de iz et $-ik$. De plus, comme la transformée du produit de fonctions delta se réduit évidemment à 1, il vient alors

$$(k^2 - m^2 - z^2/c^2)\widehat{g}_\infty^+(k; z) = 1.$$

En choisissant γ suffisamment grand, i.e. $\gamma > mc$, cette équation est bien inversible pour toutes valeurs de k et ω , avec le résultat

$$\widehat{g}_\infty^+(k; z) = \frac{1}{k^2 - m^2 - z^2/c^2},$$

et la fonction $g_\infty^+(x; t)$ est donc donnée par la transformation inverse,

$$g_\infty^+(x; t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty+i\gamma}^{+\infty+i\gamma} dz \int_{-\infty}^{\infty} dk \frac{e^{-izt+ikx}}{k^2 - m^2 - z^2/c^2}. \quad (3.146)$$

À ce stade, il reste maintenant à effectuer l'intégrale sur k , puis sur z .

Intégration sur k . Pour effectuer l'intégration sur k , écrivons

$$\frac{1}{k^2 - m^2 - z^2/c^2} = \frac{1}{(k - (m^2 + z^2/c^2)^{1/2})(k + (m^2 + z^2/c^2)^{1/2})}$$

de façon à identifier explicitement les pôles de l'intégrand dans la variable k . La détermination de la fonction $(m^2 + z^2/c^2)^{1/2}$ est choisie de sorte que sa partie imaginaire soit positive pour $\gamma = \text{Im } z > 0$. Nous préciserons dans le paragraphe suivant ce choix de détermination ainsi que le domaine d'analyticité en z de cette fonction. L'intégrale sur k peut être calculée en combinant le lemme de Jordan au théorème des résidus. Pour $x > 0$, il est judicieux de compléter l'axe réel d'intégration sur k par un grand demi-cercle dans le plan complexe supérieur. En effet, l'intégrale sur ce demi-cercle tend vers zéro dans la limite d'un rayon infini en vertu du lemme de Jordan. L'intégrale sur l'axe réel est alors simplement donnée par le résidu du pôle en $k = (m^2 + z^2/c^2)^{1/2}$ d'après le théorème de Cauchy. Pour $x < 0$, le contour fermé approprié est obtenu en complétant l'axe réel par un demi-cercle dans le plan complexe inférieur, et seul compte le pôle opposé $k = -(m^2 + z^2/c^2)^{1/2}$. Le résultat final pour x quelconque est donné par la formule synthétique

$$g_\infty^+(x; t) = \frac{ic}{4\pi} \int_{-\infty+i\gamma}^{+\infty+i\gamma} dz \frac{\exp(-izt + i(m^2 c^2 + z^2)^{1/2}|x|/c)}{(m^2 c^2 + z^2)^{1/2}}. \quad (3.147)$$

Mise en évidence de la propagation. Précisons maintenant les propriétés analytiques de la fonction $(m^2 + z^2/c^2)^{1/2}$. Celle-ci présente deux points

de branchement en $z = \pm imc$. De chacun d'entre eux, il doit nécessairement partir une coupure, qui peut être choisie arbitrairement. Ici, il est commode de prendre une seule coupure qui joint ces deux points, à savoir le segment $[-imc, imc]$ par simplicité. La fonction $(m^2 + z^2/c^2)^{1/2}$ est alors analytique dans tout le plan complexe excepté le segment $[-imc, imc]$. De plus, nous choisissons la détermination telle que pour $z = \omega$ réel avec $\omega > 0$, nous ayons $(m^2 + z^2/c^2)^{1/2} = \sqrt{m^2 + \omega^2/c^2}$. Ce choix assure $\text{Im}(m^2 + z^2/c^2)^{1/2} > 0$ dans le demi-plan complexe supérieur en z . Comme admis *a priori*, cette positivité est donc bien assurée sur l'axe d'intégration $]-\infty + i\gamma, \infty + i\gamma[$, qui passe par ailleurs au dessus de la coupure $[-imc, imc]$ en vertu de la condition $\gamma > mc$ (voir figure 3.16). Enfin, notons que $(m^2 + z^2/c^2)^{1/2} \sim z/c$ quand $|z| \rightarrow \infty$.

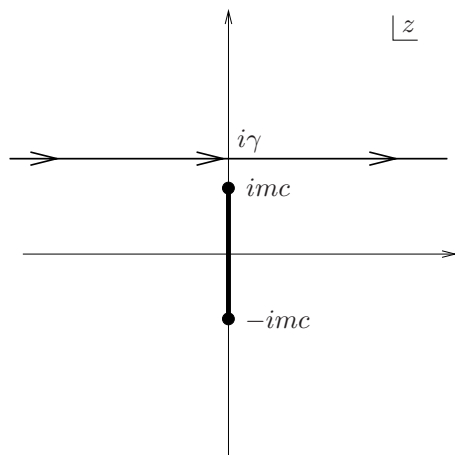


FIG. 3.16 – Contour d'intégration pour l'intégrale (3.147). Il y a une coupure entre les deux points de branchement $z = \pm imc$.

Avant d'effectuer l'intégrale sur z , montrons que le signal décrit par $g_{\infty}^{+}(x; t)$ ne peut pas se propager plus vite qu'à la vitesse c . Cette caractéristique est une conséquence directe des propriétés d'analyticité décrites ci-dessus¹⁸. Ainsi, si $|x| > ct$, il est judicieux de compléter l'axe d'intégration $]-\infty + i\gamma, \infty + i\gamma[$ par un grand demi-cercle dans le demi-plan complexe supérieur. D'après le lemme de Jordan, l'intégrale sur le demi-cercle tend vers zéro quand le rayon tend vers l'infini. L'intégrant étant analytique dans tout l'intérieur du contour fermé ainsi construit, l'intégrale (3.147) est donc nulle ! Ainsi, la fonction de Green $G_{\infty}^{+}(x; t) = 0$ s'annule pour $|x| > ct$. Pour $t < 0$, nous retrouvons la condition de causalité. Pour $t > 0$, nous voyons qu'il y a

18. La discussion ci-dessous est similaire à celle de l'exercice 1.9 du chapitre 1, page 58.

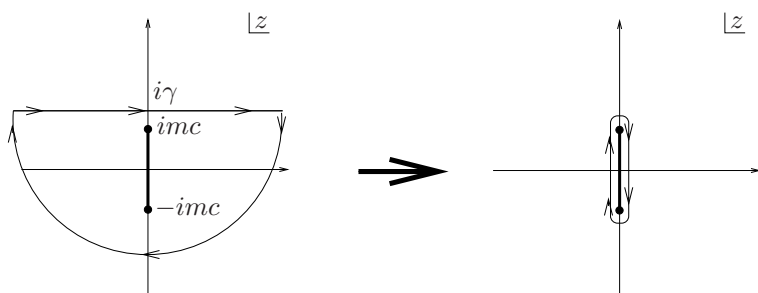


FIG. 3.17 – Déformation du contour d'intégration autour de la coupure entre $z = imc$ et $z = -imc$.

donc bien propagation à la vitesse finie c , contrairement au cas de la diffusion pure.

Intégration sur z . Considérons l'autre cas, c'est-à-dire $|x| < ct$. Maintenant, il est plus approprié de compléter $] -\infty + i\gamma, \infty + i\gamma[$ par un grand demi-cercle dans le demi-plan complexe inférieur, de sorte que ce contour d'intégration fermé entoure la coupure $[-imc, imc]$. À nouveau, le lemme de Jordan permet de se débarrasser de l'intégrale sur le demi-cercle. Par ailleurs, en vertu du théorème de Cauchy, nous pouvons déformer ce contour de façon à entourer infiniment près la coupure $[-imc, imc]$, comme représenté sur la figure 3.17. La contribution des demi-cercles entourant les points de branchement tend vers 0 comme la racine carrée du rayon des demi-cercles, et il ne reste donc que les deux intégrales de chaque côté de la coupure entre imc et $-imc$. Pour $z = \pm\delta + imcw$ avec $\delta \rightarrow 0^+$ et $w \in [-1, 1]$, nous obtenons $(m^2 + z^2/c^2)^{1/2} = \pm m\sqrt{1-w^2}$ d'après le choix de détermination adopté, ce qui donne finalement

$$g_{\infty}^{+}(x; t) = \frac{c}{4\pi} \int_{-1}^1 dw \left[\frac{e^{mc(tw+i\sqrt{1-w^2}|x|/c)}}{\sqrt{1-w^2}} + \frac{e^{mc(tw-i\sqrt{1-w^2}|x|/c)}}{\sqrt{1-w^2}} \right].$$

L'expression précédente peut être transformée à l'aide des changements de variable successifs $w \rightarrow \beta$ avec $w = \sin \beta$, puis $\beta \rightarrow \beta + i\alpha$ avec α réel défini par la paramétrisation

$$t = \sqrt{t^2 - x^2/c^2} \cos(i\alpha) \quad \text{et} \quad \frac{|x|}{c} = -i\sqrt{t^2 - x^2/c^2} \sin(i\alpha)$$

valable pour $ct > |x|$. Nous trouvons

$$g_{\infty}^{+}(x; t) = \frac{c}{4\pi} \int_{-\pi+i\alpha}^{\pi+i\alpha} d\beta e^{mc\sqrt{t^2-x^2/c^2} \sin \beta}. \quad (3.148)$$

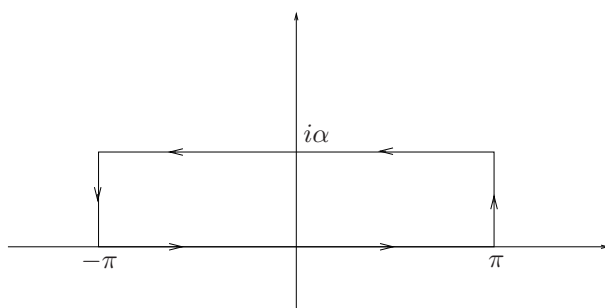


FIG. 3.18 – L'intégrale (3.149) sur le contour d'intégration ci-dessus est nulle car l'intégrand est analytique à l'intérieur du contour. Par ailleurs, les contributions des deux segments verticaux sont de signe opposés et se compensent.

Cette dernière intégrale sur un segment du demi-plan complexe supérieur peut être ramenée à une intégrale sur l'axe réel comme suit. L'intégrale

$$\oint d\beta \, e^{mc\sqrt{t^2-x^2/c^2}} \sin \beta, \quad (3.149)$$

sur le contour fermé de la figure (3.18) est nulle par suite de l'analyticité de l'intégrand à l'intérieur de ce contour. Par ailleurs, les contributions de chacun des segments verticaux sont opposées. L'expression (3.148) se réduit donc à une intégrale sur le segment réel $[-\pi, \pi]$, que nous pouvons relier à la définition de la fonction de Bessel modifiée

$$I_0(\rho) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta \, e^{\rho \cos \theta}. \quad (3.150)$$

En prenant en compte le préfacteur en $e^{-a^2 c^2 t/2}$, et en tenant compte de l'annulation de $g_{\infty}^+(x; t)$ pour $|x| > ct$ via la fonction de Heaviside $\theta(ct - |x|)$, nous obtenons finalement la fonction de Green causale de l'opérateur de Cattaneo en une dimension

$$G_{\infty}^+(x; t) = \theta(ct - |x|) \frac{c}{2} e^{-\frac{a^2 c^2 t}{2}} I_0 \left(\frac{a^2 c^2}{2} \sqrt{t^2 - x^2/c^2} \right). \quad (3.151)$$

Interprétation

Au-delà de la forme particulière de cette fonction de Green, nous avons une nouvelle fois mis en évidence l'importance fondamentale des propriétés d'analyticité. Il est par ailleurs possible de vérifier que dans la limite $c \rightarrow \infty$, nous retrouvons la fonction de Green de l'équation de diffusion. Cette limite est analysée en utilisant pour l'intégrale (3.150) la méthode du col présentée au chapitre suivant, comme proposé à l'exercice 4.6, page 296. Parallèlement,

la limite $a \rightarrow 0$ peut être prise directement dans la formule (3.151) pour obtenir l'expression de la fonction de Green causale du d'Alembertien en une dimension, calculée à l'exercice 3.6, page 238.

Il est instructif de comparer l'évolution de la fonction de Green de Cattaneo à celle du d'Alembertien. Aux temps courts, il y a peu de différence. Pour des temps intermédiaires, la fonction de Green de Cattaneo s'affaisse quand $|x|$ croît de 0 à ct , par suite du processus de diffusion, alors que la fonction de Green du d'Alembertien reste constante. Aux grands temps, la fonction de Cattaneo est proche de la forme prédite par l'équation de diffusion, sauf lorsque $|x|$ dépasse ct où le caractère propagatif l'emporte de nouveau et annule strictement celle-ci.

Pour conclure, remarquons que le terme de dérivée seconde peut donner lieu à un comportement ondulatoire de la température, similaire à celui de la pression ou de la densité en présence d'une onde sonore. En physique de la matière condensée, ce phénomène est appelé second son, car la température se comporte de manière similaire à la densité en acoustique.

3.2.6 Polarisabilité de l'atome d'hydrogène

Présentation

Considérons un atome d'hydrogène soumis à un champ électrique extérieur homogène dépendant du temps $\mathbf{E}_{ext}(t)$. Dans la limite non-relativiste, ce système peut être étudié dans le cadre de la mécanique quantique ordinaire. L'atome étant neutre, son mouvement de translation global n'est pas affecté par l'application d'un champ électrique spatialement homogène. En pratique, il suffit évidemment que le champ électrique soit homogène à l'échelle de l'atome. Cette condition est réalisée, par exemple, en envoyant sur l'atome une onde électromagnétique dans le domaine du visible. Noter qu'alors l'action du champ magnétique peut être négligée car la vitesse de l'électron interne est faible devant la vitesse de la lumière. Pour déterminer la réponse de l'atome, il suffit donc de s'intéresser à l'évolution de son état interne, décrit par la particule relative de masse $m = m_e M_p / (m_e + M_p)$, où M_p et m_e sont les masses respectives du proton et de l'électron. En l'absence de champ extérieur, son Hamiltonien se réduit à

$$H_0 = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta - \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0 r}, \quad (3.152)$$

qui incorpore le potentiel coulombien attractif $-e^2/(4\pi\epsilon_0)r$ entre le proton de charge e et l'électron de charge $-e$. En présence de $\mathbf{E}_{ext}(t)$, le Hamiltonien de la particule relative devient

$$H(t) = H_0 + e\mathbf{E}_{ext}(t) \cdot \mathbf{r}. \quad (3.153)$$

Étudions la polarisation de l'atome sous l'action d'un faible champ $\mathbf{E}_{ext}(t)$ branché adiabatiquement à $t = -\infty$. On suppose qu'initialement l'atome est dans son état fondamental $|\psi_0\rangle$ d'énergie E_0 . Dans la problématique générale de la réponse linéaire vue au chapitre 1, l'état stationnaire $\mathcal{E}_0$ est ici identifié¹⁹ à $|\psi_0\rangle$, et $A(t)$ est égale à la polarisation

$$\mathbf{p}(t) = -e \int d\mathbf{r} [\phi(\mathbf{r}, t)]^* \mathbf{r} \phi(\mathbf{r}, t) , \quad (3.154)$$

$\phi(\mathbf{r}, t)$ étant la fonction d'onde solution de l'équation de Schrödinger

$$i\hbar \frac{\partial \phi}{\partial t}(\mathbf{r}, t) = H(t)\phi(\mathbf{r}, t)$$

avec la condition initiale $\phi(\mathbf{r}, -\infty) = \psi_0(\mathbf{r})$. Noter que la polarisation dans l'état fondamental est nulle, car $\psi_0(\mathbf{r}) = \psi_0(r)$ par suite de l'invariance par rotation. Ici, la perturbation extérieure $F(t)$ est posée égale au champ $\mathbf{E}_{ext}(t)$, de sorte que la susceptibilité correspondante $\chi(\omega)$ n'est autre que la polarisabilité de l'atome dans son état fondamental.

Étude et résolution

Le calcul de la susceptibilité relève de la théorie standard des perturbations dépendant du temps en mécanique quantique, qui a été formulée à l'aide de fonctions de Green dans la section 3.1.4. Nous établissons l'expression de $\chi(\omega)$ en termes de ces fonctions, puis nous en déduisons sa représentation spectrale faisant intervenir les états propres du Hamiltonien H_0 . Celle-ci permet d'établir les propriétés analytiques d'intérêt.

Développement perturbatif de la polarisation. Dans ce calcul perturbatif, il est commode de considérer d'abord un temps initial t_0 fini, puis de prendre ensuite la limite $t_0 \rightarrow -\infty$. Par ailleurs, la fonction de Green causale de référence est à prendre dans l'espace tout entier, avec des conditions de bord rejetées à l'infini. Elle s'écrit

$$G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; \tau) = \langle \mathbf{r} | e^{-iH_0\tau/\hbar} | \mathbf{r}_1 \rangle ,$$

alors que la perturbation est

$$W(\mathbf{r}, t) = e\mathbf{E}_{ext}(t) \cdot \mathbf{r} .$$

19. Dans l'évolution engendrée par H_0 , la fonction d'onde $\psi_0(\mathbf{r}, t)$ oscille à la fréquence $E_0/\hbar$, mais la valeur moyenne correspondante de n'importe quelle observable A est bien constante.

La fonction d'onde $\phi(\mathbf{r}, t)$ est donnée par application de la formule (3.73), p. 176, avec $\phi_0(\mathbf{r}) = \psi_0(\mathbf{r})$, i.e. :

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) = & e^{-iE_0(t-t_0)/\hbar} \psi_0(\mathbf{r}) \\ & - \frac{i}{\hbar} e \int d\mathbf{r}_1 \psi_0(\mathbf{r}_1) \int_0^{t-t_0} d\tau_1 G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; \tau_1) \\ & \times e^{-iE_0(t-t_0-\tau_1)/\hbar} \mathbf{E}_{ext}(t - \tau_1) \cdot \mathbf{r}_1 + \dots, \quad (3.155) \end{aligned}$$

où nous avons utilisé

$$\int d\mathbf{r}' G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) \psi_0(\mathbf{r}') = e^{-iE_0\tau/\hbar} \psi_0(\mathbf{r}).$$

En insérant ce développement perturbatif dans l'expression (3.154) de la polarisation, et en prenant la limite $t_0 \rightarrow -\infty$, nous obtenons

$$\begin{aligned} \mathbf{p}(t) = & 2 \frac{e^2}{\hbar} \int d\mathbf{r} \psi_0(\mathbf{r}) \mathbf{r} \int d\mathbf{r}_1 \psi_0(\mathbf{r}_1) \\ & \text{Re} \left(i \int_0^{+\infty} d\tau_1 G^{+(0)}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; \tau_1) e^{iE_0\tau_1/\hbar} \mathbf{E}_{ext}(t - \tau_1) \cdot \mathbf{r}_1 \right) + \dots \quad (3.156) \end{aligned}$$

Cette expression au premier ordre dans la perturbation, est bien de la forme générale (1.4), vue dans le chapitre 1, p. 5 et de plus la fonction de réponse K_0 fait intervenir $G^{+(0)}$, conformément à l'interprétation générale des fonctions de Green présentée dans le paragraphe 3.1.1.

Expression de $\chi(\omega)$ en termes de fonctions de Green. Pour un champ monochromatique de fréquence complexe z ,

$$\mathbf{E}_{ext}(t) = \text{Re}[\mathbf{E}_z \exp(-izt)]$$

branché adiabatiquement à $-\infty$ ($\text{Im}(z) > 0$), l'intégrale sur τ_1 apparaissant dans (3.156) fait apparaître la transformée de Laplace de la fonction de Green $G^{+(0)}$, pour différentes valeurs du paramètre de la forme

$$s = \pm iE_0/\hbar - iz \quad \text{ou} \quad s = \pm iE_0/\hbar + iz^*.$$

Comme montré au chapitre 3, les transformées de Laplace correspondantes sont proportionnelles à la fonction de Green $G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1)$ associée à la résolvante $[\lambda + H_0]^{-1}$,

$$G_\lambda(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1) = \langle \mathbf{r} | \frac{1}{\lambda + H_0} | \mathbf{r}_1 \rangle, \quad (3.157)$$

pour $\lambda = \hbar z - E_0 = \lambda_+$ ou $\lambda = -\hbar z - E_0 = \lambda_-$. Le résultat final prend bien la forme prédite par l'approche générale, à savoir

$$\mathbf{p}(t) = \text{Re}(\chi(z) \mathbf{E}_z \exp(-izt)),$$

avec une susceptibilité

$$\chi(z) = e^2 \int d\mathbf{r} \int d\mathbf{r}_1 \psi_0(\mathbf{r}) \psi_0(\mathbf{r}_1) x x_1 [G_{\lambda+}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1) + G_{\lambda-}(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1)] . \quad (3.158)$$

Par suite de l'invariance par rotation de l'état fondamental et des propriétés de symétrie des fonctions de Green[✱], la polarisation est bien isotrope et colinéaire au champ électrique appliqué, autrement dit $\chi(z)$ est un pur scalaire. Soulignons que la formule (3.158) n'est valable que dans le plan complexe supérieur ($\text{Im } z > 0$) *a priori*.

✱ **Commentaire 3.2.1.** Les fonctions de Green sont symétriques par rapport à n'importe quel plan passant par l'origine. Par exemple, elles satisfont la relation de symétrie $G_{\lambda\pm}(x, y, z; x_1, y_1, z_1) = G_{\lambda\pm}(x, -y, z; x_1, -y_1, z_1)$. Ainsi, en tenant compte également de $\psi_0(\mathbf{r}) = \psi_0(|\mathbf{r}|)$, les intégrales spatiales sur des termes rectangles de la forme xy_1 dans la formule (3.156), sont nulles. Remarquons que pour un autre état propre non-invariant par rotation, ces termes ne seraient plus nuls, et la susceptibilité deviendrait un tenseur.

Représentation spectrale. La représentation spectrale de $\chi(z)$ en termes des fonctions propres ψ_n de H_0 se déduit de l'expression intégrale (3.158), en utilisant la formule (2.77), p. 101, pour chaque fonction de Green $G_{\lambda\pm}$. Il vient

$$\chi(z) = 2e^2 \sum_n |\langle \psi_0 | x | \psi_n \rangle|^2 \frac{(E_n - E_0)}{[(E_n - E_0)^2 - \hbar^2 z^2]} . \quad (3.159)$$

La somme dans (3.159) se décompose en une partie discrète associée aux états liés d'énergie négative, et une partie intégrale associée aux états ionisés d'énergie positive. Dans la suite, nous explicitons la forme de ces états, en abandonnant le label générique n pour indexer une fonction propre. Les états liés sont caractérisés par 3 nombres entiers n, l, m . Le nombre quantique principal n ($n \geq 1$) détermine l'énergie $E_{n-1} = -e^2/(8\pi\epsilon_0 n^2 a_B)$, où $a_B = 4\pi\epsilon_0 \hbar^2/(me^2)$ est le rayon de Bohr. Le nombre quantique azimutal l détermine la valeur propre $l(l+1)\hbar^2$ du carré du moment cinétique orbital : à n donné, il ne peut prendre que n valeurs, $0 \leq l \leq n-1$. Le nombre quantique magnétique m détermine la valeur propre $m\hbar$ d'une composante du moment cinétique suivant une direction arbitraire : à l donné, il ne peut prendre que $(2l+1)$ valeurs, $-l \leq m \leq l$. Les états liés seront notés dorénavant $|\psi_{nlm}\rangle$, de sorte que l'état fondamental s'écrit maintenant $|\psi_{100}\rangle$. Les états ionisés, dits aussi de diffusion, sont eux caractérisés par un nombre d'onde k réel positif, et deux entiers l et m qui ont la même signification physique que pour les états liés. Le nombre d'onde k détermine l'énergie $E_k = \hbar^2 k^2/(2m)$, alors que l peut prendre n'importe quelle valeur entière, et qu'on a toujours $-l \leq m \leq l$. On notera $|\psi_{klm}\rangle$ ces états.

En tenant compte de la forme détaillée plus haut du spectre de H_0 , la formule spectrale (3.159) devient

$$\chi(z) = 2e^2 \left\{ \sum_{n \geq 2} |\langle \psi_{100} | x | \psi_{n10} \rangle|^2 \frac{(E_{n-1} - E_0)}{[(E_{n-1} - E_0)^2 - \hbar^2 z^2]} + \int_0^\infty dk |\langle \psi_{100} | x | \psi_{k10} \rangle|^2 \frac{(E_k - E_0)}{[(E_k - E_0)^2 - \hbar^2 z^2]} \right\}. \quad (3.160)$$

Il se trouve en effet que seuls les états avec $l = 1$ et $m = 0$ contribuent à la représentation spectrale de $\chi(z)$. Le lecteur pourra s'en convaincre, en calculant les éléments de matrice dans la représentation (3.159), à l'aide de l'expression des fonctions propres $\psi_{nlm}(r, \theta, \varphi)$ et $\psi_{klm}(r, \theta, \varphi)$ en coordonnées sphériques²⁰.

Propriétés analytiques de la polarisabilité. En utilisant l'expression explicite des fonctions d'onde, on montre que $|\langle \psi_{100} | x | \psi_{n10} \rangle|^2$ décroît comme $1/n^3$ quand $n \rightarrow \infty$, alors que $|\langle \psi_{100} | x | \psi_{k10} \rangle|^2$ décroît comme $1/k^8$ quand $k \rightarrow \infty$. La série en n et l'intégrale sur k dans la représentation spectrale (3.160) sont donc absolument convergentes. Par conséquent, comme celle-ci est valable pour $\text{Im } z > 0$, $\chi(z)$ est bien analytique dans le demi-plan complexe supérieur.

Le comportement de $\chi(z)$ sur l'axe réel est obtenu en prenant la limite de la représentation (3.160) quand $\text{Im } z \rightarrow 0^+$. Les points réels $\pm\omega_{n-1}$ avec $\omega_{n-1} = (E_{n-1} - E_0)/\hbar$ apparaissent comme des pôles simples de $\chi(z)$. Ces pôles, en nombre infini, s'accumulent au voisinage de la fréquence d'ionisation $\pm\omega_i$ avec $\omega_i = |E_0|/\hbar$. Par ailleurs, pour $\omega \neq \pm\omega_{n-1}$, $|\omega| < \omega_i$, $\chi(\omega)$ est purement réelle.

Pour $|\omega| > \omega_i$, la présence d'une singularité dans l'intégrant en $k = k(\omega) = \sqrt{2m(|\omega| - \omega_i)}/\hbar$ induit une partie imaginaire non-nulle dans $\chi(\omega)$ en vertu de l'identité (A.1), i.e. :

$$\chi''(\omega) = \frac{\pi m e^2 |\omega|}{\hbar^2 \omega k(\omega)} |\langle \psi_{100} | x | \psi_{k(\omega)10} \rangle|^2. \quad (3.161)$$

La partie imaginaire $\chi''(\omega)$ reste finie quand $\omega \rightarrow \omega_i^+$ ou quand $\omega \rightarrow -\omega_i^-$, car $|\langle \psi_{100} | x | \psi_{k(\omega)10} \rangle|^2$ s'annule alors comme $k(\omega)$. En fait, les deux points symétriques $\pm\omega_i$ sont des points de branchement pour $\chi(z)$. Plus précisément, au voisinage de $z = \pm\omega_i$, $\chi(z)$ présente une singularité logarithmique $\ln(z \mp \omega_i)$: l'apparition d'une partie imaginaire finie à la traversée de la singularité est une simple conséquence de l'identité $\ln Z = \ln |Z| + i \arg Z$. De chaque point de branchement $\pm\omega_i$ part nécessairement une coupure. On peut imposer que

20. Les parties angulaires sont les harmoniques sphériques $Y_{lm}(\theta, \varphi)$ décrites en annexe. Les parties radiales sont des fonctions hypergéométriques confluentes, comme détaillé dans l'ouvrage [Landau III].

ces deux coupures ne fassent qu'une seule courbe finie d'extrémités $\pm\omega_i$ et contenue dans le demi-plan complexe inférieur. La structure analytique correspondante de $\chi(z)$ dans tout le plan complexe est résumée dans la figure 3.19.

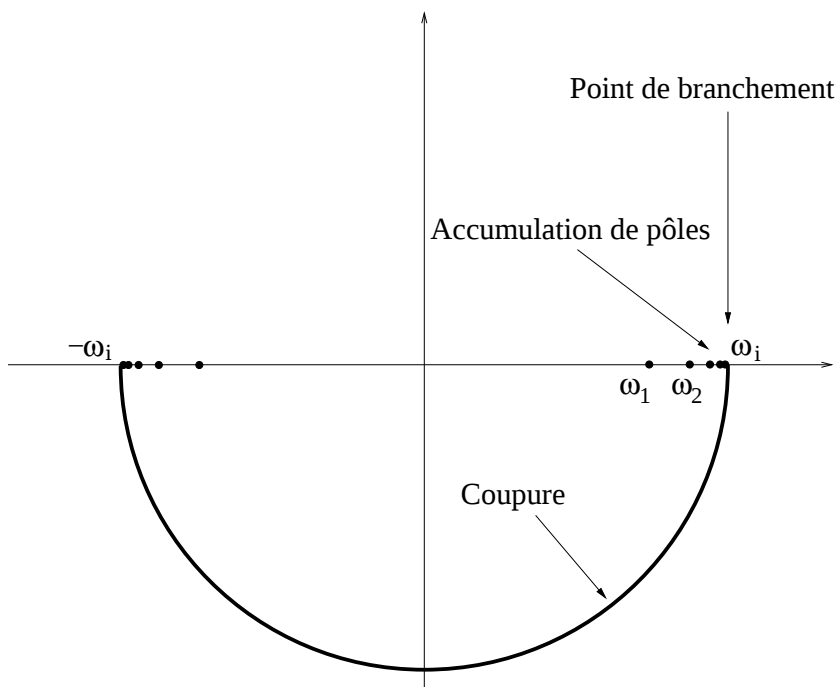


FIG. 3.19 – Structure analytique de $\chi(z)$.

Les parties réelle $\chi'(\omega)$ et imaginaire $\chi''(\omega)$ sont bien des fonctions paire et impaire respectivement. À fréquence nulle, $\chi(0) = \chi'(0)$ est purement réelle, et se réduit à la polarisabilité statique $\chi(0) = 36\pi\epsilon_0 a_B^3/2$. Aux grandes fréquences, $\chi(\omega)$ se comporte comme

$$\chi(\omega) \simeq \frac{-2e^2}{\hbar^2\omega^2} \langle \psi_{100} | x (H_0 - E_0) x | \psi_{100} \rangle,$$

soit, en utilisant l'expression de $\psi_{100}(r)$ qui est simplement proportionnelle à e^{-r/a_B} ,

$$\chi(\omega) \simeq -\frac{e^2}{m\omega^2} \text{ quand } |\omega| \rightarrow \infty. \quad (3.162)$$

Le terme dominant dans le développement asymptotique de $\chi(\omega)$ est donc purement réel. Il est identique à la polarisabilité d'une particule libre classique de charge $-e$, que l'on obtient immédiatement à partir du principe fondamental

de la dynamique Newtonienne

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = -e \mathbf{E}_{ext}(t) .$$

Autrement dit, les effets quantiques, ainsi que les contributions des interactions entre proton et électron, deviennent négligeables dans la limite des grandes fréquences. Cette limite est gouvernée par de purs effets d'inertie, qu'on peut de plus traiter classiquement. Le résultat est très général, et il s'applique en particulier à d'autres systèmes physiques.

Le premier terme correctif au comportement dominant (3.162) est encore réel et en $1/\omega^4$. Le premier terme imaginaire dans le développement asymptotique de $\chi(\omega)$ n'est pas une puissance entière de $1/\omega$, mais il est en $1/|\omega|^{9/2}$: ceci signifie que la fonction de réponse $K_0(\tau)$ du problème n'est pas indéfiniment différentiable, et présente une singularité en $\tau^{7/2}$ à l'origine.

Interprétation

La structure analytique de $\chi(z)$ est très riche, et elle illustre bien les considérations générales de la section 1.1. Nous en interprétons d'abord les caractéristiques essentielles. Puis, nous commentons différentes analogies de comportement avec des systèmes classiques. Enfin, nous terminons en mentionnant l'émission spontanée, qui est un effet quanto-relativiste fondamental, et par une brève discussion des limitations de la réponse linéaire.

Singularités et résonances. C'est la partie imaginaire $\chi''(\omega)$ qui contrôle la puissance $\overline{\mathcal{P}}$ fournie par le champ exciteur, moyennée sur une période $T = 2\pi/|\omega|$. En effet, un calcul simple mène à

$$\overline{\mathcal{P}} = \frac{1}{T} \int_0^T dt \int d\mathbf{r} [\phi(\mathbf{r}, t)]^* \frac{\partial H(t)}{\partial t} \phi(\mathbf{r}, t) = \frac{\omega \chi''(\omega)}{2} |\mathbf{E}_\omega|^2 . \quad (3.163)$$

Le produit $\omega \chi''(\omega)$ est bien positif d'après la formule (3.161).

La présence de singularités sur l'axe réel est en accord avec l'absence de dissipation dans le système considéré, ce qui est une conséquence du caractère conservatif de H_0 . Les pôles simples en $z = \pm \omega_{n-1}$ proviennent d'un phénomène de résonance. Pour ces fréquences particulières, le champ exciteur induit des transitions entre l'état fondamental et les états excités. Ceci implique la divergence correspondante de $\chi(\pm \omega_{n-1})$, car $\phi(\mathbf{r}, t)$ ne reste pas voisine de $\psi_0(r)$ comme supposé *a priori* dans l'approche perturbative. Le caractère imaginaire de $\chi(\omega)$ au voisinage de $\pm \omega_{n-1}$, obtenu en posant $z = \pm \omega_{n-1} + i\epsilon$ avec $\epsilon \rightarrow 0^+$, signifie que le champ exciteur fournit alors de l'énergie à l'atome, comme il se doit. L'accumulation des pôles au voisinage de $\pm \omega_i$ est due à l'existence des états de Rydberg d'énergie arbitrairement proche du seuil $E = 0$ d'apparition des états ionisés.

Pour $\omega \neq \pm\omega_{n-1}$ avec $|\omega| < \omega_i$, $\chi(\omega)$ est purement réelle et le dipôle $\mathbf{p}(t)$ oscille donc en phase avec le champ excitateur. Ce dernier n'a pas à fournir d'énergie pour entretenir cette oscillation car il n'y a pas de processus dissipatif dans le système. Pour $|\omega| > \omega_i$, l'apparition d'une partie imaginaire non nulle dans $\chi(\omega)$ provient du couplage résonant entre l'état fondamental et un état ionisé de nombre d'onde $k(\omega)$, couplage induit par le champ excitateur. Les divergences correspondantes, semblables à celles observées précédemment pour $\omega = \pm\omega_{n-1}$, sont maintenant lissées par l'intégration sur tous les k . En d'autres termes, la nature continue du spectre des états ionisés assure la finitude de $\chi(\omega)$.

Analogies. La forme analytique de $\chi(\omega)$ présente des analogies avec celle obtenue dans d'autres situations physiques, qu'il est intéressant d'explicitier et de commenter. Tout d'abord, au voisinage de $\pm\omega_{n-1}$, le comportement de $\chi(\omega)$ en

$$\frac{2e^2\omega_{n-1}|\langle\psi_{1,0,0}|x|\psi_{n,1,0}\rangle|^2}{\hbar(\omega_{n-1}^2 - \omega^2)} \quad (3.164)$$

est identique à celui obtenu dans le modèle dit de l'électron élastiquement lié sans dissipation, présenté dans l'exemple du §1.2.2 (voir p. 27). Ainsi, ce modèle phénoménologique très simple reproduit parfaitement la singularité de $\chi(\omega)$ en une résonance $\pm\omega_{n-1}$ donnée, dans le cadre de la dynamique classique. Cela dit, les ajustements de la fréquence de rappel et de la masse effective exigent la connaissance du spectre de H_0 . Noter que celles-ci sont spécifiques à chaque résonance.

Le mécanisme induisant une partie imaginaire finie dans $\chi(\omega)$ pour $|\omega| > \omega_i$, apparaît également pour la constante diélectrique d'un gaz d'électrons à l'équilibre, comme montré dans la section 1.2.4. Dans ce dernier cas, c'est l'intégration sur toutes les vitesses possibles des électrons distribuées suivant la statistique de Maxwell-Boltzmann, qui lisse les singularités provenant du phénomène de surf sur l'onde extérieure appliquée. Ces électrons surfeurs pompent une partie de l'énergie de l'onde excitatrice. Comme décrit plus haut pour le cas de l'atome, cette absorption d'énergie n'est pas induite par un freinage présent dans le système, mais elle est la conséquence d'un effet résonant.

Émission spontanée. L'émission spontanée est un effet relativiste fondamental, dont la description passe par l'introduction de l'électrodynamique quantique. Dans ce cadre, le couplage entre l'atome et les fluctuations du champ électromagnétique, induit une instabilité des niveaux excités de l'atome. Ces derniers ont un temps de vie fini : ils se dés excitent spontanément avec émission d'un photon. À un niveau phénoménologique, ce processus peut être pris en compte en attribuant une partie imaginaire $-i\hbar/\tau_{vie}$ à l'énergie de l'état excité. Son évolution fait alors apparaître le facteur d'amortissement $\exp(-t/\tau_{vie})$, de sorte que la polarisabilité présente maintenant des

pôles simples dans le demi-plan complexe inférieur. Autrement dit, la polarisabilité devient analytique sur l'axe réel, en accord avec l'apparition du processus dissipatif résultant de l'émission spontanée, l'énergie fournie par le champ excitateur étant emportée par les photons émis. Ainsi, le branchement d'une vitesse de la lumière c finie provoque la descente des singularités dans le demi-plan complexe inférieur ! Enfin, soulignons que le comportement de la polarisabilité au voisinage de chaque pôle est alors exactement reproduit par la variante amortie du modèle de l'électron élastiquement lié présentée dans l'exemple décrit dans la section 1.2.2.

Au-delà de la réponse linéaire. Les prédictions de la réponse linéaire doivent être comprises dans un sens asymptotique, où l'amplitude du champ excitateur tend vers zéro. Une question naturelle est de savoir si ces prédictions sont pertinentes pour un champ appliqué suffisamment faible mais fini. L'analyse précédente fournit déjà des éléments de réponse. Par exemple, si la fréquence du champ excitateur coïncide avec une des résonances, l'atome subit en fait une transition vers un état excité. De manière générale, pour n'importe quelle fréquence, il est conjecturé que l'ionisation a toujours lieu pour des temps suffisamment longs, par suite d'effets non-linéaires. Notons qu'à fréquence nulle, chaque terme de la série de perturbation reste fini pour tout temps. Cependant, l'état final est quand même ionisé par suite d'un effet tunnel. L'ionisation se produit alors sur une échelle de temps croissant exponentiellement vite quand le champ appliqué tend vers zéro. Ce mécanisme, dont la dépendance dans le champ est de type singularité essentielle, ne saurait être reproduit par la série perturbative. En définitive, on retiendra que pour un champ excitateur suffisamment faible, la polarisabilité induite de l'atome est bien donnée par l'approche linéaire, pour des temps d'application à l'échelle humaine.

3.3 Exercices

■ Exercice 3.1. Unicité des solutions des équations de diffusion et de d'Alembert

1. Montrer, en utilisant la première formule de Green, que l'équation de diffusion (3.26), page 156, a une unique solution si on impose la C.I. (3.27) et des C.L., soit de Dirichlet, soit de Neumann (voir les équations (3.28) et (3.29)).

2. Même question pour le d'Alembertien avec les conditions initiales (3.89), page 182, et des C.L. soit de Dirichlet, soit de Neumann.

Solution page 360.

■ Exercice 3.2. Relations de réciprocité

Montrer, en utilisant la seconde formule de Green, que les fonctions de Green causales du d'Alembertien avec conditions aux limites homogènes sont symétriques, c'est-à-dire $G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; t - t') = G_H^+(\mathbf{r}'; \mathbf{r}; t - t')$.

Solution page 361.

■ Exercice 3.3. Équation pour les câbles longs

L'EDP proposée ci-dessous a été établie par Lord Kelvin pour étudier la transmission d'un signal électrique dans des longs câbles sous-marins. Elle a, depuis, servi à décrire bien d'autres phénomènes comme par exemple la transmission du signal le long des dendrites dans les réseaux neuronaux.

L'équation est donnée par

$$\lambda^2 \frac{\partial^2 V(x, t)}{\partial x^2} - \tau_0 \frac{\partial V(x, t)}{\partial t} - V(x, t) + V_0 = \rho(x, t). \quad (3.165)$$

Ici $V(x, t)$ est le potentiel au point x de la ligne de transmission (câble ou dendrite) et à l'instant t , V_0 est un potentiel externe constant et $\rho(x, t)$ est proportionnel au courant injecté au point x à l'instant t .

Donner l'expression de $V(x, t)$ en fonction de $\rho(x, t)$ en prenant comme C.L. $V(x, t) \rightarrow V_0$ pour $x \rightarrow \pm\infty$ et pour $t \rightarrow -\infty$.

Solution page 361.

■ Exercice 3.4. Conditions de Neumann en théorie de la diffraction

Obtenir l'expression (3.123), page 207, de l'amplitude $A_N(\mathbf{r})$, correspondant à la diffraction de Fraunhofer avec des C.L. de Neumann homogènes sur la plaque S_p .

Solution page 362.

■ Exercice 3.5. Fonction de Green du d'Alembertien en dimension $2 + 1$

Le but de cet exercice est de déterminer en dimension $2 + 1$ la fonction de Green causale de l'opérateur d'Alembertien. Plus précisément, cette fonction, notée G_2^+ , est la solution de l'EDP²¹

$$\left(\frac{1}{c^2} \partial_t^2 - \partial_x^2 - \partial_y^2 \right) G_2^+(x - x_0, y - y_0, t - t_0) = \delta(x - x_0) \delta(y - y_0) \delta(t - t_0)$$

qui s'annule lorsque $r \rightarrow \infty$. On appelle de manière similaire G_3^+ , la fonction de Green en dimension $3 + 1$, qui est donc donnée par l'équation (3.101), page 190.

1. Montrer que

$$G_2^+(x - x_0, y - y_0, t - t_0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dz \, G_3^+(x - x_0, y - y_0, z, t - t_0). \quad (3.166)$$

2. Utiliser alors ce résultat pour calculer G_2^+ .

3. Commenter ce résultat.

4. Considérons à $3 + 1$ dimensions une collection de sources, localisées au temps t_0 , sur la droite parallèle à l'axe des z et passant par le point de coordonnées $(x_0, y_0, 0)$. Cela signifie que

$$\rho(x', y', z') = \lambda \delta(x' - x_0) \delta(y' - y_0) \delta(t' - t_0)$$

où λ est une constante. En considérant l'équation de d'Alembert à $3 + 1$ dimensions associée à cette source, discuter les résultats des questions 1. et 3. du point de vue $3 + 1$ dimensions.

Solution page 362.

21. Nous utilisons la notation $\partial_x = (\partial/\partial x)$.

■ **Exercice 3.6. Fonction de Green du d'Alembertien en dimension $1 + 1$**

La fonction de Green retardée de l'opérateur d'Alembertien en dimension $1 + 1$ est la fonction G_1^+ , solution de l'EDP

$$\left(\frac{1}{c^2} \partial_t^2 - \partial_x^2 \right) G_1^+(x - x_0, t - t_0) = \delta(x - x_0) \delta(t - t_0), \quad (3.167)$$

avec la C.L. $G_1^+(x - x_0, t - t_0) \rightarrow 0$ quand $|x| \rightarrow \infty$. Calculer G_1^+ à partir de sa représentation spectrale (3.93), page 185.

Solution page 365.

■ **Exercice 3.7. Fonction de Green G_∞ du Laplacien en dimension $d \geq 3$**

Nous proposons de calculer dans cet exercice la fonction de Green G_∞ du Laplacien en dimension $d \geq 3$ à partir de la fonction de Green G_∞^+ de la diffusion pour le même espace $\mathbb{R}^d$.

1. Montrer que

$$G_\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = D \int_0^\infty dt G_\infty^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; t)$$

où D est le coefficient de diffusion.

2. Retrouver alors le résultat de l'exercice 2.2, page 128, en effectuant un changement de variable approprié dans l'intégrale ci-dessus, et en utilisant la définition de la fonction Γ d'Euler,

$$\Gamma(\alpha + 1) = \int_0^\infty du u^\alpha e^{-u}.$$

Solution page 365.

■ **Exercice 3.8. Diffusion de la chaleur dans une boule**

Imaginons une boule de rayon R à une température initiale uniforme T_0 . Elle est plongée à un instant $t = 0$ dans un bain à température T_b , qui fixe immédiatement la température du bord de la boule à $T = T_b$ (voir figure 3.20). Obtenir une expression pour la température $T(r, t)$ en tout point de la boule et tout temps.

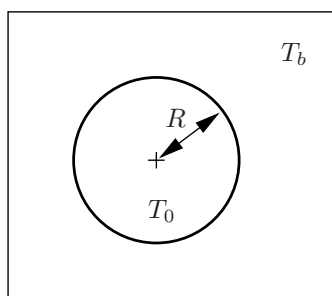


FIG. 3.20 – Boule de rayon R initialement à la température uniforme T_0 puis plongée dans un bain à température T_b .

Pour cela, compte tenu de la symétrie sphérique du problème, on se placera dans l'ensemble des fonctions ne dépendant que de $r = |\mathbf{r}| \in [0, R]$ et s'annulant en $r = R$. Une base complète de cet ensemble est donnée par les fonctions $\{\psi_n\}$ définies par

$$\psi_n(r) = \sqrt{\frac{2}{R}} \frac{1}{r} \sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right), \quad n \in \mathbb{N}^*.$$

Ces fonctions sont orthonormées i.e. :

$$\int_0^R dr r^2 \psi_n(r) \psi_m(r) = \delta_{nm}.$$

On développera alors directement $T(r, t)$ dans cette base.

Solution page 366.

■ Exercice 3.9. Des conditions de Dirichlet aux conditions de Robin

1. Question préliminaire : On se place dans cette question dans l'ensemble des fonctions définies sur $\mathbb{R}^+$ (origine comprise) et on considère dans cet ensemble deux fonctions b et ϕ telles que $b(0) = 0$ et

$$b = -\frac{d\phi}{dx} + h\phi \quad (3.168)$$

avec $\phi(x) \rightarrow 0$ quand $x \rightarrow +\infty$ et h une constante positive. Déterminer ϕ par la méthode de variation de la constante et montrer que

$$\phi(x) = \int_0^{+\infty} du e^{-hu} b(x+u). \quad (3.169)$$

2. Considérons l'équation différentielle

$$(\mathcal{O}_r + \mathcal{O}_t)\phi(\mathbf{r}, t) = \rho \quad (3.170)$$

dans un volume $\mathcal{D}$ de bord $\partial\mathcal{D}$. Ici, $\rho(\mathbf{r}, t)$ est une source et $\mathcal{O}_r$ et $\mathcal{O}_t$ sont l'un des opérateurs différentiels correspondant à l'équation de diffusion ou à l'équation de d'Alembert. Les conditions initiales en un temps t_0 sur $\phi(\mathbf{r}, t)$ sont choisies selon le type d'opérateur de manière appropriée pour garantir l'unicité de ϕ , par exemple avec des C.L. de Dirichlet sur $\partial\mathcal{D}$.

Imaginons que soit imposée sur une fonction ϕ_R , solution de l'EDP (3.170), les mêmes conditions initiales mais des conditions au bord dites de Robin,

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \phi_R(\mathbf{r}, t) + h(\mathbf{r}, t)\phi_R(\mathbf{r}, t) = 0 \quad \forall \mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}, \quad (3.171)$$

avec $h(\mathbf{r}, t)$ une fonction positive, définie pour $\mathbf{r} \in \partial\mathcal{D}$ et pour tout t . Montrer alors que ϕ_R est unique en procédant comme à l'exercice 3.1.

Notez que le propos de l'exercice suivant est de montrer que ces C.L. de Robin apparaissent naturellement dans certaines situations physiques.

3. On suppose désormais que $\mathcal{D}$ consiste en la demi-droite $[0, \infty[$ et que h est une constante positive. Plus précisément, $\phi_R(x, t)$ satisfait les conditions de Robin (3.171) en $x = 0$ et tend vers zéro quand $x \rightarrow +\infty$. Nous supposons que les conditions initiales sont $\phi_R(x, t_0) = 0$ pour la diffusion, avec en plus $\partial_t \phi_R(x, t_0) = 0$ pour l'équation de d'Alembert.

Considérons la fonction

$$b_D(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} \phi_R(x, t) + h\phi_R(x, t). \quad (3.172)$$

Montrer que b_D est solution d'une EDP de type (3.170) et indiquer la source correspondante. Quelles sont les C.L. satisfaites par $b_D(x, t)$?

4. Soit $G_{DH}^+(x; x'; t - t')$ la fonction de Green causale, avec C.L. de Dirichlet homogènes, de l'opérateur $(\mathcal{O}_x + \mathcal{O}_t)$. Exprimer $b_D(x, t)$ en fonction de G_{DH}^+ , de ρ et des dérivées de ρ . En déduire une expression pour $\phi_R(x, t)$.

Solution page 367.

■ Exercice 3.10. Conditions de Robin pour l'équation de la chaleur

Il existe des situations physiques pour lesquelles les conditions au bord les plus réalistes à imposer ne sont ni de Dirichlet, ni de Neumann. Cet exercice illustre cette propriété dans le cas de l'équation de la chaleur.

Imaginons qu'un corps de volume $\mathcal{D}$ soit à une température $T(\mathbf{r}, t)$ et que son bord $\partial\mathcal{D}$ soit en contact avec un thermostat à la température constante et uniforme T_0 .

1. On rappelle la loi de Fourier reliant le flux de chaleur $\mathbf{j}_Q$ au gradient de température,

$$\mathbf{j}_Q = -\lambda \nabla T$$

où λ est la conductivité thermique. Rappelons aussi la loi de Stefan-Boltzmann, qui indique que la quantité de chaleur reçue par un corps, par unité de temps et à travers un élément de surface $d\Sigma$ de son bord, est donnée par

$$\frac{dQ}{dt} = -a(T^4 - T_0^4)d\Sigma.$$

Dans cette expression, la constante a positive est la constante de Stefan et T la température de l'élément de surface considéré.

Dans le cas où $|T - T_0| \ll T_0$, montrer que la différence de température $\phi = T - T_0$ satisfait à des conditions au bord du type Robin,

$$[\mathbf{n} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, t) + h\phi(\mathbf{r}, t)] \Big|_{\partial \mathcal{D}} = 0,$$

où h est une constante positive à déterminer. La fonction $\phi(\mathbf{r}, t)$ est donc une solution homogène de l'équation de diffusion avec C.L. de Robin.

2. Nous considérons désormais une barre semi-infinie dont les variations de température dans la direction transverse sont négligeables. Nous pouvons donc nous restreindre à un problème unidimensionnel défini par la demi-droite $x \geq 0$.

Soit $G_R^+(x; x'; \tau)$ la fonction de Green causale de l'équation de diffusion avec des C.L. de Robin en $x = 0$ et qui tend vers zéro quand $x \rightarrow +\infty$. Montrer, en utilisant les résultats de l'exercice précédent, que

$$G_R^+(x; x'; \tau) = \int_0^{+\infty} du \, e^{-hu} \left(\frac{\partial}{\partial x'} G_{DH}^+(x+u; x'; \tau) + hG_{DH}^+(x+u; x'; \tau) \right).$$

3. Montrer alors que

$$G_R^+(x; x'; \tau) = G_{NH}^+(x; x'; \tau) - 2h \int_0^\infty du \, e^{-hu} G_\infty^+(x+u; -x'; \tau) \quad (3.173)$$

où G_∞^+ est la fonction de Green causale de la diffusion sur $\mathbb{R}$ et G_{NH}^+ la fonction de Green causale sur $[0, \infty[$ avec C.L. de Neumann homogène en $x = 0$.

Solution page 367.

■ Exercice 3.11. Équation de Cattaneo en 3d

Cet exercice propose de déterminer la fonction de Green causale G_{∞}^{+} , avec C.L. à l'infini, pour l'équation de Cattaneo en 3d en utilisant le résultat en 1d du paragraphe 3.2.5. Rappelons que l'équation de Cattaneo en 3d est donnée par :

$$\left(-\Delta + a^2 \frac{\partial}{\partial t} + \frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t^2}\right) \phi(\mathbf{r}, t) = \rho(\mathbf{r}, t).$$

1. En procédant comme dans le cas uni-dimensionnel, montrer que

$$G_{\infty}^{+}(\mathbf{r}; t) = e^{-\frac{c^2 a^2 t}{2}} g_{\infty}^{+}(\mathbf{r}; t)$$

avec

$$g_{\infty}^{+}(\mathbf{r}; t) = \frac{1}{(2\pi)^4} \int_{-\infty+i\gamma}^{+\infty+i\gamma} dz \int d\mathbf{k} \frac{e^{-izt+i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}}{k^2 - m^2 - z^2/c^2}$$

où γ est un nombre réel suffisamment grand.

2. Intégrer alors sur les angles pour se ramener à

$$g_{\infty}^{+}(\mathbf{r}; t) = -\frac{i}{(2\pi)^3 r} \int_{-\infty+i\gamma}^{+\infty+i\gamma} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{ke^{-izt+ikr}}{k^2 - m^2 - z^2/c^2}.$$

3. Conclure en remarquant que l'expression ci-dessus peut se réécrire

$$-\frac{1}{(2\pi)^3 r} \frac{\partial}{\partial r} \left(\int_{-\infty+i\gamma}^{+\infty+i\gamma} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{-izt+ikr}}{k^2 - m^2 - z^2/c^2} \right).$$

et en utilisant le résultat (3.151), page 226 obtenu pour le cas uni-dimensionnel.

Solution page 368.

■ Exercice 3.12. Équation de Klein-Gordon

Cet exercice propose de calculer les fonctions de Green causales G_1^{+} et G_3^{+} avec C.L. à l'infini pour les équations de Klein-Gordon

$$\left(\frac{1}{c^2} \partial_t^2 - \Delta + m^2\right) G^{+}(\mathbf{r}, t) = \delta(\mathbf{r})\delta(t)$$

respectivement à une et à trois dimensions.

1. Montrer tout d'abord qu'en une dimension

$$G_1^{+}(x; t) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\infty+i\gamma}^{+\infty+i\gamma} dz \int_{-\infty}^{+\infty} dk \frac{e^{-izt+ikx}}{(k - (z^2/c^2 - m^2)^{1/2})(k + (z^2/c^2 - m^2)^{1/2})}$$

où γ est un nombre réel suffisamment grand et avec une détermination appropriée pour $(z^2/c^2 - m^2)^{1/2}$. Faire l'intégrale sur k et montrer que $G_1^+(x; t) = 0$ si $|x| > ct$. Finir alors le calcul de G_1^+ en s'inspirant du calcul mené au §3.2.5 pour l'équation de Cattaneo.

2. Calculer alors G_3^+ en suivant la méthode proposée à l'exercice précédent pour l'équation de Cattaneo. On rappelle la définition des fonctions de Bessel :

$$J_0(\rho) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\theta e^{i\rho \cos \theta} \quad \text{et} \quad J_1(\rho) = -\frac{dJ_0}{d\rho}.$$

Solution page 369.

Chapitre 4

Méthode du Col

Il arrive fréquemment d'être amené à estimer des quantités physiques dans une certaine limite. Cette limite peut correspondre par exemple à une faible température, à une petite constante de couplage, à une grande taille du système considéré, ou encore à la limite classique $\hbar \rightarrow 0$, etc. Par ailleurs, ces quantités physiques s'expriment souvent comme une intégrale. Ce chapitre est consacré à la présentation d'une méthode très générale, appelée méthode du col, qui permet d'estimer ces intégrales dans certaines limites asymptotiques. Plus précisément, leur point commun est l'apparition d'un maximum très marqué de l'intégrand. De manière schématique, la méthode du col consiste alors à remplacer l'intégrand par sa forme asymptotique au voisinage de son maximum. L'intégrale prend ainsi une forme gaussienne qui incorpore la contribution dominante ainsi que celle de la région proche du col. La méthode du col fournit ainsi un cadre unificateur, qui met en rapport des mécanismes physiques *a priori* très différents. Un autre atout majeur de cette méthode est la prise en compte systématique des contributions de la région proche du col, qui ne sont pas toujours aisément accessibles par d'autres approches.

Comme illustré dans la seconde partie de ce chapitre, les contextes d'application de la méthode du col mettent en jeu tout type d'intégrale, allant de la plus simple, sur une seule variable réelle, à la plus délicate, sur un champ, en passant par le cas d'un nombre discret de variables d'intégration. Nous traitons d'abord le cas d'une intégrale simple de la forme

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

où $f(x;\lambda)$ est une fonction réelle dépendant d'un paramètre λ , et x une variable réelle décrivant un domaine $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}$. Ce cas canonique contient l'essence de la méthode générale. Nous discutons la validité de l'estimation asymptotique obtenue à partir du col, en évaluant les corrections correspondantes. La méthode de la phase stationnaire, applicable au cas où $f(x;\lambda)$ est une pure

phase $f(x; \lambda) = i\varphi(x; \lambda)$ avec φ réelle, est ensuite décrite. Cette variante de la méthode du col présente des difficultés spécifiques provenant de la nature oscillante de l'intégrand, dont le module est constant. En fait, ces deux variantes peuvent être réunies dans un cadre unifié, où x devient une variable complexe z . La fonction $f(z; \lambda)$ est supposée être analytique en z , le domaine d'intégration $\mathcal{D}$ étant remplacé par un certain chemin γ dans le plan complexe. L'introduction d'une variable complexe permet, *modulo* des propriétés d'analyticité suffisantes de f , de déformer γ en un autre chemin γ_c passant par un point z_c dit col. Au voisinage de z_c , le module $|e^{-f(z; \lambda)}|$ de l'intégrand, vu comme une fonction des deux variables $\operatorname{Re} z$ et $\operatorname{Im} z$, présente une structure de selle de cheval avec apparition d'un col. Ceci explique le nom générique de la méthode, également appelée *steepest descent method* ou *saddle point method* en anglais.

Nous présentons ensuite de manière analogue le cas d'une intégrale multiple sur plusieurs variables réelles dans un domaine $\mathcal{D}$ de $\mathbb{R}^d$. Les intégrales gaussiennes correspondantes s'expriment aisément en termes des valeurs propres d'une forme quadratique. Enfin nous considérons l'intégrale fonctionnelle sur un champ $\phi(\zeta)$ indexé par une variable continue ζ . Celle-ci est définie en prenant la limite continue d'une intégrale multiple sur un nombre discret de variables. Le champ au col est donné par un principe variationnel. À nouveau, la forme asymptotique dominante se réduit à une intégrale gaussienne qui peut être exprimée, au moins formellement, en termes des valeurs propres d'une forme quadratique fonctionnelle.

La seconde partie du chapitre est dévolue à la présentation de différents exemples. Le premier concerne l'obtention de la formule de Stirling pour $N!$ avec N grand. Ici le paramètre de contrôle $\lambda = N$ peut décrire le nombre de particules d'un gaz parfait à l'équilibre thermodynamique, et le comportement asymptotique obtenu garantit l'extensivité de son énergie libre. Une autre application simple à la mécanique statistique est la preuve de l'équivalence à la limite thermodynamique des ensembles micro-canonique et canonique respectivement. À nouveau, le paramètre de contrôle λ s'identifie avec N , la variable d'intégration étant l'énergie du système dans l'ensemble canonique. Nous étudions ensuite la fonction de partition d'un système classique, qui consitue un exemple d'intégrale sur plus d'une variable. Ce système est supposé être dans une phase solide à suffisamment basse température. Dans ce régime, la fonction de partition peut être estimée par la méthode du col, où λ correspond à l'inverse de la température, alors que le col est constitué des sites du réseau cristallin formé à température nulle. Un exemple d'intégrale fonctionnelle provient de la représentation de Hubbard-Stratanovitch du modèle d'Ising. Le terme dominant au col correspond à la théorie de champ moyen usuelle. Enfin, nous établissons la représentation du propagateur thermique en termes d'intégrale de chemins, et nous en déduisons l'approximation semi-classique correspondante.

4.1 Propriétés générales

4.1.1 Intégrale simple

Ici, nous considérons l'intégrale simple

$$I(\lambda) = \int_{\mathcal{D}} dx e^{-f(x;\lambda)}, \quad (4.1)$$

sur un domaine $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}$, avec une fonction $f(x;\lambda)$ à valeurs réelles. Nous précisons d'abord les hypothèses préalables à l'application de la méthode du col lorsque le paramètre de contrôle λ tend vers l'infini. Celle-ci est ensuite mise en œuvre à travers l'établissement de la formule dite du col. Nous discutons ensuite le caractère asymptotique de la forme approchée ainsi obtenue. Nous terminons cette section par l'extension de la méthode au cas où la fonction $f(x;\lambda)$ est à valeurs imaginaires pures.

Contexte d'application et essence de la méthode

Supposons que la fonction $f(x;\lambda)$ admette un minimum dans le domaine d'intégration $\mathcal{D}$ en $x = x_c(\lambda)$, et qu'elle devienne de plus en plus étroite autour de celui-ci, quand $\lambda \rightarrow \infty$. En conséquence, pour λ suffisamment grand, l'intégrant $e^{-f(x;\lambda)}$ présente un pic très prononcé en $x = x_c(\lambda)$ et de faible largeur. Cette situation est illustrée dans la figure 4.1, où sont dessinées plusieurs courbes représentant l'intégrant $e^{-f(x;\lambda)}$ avec des valeurs croissantes de λ , pour un exemple typique de fonction $f(x;\lambda)$. Elle sera précisée quantitativement par la suite.

Afin d'estimer $I(\lambda)$ dans la limite $\lambda \rightarrow \infty$, remarquons simplement que les contributions dominantes devraient provenir de la région où x reste proche de $x_c(\lambda)$. En suivant cette idée, il semble alors légitime de remplacer $f(x;\lambda)$ par son développement de Taylor au second ordre en $(x - x_c(\lambda))$. Ceci constitue l'essence de la méthode du col. L'estimation correspondante de $I(\lambda)$ est détaillée dans le paragraphe suivant.

Formule du col

Comme $x_c(\lambda)$ est un minimum de $f(x;\lambda)$, nous avons nécessairement¹

$$\frac{\partial f}{\partial x}(x_c(\lambda);\lambda) = 0 \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_c(\lambda);\lambda) > 0.$$

Posons alors

$$F_c(\lambda) = f(x_c(\lambda);\lambda) \quad \text{et} \quad C(\lambda) = \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_c(\lambda);\lambda).$$

1. Nous n'envisagerons pas le cas où les trois premières dérivées partielles de $f(x;\lambda)$ par rapport à x , s'annulent en $x = x_c(\lambda)$, avec la dérivée quatrième qui est strictement positive. Cette situation est bien plus rare en pratique.

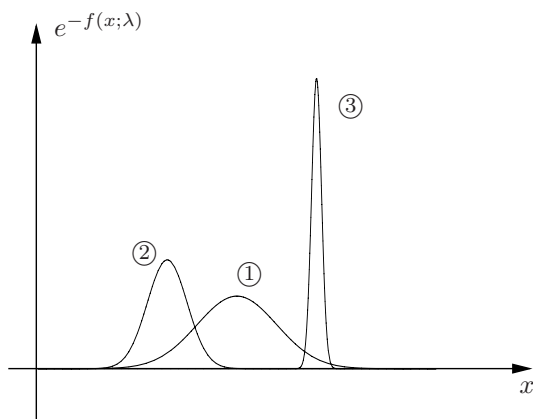


FIG. 4.1 – Cette figure illustre le caractère de plus en plus piqué de l'intégrant $e^{-f(x; \lambda)}$ lorsque $\lambda \rightarrow \infty$. Les courbes ①, ② et ③, correspondent respectivement à $\lambda_1 < \lambda_2 < \lambda_3$.

Le développement de Taylor de $f(x; \lambda)$ au voisinage du minimum $x_c(\lambda)$ s'écrit

$$f(x; \lambda) = F_c(\lambda) + \frac{C(\lambda)}{2}(x - x_c(\lambda))^2 + O((x - x_c(\lambda))^3),$$

avec les hypothèses de différentiabilité habituelles. En reportant ce développement tronqué au second ordre dans l'intégrant $e^{-f(x; \lambda)}$, nous obtenons une expression approchée de $I(\lambda)$ qui s'écrit

$$e^{-F_c(\lambda)} \int_{\mathcal{D}} dx \exp\left[-\frac{C(\lambda)}{2}(x - x_c(\lambda))^2\right]. \quad (4.2)$$

Souvent, le domaine $\mathcal{D}$ est une partie de $\mathbb{R}$ seulement. Comme l'intégrant s'annule rapidement autour de $x_c(\lambda)$ sur une échelle $\sigma(\lambda) = 1/\sqrt{C(\lambda)}$, on peut étendre le domaine d'intégration à tout $\mathbb{R}$, pourvu que le pic tout entier soit inclus dans $\mathcal{D}$. Dans le cas typique $\mathcal{D} = [L_1, L_2]$, ceci ne sera justifié qu'à la condition nécessaire que les distances $|L_i - x_c(\lambda)|$ du minimum aux bords, soient très grandes devant la largeur $\sigma(\lambda)$ du pic. La forme approchée (4.2) est alors remplacée par

$$e^{-F_c(\lambda)} \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp\left[-\frac{(x - x_c(\lambda))^2}{2(\sigma(\lambda))^2}\right].$$

Un calcul élémentaire de l'intégrale gaussienne complète sur $\mathbb{R}$ conduit finalement à la formule dite du col :

$$\begin{aligned} \text{Formule du col pour } : \quad I(\lambda) &= \int_{\mathcal{D}} dx \, e^{-f(x;\lambda)} \\ I_{col}(\lambda) &= \sqrt{2\pi} \, \sigma(\lambda) \, e^{-F_c(\lambda)} \\ F_c(\lambda) = f(x_c(\lambda); \lambda) \quad \text{et} \quad \sigma(\lambda) &= \left[\frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_c(\lambda); \lambda) \right]^{-1/2}. \end{aligned} \quad (4.3)$$

L'interprétation de l'approximation (4.3) est transparente. Le terme

$$e^{-F_c(\lambda)} \quad (4.4)$$

est simplement la hauteur du pic. Il peut être vu comme la contribution de $x_c(\lambda)$ lui-même.

Il est dit dominant[✱], car le facteur exponentiel assure qu'il l'emporte sur toutes les autres contributions en général. Le terme

$$\sqrt{2\pi} \, \sigma(\lambda) \quad (4.5)$$

est proportionnel à la largeur du pic. Il prend en compte la contribution des points proches de $x_c(\lambda)$. En reprenant une terminologie issue de la physique statistique, cette contribution est dite provenir des fluctuations de la variable x au voisinage de $x_c(\lambda)$. Notons que l'approximation (4.3) revient simplement à multiplier la hauteur du pic par sa largeur, comme attendu par un argument de physicien !

✱ Commentaire 4.1.1. Il existe toutefois des cas où ceci n'est pas observé. Considérons par exemple une particule quantique à une dimension dans un potentiel confinant admettant un minimum absolu à l'origine avec $V(0) = 0$. On peut calculer son propagateur thermique correspondant par l'approximation semi-classique, qui est en fait une application de la méthode du col à l'intégrale de chemin comme exposé au §4.2.5. Alors à basse température, le comportement dominant de ce propagateur au voisinage de l'origine, est de la forme $e^{-\beta\hbar\omega/2}$ où $\omega = \sqrt{V''(0)/m}$ est la fréquence de vibration dans le potentiel localement harmonique. Ce comportement provient de la contribution de la largeur du col, c'est-à-dire du déterminant dans la formule (4.84) !

Caractère asymptotique de la formule du col

L'expression (4.3) ne constitue la forme asymptotique de $I(\lambda)$ quand $\lambda \rightarrow \infty$ que si les contributions négligées *a priori* sont effectivement petites par

rapport à $I_{col}(\lambda)$. Les corrections correspondantes proviennent du caractère non-strictement gaussien de l'intégrant au voisinage de $x_c(\lambda)$, de l'existence éventuelle d'autres pics, et enfin des effets de bord. Ces trois contributions sont analysées successivement dans la suite. Comme nous le découvrirons au fil des analyses, une séparation complète des différentes contributions n'est pas aisée à formuler rigoureusement. C'est pourquoi les estimations effectuées doivent être vues plutôt comme des recettes, qui ont néanmoins le bon goût de prédire les comportements corrects !

Contribution des termes non-quadratiques au voisinage du pic. Estimons la contribution des termes d'ordre supérieur à deux dans le développement de Taylor de f au voisinage de $x_c(\lambda)$. Pour cela, nous posons

$$f(x; \lambda) = F_c(\lambda) + \frac{C(\lambda)}{2}(x - x_c(\lambda))^2 + R(x; \lambda) ,$$

où le reste $R(x; \lambda)$ est donné par la série

$$R(x; \lambda) = \sum_{p \geq 3} \frac{\partial^p f}{\partial x^p}(x_c(\lambda); \lambda) \frac{(x - x_c(\lambda))^p}{p!} .$$

La contribution du reste à l'intégrale $I(\lambda)$ étant *a priori* petite, un traitement perturbatif de ce reste est légitime. Il consiste à développer e^{-R} en puissances de R , puis à remplacer R par la série de Taylor précédente. Ensuite nous procédons à une intégration terme à terme du développement ainsi obtenu en puissances de $(x - x_c(\lambda))$. Le domaine d'intégration $\mathcal{D}$ est étendu à tout $\mathbb{R}$, comme dans le calcul de la forme approchée (4.3), les effets de bord étant traités séparément. Ceci fait donc apparaître des moments d'ordre arbitraire de la Gaussienne $\exp[-(x - x_c(\lambda))^2/2(\sigma(\lambda))^2]$, qui sont tous bien définis. Les moments impairs sont nuls par symétrie, et les moments pairs d'ordre $2p$ sont proportionnels à $[\sigma(\lambda)]^{2p}$. Nous obtenons ainsi la représentation perturbative de la contribution totale du pic,

$$\sqrt{2\pi} \sigma(\lambda) e^{-F_c(\lambda)} \left[1 + \sum_{p=2}^{\infty} c_p(\lambda) (\sigma(\lambda))^{2p} \right] , \quad (4.6)$$

où chaque coefficient $c_p(\lambda)$ est une combinaison linéaire de produits de dérivées de f en $x_c(\lambda)$, c'est-à-dire de

$$\prod_i \left(\frac{\partial^{p_i} f}{\partial x^{p_i}}(x_c(\lambda); \lambda) \right)^{q_i} \quad \text{avec} \quad \sum_i p_i q_i = 2p , \quad (4.7)$$

affectés de facteurs purement numériques. Par exemple, nous avons

$$\begin{aligned} c_2(\lambda) &= -\frac{1}{8} \frac{\partial^4 f}{\partial x^4}(x_c(\lambda); \lambda) , \\ c_3(\lambda) &= -\frac{1}{48} \frac{\partial^6 f}{\partial x^6}(x_c(\lambda); \lambda) + \frac{5}{24} \left[\frac{\partial^3 f}{\partial x^3}(x_c(\lambda); \lambda) \right]^2 . \end{aligned} \quad (4.8)$$

Pour que la forme approchée (4.3) soit exacte asymptotiquement, il est nécessaire que chaque correction d'ordre p dans la série perturbative (4.6) tende vers zéro quand $\lambda \rightarrow \infty$. Vu la structure des coefficients $c_p(\lambda)$, ces conditions impliquent

Validité de la formule du col (4.3) :

$$\forall q \geq 3, \quad [\sigma(\lambda)]^q \frac{\partial^q f}{\partial x^q}(x_c(\lambda); \lambda) \rightarrow 0 \text{ quand } \lambda \rightarrow \infty.$$

(4.9)

Ces comportements limites sont presque toujours suffisants en pratique pour que la somme de toutes les corrections dans la série (4.6) soit effectivement négligeable aux grands λ . En toute rigueur, il faut également examiner la convergence de la série (4.6) qui n'est pas forcément assurée. En cas de convergence seulement asymptotique, la forme col (4.3) peut néanmoins constituer un équivalent de la contribution totale du pic quand $\lambda \rightarrow \infty$.

Contribution de pics secondaires. En plus de $x_c(\lambda)$, la fonction $f(x; \lambda)$ peut admettre d'autres minima locaux en des points $x_i(\lambda)$ appartenant au domaine $\mathcal{D}$, avec $f(x_i(\lambda); \lambda) > F_c(\lambda)$. Alors l'intégrant $e^{-f(x; \lambda)}$ présente, en plus du pic principal en $x_c(\lambda)$, des pics secondaires en $x_i(\lambda)$, qu'on supposera également très étroits.

Si les pics sont bien séparés et présentent un faible recouvrement, alors la contribution de chaque pic peut être déterminée indépendamment des autres. Admettons que, pour chacun d'entre eux, la forme col correspondante

$$\sqrt{2\pi} \sigma_i(\lambda) e^{-F_i(\lambda)}, \quad (4.10)$$

soit asymptotiquement valable quand $\lambda \rightarrow \infty$. Alors, la contribution dominante à l'intégrale $I(\lambda)$ est la plus grande des expressions (4.3) et (4.10). Soulignons que ce n'est pas forcément celle du pic principal. En effet, un pic secondaire plus large peut l'emporter. Cela dit, en général, les hauteurs varient exponentiellement plus vite que les largeurs aux grands λ , de sorte que c'est bien le pic principal qui donne la contribution dominante. Notons que la condition préalable de faible recouvrement des pics impose que leurs distances relatives soient grandes devant leurs largeurs respectives, i.e. $|x_i(\lambda) - x_j(\lambda)| \gg \sigma_i(\lambda), \sigma_j(\lambda)$.

Contribution des bords et formule asymptotique. Considérons le cas où le domaine se réduit à un segment $[L_1, L_2]$, et supposons qu'il ait un seul pic en $x_c(\lambda)$, et que sa contribution soit bien donnée asymptotiquement par la forme col (4.3). Alors, un ordre de grandeur grossier de la contribution de chaque bord L_1 et L_2 est simplement donné par $(L_2 - L_1)e^{-f(L_1; \lambda)}$ et $(L_2 - L_1)e^{-f(L_2; \lambda)}$ respectivement. Ces contributions sont en général négligeables devant la forme col (4.3), pourvu que la largeur $\sigma(\lambda)$ du pic ne soit pas exponentiellement petite quand λ diverge.

Si toutes les conditions énoncées précédemment pour chacune des contributions analysées sont satisfaites, alors la formule du col donne bien le comportement asymptotique de $I(\lambda)$ aux grands λ .

Cas d'un paramètre de contrôle multiplicatif. En pratique, il arrive souvent que le paramètre de contrôle λ intervienne de manière multiplicative dans la fonction f , qui est alors de la forme $f(x; \lambda) = \lambda g(x)$. Supposons que $g(x)$ possède un minimum absolu en x_0 , ce point étant strictement à l'intérieur du domaine $\mathcal{D}$. La position $x_c(\lambda)$ du pic principal est indépendante de λ , et se réduit évidemment à ce point x_0 . Nous laissons le soin au lecteur de vérifier que toutes les conditions menant à la formule asymptotique (4.3) sont alors remplies, avec le résultat

Formule du col pour : $I(\lambda) = \int_{\mathcal{D}} dx \, e^{-\lambda g(x)}$

$$I_{col}(\lambda) = \sqrt{\frac{2\pi}{\lambda g''(x_0)}} e^{-\lambda g(x_0)} \quad (4.11)$$

x_0 : Minimum absolu de $g(x)$.

Les corrections au comportement asymptotique dominant (4.11) s'obtiennent facilement à partir de la série perturbative (4.6), engendrée par les déviations locales à la forme gaussienne au voisinage de x_0 . La largeur $\sigma(\lambda)$ est inversement proportionnelle à $\lambda^{1/2}$, et chaque dérivée d'ordre q de f est bien sûr proportionnelle à λ lui-même. Chaque terme d'ordre p ,

$$c_p(\lambda) (\sigma(\lambda))^{2p}, \quad (4.12)$$

est donc un polynôme en $1/\lambda$. Par exemple, $c_2 (\sigma(\lambda))^4$ est proportionnel à $1/\lambda$, alors que $c_3 (\sigma(\lambda))^6$ est un polynôme du second degré en $1/\lambda$ avec un terme constant nul. En conséquence, la série (4.6) peut être réorganisée comme un développement perturbatif en puissances de $1/\lambda$: chaque terme d'un ordre donné provient d'un nombre fini de termes (4.12). Toutes les autres corrections à la formule du col, provenant de pics secondaires ou des bords, sont exponentiellement plus petites.

Contre-exemple. Lorsque la fonction $f(x; \lambda)$ est de la forme $f(x; \lambda) = g(\lambda x)$, la méthode du col n'est pas applicable en général. En effet, par suite de l'invariance d'échelle sous-jacente à cette forme, l'intégrand $e^{-f(x; \lambda)}$ ne se réduit pas localement à une Gaussienne dans la limite $\lambda \rightarrow \infty$. Par exemple,

si on considère un gaz de Fermi idéal à très basse température, les quantités thermodynamiques peuvent être réécrites comme des intégrales sur l'énergie E faisant intervenir la dérivée de la distribution de Fermi-Dirac. Cette distribution, qui est une fonction de βE avec $\beta = 1/(k_B T)$, présente un pic très prononcé au voisinage de l'énergie de Fermi quand $\beta \rightarrow \infty$. Cela dit, il n'est pas possible d'approximer ce pic par une Gaussienne. En fait, il faut dans ce cas procéder à un changement de variable de la forme $\beta E \rightarrow x$.

Extension au cas d'une pure phase

Considérons une fonction $f(x; \lambda)$ qui soit une pure phase $f(x; \lambda) = i\varphi(x; \lambda)$ avec φ réelle. L'intégrale $I(\lambda)$ est maintenant du type

$$I(\lambda) = \int_{\mathcal{D}} dx e^{-i\varphi(x; \lambda)} \quad (4.13)$$

et nous nous proposons à nouveau de déterminer sa forme asymptotique quand λ diverge, *modulo* certaines hypothèses couramment satisfaites par φ . Contrairement au cas précédent où f était réelle, l'intégrand garde ici un module constant égal à 1, et il oscille en général. Les estimations deviennent immédiatement beaucoup plus délicates, à cause des compensations entre contributions positives et négatives. Dans un premier temps, nous argumentons que le voisinage d'un point d'intégration arbitraire contribue peu par suite d'interférences destructives. Puis nous montrons que le voisinage d'un point où φ est extrémale devrait donner les contributions dominantes.

Interférences destructives au voisinage d'un point arbitraire. Considérons un point arbitraire x_a strictement à l'intérieur du domaine $\mathcal{D}$. Développons la phase $\varphi(x; \lambda)$ au voisinage du point x_a en série de Taylor,

$$\varphi(x; \lambda) = \varphi(x_a; \lambda) + k_a(\lambda)(x - x_a) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}(x_a; \lambda)(x - x_a)^2 + \dots \quad (4.14)$$

avec $k_a(\lambda) = (\partial\varphi/\partial x)(x_a; \lambda)$. Le nombre d'onde local k_a contrôle la longueur d'onde des oscillations au voisinage de x_a .

Supposons que k_a diverge quand $\lambda \rightarrow \infty$. À mesure que λ augmente, $e^{-i\varphi(x; \lambda)}$ oscille de plus en plus rapidement au voisinage de x_a . Dans l'intégration de ce facteur de phase sur un tel voisinage, il apparaît des interférences destructives, dont il résulte une contribution qui tend vers zéro dans la limite $\lambda \rightarrow \infty$. Ainsi, le voisinage considéré devrait peu apporter à l'intégrale $I(\lambda)$.

Contribution du voisinage d'un extremum de la phase. Si le point x_a coïncide avec un extremum de φ , $x_a = x_c(\lambda)$, le nombre d'onde k_a s'annule. La phase φ est alors stationnaire dans un voisinage de $x_c(\lambda)$. Autrement dit,

l'intégrant $e^{-i\varphi(x;\lambda)}$ reste maintenant sensiblement constant sur une échelle spatiale plus grande qu'au voisinage d'un point arbitraire avec $k_a \neq 0$. Les interférences sont donc *a priori* bien moins destructives que précédemment. Pour estimer la contribution correspondante du voisinage de $x_c(\lambda)$, nous remplaçons $\varphi(x; \lambda)$ par sa forme quadratique locale

$$\varphi(x_c(\lambda); \lambda) + \frac{1}{2} \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}(x_c(\lambda); \lambda) (x - x_c(\lambda))^2 ,$$

obtenue par troncation de la série de Taylor. En étendant le domaine $\mathcal{D}$ à $\mathbb{R}$, nous obtenons une intégrale gaussienne à covariance imaginaire pure, dont le calcul est détaillé dans l'annexe E, pages 318-320. Ceci conduit à la formule dite de la phase stationnaire pour la contribution du voisinage de l'extremum considéré à $I(\lambda)$:

Phase stationnaire : $I(\lambda) = \int_{\mathcal{D}} dx e^{-i\varphi(x;\lambda)}$

$$I_{sta}(\lambda) = \sqrt{2\pi} \left[i \frac{\partial^2 \varphi}{\partial x^2}(x_c(\lambda); \lambda) \right]^{-1/2} e^{-i\varphi(x_c(\lambda); \lambda)} \quad (4.15)$$

$x_c(\lambda)$ tel que : $\frac{\partial \varphi}{\partial x}(x_c(\lambda); \lambda) = 0.$

L'analyse directe des autres contributions à $I(\lambda)$, est bien plus difficile que dans le cas précédent où l'intégrant était réel et de signe constant. En particulier, notons qu'une estimation perturbative des déviations à la forme quadratique locale de φ , semblable à la série (4.6), fait apparaître des moments mal définis. La contribution des bords est également moins aisément accessible, alors que tous les extrema donnent *a priori* des contributions du même ordre que l'expression (4.15)! En fait, les intégrales (4.1) et (4.13) peuvent être étudiées par une méthode commune en passant dans le plan complexe, comme nous allons le montrer. Dans ce cadre unifié, on retrouve la formule de la phase stationnaire (4.15). Elle donne bien le comportement asymptotique de $I(\lambda)$ aux grands λ , sous des conditions d'application finalement analogues à celles de la formule du col (4.3).

4.1.2 Intégrale sur un chemin du plan complexe

Les méthodes du col réel et de la phase stationnaire sont des cas particuliers d'une méthode plus générale pour des intégrales dans le plan complexe, de la forme

$$I(\lambda) = \int_{\gamma} dz e^{-f(z;\lambda)}$$

(4.16)

où γ est un chemin de $\mathbb{C}$ reliant deux points. Ici, la fonction $f(z; \lambda)$ est analytique par rapport à la variable complexe z , dans une région incluant le

contour d'intégration. L'intégrale réelle (4.1) est bien une forme particulière de l'expression (4.16), avec un chemin γ qui se réduit au segment $[L_1, L_2]$, et une fonction f dont la restriction à ce segment est purement réelle. L'intégrale (4.13) sur un pur facteur de phase est une autre forme particulière, avec le même chemin γ et une fonction f devenant imaginaire pure sur $[L_1, L_2]$.

Le but est toujours d'évaluer $I(\lambda)$ lorsque $\lambda \rightarrow \infty$, en supposant que la fonction $f(z; \lambda)$ présente alors de très grandes variations quand z parcourt le chemin d'intégration γ . Dans ce qui suit, nous distinguons bien la démonstration de la formule du col et l'utilisation pratique de cette formule. Pour ce dernier aspect, nous faisons une analogie avec le théorème des résidus. Enfin, nous terminons ce paragraphe en vérifiant que les expressions (4.3) et (4.15) sont bien des formes particulières de la méthode du col complexe.

Démonstration de la formule du col

Déformation du chemin γ originel. Avant de se demander à quoi correspond un point col² z_c dans le cas complexe, commençons par une remarque simple. Imaginons que la fonction f à intégrer ait un tel point col z_c mais que z_c ne soit pas sur le chemin d'intégration γ . Supposons alors que le domaine d'analyticité de f soit suffisamment vaste, de sorte à inclure non seulement le chemin γ , mais également le point z_c . Alors, l'application du théorème de Cauchy permet de réécrire exactement $I(\lambda)$ comme

$$I(\lambda) = \int_{\gamma_c} dz e^{-f(z; \lambda)}, \quad (4.17)$$

où γ_c est un chemin, déformé à partir de γ et passant par le point z_c considéré (voir figure 4.2). Nous précisons plus loin comment choisir ce chemin. Avant cela, nous allons discuter les caractéristiques du point col z_c .

Point selle. Par rapport au cas où l'intégration porte sur une variable réelle, une question à se poser est en effet : quel est l'analogue du point col x_c ? Pour répondre à cette question, appelons $P(x, y; \lambda)$ et $Q(x, y; \lambda)$ les parties réelle et imaginaire respectives de $f(z; \lambda)$, i.e. :

$$f(z; \lambda) = P(x, y; \lambda) + iQ(x, y; \lambda) \quad \text{avec } z = x + iy.$$

Compte tenu des analyses menées précédemment, il semblerait naturel de dire que l'analogue de x_c est un point $z_c = x_c + iy_c$ où P est minimale tandis que Q est extrémale. Cela nécessite en particulier que les dérivées premières partielles de ces fonctions soient nulles, et donc que

$$\frac{\partial f}{\partial z}(z_c; \lambda) = 0.$$

2. Nous écrivons temporairement z_c au lieu de $z_c(\lambda)$.

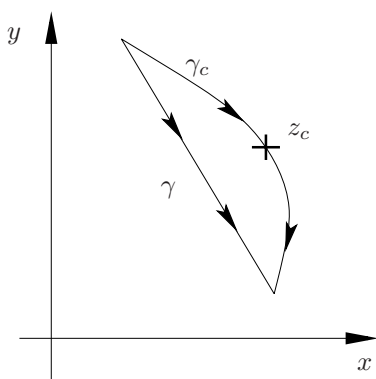


FIG. 4.2 – Le contour d'intégration original γ est déformé en γ_c pour passer par le point col z_c . Le choix précis de γ_c est précisé plus loin.

Or, la fonction $f(z; \lambda)$ est analytique dans une région incluant le contour d'intégration. Comme rappelé dans l'annexe A, page 301, les fonctions P et Q sont alors harmoniques. En conséquence, la fonction P n'a pas de minimum local, comme le montre la nullité de son Laplacien,

$$\frac{\partial^2 P}{\partial x^2} + \frac{\partial^2 P}{\partial y^2} = 0.$$

Comment continuer alors le raisonnement ? Supposons, pour fixer les idées, que $(\partial^2 P / \partial x^2) < 0$ en z_c . Il vient alors $(\partial^2 P / \partial y^2) > 0$ en z_c . Autrement dit, si z_c correspond à un maximum de P dans la direction x , il correspond alors à un minimum de P dans la direction y . En fait, nous sommes ici simplement en train de rappeler que l'allure de la fonction harmonique P autour du point z_c est en forme de selle de cheval. Nous avons représenté sur la figure 4.3 l'allure correspondante pour e^{-P} .

Chemin de descente la plus raide. À ce niveau du raisonnement, une idée naturelle est alors de faire en sorte que le chemin déformé γ_c corresponde, au voisinage de z_c , au chemin de descente la plus raide sur la selle de cheval correspondant à e^{-P} . Notons, pour éviter toute ambiguïté, que le terme « descente » réfère à la situation vue depuis le point z_c . Un tel choix garantirait en effet que les variations de e^{-P} autour du point col z_c soient les plus fortes et donc que la contribution dominante de l'intégrale vienne bien de z_c . Cependant, nous ne nous sommes pas préoccupés jusqu'à présent de la partie en e^{-iQ} de e^{-f} , qui pourrait mettre à mal ce raisonnement en engendrant des interférences destructives autour du point z_c . Grâce aux propriétés d'analyticité de $f(z; \lambda)$, cela n'est pas le cas. Au contraire, le chemin de descente la

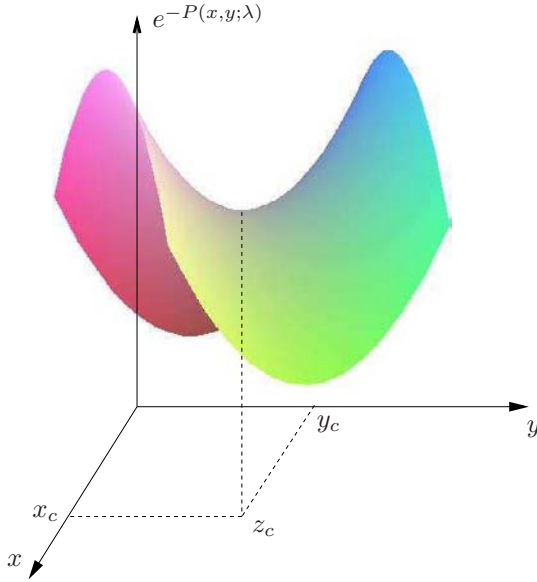


FIG. 4.3 – L'allure de la fonction $e^{-P(x,y;\lambda)}$ autour du point z_c est celle d'une selle de cheval.

plus raide correspond en fait à un des deux chemins où la partie imaginaire Q varie le moins au voisinage de z_c !

Pour se convaincre de cette propriété, prenons pour le chemin γ_c au voisinage de z_c la droite d'équation

$$z - z_c = \pm \rho e^{i\alpha} \quad (4.18)$$

où α est l'angle de cette droite avec l'axe des x (voir figure 4.4) et où les deux signes correspondent aux deux parties du chemin de part et d'autre de z_c . Écrivons aussi

$$\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}(z_c; \lambda) = \left| \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}(z_c; \lambda) \right| e^{i\theta}. \quad (4.19)$$

Comme la dérivée première de f s'annule en z_c , nous avons, au voisinage de z_c :

$$f(z; \lambda) - f(z_c; \lambda) \simeq \frac{1}{2} \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}(z_c; \lambda) (z - z_c)^2. \quad (4.20)$$

Rappelons que, dans la limite $\lambda \rightarrow \infty$, $\left| \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}(z_c; \lambda) \right|$ est supposée être grand. Le développement (4.20) de f et la paramétrisation (4.18) donnent pour P et Q :

$$P(x, y; \lambda) - P(x_c, y_c; \lambda) \simeq \frac{1}{2} \rho^2 \left| \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}(z_c; \lambda) \right| \cos(\theta + 2\alpha)$$

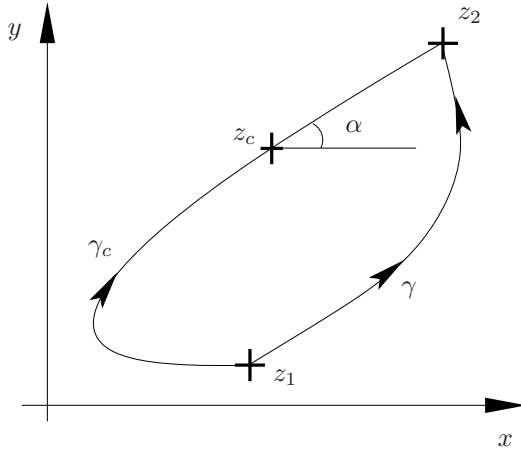


FIG. 4.4 – Représentation du contour initial γ et du contour déformé γ_c passant par le point col. Au voisinage du point z_c , le contour déformé γ_c a la forme d'une droite faisant un angle α avec l'axe des x .

et

$$Q(x, y; \lambda) - Q(x_c, y_c; \lambda) \simeq \frac{1}{2} \rho^2 \left| \frac{\partial^2 f}{\partial z^2}(z_c; \lambda) \right| \sin(\theta + 2\alpha). \quad (4.21)$$

Le chemin de descente la plus raide correspond à prendre $\cos(\theta + 2\alpha)$ positif, et maximal, soit $\theta + 2\alpha = 2\pi n$ avec n entier. Mais dans ce cas, $\sin(\theta + 2\alpha)$ s'annule, et l'équation (4.21) montre alors que les variations de la partie imaginaire Q de f autour de z_c sont très faibles, de l'ordre de $O(\rho^3)$. En résumé, le chemin de descente la plus raide correspond à

$$\alpha = -\frac{\theta}{2} + n\pi, \quad (4.22)$$

ou encore à $e^{i\alpha} = \pm e^{-i\theta/2}$. Les deux signes possibles correspondent bien sûr aux deux parties du chemin de part et d'autre de z_c . La situation est résumée sur la figure 4.5.

Formule du col complexe. Comme

$$dz = d\rho e^{i\alpha} = \pm d\rho e^{-i\frac{\theta}{2}}$$

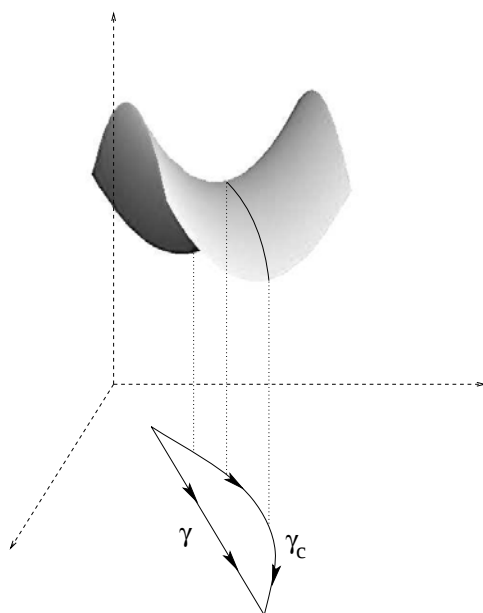


FIG. 4.5 – Représentation de la fonction $\exp[-P(x, y : \lambda)]$ en fonction de x et y . Au voisinage de z_c , le chemin γ_c correspond au chemin de descente la plus raide.

pour chaque partie du chemin, on obtient à partir du développement (4.19), et du choix (4.22) :

$$I(\lambda) \simeq 2e^{-f(z_c(\lambda); \lambda)} e^{-i\frac{\theta}{2}} \int_0^\infty d\rho \exp\left[-\frac{1}{2}\rho^2 \left|\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}(z_c(\lambda); \lambda)\right|\right] \quad (4.23)$$

$$\simeq e^{-f(z_c(\lambda); \lambda)} e^{-i\frac{\theta}{2}} \sqrt{2\pi} \left|\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}(z_c(\lambda); \lambda)\right|^{-1/2}, \quad (4.24)$$

où nous avons étendu l'intégration à toute la droite (4.18), similairement au cas de l'intégrale réelle, page 248. Remarquons que l'expression (4.23) est un moyen simple de comprendre le choix du chemin de descente la plus raide puisqu'avec un tel choix, l'argument de l'exponentielle est purement réel. C'est d'ailleurs cette même stratégie qui est rappelée dans l'annexe E pour le calcul de certaines intégrales gaussiennes.

Nous pouvons exprimer le préfacteur dans la formule (4.24) en fonction de la seule dérivée seconde de f en $z_c(\lambda)$. Pour cela, il faut introduire la fonction analytique $Z^{-1/2}$ de la variable complexe Z . Pour la définir univoquement, nous choisissons la détermination

$$Z^{-1/2} = e^{-i \arg Z/2} / \sqrt{|Z|} \quad (4.25)$$

qui assure que pour Z réel positif, $Z^{-1/2}$ est réelle positive. Bien sûr, il faut également introduire une coupure partant de $Z = 0$ qui est un point singulier.

Celle-ci est choisie ici suivant le demi-axe réel négatif. Avec ce choix de détermination, et compte tenu de la relation (4.19), la formule (4.24) devient

$$\begin{aligned} \textbf{Formule Col complexe : } I(\lambda) &= \int_{\gamma} dz \, e^{-f(z;\lambda)} \\ I_{col}(\lambda) &= \sqrt{2\pi} \left[\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}(z_c(\lambda); \lambda) \right]^{-1/2} e^{-f(z_c(\lambda);\lambda)} \\ z_c(\lambda) \quad \text{tel que : } \frac{\partial f}{\partial z}(z_c(\lambda); \lambda) &= 0. \end{aligned} \quad (4.26)$$

Validité de la formule asymptotique. L'estimation des corrections à la formule du col (4.26) peut être menée en étendant l'analyse introduite dans la section précédente pour l'intégrale réelle (4.1). En particulier, les contributions des fluctuations non gaussiennes au voisinage du col sont négligeables sous des conditions analogues, à savoir

$$\textbf{Validité de la formule du col (4.26) :} \quad (4.27)$$

$$\forall p \geq 3, \quad \frac{\partial^p f}{\partial z^p}(z_c(\lambda); \lambda) \left[\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}(z_c(\lambda); \lambda) \right]^{-p/2} \rightarrow 0 \text{ quand } \lambda \rightarrow \infty .$$

Dans la pratique, ces conditions sont souvent suffisantes pour assurer que la formule (4.26) est bien la forme asymptotique de $I(\lambda)$ quand $\lambda \rightarrow \infty$.

Utilisation pratique et extension

Dans la pratique, la formule du col complexe s'utilise en quelque sorte de manière analogue au théorème des résidus avec la différence suivante. Pour le théorème des résidus, le chemin originel γ est déformé pour contourner un pôle simple. Dans le cas de la formule du col complexe, le chemin γ est déformé pour passer par le point selle en évitant toute singularité! Concrètement, il suffit donc de s'assurer que cette déformation du chemin γ est bien possible, puis d'appliquer simplement la formule (4.26).

La formule du point selle s'étend aux intégrales de la forme

$$I(\lambda) = \int_{\gamma} dz \, \ell(z) e^{-f(z;\lambda)} \quad (4.28)$$

où $\ell(z)$ est une fonction variant lentement. Dans ce cas, sous les hypothèses (4.27), nous avons

$$I(\lambda) \simeq \ell(z_c) \sqrt{2\pi} \left[\frac{\partial^2 f}{\partial z^2}(z_c(\lambda); \lambda) \right]^{-1/2} e^{-f(z_c(\lambda);\lambda)}. \quad (4.29)$$

Retour sur l'axe réel

Revenons au cas de l'intégrale simple (4.1) définie originellement par un chemin γ se réduisant à un segment de l'axe réel. Dans ce cas, la partie imaginaire Q de f est identiquement nulle sur γ . Un des points col complexes z_c est alors simplement le point $z_c(\lambda) = x_c(\lambda)$ sur l'axe réel minimisant f sur l'axe réel. De plus, la ligne de plus grande pente dans la structure selle de cheval de e^{-P} n'est autre que l'axe réel lui-même. Le chemin γ_c est alors confondu avec γ , et comme $(\partial^2 f / \partial z^2)(z_c(\lambda); \lambda) = (\partial^2 f / \partial x^2)(x_c(\lambda); \lambda)$, la formule complexe (4.26) coïncide avec la formule réelle (4.3), comme il se doit !

Enfin, dans le cas de l'intégrale (4.13), p. 253, portant sur un pur facteur de phase, il est de nouveau possible de choisir le point col $z_c(\lambda)$ sur l'axe réel, confondu avec le point $x_c(\lambda)$ extrémisant la phase. Par contre, la ligne de plus grande pente n'est plus alors sur l'axe réel. En effet, comme

$$(\partial^2 f / \partial z^2)(z_c(\lambda); \lambda) = i(\partial^2 \varphi / \partial x^2)(x_c(\lambda); \lambda),$$

les équations (4.19) et (4.22) montrent que cette ligne fait un angle de $\pi/4$ avec l'axe réel, comme représenté sur la figure 4.6. Ainsi, le chemin γ_c est différent de γ . La formule du col complexe (4.26) redonne alors la formule de

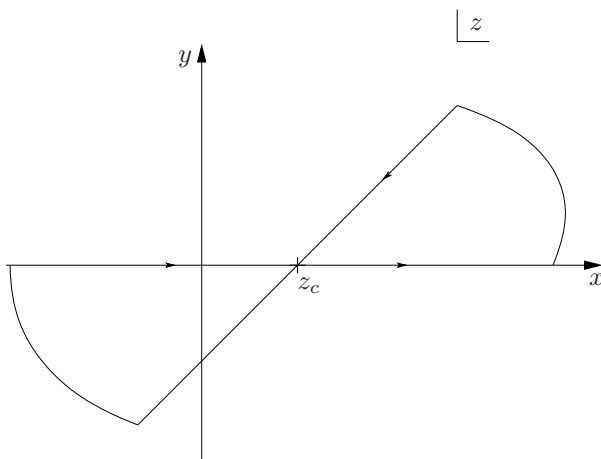


FIG. 4.6 – Pour l'intégrale (4.13), le chemin de pente la plus raide fait un angle de $\pi/4$ avec le chemin originel, qui est l'axe réel. Remarquons que c'est exactement cette déformation du contour qui est utilisée pour le calcul du cas gaussien, rappelé dans l'annexe E, p. 318.

la phase stationnaire (4.15), p. 254. Soulignons que la méthode de déformation dans le plan complexe permet d'estimer les corrections à cette formule, et d'en justifier ainsi le caractère asymptotique de manière convaincante.

4.1.3 Cas d'une intégrale multiple

Dans cette section, nous considérons d'abord une intégrale sur d variables réelles, le domaine d'intégration $\mathcal{D}$ étant inclus dans $\mathbb{R}^d$. Nous passons ensuite au cas d'une intégrale fonctionnelle portant sur un nombre infini de variables d'intégration. Pour ces deux situations, nous montrons que la formule du col, établie pour une intégrale simple, est aisément généralisable, tout du moins sur un plan formel. En effet, sa mise en œuvre devient plus difficile que dans la cas unidimensionnel, car elle requiert des diagonalisations de matrice $d \times d$ en dimension finie, ou la détermination du spectre d'un opérateur pour une intégrale fonctionnelle. Similairement, l'examen de son caractère asymptotique devient beaucoup plus difficile encore et nous n'entrerons pas dans une discussion générale de cette problématique.

Nombre fini de variables

Soit d variables réelles, notées collectivement $\mathbf{x} = (x_1, \dots, x_d)$, et $f(\mathbf{x}; \lambda)$ une fonction réelle de ces variables et d'un paramètre de contrôle λ . Nous considérons l'intégrale

$$I(\lambda) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{x} \, e^{-f(\mathbf{x}; \lambda)}, \quad (4.30)$$

avec la notation $d\mathbf{x} = \prod_{i=1}^d dx_i$. Supposons que $f(\mathbf{x}; \lambda)$ ait un minimum absolu³ au point col $\mathbf{x} = \mathbf{x}_c(\lambda)$ situé à l'intérieur du domaine $\mathcal{D}$. Si ce minimum devient de plus en plus étroit et marqué quand $\lambda \rightarrow \infty$, alors il est raisonnable de remplacer l'intégrand $e^{-f(\mathbf{x}; \lambda)}$ par sa forme gaussienne locale au voisinage du point col $\mathbf{x}_c(\lambda)$, tout en étendant le domaine d'intégration à tout l'espace $\mathbb{R}^d$. Cette approximation est l'extension évidente, à d dimensions, de la méthode du col pour une intégrale simple. Sa forme spécifique est établie ci-dessous.

Approximation gaussienne locale. Procédons au développement de Taylor de $f(\mathbf{x}; \lambda)$ au voisinage de $\mathbf{x}_c(\lambda)$. Il vient

$$f(\mathbf{x}; \lambda) = f(\mathbf{x}_c(\lambda); \lambda) + \frac{1}{2}(\mathbf{x} - \mathbf{x}_c(\lambda))^T \cdot C(\lambda) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c(\lambda)) + \dots, \quad (4.31)$$

où $C(\lambda)$ est la matrice symétrique $d \times d$ ayant pour éléments

$$C_{ij}(\lambda) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}_c(\lambda); \lambda).$$

3. La fonction $f(\mathbf{x}; \lambda)$ peut avoir d'autres minima secondaires. Cette situation sera en général de plus en plus fréquente quand la dimension d augmente.

Dans l'expression (4.31), nous avons utilisé la notation générique

$$\mathbf{u}^T \cdot M \cdot \mathbf{v} = \sum_{ij} u_i M_{ij} v_j, \quad (4.32)$$

pour deux vecteurs $\mathbf{u}$ et $\mathbf{v}$ de $\mathbb{R}^d$, M étant une matrice $d \times d$ et A^T désignant la transposée de la matrice A . En ne conservant que les termes quadratiques dans la série de Taylor (4.31) et en remplaçant $\mathcal{D}$ par $\mathbb{R}^d$, nous obtenons, pour l'intégrale $I(\lambda)$, la forme gaussienne

$$I_{col}(\lambda) = e^{-F_c(\lambda)} \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{x} \exp \left[-\frac{1}{2} (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c(\lambda))^T \cdot C(\lambda) \cdot (\mathbf{x} - \mathbf{x}_c(\lambda)) \right], \quad (4.33)$$

avec $F_c(\lambda) = f(\mathbf{x}_c(\lambda); \lambda)$.

Il reste donc à calculer l'intégrale multiple d'une gaussienne. Ce calcul est rappelé, de manière générale, dans l'annexe E, page 320. Le résultat est

$$\begin{aligned} \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2} \mathbf{x}^T \cdot C(\lambda) \cdot \mathbf{x}} \\ = \sqrt{\frac{(2\pi)^d}{\text{Det}(C(\lambda))}}. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Nous renvoyons le lecteur à l'annexe E pour les détails[✱].

✱ Commentaire 4.1.2. Indiquons cependant brièvement ici que l'apparition du déterminant de $C(\lambda)$ se comprend bien dans le cas où la matrice $C(\lambda)$ est diagonale,

$$C(\lambda) = \begin{pmatrix} \mu_1(\lambda) & & \\ & \mu_2(\lambda) & \\ & & \ddots \\ & & & \mu_d(\lambda) \end{pmatrix}.$$

Dans ce cas, l'intégrale multiple se factorise. L'intégrale sur la composante x_i de $\mathbf{x}$ donne $\sqrt{2\pi/\mu_i(\lambda)}$. Le produit de ces termes donne bien le résultat (4.34).

Notons que $\text{Det } C(\lambda) > 0$. En effet, ces d valeurs propres $\mu_1(\lambda), \dots, \mu_d(\lambda)$ sont nécessairement réelles, et strictement positives car $C(\lambda)$ est une matrice symétrique réelle et $\mathbf{x}_c(\lambda)$ est un minimum de f . Nous avons donc le résultat :

Formule du col pour : $I(\lambda) = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{x} e^{-f(\mathbf{x}; \lambda)},$

$$I_{col}(\lambda) = e^{-F_c(\lambda)} \sqrt{\frac{(2\pi)^d}{\text{Det}(C(\lambda))}}. \quad (4.35)$$

$$F_c(\lambda) = f(\mathbf{x}_c(\lambda); \lambda) \quad \text{et} \quad C_{ij}(\lambda) = \frac{\partial^2 f}{\partial x_i \partial x_j}(\mathbf{x}_c(\lambda); \lambda).$$

En ce qui concerne le caractère asymptotique de la formule (4.35), il faut vérifier que les termes d'ordre supérieur à deux dans la série de Taylor (4.31)

donnent une contribution qui tend vers 0 pour $\lambda \rightarrow \infty$. Similairement au cas d'une seule variable réelle, cette condition est réalisée si

Validité de la formule du col (4.35) :

$$\forall q \geq 3 \quad \text{avec} \quad q = \sum_{i=1}^p q_i, \quad (4.36)$$

$$\frac{1}{\sqrt{\mu_{i_1}^{q_1}(\lambda) \dots \mu_{i_p}^{q_p}(\lambda)}} \frac{\partial^q f}{\partial x_{i_1}^{q_1} \dots \partial x_{i_p}^{q_p}}(\mathbf{x}_c(\lambda); \lambda) \rightarrow 0 \quad \text{quand} \quad \lambda \rightarrow \infty.$$

Dans cette condition, $\mu_{i_1}(\lambda), \dots, \mu_{i_p}(\lambda)$ correspond à une sélection arbitraire de p valeurs propres de la matrice $C(\lambda)$. Elle est analogue à la condition (4.9), p. 251. Comme dans le cas d'une intégrale simple, la condition (4.36) est automatiquement vérifiée pour f de la forme $f(\mathbf{x}; \lambda) = \lambda g(\mathbf{x})$.

Nombre infini de variables et passage à l'intégrale fonctionnelle

Dans certaines conditions, lorsque le nombre de variables d'intégration devient infini, l'intégrale multiple devient une intégrale fonctionnelle. Dans un premier temps, nous décrivons, succinctement, comment cette intégrale est construite à partir d'un processus de limite adéquat. Puis, nous établissons la formule du col correspondante.

Construction de l'intégrale fonctionnelle. Le processus de limite en jeu prend la forme générique suivante. Partons d'une intégrale multiple de la forme (4.30), dans un espace à $d = N$ dimensions. Notons dorénavant ϕ_i la i ème variable avec i décrivant l'ensemble $[1, \dots, N]$, ϕ_i étant supposée réelle pour fixer les idées. Généralement, dans la plupart des situations physiques rencontrées, à l'indice i est associé un paramètre noté $\zeta(i, N)$ qui dépend aussi du nombre total de variables N . Ce paramètre peut être, par exemple, une position, comme dans la représentation d'Hubbard-Stratanovitch du modèle d'Ising, ou bien un temps fictif, comme dans la représentation par une intégrale de chemin du propagateur thermique, ces représentations étant décrites dans les exemples de la seconde partie.

À ce niveau, la variable ϕ_i peut être vue comme un champ $\phi(\zeta)$ dépendant du paramètre ζ qui prend des valeurs discrètes pour N fini. Si l'ensemble des valeurs $\zeta(i, N)$ devient dense dans un certain domaine Ω quand $N \rightarrow \infty$, alors une configuration $\{\phi_i, i = 1, \dots, N\}$ engendre un champ continu noté $\phi(\cdot) = \phi(\zeta)$ où ζ parcourt Ω . Le volume élémentaire dans l'espace d'intégration initial à N fini, définit alors la mesure $d[\phi(\cdot)]$ d'une intégrale fonctionnelle sur l'espace des champs $\phi(\cdot)$, i.e. :

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^N d\phi_i = d[\phi(\cdot)] . \quad (4.37)$$

Dans cette limite $N \rightarrow \infty$, la fonction des N variables $f(\phi_1, \phi_2, \dots, \phi_N; \lambda)$ définit elle une fonctionnelle, souvent notée⁴ $S_\lambda[\phi(\cdot)]$. Ce processus de limite à partir de l'intégrale multiple initiale, conduit donc à introduire l'intégrale fonctionnelle

$$I(\lambda) = \int d[\phi(\cdot)] \exp\{-S_\lambda[\phi(\cdot)]\}. \quad (4.38)$$

Dans la présentation ci-dessus, nous avons délibérément omis toutes les difficultés mathématiques qui apparaissent dans le processus de limite $N \rightarrow \infty$. Dans certains cas, comme celui de la représentation de Feynman-Kac de la matrice densité en mécanique statistique, ce processus peut être contrôlé de manière rigoureuse⁵. Dans la suite nous admettons que l'intégrale fonctionnelle (4.38) est bien définie.

Formule du col fonctionnelle. Comme dans le cas discret, il peut apparaître un pic très étroit dans l'intégrand de (4.38) quand $\lambda \rightarrow \infty$. Ce pic est obtenu pour un champ $\phi_c(\cdot)$ qui extrémalise $S_\lambda[\phi(\cdot)]$, ce qui signifie que la dérivée fonctionnelle⁶ de $S_\lambda[\phi(\cdot)]$ évaluée en $\phi_c(\cdot)$ est nulle, c'est-à-dire

$$\frac{\delta S_\lambda[\phi(\cdot)]}{\delta \phi(\zeta)}[\phi_c(\cdot)] = 0 \quad \forall \zeta \in \Omega. \quad (4.39)$$

Il est alors légitime de développer $S_\lambda[\phi(\cdot)]$ au second ordre en $(\phi - \phi_c)$, ce qui donne l'expression gaussienne approchée

$$I_{col}(\lambda) = e^{-S_\lambda[\phi_c(\cdot)]} \int d[\phi(\cdot)] \exp\left\{-\frac{1}{2} \int_{\Omega^2} d\zeta_1 d\zeta_2 [\phi(\zeta_1) - \phi_c(\zeta_1)] \right. \\ \left. \times C_\lambda(\zeta_1, \zeta_2) [\phi(\zeta_2) - \phi_c(\zeta_2)]\right\}. \quad (4.40)$$

Dans l'intégrale fonctionnelle gaussienne (4.40), la covariance $C_\lambda(\zeta_1, \zeta_2)$ est définie par

$$C_\lambda(\zeta_1, \zeta_2) = \frac{\delta^2 S_\lambda}{\delta \phi(\zeta_1) \delta \phi(\zeta_2)}[\phi_c(\cdot)]. \quad (4.41)$$

Formellement, cette intégrale gaussienne s'exprime en termes des valeurs propres $\mu_\lambda(\nu)$ de l'opérateur C_λ où ν est un paramètre spectral⁷ qui caractérise la valeur propre considérée. Ces valeurs propres sont réelles par suite du caractère hermitien de C_λ . De plus, la condition de minimum de S au col implique qu'elles sont aussi toutes positives. En introduisant la densité de fonctions propres $g_\lambda(\nu)$, et en généralisant le résultat (E.11), p. 321, valable

4. La notation S est issue de la théorie des champs, où cette quantité représente alors l'action.

5. Voir le livre [Simon] pour une présentation détaillée de cette démonstration.

6. L'appendice H contient des rappels sur la dérivée fonctionnelle.

pour une intégrale gaussienne multiple, la forme col (4.40) de $I(\lambda)$ se réduit alors à :

$$\text{Formule du col pour } I(\lambda) = \int d[\phi(\cdot)] \exp\{-S_\lambda[\phi(\cdot)]\} \\ I_{col}(\lambda) = e^{-S_\lambda[\phi_c(\cdot)]} \exp\left\{\frac{1}{2} \int d\nu g_\lambda(\nu) \ln[2\pi/\mu_\lambda(\nu)]\right\}. \quad (4.42)$$

✎ **Commentaire 4.1.3.** Le paramètre spectral ν permet d'indexer les valeurs propres dans la partie continue du spectre d'un opérateur donné. En quelque sorte, il est l'équivalent de l'indice i pour les valeurs propres discrètes μ_i de la matrice $C(\lambda)$ en dimension finie d . Par exemple, les valeurs propres de l'opérateur $-\lambda\Delta$ dans un segment de longueur L avec des conditions de Dirichlet homogènes, sont de la forme $\mu_\lambda(k) = \lambda k^2$, avec $k = p\pi/L$ et $p > 0$. Dans la limite $L \rightarrow \infty$, le nombre d'onde k peut être vu comme un paramètre spectral prenant des valeurs continues réelles et positives. En posant ici $\nu = k$, la densité de fonctions propres correspondante devient $g_\lambda(\nu) = (L/\pi)$, et le domaine d'intégration sur ν est $[0, +\infty]$.

Similairement au cas d'une intégrale simple ou multiple, dans la forme col (4.42), la contribution du col lui-même $\exp(-S_\lambda[\phi_c(\cdot)])$ est multipliée par la contribution de la région proche de celui-ci. Dans la pratique, la détermination des valeurs propres $\mu_\lambda(\nu)$ est naturellement un problème très difficile en général, de sorte que l'expression (4.42) reste souvent d'exploitation peu aisée. Dans certains cas, les valeurs propres sont calculables simplement, ou bien leur produit s'exprime, de manière compacte et tractable⁷, en termes de quantités spécifiques au champ col ϕ_c . L'analyse des corrections à l'approximation du col est tout aussi complexe. Dans cet esprit, notons que l'immense étendue du domaine d'intégration, typiquement l'ensemble de toutes les fonctions continues $\phi(\zeta)$, induit bien sûr une grande richesse dans le paysage représentant $\exp(-S_\lambda[\phi(\cdot)])$. En particulier, de nombreux autres minima locaux peuvent exister, et il faut aussi contrôler leurs contributions quand λ tend vers l'infini.

7. Une telle simplification intervient dans l'approximation semi-classique pour le propagateur thermique, traitée en exemple dans la partie suivante de ce chapitre.

4.2 Applications et exemples

4.2.1 Formule de Stirling et facteur d'indiscernabilité

Présentation

La notion d'indiscernabilité joue un rôle crucial en mécanique statistique, dans la levée du paradoxe de Gibbs, ou bien à travers les effets spectaculaires liés à la nature bosonique ou fermionique des particules. Cette importance est déjà mise en évidence dans le cas simple d'un gaz parfait classique en statistique de Maxwell-Boltzmann. La fonction de partition canonique de ce gaz s'écrit

$$Z_{GP}(N, V, T) = \frac{1}{N!} \int_{V^N \otimes \mathbb{R}^{3N}} \prod_{i=1}^N \left[\frac{d\mathbf{r}_i d\mathbf{p}_i}{(2\pi\hbar)^3} \right] \exp[-\beta \sum_{i=1}^N \frac{\mathbf{p}_i^2}{2m}] \quad (4.43)$$

pour N particules identiques de masse m , contenues dans un volume V , à la température T , avec $\beta = 1/(k_B T)$ et k_B la constante de Boltzmann. Dans cette expression, le préfacteur $1/N!$ a pour origine l'indiscernabilité des particules : il permet de compter une seule fois toutes les configurations microscopiques qui diffèrent seulement par une permutation des coordonnées des particules. L'intégration sur les positions $\mathbf{r}_i$ des particules est immédiate, alors que celle sur leurs impulsions $\mathbf{p}_i$, purement gaussienne, s'exprime facilement en appliquant le résultat (E.1), p. 317, de l'annexe E. On trouve alors la formule bien connue

$$Z_{GP}(N, V, T) = \frac{1}{N!} \left(\frac{V}{\lambda_D^3} \right)^N \quad (4.44)$$

où $\lambda_D = (h/\sqrt{2\pi m k_B T})$ est la longueur d'onde thermique de de Broglie. La problématique de l'extensivité de l'énergie libre

$$F_{GP}(N, V, T) = -k_B T \ln Z_{GP}(N, V, T)$$

se ramène alors à l'étude du comportement asymptotique de $N!$ quand $N \rightarrow \infty$.

Introduisons la fonction d'Euler Γ , qui est telle que $\Gamma(N+1) = N!$. Le comportement asymptotique cherché peut être simplement obtenu en partant de la représentation intégrale

$$\Gamma(\lambda+1) = \int_0^\infty dx e^{-x} x^\lambda, \quad (4.45)$$

qui est de la forme générique (4.1), page 247, avec

$$I(\lambda) = \Gamma(\lambda+1), \quad \mathcal{D} = [0, \infty] \quad \text{et} \quad f(x; \lambda) = x - \lambda \ln x.$$

Il suffit donc d'appliquer la méthode du col à l'intégrale (4.45).

Étude et résolution

Nous déterminons d'abord le col et ses caractéristiques, ce qui conduit à la célèbre formule de Stirling. Puis, nous calculons les premières corrections à cette formule.

Formule de Stirling. La fonction f admet un seul minimum en $x_c(\lambda) = \lambda$ car

$$\frac{\partial f}{\partial x} = 1 - \frac{\lambda}{x} \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial x^2}(x_c(\lambda); \lambda) = \frac{1}{\lambda} > 0.$$

Ce minimum appartient bien par ailleurs au domaine d'intégration $\mathcal{D}$. La formule générale du col (4.3), p. 249, se réduit donc ici à

$$\boxed{\Gamma_{\text{col}}(\lambda + 1) = \lambda^\lambda e^{-\lambda} \sqrt{2\pi\lambda}} \quad (4.46)$$

qui n'est autre que la formule de Stirling !

Examinons maintenant les conditions de validité (4.9). Nous trouvons

$$\sigma(\lambda) = \sqrt{\lambda} \quad \text{tandis que} \quad \frac{\partial^p f}{\partial x^p}(x_c(\lambda); \lambda) = \frac{(-1)^p (p-1)!}{\lambda^{p-1}}$$

pour $p \geq 2$, ce qui implique

$$[\sigma(\lambda)]^p \frac{\partial^p f}{\partial x^p}(x_c(\lambda); \lambda) = O\left(\frac{1}{\lambda^{p/2-1}}\right).$$

Au voisinage du bord inférieur $x = 0$ du domaine d'intégration $\mathcal{D}$, $\exp(-f(x; \lambda))$ est par ailleurs exponentiellement faible devant $\exp(-f(x_c(\lambda); \lambda))$. Ces considérations justifient la validité asymptotique de la formule de Stirling (4.46) quand $\lambda \rightarrow \infty$.

Avant d'examiner les corrections à la formule de Stirling, arrêtons-nous quelques instants pour remarquer que la largeur $\sigma(\lambda)$ du pic diverge quand $\lambda \rightarrow \infty$. Cela peut paraître surprenant au premier abord, et le lecteur peut se demander si le pic est bien étroit. En fait, comme $x_c(\lambda) = \lambda$ diverge aussi, il faut rapporter la largeur du pic à la valeur de $x_c(\lambda)$, comme indiqué sur la figure 4.7. L'image intuitive du pic étroit coïncide alors avec les conditions de validité vérifiées ci-dessus.

Corrections à la formule de Stirling. D'après la remarque précédente sur la contribution du bord $x = 0$, les corrections principales à la formule de Stirling proviennent des déviations à la Gaussienne. La première correction est ainsi calculée en suivant la méthode donnée page 250, avec le résultat

$$\Gamma(\lambda + 1) = \lambda^\lambda e^{-\lambda} \sqrt{2\pi\lambda} \left[1 + \frac{1}{12\lambda} + O\left(\frac{1}{\lambda^2}\right) \right]. \quad (4.47)$$

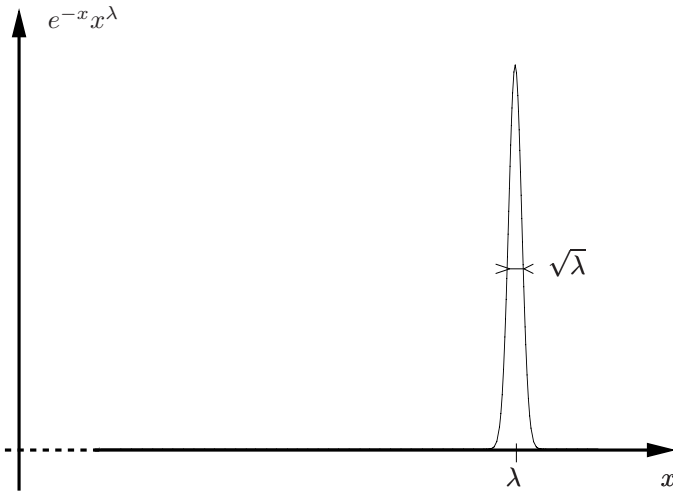


FIG. 4.7 – La largeur $\sigma(\lambda) = \sqrt{\lambda}$ du pic de la fonction $e^{-x}x^{\lambda}$ diverge lorsque $\lambda \rightarrow \infty$. Cependant, cette largeur est faible par rapport à $x_c(\lambda) = \lambda$, et donc cette fonction présente bien un pic de plus en plus étroit autour de son maximum lorsque $\lambda \rightarrow \infty$.

Si, sur un plan mathématique, les formules obtenues sont asymptotiquement valables dans la limite des très grands λ seulement, il se trouve qu’elles sont déjà remarquablement précises pour des valeurs inférieures à 5 comme indiqué dans le tableau 4.1.

N	$N!$	Stirling	Stirling + correction
2	2	1,919	1,999
3	6	5,84	5,99
4	24	23,51	23,99
5	120	118,02	119,99

TAB. 4.1 – Sur ce tableau sont indiquées pour chaque entier N de 2 à 5, les valeurs correspondant à $N!$, la formule de Stirling (4.46), et la formule de Stirling avec correction (4.47).

Interprétation

L'analyse précédente permet d'étudier le comportement de l'énergie libre à la limite thermodynamique (LT) définie par $N, V \rightarrow \infty$ à densité $\rho = N/V$ et température T fixées. En substituant $N!$ par le développement asymptotique (4.47) appliqué à $\lambda = N$, il vient :

$$\beta \frac{F_{GP}}{N} = \ln(\rho \lambda_D^3) - 1 + \frac{\ln(2\pi N)}{2N} + \frac{1}{12N^2} + O(1/N^3) \quad (4.48)$$

à la limite thermodynamique. L'énergie libre par particule tend donc vers la valeur intensive

$$k_B T [\ln(\rho \lambda_D^3) - 1] \quad (4.49)$$

dépendant uniquement de la densité et de la température. La présence du facteur d'indiscernabilité ($1/N!$) dans le comptage des états microscopiques différents, garantit donc bien cette propriété fondamentale, à la base de la thermodynamique macroscopique.

Effets de taille finie. Au-delà de son intérêt pour la notion d'extensivité elle-même, le développement asymptotique (4.48) conduit également à une estimation de l'importance des effets de taille finie. La première correction à l'expression (4.49) est en $\ln(2\pi N)/(2N)$. Pour $N = 10^3$, celle-ci est de l'ordre du pour cent seulement. Cette simple estimation suggère qu'il est possible d'obtenir des résultats précis sur les quantités thermodynamiques d'un système infini, en faisant des simulations numériques pour des nombres de particules bien plus petits que le nombre d'Avogadro ! Noter que la contribution intensive (4.49) dépend uniquement du maximum au col dans l'expression intégrale (4.45) de $N!$, alors que la première correction de taille finie provient entièrement de la contribution des fluctuations au voisinage de ce col.

4.2.2 Équivalence des ensembles canonique et micro-canonique

Présentation

En mécanique statistique, la description des systèmes à l'équilibre thermodynamique repose sur trois ensembles différents en général. Le premier d'entre eux est le micro-canonique qui décrit des systèmes isolés, pour lesquels le nombre N de particules, le volume V et l'énergie E sont fixés. Le deuxième est l'ensemble canonique : N et V sont toujours fixés mais c'est par contre la température T , au lieu de l'énergie, qui est fixée. Cela signifie que le système peut échanger de l'énergie avec un thermostat de grande taille qui fixe la température. Enfin, le dernier ensemble couramment utilisé, en particulier pour les statistiques quantiques, est l'ensemble grand-canonique pour lequel volume, température et potentiel chimique sont fixés. La question abordée ici

est celle de l'équivalence entre les descriptions micro-canonique et canonique⁸. En toute rigueur, cette question est extrêmement difficile, et elle passe par le contrôle d'intégrales multiples dans la limite d'un nombre infini de variables d'intégration ! Ici, nous adoptons un point de vue très schématique, reposant sur un certain nombre d'hypothèses, certes raisonnables mais qui restent à prouver mathématiquement...

Soit donc un système de N particules dans un volume V . Dans l'ensemble canonique, le système est en contact avec un thermostat à la température T_0 . Dans l'ensemble micro-canonique, il est isolé et son énergie est E_0 . Que faut-il faire pour montrer l'équivalence des descriptions microcanonique et canonique ? La réponse est simple : il faut montrer que les quantités thermodynamiques calculées indépendamment dans chaque ensemble, deviennent bien identiques à la limite thermodynamique (LT). Celle-ci est définie par $N, V \rightarrow \infty$ à densité $\rho = N/V$ fixée, la température T_0 et l'énergie par particules E_0/N étant respectivement fixées dans les ensembles canonique et microcanonique. Dans l'ensemble canonique, l'énergie libre s'écrit

$$F_{can}(N, V, T_0) = -k_B T_0 \ln Z(N, V, T_0) \quad (4.50)$$

où k_B est la constante de Boltzmann et Z la fonction de partition canonique. Dans l'ensemble microcanonique, l'entropie est donnée par

$$S_{micro}(N, V, E_0) = k_B \ln[\Omega(N, V, E_0)\Delta] \quad (4.51)$$

où Ω est la densité de micro-états, et $\Omega\Delta$ est le nombre de micro-états d'énergie comprise entre E_0 et $E_0 + \Delta$ avec Δ une constante. L'énergie libre microcanonique s'écrit alors

$$F_{micro}(N, V, E_0) = E_0 - k_B T_{micro} S_{micro} \quad (4.52)$$

où la température microcanonique T_{micro} est définie par

$$T_{micro}(N, V, E_0) = \left[\frac{\partial S_{micro}}{\partial E_0} \right]^{-1}. \quad (4.53)$$

Nous devons donc montrer que

$$\lim_{LT} \frac{F_{can}(N, V, T_0)}{N} = \lim_{LT} \frac{F_{micro}(N, V, E_0)}{N} \quad (4.54)$$

en ajustant convenablement l'énergie par particule E_0/N dans l'ensemble micro-canonique.

Comme annoncé, nous adoptons un point de vue minimaliste, partant de la fonction de partition canonique Z

$$Z(N, V, T_0) = \int_{-\infty}^{\infty} dE \Omega(N, V, E) e^{-\beta_0 E} \quad (4.55)$$

8. L'exercice 4.4, p. 295, est consacré à l'équivalence entre l'ensemble micro-canonique et un quatrième ensemble, l'ensemble isotherme-isobare.

avec $\beta_0 = 1/(k_B T_0)$. Dans cette écriture, toutes les contributions des états microscopiques de même énergie E sont regroupés via $\Omega(N, V, E)$ qui compte le nombre d'états $\Omega(N, V, E)dE$ d'énergie comprise entre E et $E + dE$. En utilisant la définition (4.51) de l'entropie microcanonique, la fonction de partition se réécrit

$$Z(N, V, T_0) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dE}{\Delta} \exp(-\beta_0 F_0^*(N, V, E)) \quad (4.56)$$

avec le potentiel thermodynamique

$$F_0^*(N, V, E) = E - T_0 S_{micro}(N, V, E) \quad (4.57)$$

spécifique à l'ensemble canonique. Pour montrer l'équivalence (4.54), nous allons appliquer la méthode du col à la détermination du comportement asymptotique de l'expression (4.56) dans la limite LT.

Étude et résolution

Le paramètre de contrôle dans la limite thermodynamique est le nombre de particules N . Maintenant, pourquoi l'intégrale (4.56) présente-t-elle un pic très marqué quand $N \rightarrow \infty$? Pour répondre à cette question, argumentons physiquement l'origine de l'équivalence entre les descriptions canonique et micro-canonique. Dans l'ensemble canonique, l'énergie du système n'est pas fixée par suite des échanges avec le thermostat. L'expérience montre cependant qu'elle fluctue peu au voisinage de sa valeur moyenne $\langle E \rangle$. Alors l'intégrale (4.56) devrait présenter un pic au voisinage de $\langle E \rangle$, de sorte que tout se passe comme si on travaillait dans l'ensemble micro-canonique de paramètres $(N, V, \langle E \rangle)$. Bien sûr, et c'est là un point crucial, cette assertion n'est correcte que si les fluctuations sont négligeables. Nous verrons que c'est effectivement le cas *modulo* des hypothèses raisonnables. Soulignons cependant que celles-ci ne sont pas valables aux points critiques où les fluctuations deviennent très importantes.

Ajustement de l'énergie micro-canonique. Nous prenons donc le parti de calculer l'intégrale (4.56) qui est de la forme générique (4.1), page 247, avec $\lambda = N$, $x = E$, $\mathcal{D} = [-\infty, \infty]$ et

$$f(E; N) = \beta_0 F_0^*(N, V, E) \quad \text{où} \quad V = N\rho^{-1},$$

par la méthode du col. La première étape consiste à chercher l'énergie qui extrémise $f(E; N)$. Compte tenu de l'argumentation précédente, il est naturel d'ajuster immédiatement E_0 à cet extremum. En conséquence, E_0 est telle que

$$\frac{1}{T_0} = \frac{\partial S_{micro}}{\partial E}(N, V, E_0). \quad (4.58)$$

Nous admettons que cette équation admet une et une seule solution E_0 . Notons qu'une condition nécessaire pour garantir cette unicité, est que l'entropie micro-canonique soit une fonction monotone croissante de l'énergie. Examinons la nature de cet extremum de $f(E; N)$ en calculant la dérivée seconde

$$\frac{\partial^2 f}{\partial E^2}(E_0; N) = -\frac{1}{k_B} \frac{\partial^2 S_{micro}}{\partial E^2}(N, V, E_0) = [k_B T_0^2 C_{micro}(N, V, E_0)]^{-1} \quad (4.59)$$

où $C_{micro}(N, V, E_0)$ est la chaleur spécifique microcanonique à volume constant. Lorsque l'entropie est une fonction concave de l'énergie, la dérivée seconde de S par rapport à E est négative ou de manière équivalente, $C_{micro}(N, V, E_0) > 0$. Cette condition exprime la stabilité thermodynamique du système, et elle garantit que E_0 soit bien un minimum de $f = \beta_0 F^*$.

Expression asymptotique de Z à la limite thermodynamique. Examinons maintenant les conditions de validité (4.9), page 251, qui assurent que la formule du col donne bien le comportement asymptotique de $Z(N, V, T_0)$. La largeur $\sigma(N)$ du pic en E_0 , donnée par la formule (4.59), est

$$\sigma(N) = \sqrt{k_B T_0^2 C_{micro}(N, V, E_0)} \propto \sqrt{N},$$

en admettant que la chaleur spécifique micro-canonique est bien extensive. Par ailleurs, il vient

$$\frac{\partial^p f}{\partial E^p}(E_0, N) = -\frac{1}{k_B} \frac{\partial^p S_{micro}}{\partial E^p}(N, V, E_0) \propto N^{1-p}$$

en admettant l'extensivité de l'entropie et de l'énergie microcanoniques. Ainsi, pour $p > 2$

$$\sigma^p(N) \frac{\partial^p f}{\partial E^p}(E_0, N) \propto \frac{1}{N^{p/2-1}} \rightarrow 0 \quad \text{quand } N \rightarrow \infty,$$

de sorte que l'approximation du col est asymptotiquement valide. La formule (4.3) donne finalement

$$\boxed{Z(N, V, T_0) \stackrel{\text{LT}}{\simeq} \Delta^{-1} \sqrt{2\pi k_B T_0^2 C_{micro}(N, V, E_0)} e^{-\beta_0 [E_0 - T_0 S_{micro}(N, V, E_0)]}.} \quad (4.60)$$

Interprétation

Commentons l'équation (4.58) qui permet d'ajuster l'énergie E_0 aux paramètres (N, V, T_0) définissant l'ensemble canonique. En vertu de la définition (4.53) de la température dans l'ensemble micro-canonique, elle signifie que celle-ci doit être identique à la température canonique donnée T_0 , ce qui

est évidemment satisfaisant. Remarquons ici que E_0 est l'énergie la plus probable. Comme la distribution de probabilité $\exp(-\beta_0 F^*(N, V, E))$ est très piquée en E_0 , la valeur moyenne $\langle E \rangle$ et la valeur la plus probable E_0 sont très proches, comme attendu. Maintenant, nous allons montrer que l'équivalence des ensembles est bien réalisée, avant de vérifier explicitement que les hypothèses utilisées sont bien satisfaites pour un gaz parfait, puis de conclure par de brèves remarques pour le cas général.

Équivalence des énergies libres par particule. En insérant la formule asymptotique (4.60) dans la définition (4.50), nous trouvons :

$$\frac{F_{can}}{N} = \frac{E_0 - T_0 S_{micro}(N, V, E_0)}{N} - \frac{k_B T_0}{2N} \ln(C_{micro}(N, V, E_0)/k_B) - \frac{k_B T_0}{2N} \ln(2\pi k_B^2 T_0^2 / \Delta^2) + o(1/N). \quad (4.61)$$

Le premier terme dans le membre de droite n'est autre que l'énergie libre microcanonique par particule pour la valeur col E_0 de l'énergie. Dans la démonstration de la formule (4.60), nous avons admis que E_0 , S_{micro} et C_{micro} sont extensives. Par conséquent, à la limite thermodynamique, l'énergie libre microcanonique par particule tend vers une valeur finie, alors que les autres termes dans l'expression (4.61) tendent vers zéro. Ainsi l'équivalence (4.54) est bien assurée.

Gaz parfait classique. Le lecteur est encouragé à vérifier explicitement l'équivalence (4.54) dans le cas d'un gaz parfait classique. Les calculs de la fonction de partition canonique $Z(N, V, T)$ et du nombre d'états $\Omega(N, V, E)$ sont relativement élémentaires. L'expression de Z a déjà été obtenue dans l'exemple précédent, page 267, tandis que

$$\Omega(N, V, E) = \frac{V^N}{N!(2\pi\hbar)^{3N}} \frac{\pi^{3N/2}}{\Gamma(3N/2 + 1)} (2mE)^{3N/2}$$

où Γ est la fonction d'Euler (4.45), également définie dans l'exemple précédent. Le lecteur trouvera ainsi ⁹

$$\frac{F_{micro}(N, V, E_0)}{N} = \frac{F_{can}(N, V, T_0)}{N} + \frac{k_B T_0}{2N} \ln(3\pi N) + O\left(\frac{1}{N}\right),$$

ce qui prouve l'égalité des énergies libres microcanonique et canonique par particule à la limite thermodynamique.

Gaz avec interactions. Les propriétés d'extensivité des quantités thermodynamiques jouent un rôle crucial pour l'équivalence des ensembles. Soulignons que leur démonstration à partir des expressions microscopiques des

9. Il faut utiliser la formule de Stirling (4.46), démontrée dans l'exemple précédent.

fonctions de partition constitue un tour de force lorsque des interactions entre particules sont présentes. Les preuves correspondantes ont été établies dans la littérature, pour des interactions à courte portée, et également pour des interactions coulombiennes dont la longue portée est alors gommée par les effets d'écran ¹⁰. Remarquons par contre que pour certaines interactions à longue portée comme la gravitation, l'extensivité est perdue et il n'y a plus équivalence entre les descriptions micro-canonique et canonique.

4.2.3 Cristal harmonique à basse température

Présentation

Cet exemple est consacré à la stabilité à basse température du cristal harmonique par rapport aux fluctuations thermiques. À d dimensions, N particules identiques, se déplaçant dans un domaine $\mathcal{D}$ de $\mathbb{R}^d$ interagissent entre elles via un potentiel V . À température nulle, les particules sont dans les minima du potentiel et le système présente un ordre cristallin. Est-ce que cet ordre cristallin persiste à très basse température? Comment déterminer la chaleur spécifique à basse température? Nous allons voir que la méthode du col fournit des réponses à ces questions.

Dans un premier temps, les particules sont traitées classiquement, et le domaine est choisi uni-dimensionnel, les résultats obtenus étant facilement généralisables à une dimension d arbitraire. Le Hamiltonien de ce système est

$$H(\mathbf{x}, \mathbf{p}) = \sum_{n=1}^N \frac{p_n^2}{2m} + V(\mathbf{x}) , \quad (4.62)$$

où $\mathbf{x}$ et $\mathbf{p}$ sont des coordonnées collectives désignant l'ensemble des positions x_n et des impulsions p_n individuelles des particules avec $n = 1, \dots, N$. La fonction de partition canonique s'écrit

$$Z = \frac{1}{N!} \int_{\mathcal{D}^N \otimes \mathbb{R}^N} \prod_{n=1}^N \left(\frac{dx_n dp_n}{(2\pi\hbar)} \right) e^{-\beta H(\mathbf{x}, \mathbf{p})} . \quad (4.63)$$

Classiquement, le facteur de Gibbs $e^{-\beta H(\mathbf{x}, \mathbf{p})}$ se factorise en une partie dépendant uniquement des impulsions multipliée par le facteur de Boltzmann $e^{-\beta V(\mathbf{x})}$. L'intégration sur les impulsions est alors immédiate, et donne le facteur λ_D^{-N} comme pour un gaz parfait (voir page 267). Il vient alors

$$Z = \lambda_D^{-N} Z_{conf} ,$$

10. Voir l'exemple du chapitre 2 pour une autre manifestation macroscopique de ces effets.

avec la fonction de partition purement configurationnelle

$$Z_{conf} = \frac{1}{N!} \int_{\mathcal{D}^N} \prod_{n=1}^N dx_n e^{-\beta V(\mathbf{x})} . \quad (4.64)$$

Les propriétés thermodynamiques du cristal sont entièrement déterminées par le comportement de Z_{conf} à basse température $T = 1/(k_B\beta)$. Nous nous proposons donc d'appliquer la méthode du col à l'intégrale multiple (4.64) sur un nombre N de variables, qui est de la forme générique (4.30).

Ici, le paramètre de contrôle β est multiplicatif, i.e. $f(\mathbf{x}; \lambda) \rightarrow \beta V(\mathbf{x})$. Dans cette étude, nous omettrons délibérément toute contribution des bords du domaine[✂], et certaines opérations seront effectuées en remplaçant $\mathcal{D}$ par $\mathbb{R}$. De plus, nous admettons qu'il existe des configurations correspondant à l'ordre cristallin qui minimisent le potentiel $V(\mathbf{x})$.

✂ Commentaire 4.2.1. En fait, pour éviter que le cristal ne glisse globalement par suite de l'invariance par translation des potentiels d'interaction entre particules, il est essentiel de fixer des bords, ou bien d'imposer un potentiel extérieur. La brisure de l'invariance par translation dans la phase cristalline, est alors bien conservée après passage à la limite thermodynamique et extinction de ce potentiel.

Étude et résolution

Nous admettons donc que le potentiel $V(\mathbf{x})$ présente des minima pour des configurations où les x_n forment une chaîne régulière avec un espacement a . Comme les particules sont identiques, il y a $N!$ minimums qui donnent la même contribution à la fonction de partition. En négligeant les effets de recouvrement discutés dans la section générale, nous multiplierons par $N!$ la contribution d'un seul de ces minima, noté $\mathbf{x}_c$, où les positions des particules sont de la forme $x_n = na$. Cette contribution est estimée par la formule du col, puis nous en déduisons l'énergie interne et la chaleur spécifique à volume constant.

Fonction de partition configurationnelle. Considérons donc le minimum $\mathbf{x}_c = (a, 2a, \dots, Na)$. Il est tel que

$$\frac{\partial V}{\partial x_n}(\mathbf{x}_c) = 0, \quad n = 1, \dots, N ,$$

et la matrice $N \times N$

$$A_{ln} = \frac{\partial^2 V}{\partial x_l \partial x_n}(\mathbf{x}_c)$$

définit une forme quadratique définie positive. En appliquant la formule du col (4.35), page 263 à ce minimum, nous obtenons

$$Z_{conf} \sim e^{-\beta V(\mathbf{x}_c)} \frac{(2\pi)^{N/2}}{\sqrt{\text{Det}(\beta A)}} = e^{-\beta V(\mathbf{x}_c)} \beta^{-N/2} \frac{(2\pi)^{N/2}}{\sqrt{\text{Det}(A)}}. \quad (4.65)$$

Notons que comme le paramètre de contrôle est multiplicatif, la formule du col donne bien le comportement asymptotique de Z_{conf} à basse température.

Énergie interne et chaleur spécifique. Les expressions à basse température de l'énergie interne U et de la chaleur spécifique à volume constant C_V se déduisent immédiatement de l'expression $Z = Z_{conf}/\lambda_D^N$ combinée à la formule du col (4.65),

$$U(N, V, T) = k_B T^2 (\partial \ln Z / \partial T) (N, V, T) = V(\mathbf{x}_c) + N k_B T + o(T)$$

$$C_V(N, V, T) = (\partial U / \partial T) (N, V, T) = N k_B + o(1)$$

Noter que dans les dérivations partielles par rapport à la température, les quantités $V(\mathbf{x}_c)$ et A sont des constantes car elles ne dépendent que de N et V . L'expression de U s'interprète aisément. Le terme $V(\mathbf{x}_c)$ est l'énergie de cohésion à température nulle, dite énergie de Madelung. La contribution suivante à U provient de l'équipartition de l'énergie. En effet, l'énergie cinétique de chaque particule contribue pour $k_B T/2$. Par ailleurs, à l'approximation gaussienne, l'énergie potentielle correspond simplement à N modes harmoniques, contribuant chacun pour $k_B T/2$.

Introduction des phonons. Afin d'éclairer les résultats précédents, et également d'avoir accès à d'autres quantités physiques, il est instructif et utile de diagonaliser la matrice A . Comme annoncé, nous ne prenons pas en compte les effets de bord ¹¹, en considérant que A est invariante par translation, c'est-à-dire $A_{nl} = A(n-l)$. Définissons l'écartement $\xi_n = x_n - na$ de la particule n à sa position d'équilibre dans l'état fondamental (voir figure 4.8).

L'approximation gaussienne consiste à écrire

$$V(\mathbf{x}) \simeq V(\mathbf{x}_c) + \frac{1}{2} \boldsymbol{\xi}^T \cdot A \cdot \boldsymbol{\xi}$$

avec l'écriture matricielle (4.32), page 263. Vu l'invariance par translations de déplacements multiples de a , la matrice A peut être diagonalisée par transformée de Fourier discrète, en décomposant les ξ_n comme

$$\xi_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k \in \mathbb{Z}B} q_k \exp(inak) .$$

11. Pour s'affranchir des effets de bord, on peut aussi prendre des conditions aux limites périodiques, qui consistent à imposer la propriété de périodicité $x_{n+N} = x_n$. Cette procédure revient à disposer les particules sur un cercle.

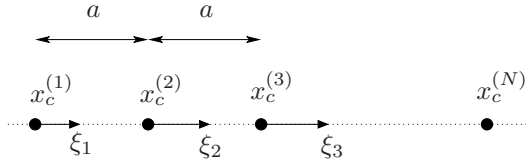


FIG. 4.8 – Les $x_c^{(n)} = na$ forment une chaîne régulière d'espacement a . Les $\xi_n = x_n - na$ dénotent l'écart de la particule n à sa position d'équilibre dans l'état fondamental.

Dans cette décomposition, les variables q_k sont dites phonons de nombre d'onde k appartenant à la première zone de Brillouin $ZB = [-\pi/a, \pi/a]$. Ces nombres d'onde sont régulièrement espacés de $2\pi/(Na)$. En utilisant la relation $q_{-k} = q_k^*$, conséquence de la réalité des ξ_n , nous obtenons alors

$$\xi^T \cdot A \cdot \xi = m \sum_{k \in ZB} \omega_k^2 |q_k|^2 ,$$

où les fréquences propres ω_k sont simplement données par la la transformée de Fourier discrète de A , i.e. :

$$m\omega_k^2 = \sum_l A_{nl} e^{-ik(l-n)a} .$$

Nous avons donc bien diagonalisé la forme quadratique originelle. Remarquons que l'écriture de la transformée de Fourier de A_{nl} sous la forme $m\omega_k^2$ est justifiée par l'hypothèse que $\mathbf{x}_c$ est un minimum du potentiel $V(\mathbf{x})$. Notons également que la fréquence du mode $k = 0$, qui correspond à une translation globale du cristal, est nulle si on ne prend en compte que les interactions entre les particules. Dans la suite, nous omettons les contributions de ce mode, en admettant implicitement qu'il existe par exemple un potentiel extérieur qui évite le glissement global du cristal, comme déjà indiqué précédemment.

La même transformation peut être effectuée pour les p_n et l'énergie cinétique. En introduisant les variables p_k canoniquement conjuguées des q_k , le Hamiltonien (4.62) peut alors se réécrire, à l'approximation harmonique, comme

$$\frac{1}{2} \sum_{k \in ZB} \left(\frac{|p_k|^2}{m} + m\omega_k^2 |q_k|^2 \right) , \quad (4.66)$$

en ayant omis la constante additive $V(\mathbf{x}_c)$. Les phonons (q_k, p_k) correspondent donc à N modes collectifs harmoniques. Le système se réduit donc, dans cette approximation, à la collection de N oscillateurs harmoniques indépendants, de masse m et de fréquences ω_k . La généralisation à une dimension d arbitraire est immédiate. La forme de la première zone de Brillouin est déterminée par

les symétries de la maille élémentaire du cristal. Les fréquences propres sont déterminées en diagonalisant la matrice dite dynamique $d \times d$ formée avec les transformées de Fourier discrètes des dérivées secondes partielles de V dans les d directions possibles. Pour chaque nombre d'onde $\mathbf{k}$ il existe d fréquences propres notées $\omega_\alpha(\mathbf{k})$ où α est un indice de polarisation.

Interprétation

La méthode du col et l'introduction des variables phonons permet d'étudier la stabilité du système autour de la configuration d'équilibre à température nulle. Cette question importante en amène immédiatement une autre concernant la validité d'un traitement classique à très basse température.

Stabilité vis-à-vis des fluctuations thermiques. Déterminons l'écart moyen d'une particule autour de sa position d'équilibre dû à l'agitation thermique, défini par

$$\delta^2 = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{n}} \langle \xi_{\mathbf{n}}^2 \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k} \in ZB} \langle \mathbf{q}_{\mathbf{k}}^2 \rangle .$$

Comme les modes phonons sont indépendants et harmoniques, le calcul est élémentaire. Dans la limite de taille infinie, nous pouvons prendre la variable $\mathbf{k}$ comme continue et, à des constantes de proportionnalité près, on obtient

$$\delta^2 \propto \int_{ZB} d^d \mathbf{k} \sum_{\alpha=1}^d \frac{k_B T}{m \omega_\alpha^2(\mathbf{k})} . \quad (4.67)$$

Pour pouvoir effectuer cette intégrale, il faut connaître les lois de dispersion $\omega_\alpha(\mathbf{k})$ des phonons, qui sont spécifiques au cristal considéré. Cependant, pour les grandes longueurs d'ondes, il existe au moins un mode sonore avec une relation de dispersion linéaire

$$\omega_s(\mathbf{k}) \sim v_s k \quad \text{pour } k \rightarrow 0 ,$$

où v_s est la vitesse du son. Dans ce cas l'intégrale (4.67) présente des divergences pour $k \rightarrow 0$, en une et deux dimensions. Ceci signifie que les fluctuations thermiques, déstabilisent toujours l'ordre cristallin à température non-nulle. Ce résultat est en fait un cas particulier du théorème de Mermin-Wagner [Ashcroft] sur la brisure des symétries continues en basses dimensions, la symétrie brisée dans le cas de la formation d'un cristal étant bien sûr la symétrie de translation.

Effets quantiques. Pour fixer les idées, considérons un cristal en trois dimensions. À très basse température, nous ne pouvons plus négliger les effets quantiques ! Nous devons donc remplacer le Hamiltonien (4.66) d'oscillateurs harmoniques classiques par le Hamiltonien d'un système quantique. Cela dit,

dans les variables phonons, nous avons encore une collection d'oscillateurs harmoniques indépendants, qui peuvent être traités au niveau des statistiques quantiques comme des bosons. Alors, dans l'énergie interne, en plus de $V(\mathbf{x}_c)$, il apparaît un terme constant supplémentaire qui correspond à l'énergie de point zéro. La partie dépendant de la température est maintenant contrôlée par la contribution des modes sonores, et elle est proportionnelle à T^4 . Ceci entraîne un comportement en T^3 pour la chaleur spécifique. Pour ce qui concerne la stabilité du cristal, le raisonnement précédent est toujours valable à température non-nulle, car les modes qui engendrent l'instabilité sont de fréquence très faible et peuvent donc être traités classiquement, en vertu de la condition $\hbar\omega_s(\mathbf{k}) \ll k_B T$.

4.2.4 Modèle d'Ising

Présentation

Le modèle d'Ising a joué un rôle fondamental dans la compréhension des transitions de phase dans le cadre de la mécanique statistique, où les quantités thermodynamiques sont déterminées à partir d'un Hamiltonien microscopique. Au delà du calcul originel de Ising, puis du véritable tour de force d'Onsager, qui ont résolu exactement ce modèle à une et deux dimensions respectivement, de très nombreux travaux ont été dévolus à son étude. On peut distinguer les approches de type champ moyen d'une part, et la mise en œuvre des méthodes du groupe de renormalisation d'autre part. Ainsi, une connaissance fine et précise des propriétés critiques de ce modèle a été acquise. Ces propriétés sont par ailleurs communes à une large classe de systèmes dont il est le représentant canonique.

Comme nous allons le montrer ici, il se trouve que les quantités d'équilibre du modèle d'Ising peuvent être représentées par une intégrale fonctionnelle *via* la transformation de Hubbard-Stratanovitch. L'approximation usuelle de champ moyen correspond alors à une estimation de cette intégrale fonctionnelle par la méthode du col ! L'approche fonctionnelle apporte ainsi un autre éclairage à cette approximation, qui présente de multiples intérêts. Tout d'abord, elle fournit un cadre plus déductif à la construction de l'énergie libre de Landau-Ginzburg, qui est usuellement introduite sur la base d'arguments de symétrie et de modélisations *ad hoc*. Aussi, elle ouvre la voie à une étude systématique des contributions des fluctuations en introduisant les techniques de renormalisation. Celles-ci jouent un rôle fondamental dans les comportements critiques, ce qu'on peut naïvement anticiper en réalisant que l'approximation col reste ici incontrôlée...

Considérons donc le modèle d'Ising défini comme suit. Soit N spins $\sigma_i = \pm 1$ disposés sur les sites i d'un réseau en d dimensions. Le Hamiltonien d'Ising

s'écrit

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (4.68)$$

où la somme est prise sur tous les sites. Noter que, comme $\sigma_i^2 = 1$, les termes $i = j$ donnent une contribution constante à H . On supposera que les J_{ij} définissent une forme quadratique définie positive, et qu'ils correspondent à une interaction décroissante avec la distance, $J_{ij} = f(|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|)$ avec $f(r)$ une fonction positive décroissante. Remarquons que d'autres formes des J_{ij} sont imaginables, par exemple $J_{ij} = J/N \forall i, j$ comme étudié à l'exercice 4.7, p. 297, ou bien $J_{ij} = J$ si i et j sont plus proches voisins, et $J_{ij} = 0$ autrement. C'est cette dernière version qui est la plus souvent considérée dans la littérature, et qui a été résolue exactement en une et deux dimensions. En pratique, le modèle d'Ising peut décrire un matériau dont les propriétés magnétiques sont déterminées par le spin d'origine électronique $\pm 1/2$ de chaque atome. Les constantes de couplage modélisent des interactions effectives entre spins. Par exemple, elles peuvent être engendrées par des contributions d'échange à l'énergie d'interaction coulombienne entre les nuages électroniques pour les atomes plus proches voisins.

En dimension supérieure à un, le modèle précédent est attendu subir une transition de phase pour une certaine température critique T_c , entre une phase ferromagnétique d'aimantation spontanée non-nulle pour $T < T_c$, et une phase paramagnétique ordinaire pour $T > T_c$. Nous allons étudier cette transition dans le cadre de l'intégrale fonctionnelle. Nous prendrons implicitement la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$, en admettant que les effets de bord ne jouent aucun rôle.

Étude et résolution

Nous nous intéressons à la fonction de partition canonique du modèle qui est par définition

$$Z = \sum_{\{\sigma_i\}} e^{\frac{\beta}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j}. \quad (4.69)$$

Si le Hamiltonien semble très simple, la sommation sur les variables discrètes σ_i dans la formule (4.69) est loin d'être immédiate. En fait, il est avantageux d'exprimer Z en termes de variables continues qui sont plus simples à manipuler, en effectuant la transformation de Hubbard-Stratonovitch. Ensuite, nous argumentons le passage à une intégrale fonctionnelle sur un champ continu au voisinage du point critique. Ceci conduit naturellement à l'introduction de l'action de Ginzburg-Landau. Nous montrons alors que l'approximation du col redonne bien les prédictions de l'approche champ moyen standard.

Transformation de Hubbard-Stratonovitch. Concrètement, l'idée consiste à utiliser l'identité (E.12), page 321, que nous réécrivons sous la forme

$$(2\pi)^{N/2} \frac{1}{\sqrt{\text{Det } A}} e^{\frac{1}{2}\mathbf{y}^T A^{-1}\mathbf{y}} = \int_{\mathbb{R}^N} d\mathbf{x} e^{-\frac{1}{2}\mathbf{x}^T A \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{y}}$$

pour toute matrice A de taille $N \times N$ symétrique réelle définie positive. En prenant $A^{-1} = \beta J$, cela permet de réécrire la fonction de partition (4.69) comme

$$Z = \frac{1}{(2\pi\beta)^{N/2} \sqrt{\text{Det } J}} \int_{\mathbb{R}^N} d\phi e^{-\frac{1}{2\beta}(\phi^T J^{-1} \phi)} \sum_{\{\sigma\}} e^{\phi^T \sigma}$$

où nous avons introduit les variables ϕ_i , ainsi que les notations collectives σ et ϕ pour les vecteurs colonnes de composantes $\sigma_1, \dots, \sigma_N$ et $\phi_1, \dots, \phi_N$ respectivement, l'indice T en exposant signifiant la transposition comme définie dans l'annexe. La somme sur toutes les configurations des spins σ_i peut être maintenant effectuée de manière très simple, car elle se factorise en

$$\sum_{\{\sigma\}} e^{\phi^T \sigma} = \prod_i (e^{\phi_i} + e^{-\phi_i}) ,$$

de telle sorte que

$$Z = \frac{1}{(2\pi\beta)^{N/2} \sqrt{\text{Det } J}} \int \prod_i d\phi_i e^{-\frac{1}{2\beta} \sum_{i,j} (\phi_i J_{ij}^{-1} \phi_j) - \sum_i U(\phi_i)} , \quad (4.70)$$

avec

$$U(\phi_i) = -\ln \text{ch } \phi_i - \ln 2 .$$

Soulignons que la transformation conduisant à l'expression (4.70) est exacte. Elle montre que le système originel est équivalent à un modèle de théorie classique des champs sur réseau. Naturellement, le problème reste extrêmement ardu, par suite de la présence simultanée d'un couplage entre les valeurs du champ en différents sites et d'un terme de type potentiel extérieur $U(\phi_i)$. Le champ ϕ a une signification physique très simple, qu'on peut mettre en évidence en exprimant la valeur moyenne $\langle \sigma_l \rangle$ du spin au site l comme

$$\langle \sigma_l \rangle = \langle \text{sh } \phi_l \rangle .$$

Ainsi, ϕ_l est directement relié à l'aimantation locale au site l , ces deux grandeurs ayant sensiblement les mêmes valeurs moyennes dans les régimes où celles-ci sont faibles par rapport aux valeurs de saturation correspondant à un alignement total des spins.

Limite continue et action de Ginzburg-Landau. Au voisinage de la température critique T_c , nous admettons que ce sont les comportements à grande échelle qui sont déterminants, de sorte qu'on peut supposer que la structure du réseau n'est plus pertinente. La théorie des transitions de phases du second ordre montre que cette hypothèse est justifiée au voisinage du point critique, où la longueur de corrélation ξ devient beaucoup plus grande que le pas du réseau a . Alors, il est *a priori* légitime de prendre la limite du continu dans l'écriture fonctionnelle précédente de Z . Les indices discrets du réseau sont alors remplacés par des variables continues, i.e. :

$$J_{ij} \rightarrow J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad ; \quad \sum_i \rightarrow \frac{1}{a^d} \int d\mathbf{r} \quad ; \quad \delta_{ij} \rightarrow a^d \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$$

où a est le pas du réseau, que nous prenons de structure cubique simple. Désormais, nous procéderons formellement à des manipulations dans le système infini en admettant l'invariance par translation. Avec les notations et règles précédentes, il vient

$$\frac{1}{a^d} \int d\mathbf{r}' J(\mathbf{r} - \mathbf{r}') J^{-1}(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') = a^d \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'') , \quad (4.71)$$

$$\begin{aligned} \sum_{i,j} \phi_i J_{ij}^{-1} \phi_j &\rightarrow \frac{1}{a^d} \int d\mathbf{r} d\mathbf{r}' \phi(\mathbf{r}) J^{-1}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \phi(\mathbf{r}') \\ &= \frac{1}{(2\pi)^d} \int d\mathbf{k} \frac{|\widehat{\phi}(\mathbf{k})|^2}{\widehat{J}(\mathbf{k})} , \end{aligned} \quad (4.72)$$

où la la transformée de Fourier $\widehat{f}(\mathbf{k})$ d'une fonction quelconque $f(\mathbf{r})$ est définie par

$$\widehat{f}(\mathbf{k}) = \int d\mathbf{r} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}} f(\mathbf{r}) .$$

Pour établir (4.72), nous avons utilisé la formule de Parseval-Plancherel, ainsi que la relation $\widehat{\phi}(-\mathbf{k}) = \widehat{\phi}^*(\mathbf{k})$ conséquence du caractère réel de $\phi(\mathbf{r})$, et l'identité

$$\frac{1}{a^d} \widehat{J}(\mathbf{k}) \widehat{J^{-1}}(\mathbf{k}) = a^d , \quad (4.73)$$

analogue de la relation (4.71) exprimant que les opérateurs J et J^{-1} sont inverses l'une de l'autre.

Pour obtenir les comportements d'intérêt aux grandes échelles, il suffit de remplacer $\widehat{J}(\mathbf{k})$ par son développement aux petits nombres d'onde $\mathbf{k}$ au voisinage de $\mathbf{k} = \mathbf{0}$,

$$\widehat{J}(\mathbf{k}) = \widehat{J}(0) (1 - \ell^2 k^2 + \dots)$$

où nous avons utilisé l'invariance par rotation de $J(\mathbf{r}) = J(r)$, et avec

$$\ell^2 = \frac{1}{2d} \frac{\int d\mathbf{r} \, r^2 J(r)}{\int d\mathbf{r} \, J(r)} .$$

Le terme de couplage quadratique dans le champ (4.72) devient alors

$$\frac{1}{\widehat{J}(0)} \int d\mathbf{r} (\phi^2(\mathbf{r}) + \ell^2 (\nabla \phi(\mathbf{r}))^2 + \dots) .$$

Quant au terme de type potentiel extérieur, il se réécrit dans cette limite continue comme

$$\sum_i \ln \chi \phi_i \rightarrow \frac{1}{a^d} \int d\mathbf{r} \ln \chi \phi(\mathbf{r}) = \frac{1}{a^d} \int d\mathbf{r} \left(\frac{1}{2} \phi(\mathbf{r})^2 - \frac{1}{12} \phi(\mathbf{r})^4 + \dots \right) ,$$

le développement en puissances de ϕ étant justifié au voisinage du point critique, car ce sont les champs faibles qui contribuent majoritairement.

Finalement, en introduisant la mesure fonctionnelle $d[\phi(\cdot)]$ définie par le processus de limite

$$d[\phi(\cdot)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left\{ [(2\pi)^{N/2} \sqrt{\text{Det}(\beta J)}]^{-1} \prod_{i=1}^N d\phi_i \right\} ,$$

nous obtenons pour le système infini

$$\boxed{Z = \int d[\phi(\cdot)] e^{-S[\phi(\cdot)]}} \quad (4.74)$$

avec l'action de Ginzburg-Landau

$$\boxed{S[\phi(\cdot)] = \int d\mathbf{r} \left(\frac{a}{2} (\nabla \phi(\mathbf{r}))^2 + \frac{b}{2} \phi^2(\mathbf{r}) + \frac{c}{4} \phi^4(\mathbf{r}) + \dots \right)} \quad (4.75)$$

et les coefficients

$$a = \frac{\ell^2}{\beta \widehat{J}(0)} \quad ; \quad b = \frac{1}{\beta \widehat{J}(0)} - \frac{1}{a^d} \quad ; \quad c = \frac{1}{3a^d} . \quad (4.76)$$

Stricto-sensu, l'expression (4.74) diverge, en accord avec les propriétés d'extensivité de Z bien sûr, et sans compter les subtilités et autres difficultés mathématiques apparaissant dans la limite continue. Cela dit, nous continuerons à procéder formellement dans la suite, ce qui est suffisant pour notre étude. Noter également que si l'intégrale fonctionnelle (4.74) est bien de la forme générale (4.38), p. 265, il n'apparaît pas de paramètre de contrôle λ bien identifié.

Approximation du col. Malgré l'absence de paramètre de contrôle, évaluons l'intégrale (4.74) par la méthode du col. Plus précisément, nous nous contentons de chercher le champ $\phi_c(\mathbf{r})$ qui minimise l'action de Ginzburg-Landau, et nous n'étudions pas les contributions des fluctuations correspondant à des champs voisins, problématique très complexe qui va bien au-delà de nos ambitions présentes. De manière cohérente avec le point de vue qui consiste à omettre tout effet de bord, les fonctions à considérer ne satisfont aucune contrainte particulière. Comme le terme $(\nabla\phi(\mathbf{r}))^2$ est défini positif, une première condition pour minimiser l'action $S[\phi(\cdot)]$ est que ϕ_c soit homogène. Il vient ensuite

$$b\phi_c + c\phi_c^3 = 0.$$

Comme montré par les expressions (4.76), la constante positive c est indépendante de la température, alors que le coefficient b est négatif pour $T < \hat{J}(0)/(k_B a^d)$ et positif pour $T > \hat{J}(0)/(k_B a^d)$. Le nombre et la nature des champs cols change donc à la température $\hat{J}(0)/(k_B a^d)$, qu'il est naturel d'identifier à la température critique T_c comme justifié dans la suite.

Pour $T > T_c$, le seul champ col homogène est donné par $\phi_c = 0$. La valeur col correspondante $S[\phi_c(\cdot)]$ est nulle et constitue bien le minimum de $S[\phi(\cdot)]$ qui est toujours positive. Pour $T < T_c$, il apparaît deux champs cols opposés correspondant à $\phi_c = \pm\sqrt{-b/c}$, et constituant des minima de $S[\phi(\cdot)]$, alors que le champ identiquement nul devient un maximum local. Ce changement de comportement est la signature d'une transition de phase concernant les propriétés magnétiques du système. Pour s'en convaincre, il suffit d'appliquer un champ magnétique extérieur proportionnel à h , donnant une contribution supplémentaire $-\sum_i h \sigma_i$ au Hamiltonien (4.68). Ce champ magnétique brise la symétrie $\phi \rightarrow -\phi$, et un calcul analogue à l'établissement de la formule (4.74) montre, qu'à l'approximation du col,

$$\langle\phi(\mathbf{r})\rangle_h \rightarrow \pm\sqrt{-b/c} \quad \text{quand} \quad h \rightarrow 0^\pm \quad \text{pour} \quad T < T_c.$$

Comme au voisinage du point critique, la valeur moyenne de $\phi(\mathbf{r})$ est bien proportionnelle à l'aimantation, la phase basse température $T < T_c$ est ferromagnétique, avec apparition d'une aimantation spontanée. Par contre, pour $T > T_c$, on trouve que $\langle\phi(\mathbf{r})\rangle_h$ s'annule proportionnellement à h , ce qui signifie que la phase haute température est paramagnétique.

Interprétation

Comme nous l'explicitons en premier lieu, l'approximation du col sur la représentation fonctionnelle (4.74) se trouve être équivalente à l'approche champ moyen habituelle. Ensuite, nous discutons brièvement le rôle des fluctuations, avant d'argumenter sommairement le caractère universel des propriétés critiques obtenues dans le cadre du modèle d'Ising.

Lien avec l'approche champ moyen standard. Dans la théorie de Landau, on admet qu'un état du système est entièrement déterminé par la donnée de l'aimantation locale $M(\mathbf{r})$, qui est le paramètre d'ordre pertinent pour la transition étudiée. Le potentiel thermodynamique $\Omega_T[M(\cdot)]$ du système, en contact avec un thermostat fixant la température T , est alors construit phénoménologiquement pour T voisin de T_c via un développement en puissances de M et de ∇M . Des arguments de symétrie conduisent alors à la forme de Ginzburg-Landau de $\Omega_T[M(\cdot)]$.

Remarquablement, l'action $S[\phi(\cdot)]$ possède exactement la même structure que $\Omega_T[M(\cdot)]$, à condition d'identifier ϕ et M ! De plus, le changement de signe du coefficient b en $T = T_c$, qui apparaît naturellement dans la construction mathématique de $S[\phi(\cdot)]$, est introduit heuristiquement dans $\Omega_T[M(\cdot)]$, comme conséquence de la compétition entre l'entropie qui favorise l'état de désordre maximal avec $M(\mathbf{r}) = 0$ d'une part, et l'énergie qui diminue pour des états ordonnés avec $M(\mathbf{r}) \neq 0$ d'autre part. Ainsi, la valeur d'équilibre de l'aimantation M_{eq} , donnée par la minimisation du potentiel thermodynamique $\Omega_T[M(\cdot)]$ à T fixée, est simplement proportionnelle au champ col ϕ_c minimisant l'action $S[\phi(\cdot)]$. Autrement dit, l'approximation du col est équivalente à la théorie de champ moyen de Landau. La représentation fonctionnelle fournit donc un cadre constructif pour cette approche phénoménologique, qui se révèle fort utile, en particulier pour la prise en compte des corrections dues aux fluctuations.

Contributions des fluctuations. La théorie de champ moyen ne reproduit pas exactement les propriétés critiques de la transition. Dans l'approche fonctionnelle, ceci n'est pas surprenant vu l'absence de paramètre de contrôle, l'approximation du col ne pouvant alors revendiquer aucun statut asymptotique... En particulier, les contributions des fluctuations au voisinage du col, qu'elles soient gaussiennes ou non, ne sont pas *a priori* négligeables devant la contribution du col lui-même.

En fait, la comparaison à la solution exacte à une dimension illustre bien les limites de l'approche champ moyen. Alors, la transition prédite est gommée par les fluctuations, qui sont particulièrement importantes en basse dimension. À trois dimensions, la valeur de T_c obtenue ici en termes des paramètres microscopiques n'est pas exacte, mais la transition ferromagnétique-paramagnétique prédite est qualitativement correcte. Le système a donc bien une aimantation spontanée en dessous d'une certaine température critique. En revanche, l'annulation de cette aimantation quand $T \rightarrow T_c^-$ n'est pas en $\sqrt{T_c - T}$ comme obtenu dans l'approximation du col. L'exposant critique correspondant dépend crucialement des fluctuations, et peut être déterminé perturbativement par les méthodes sophistiquées du groupe de renormalisation. Notons qu'en dimension supérieure à 4, les prédictions du champ moyen deviennent exactes.

Classe d'universalité. En exploitant l'idée fondamentale que les transitions de phase du second ordre sont gouvernées par les comportements à grande distance, il peut être montré que les propriétés critiques du modèle d'Ising sont communes à une large classe de systèmes possédant des symétries identiques. Cette universalité, au demeurant remarquable, apparaît simplement dans la construction de l'action $S[\phi(\cdot)]$, qui est clairement invariante sous la transformation $\phi \rightarrow -\phi$. Cette symétrie évidente, dite $\mathbb{Z}_2$, est une conséquence de l'invariance du Hamiltonien originel (4.68) par le changement $\sigma_i \rightarrow -\sigma_i$, $\forall i$. Au lieu de travailler avec des variables discrètes, considérons des variables continues pondérées par un poids statistique symétrique $P(\sigma_i) = P(-\sigma_i)$, et remplaçons $\sum_{\{\sigma_i\}}$ par $\int \prod_i P(\sigma_i) d\sigma_i$. En appliquant de nouveau la transformation de Hubbard-Stratanovitch, et en passant à la limite $a \rightarrow 0$, nous obtenons une représentation fonctionnelle de la fonction de partition, qui fait intervenir une action ayant la même structure que l'expression (4.75). Les nouveaux coefficients a , b et c ont la même dépendance en température que ceux relatifs aux variables σ_i discrètes. Par conséquent, les différents modèles correspondant à tous les choix possibles de $P(\sigma)$, et qui possèdent tous la même symétrie $\mathbb{Z}_2$, devraient présenter des propriétés critiques identiques.

4.2.5 Approximation semi-classique

Présentation

Reprenant une idée de Dirac, et développant une analogie avec l'optique ondulatoire, Feynman fut le premier à réécrire la fonction de Green associée à l'équation de Schrödinger, en termes d'une intégrale de chemins. Cette représentation fonctionnelle fut ensuite rapidement étendue au propagateur thermique associé à l'équation de Bloch. Elle constitue un outil particulièrement efficace pour l'étude des systèmes quantiques à l'équilibre, comme montré par ses innombrables applications. Une large partie d'entre elles repose sur la célèbre approximation semi-classique, qui consiste en un calcul de l'intégrale de chemins par la méthode du col où le paramètre de contrôle n'est autre que $1/\hbar$! Nous en donnons ici une illustration très simple, dévolue à l'étude de l'effet tunnel d'une particule à travers une barrière de potentiel répulsive.

Considérons une particule quantique de masse m et soumise à un potentiel $V(\mathbf{r})$, dans l'espace à trois dimensions. Son Hamiltonien est

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\Delta + V(\mathbf{r}) ,$$

et le propagateur thermique correspondant est noté

$$G(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta) = \langle \mathbf{r} | e^{-\beta H} | \mathbf{r}' \rangle$$

avec la température inverse $\beta = 1/k_B T$. Pour fixer les idées, imaginons que le potentiel $V(\mathbf{r}) = Z^2 e^2 / (4\pi\epsilon_0 r)$ décrive une barrière répulsive coulombienne entre deux noyaux de charge Ze . La probabilité que la particule s'approche à une distance r_0 de l'origine est proportionnelle à $G(\mathbf{r}_0; \mathbf{r}_0; \beta)$. Pour de basses températures telles que $k_B T \ll V(\mathbf{r}_0)$, $G(\mathbf{r}_0; \mathbf{r}_0; \beta)$ est essentiellement contrôlée par un effet tunnel à travers la barrière répulsive, de sorte que sa valeur est largement accrue par rapport au facteur de Boltzmann classique $e^{-\beta V(\mathbf{r}_0)}$. Nous allons estimer la contribution correspondante par l'approximation semi-classique.

D'abord, nous construisons la représentation en termes d'intégrale de chemins de $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$, en exploitant les développements perturbatifs des fonctions de Green établis dans le chapitre 3. Ayant ainsi obtenu une intégrale fonctionnelle de la forme générale (4.38), nous l'évaluons par la méthode du col qui conduit à l'expression semi-classique de $G(\mathbf{r}_0; \mathbf{r}_0; \beta)$. Le terme dominant correspondant à basse température, peut être retrouvé à partir de la représentation spectrale de G , où les fonctions propres de H sont évaluées par l'approximation de Wentzel-Kramers-Brillouin (WKB).

Étude et résolution

Dans un premier temps, il est essentiel d'estimer la forme asymptotique à haute température de $G(\mathbf{r}_a; \mathbf{r}_b; \tau)$ quand $\tau \rightarrow 0^+$ avec τ l'inverse de la température. Cette forme permet ensuite de construire l'intégrale de chemins représentant $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$ à n'importe quelle température finie.

Forme haute température du propagateur. Fixons $\mathbf{r}_a$ et $\mathbf{r}_b$, et étudions le comportement de $G(\mathbf{r}_a; \mathbf{r}_b; \tau)$ quand $\tau \rightarrow 0^+$. Ici, nous pouvons traiter perturbativement le potentiel $V(\mathbf{r})$ lui-même, comme vérifié *a posteriori*. Le développement perturbatif de $G(\mathbf{r}_a; \mathbf{r}_b; \tau)$ en puissances de V est obtenu à partir de la série (3.83), p. 180, avec $H^{(0)} = -(\hbar^2/2m)\Delta$ et $W(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$,

$$G(\mathbf{r}_a; \mathbf{r}_b; \tau) = G^{(0)}(\mathbf{r}_a; \mathbf{r}_b; \tau) - \int_0^\tau d\tau_1 \int d\mathbf{r}_1 G^{(0)}(\mathbf{r}_a; \mathbf{r}_1; \tau - \tau_1) V(\mathbf{r}_1) G^{(0)}(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_b; \tau_1) + \cdots \quad (4.77)$$

Le propagateur non-perturbé $G^{(0)}$ se réduit ici au propagateur libre donné par la formule (3.84) en dimension $d = 3$. Par conséquent, la première correction dans le développement (4.77) devient

$$- \left(\frac{m}{2\pi\hbar^2} \right)^3 \int_0^\tau d\tau_1 [(\tau - \tau_1)\tau_1]^{-3/2} \int d\mathbf{r}_1 V(\mathbf{r}_1) \exp \left(-\frac{m(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_a)^2}{2(\tau - \tau_1)\hbar^2} - \frac{m(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_b)^2}{2\tau_1\hbar^2} \right). \quad (4.78)$$

Dans la limite $\tau \rightarrow 0^+$, $\tau - \tau_1$ et τ_1 deviennent infiniment petits. Alors, dans l'intégrale spatiale figurant dans l'expression (4.78), les facteurs gaussiens varient extrêmement vite tandis que $V(\mathbf{r}_1)$ varie sur une échelle bien plus grande, indépendante de la température. Par conséquent, nous pouvons estimer cette intégrale par la variante de la méthode du col décrite p. 260. Le point col $\mathbf{r}_c$ est

$$\mathbf{r}_c = \frac{\tau_1 \mathbf{r}_a + (\tau - \tau_1) \mathbf{r}_b}{\tau}$$

et le facteur gaussien se réécrit exactement comme

$$\exp\left(-\frac{m(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a)^2}{2\tau\hbar^2}\right) \exp\left(-\frac{m\tau(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_c)^2}{2(\tau - \tau_1)\tau_1\hbar^2}\right).$$

En remplaçant $V(\mathbf{r}_1)$ par $V(\mathbf{r}_c)$, nous obtenons la forme asymptotique à haute température de l'expression (4.78),

$$-\left(\frac{m}{2\pi\tau\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a)^2}{2\tau\hbar^2}\right) \int_0^\tau d\tau_1 V((\tau_1 \mathbf{r}_a + (\tau - \tau_1) \mathbf{r}_b)/\tau), \quad (4.79)$$

qui est donc de la forme $G^{(0)}(\mathbf{r}_a; \mathbf{r}_b; \tau)$ multipliée par un facteur d'ordre τ . Les corrections à ce terme dominant quand $\tau \rightarrow 0^+$, sont calculées en développant $V(\mathbf{r}_1)$ au voisinage de $V(\mathbf{r}_c)$ en série de Taylor de $(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_c)$. La première correction non-nulle provient du terme

$$\frac{1}{2}[(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_c) \cdot \nabla_{\mathbf{r}_c}]^2 V(\mathbf{r}_c),$$

et elle est plus petite que le terme dominant (4.79) par un facteur d'ordre τ , comme montré par le simple changement de variable $\tau_1 = u\tau$.

L'analyse précédente peut être étendue à tous les termes de la série perturbative (4.77). On trouve facilement que le terme d'ordre V^n est asymptotiquement de la forme $G^{(0)}(\mathbf{r}_a; \mathbf{r}_b; \tau)$ fois un facteur d'ordre τ^n quand $\tau \rightarrow 0^+$. Ainsi, nous pouvons réexponentier la série (4.77) via l'identité

$$\begin{aligned} 1 - \int_0^\tau d\tau_1 V((\tau_1 \mathbf{r}_a + (\tau - \tau_1) \mathbf{r}_b)/\tau) + O(\tau^2) \\ = \exp\left(-\int_0^\tau d\tau_1 V((\tau_1 \mathbf{r}_a + (\tau - \tau_1) \mathbf{r}_b)/\tau) + O(\tau^2)\right), \end{aligned} \quad (4.80)$$

ce qui conduit à la formule haute température

$$\begin{aligned} G(\mathbf{r}_a; \mathbf{r}_b; \tau) = \left(\frac{m}{2\pi\tau\hbar^2}\right)^{3/2} \exp\left(-\frac{m(\mathbf{r}_b - \mathbf{r}_a)^2}{2\tau\hbar^2}\right) \\ \exp\left(-\int_0^\tau d\tau_1 V((\tau_1 \mathbf{r}_a + (\tau - \tau_1) \mathbf{r}_b)/\tau) + O(\tau^2)\right). \end{aligned} \quad (4.81)$$

Représentation par intégrale de chemins. Considérons maintenant le propagateur $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$ à température finie. L'identité opératorielle évidente

$$e^{-\beta H} = [e^{-\beta H/N}]^N$$

valable pour un entier N quelconque implique la formule de convolution

$$G(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta) = \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \cdots d\mathbf{r}_{N-1} G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; \beta/N) G(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2; \beta/N) \cdots \\ \times G(\mathbf{r}_{N-1}; \mathbf{r}'; \beta/N).$$

Quand $N \rightarrow \infty$, il est légitime de remplacer chaque propagateur $G(\mathbf{r}_p; \mathbf{r}_{p+1}; \beta/N)$ par la formule haute-température (4.81). Comme ici, $\tau = \beta/N$, les termes $O(\tau^2)$ sont d'ordre $O(1/N^2)$. Lorsqu'on effectue le produit des $N + 1$ facteurs exponentiels, la somme de ces $N + 1$ termes est elle-même d'ordre $O(1/N)$, et elle peut donc être négligée quand $N \rightarrow \infty$. Nous trouvons ainsi

$$G(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{mN}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{3N/2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \cdots d\mathbf{r}_{N-1} \\ \exp \left(- \sum_{p=0}^{N-1} \frac{mN(\mathbf{r}_{p+1} - \mathbf{r}_p)^2}{2\beta\hbar^2} + \frac{\beta}{N} \int_0^1 du V(u\mathbf{r}_p + (1-u)\mathbf{r}_{p+1}) \right), \quad (4.82)$$

avec $\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}$ et $\mathbf{r}_N = \mathbf{r}'$.

Dans l'expression (4.82), il apparaît naturellement le chemin $\mathbf{r}(t)$ constitué de $N + 1$ segments de droite joignant successivement $\mathbf{r}_p$ à $\mathbf{r}_{p+1}$, avec un temps fictif t qui varie entre 0 et $\beta\hbar$. Chaque point $\mathbf{r}_p$ est atteint au bout d'un temps $t_p = p\beta\hbar/N$. De plus, la vitesse $\dot{\mathbf{r}}(t) = N(\mathbf{r}_{p+1} - \mathbf{r}_p)/(\beta\hbar)$ est uniforme entre t_p et t_{p+1} . La somme $\sum_{p=0}^{N-1} \cdots$ dans l'expression (4.82) s'identifie alors exactement à $S[\mathbf{r}(\cdot)]/\hbar$, avec l'action associée au chemin $\mathbf{r}(t)$ dans le potentiel changé de signe $-V$, i.e. :

$$S[\mathbf{r}(\cdot)] = \int_0^{\beta\hbar} dt \left[\frac{m\dot{\mathbf{r}}^2(t)}{2} + V(\mathbf{r}(t)) \right].$$

En introduisant la mesure fonctionnelle

$$d[\mathbf{r}(\cdot)] = \lim_{N \rightarrow \infty} \left(\frac{mN}{2\pi\beta\hbar^2} \right)^{3N/2} \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \cdots d\mathbf{r}_{N-1},$$

on obtient finalement

$$G(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta) = \int d[\mathbf{r}(\cdot)] \exp \left(- \frac{S[\mathbf{r}(\cdot)]}{\hbar} \right). \quad (4.83)$$

Dans la présentation adoptée pour établir la représentation (4.83), nous ne prétendons pas à une rigueur absolue, étant entendu que, au niveau mathématique, il faudrait contrôler la convergence des séries perturbatives, ainsi que le processus de limite définissant la mesure fonctionnelle $d[\mathbf{r}(\cdot)]$. Le lecteur peut trouver une preuve de la formule (4.83) pour une large classe de potentiels dans le livre [Simon]. En particulier, il est démontré que la mesure $d[\mathbf{r}(\cdot)]$ est simplement reliée à la mesure de Wiener qui gouverne les propriétés statistiques du mouvement brownien. Enfin, notons que la représentation en termes d'intégrale de chemins de la fonction de Green dynamique fait intervenir un pur facteur de phase, avec une phase proportionnelle à l'action dans le potentiel V . Dans ce cas, la présence d'oscillations implique que l'intégrale fonctionnelle n'est pas bien définie en toute rigueur.

Approximation semi-classique. L'intégrale fonctionnelle (4.83) est bien de la forme générale (4.38), p. 265, avec les substitutions $\phi \rightarrow \mathbf{r}$, $\zeta \rightarrow t$, $\Omega \rightarrow [0, \beta\hbar]$, et $S_\lambda \rightarrow S/\hbar$. Le paramètre de contrôle λ peut être naturellement identifié à $1/\hbar$. La limite classique est obtenue en envoyant $\hbar$ à zéro. Comme l'exposant $(S[\mathbf{r}(\cdot)]/\hbar)$ varie alors très rapidement et peut prendre de très grandes valeurs, il est *a priori* raisonnable de mettre en œuvre la méthode du col pour étudier $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$ dans cette limite.

Un chemin col $\mathbf{r}_c(t)$ est donc un minimum de l'action $S[\mathbf{r}(\cdot)]$ avec les contraintes de départ $\mathbf{r}_c(0) = \mathbf{r}$ et d'arrivée $\mathbf{r}_c(\beta\hbar) = \mathbf{r}'$, le temps de vol étant également imposé et égal à $\beta\hbar$. L'équation fonctionnelle (4.39) se réduit alors aux équations de Lagrange qui définissent une trajectoire classique, conformément au principe de moindre action. Notons qu'il peut exister plusieurs trajectoires classiques satisfaisant aux contraintes précédentes. Nous supposons qu'il en existe une qui donne le minimum absolu S_c de l'action, et que les contributions des autres trajectoires classiques peuvent être négligées.¹²

La contribution de la trajectoire classique $\mathbf{r}_c(t)$ et de son voisinage est donnée par la formule du col (4.42), p. 266. Comme déjà commenté de manière générale, la détermination explicite des valeurs propres de l'opérateur associé à la covariance

$$C(t_1, t_2) = \hbar^{-1} \frac{\delta^2 S}{\delta \mathbf{r}(t_1) \delta \mathbf{r}(t_2)} [\mathbf{r}_c(\cdot)]$$

n'est pas immédiate... et pour obtenir la contribution totale des fluctuations gaussiennes, il faut encore effectuer une somme sur tout le spectre. Grâce à des identités remarquables de mécanique analytique, on montre qu'en fait cette somme s'exprime de manière compacte, en termes de l'action classique $S_c(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta\hbar)$ correspondant à la trajectoire classique $\mathbf{r}_c(t)$. La formule du col, également dite approximation semi-classique ou formule de Van Vleck, s'écrit finalement :

12. Comme esquissé dans la partie générale de ce chapitre dans le cas d'une intégrale simple, la prise en compte des contributions de plusieurs chemins cols est très délicate.

$$G_{col}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta) = (2\pi\hbar)^{-3/2} \left[\text{Det} -\frac{\partial^2 S_c}{\partial \mathbf{r} \partial \mathbf{r}'}(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta\hbar) \right]^{1/2} \exp \left(-\frac{S_c(\mathbf{r}, \mathbf{r}'; \beta\hbar)}{\hbar} \right). \quad (4.84)$$

Noter que la racine carrée du déterminant des dérivées partielles de l'action classique par rapport aux points de départ et d'arrivée est bien au numérateur dans cette formule, et non au dénominateur comme pourrait le suggérer une identification tentante, mais abusive, avec le déterminant de la forme quadratique fonctionnelle ! En fait, c'est bien aussi cette position au numérateur qui garantit la bonne dimension de $G_{col}(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \beta)$, homogène à l'inverse d'un volume en trois dimension. Enfin, le lecteur non encore complètement convaincu peut appliquer la formule (4.84) au cas où $V(\mathbf{r}) = 0$: il retrouvera bien exactement l'expression (3.84) du propagateur libre. S'il est amateur de déterminants, nous l'invitons également à vérifier que dans le cas d'un potentiel harmonique, la formule (4.84) donne aussi le propagateur exact...

Interprétation

Dans la limite, formelle, $\hbar \rightarrow 0$, l'approximation semi-classique (4.84) devient asymptotiquement exacte. Notons que le paramètre de contrôle $1/\hbar$ n'est pas multiplicatif, car $\hbar$ intervient également dans le temps de vol des chemins. Néanmoins, il est possible de vérifier qu'on retrouve bien le développement de Wigner-Kirkwood à l'ordre $\hbar^2$ inclus de la partie diagonale $G(\mathbf{r}; \mathbf{r}; \beta)$ au voisinage de sa valeur classique $(m/(2\pi\beta\hbar^2))^{3/2} \exp(-\beta V(\mathbf{r}))$. Cela dit, l'approximation semi-classique présente un potentiel d'application bien plus vaste que le développement de Wigner-Kirkwood, car elle prend en compte non-perturbativement des effets quantiques importants. Ceci est bien illustré par le calcul de $G_{col}(\mathbf{r}_0; \mathbf{r}_0; \beta)$ à basse température pour le potentiel coulombien répulsif $V(\mathbf{r}) = Z^2 e^2 / (4\pi\epsilon_0 r)$.

Application à un effet tunnel. Plaçons-nous à des températures suffisamment basses de sorte que $k_B T \ll V(r_0)$. Les différents chemins col sont des trajectoires classiques dans le potentiel coulombien attractif $-Z^2 e^2 / (4\pi\epsilon_0 r)$. Cet ensemble de trajectoires est donc constitué d'ellipses de période $\beta\hbar$ passant par $\mathbf{r}_0$, et des deux trajectoires rectilignes partant de $\mathbf{r}_0$ et y revenant au bout d'un temps $\beta\hbar$. La trajectoire donnant le minimum absolu de l'action, est celle rectiligne qui ne passe par l'origine. Un calcul relativement simple donne l'action classique correspondante, dont la forme asymptotique est

$$S_c(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; \beta\hbar) \sim \left(\frac{27mZ^4 e^4 \hbar}{32\epsilon_0^2 k_B T} \right)^{1/3} \quad \text{quand } T \rightarrow 0.$$

Un autre calcul, bien plus corsé, donne le déterminant intervenant dans la formule semi-classique (4.84). À basse température, la contribution dominante à $G_{col}(\mathbf{r}_0; \mathbf{r}_0; \beta)$ provient du facteur $\exp(-S_c(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0; \beta\hbar)/\hbar)$, et se réduit à :

$$\exp\left(-\left(\frac{27mZ^4e^4}{32\varepsilon_0^2\hbar^2k_BT}\right)^{1/3}\right). \quad (4.85)$$

Le facteur de pénétration (4.85) prend en compte un mécanisme quantique fondamental, à savoir l'effet tunnel. Ainsi, l'approximation semi-classique se révèle encore efficace loin de la limite classique ! Soulignons en particulier que le développement de Wigner-Kirkwood est ici complètement inopérant : le facteur (4.85) devient exponentiellement plus grand que le facteur de Boltzmann classique $\exp(-\beta V(r_0))$ quand $T \rightarrow 0$. Notons néanmoins qu'il est très ardu de contrôler la fiabilité de la formule semi-classique (4.84) dans les situations où les effets quantiques sont importants. Ici, il se trouve que le facteur semi-classique (4.85) décrit bien le comportement dominant exact de $G(\mathbf{r}_0; \mathbf{r}_0; \beta)$.

Comparaison avec l'approximation WKB. Pour conclure, signalons que l'expression précédente du facteur de pénétration peut être retrouvée à partir de la méthode WKB. Cette méthode, également qualifiée de semi-classique, consiste à déterminer approximativement les fonctions propres du Hamiltonien H via une résolution perturbative par rapport à $\hbar$ de l'équation de Schrödinger stationnaire. Pour obtenir le propagateur thermique correspondant, il suffit de partir de la représentation spectrale (3.81)

$$G(\mathbf{r}_0; \mathbf{r}_0; \beta) = \sum_n |\psi_n(\mathbf{r}_0)|^2 e^{-\beta E_n}.$$

Le lecteur ne sera pas surpris d'apprendre que cette vérification passe par une estimation de la somme sur les énergies... par la méthode du col !

4.3 Exercices

■ **Exercice 4.1. Comportement asymptotique de la fonction de Bessel J_0**

Étudier le comportement de la fonction de Bessel

$$J_0(\lambda) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta e^{i\lambda \cos \theta}$$

pour λ réel positif et grand. Pour cela, on réécrira dans un premier temps J_0 comme

$$J_0(\lambda) = \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left[\int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} d\theta e^{-i\varphi(\theta;\lambda)} \right]$$

avec $\varphi(\theta; \lambda) = -\lambda \cos \theta$. Montrer alors que

$$J_0(\lambda) \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi\lambda}} \cos\left(\lambda - \frac{\pi}{4}\right) \quad \text{quand } \lambda \rightarrow +\infty \quad (4.86)$$

et établir la légitimité de cette approximation.

Solution page 370.

■ **Exercice 4.2. Coefficients du binôme**

1. Justifier la relation

$$C_n^p = \frac{1}{2\pi i} \oint_{\mathcal{C}} dz \frac{(1+z)^n}{z^{p+1}}$$

où $\mathcal{C}$ est un contour d'intégration entourant l'origine du plan complexe.

2. Posons $p = nx$. Montrer que dans la limite $n \rightarrow \infty$,

$$C_n^{nx} \simeq \frac{1}{\sqrt{2\pi nx(1-x)}} \exp\left\{-n[x \ln x + (1-x) \ln(1-x)]\right\}. \quad (4.87)$$

Solution page 370.

■ Exercice 4.3. Forme asymptotique de la fonction de Green de Helmholtz

Soit $G_\infty(\mathbf{r})$ la fonction de Green avec C.L. à l'infini de l'opérateur de Helmholtz en dimension d , i.e. solution de

$$-\Delta G_\infty(\mathbf{r}) + m^2 G_\infty(\mathbf{r}) = \delta(\mathbf{r})$$

avec $G_\infty(\mathbf{r}) \rightarrow 0$ quand $r \rightarrow \infty$. La discussion menée au chapitre 3, p. 161, permet de montrer que

$$G_\infty(\mathbf{r}) = \tilde{G}_\infty^+(\mathbf{r}; s = m^2)$$

où $\tilde{G}_\infty^+(\mathbf{r}; s = m^2)$ est la transformée de Laplace (prise en $s = m^2$) de la fonction de Green causale de l'équation de diffusion pour un coefficient de diffusion $D = 1$. Autrement dit,

$$G_\infty(\mathbf{r}) = \frac{1}{(4\pi)^{d/2}} \int_0^{+\infty} \frac{dt}{t^{d/2}} \exp(-m^2 t - r^2/4t).$$

En déduire que pour $r \rightarrow \infty$:

$$G_\infty(\mathbf{r}) \simeq \sqrt{\frac{\pi}{2}} \frac{1}{(2\pi)^{d/2}} \frac{m^{\frac{d-3}{2}}}{r^{\frac{d-1}{2}}} e^{-mr} (1 + O(1/r)). \quad (4.88)$$

Solution page 371.

■ Exercice 4.4. Ensemble isotherme-isobare

Il existe de nombreuses situations expérimentales où la température et la pression d'un système thermodynamique sont imposées grâce au contact avec un réservoir de température et de pression. Ce réservoir fixe donc la température et la pression d'équilibre du système. De manière équivalente à l'ensemble canonique, l'ensemble isotherme-isobare correspond à cette situation où température, pression et nombre d'atomes du système sont fixés. En particulier, le volume et l'énergie du système sont libres de varier.

La fonction de partition isotherme-isobare de cet ensemble est définie comme :

$$Q_N(P_0, T_0) = \Lambda^{-1} \int dV e^{-\beta_0 P_0 V} Z_N(V, T_0)$$

avec $\beta_0 = 1/k_B T_0$ et où $Z_N(V, T_0)$ est la fonction de partition canonique pour un système de N atomes dans un volume V et à la température T_0 et où Λ est un volume arbitraire de normalisation assurant le caractère adimensionné de Q_N . En utilisant l'expression de la fonction de partition canonique, rappelée par exemple page 272, $Q_N(P_0, T_0)$ peut se réécrire comme

$$Q_N(P_0, T_0) = (\Lambda \Delta)^{-1} \int dV dE e^{-\beta_0 (P_0 V + E - T_0 S)}$$

où $S = S(N, V, E)$ est l'entropie microcanonique. Enfin, dans cet ensemble, l'énergie libre de Gibbs est définie par :

$$G_N(P_0, T_0) = -k_B T_0 \ln Q_N(P_0, T_0). \quad (4.89)$$

Évaluer $G_N(P_0, T_0)$ puis la différence entre les expressions microcanonique et isotherme-isobare de cette fonction thermodynamique dans la limite N grand.

Solution page 372.

■ Exercice 4.5. Évolution d'un paquet d'ondes et vitesse de groupe

On considère en une dimension un paquet d'ondes pris initialement à $t = 0$ comme :

$$P(x, t = 0) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{ikx} F(k). \quad (4.90)$$

Par ailleurs, la relation de dispersion est donnée par une fonction $\omega(k)$, de telle sorte que l'évolution du paquet d'ondes soit

$$P(x, t) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk e^{i(kx - \omega(k)t)} F(k). \quad (4.91)$$

On se place en $x(t) = vt$. Évaluer $P(x(t), t)$ pour t grand.

Solution page 372.

■ Exercice 4.6. De la fonction de Green de Cattaneo à celle de l'équation de diffusion

On rappelle que la fonction de Green $G_{\infty}^{+}(x; t)$ de l'équation de Cattaneo à une dimension introduite page 222 s'écrit $G_{\infty}^{+}(x; t) = e^{-\frac{c^2 a^2 t}{2}} g_{\infty}^{+}(x; t)$ avec (voir p. 225)

$$g_{\infty}^{+}(x; t) = \theta(ct - |x|) \frac{c}{4\pi} \int_{-\pi+i\alpha}^{\pi+i\alpha} d\beta e^{mc\sqrt{t^2 - x^2/c^2} \sin \beta}$$

avec $m = a^2 c/2$. Retrouver la fonction de Green de l'opérateur de diffusion en une dimension à partir de ce résultat.

Solution page 373.

■ Exercice 4.7. Modèle d'Ising avec des interactions à longue portée

On considère un modèle d'Ising constitué de N spins $S_i = \pm 1$ disposés sur N sites, et dont le Hamiltonien est :

$$H = \frac{-1}{2N} \sum_{i,j} S_i S_j - h \sum_i S_i$$

où il faut sommer sur tous les sites $i, j = 1, \dots, N$.

1. Montrer que $\exp(-\beta H)$ peut s'écrire comme :

$$\left(\frac{N\beta}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp[-N\beta\lambda^2/2 + \sum_i (\beta\lambda + \beta h) S_i].$$

En déduire que la fonction de partition Z du modèle peut s'écrire comme

$$Z = \left(\frac{N\beta}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp(-N\beta A(\lambda))$$

où l'on déterminera $A(\lambda)$.

2. Montrer que l'énergie libre par site est donnée par :

$$f = \frac{-1}{N\beta} \ln Z = A(\lambda_0) + O(1/N)$$

où λ_0 est la valeur de λ pour laquelle $A(\lambda)$ est minimale.

3. Montrer aussi que l'aimantation

$$m = -\frac{\partial f}{\partial h}$$

à β et N fixés, est donnée par $m = \lambda_0 + O(1/N)$. En déduire alors que l'équation qui définit λ_0 , donne pour m :

$$\text{th}(\beta(m + h)) = m,$$

qui est l'équation de champ moyen pour ce modèle. Donner β_c , le point critique du passage de la phase paramagnétique à la phase ferromagnétique. En déduire que le champ moyen donne des résultats exacts pour ce modèle dans la limite $N \rightarrow \infty$.

Solution page 373.

■ Exercice 4.8. Marche aléatoire de Bernoulli

Considérons une particule qui se déplace dans un espace discret en une dimension. Nous pouvons donc repérer sa position par un entier m . Cette particule change de position de façon aléatoire à chaque intervalle de temps, discret également. La particule ne peut faire que des sauts d'une unité vers la droite ou vers la gauche par intervalle de temps, et avec la même probabilité. Donc, si $P_N(m)$ est la probabilité que, à l'instant N , la particule se trouve en m , nous avons la relation de récurrence :

$$P_N(m) = \frac{1}{2} [P_{N-1}(m-1) + P_{N-1}(m+1)].$$

1. En définissant la transformée de Fourier et son inverse respectivement par

$$\hat{P}_N(k) = \sum_{m=-\infty}^{\infty} e^{ikm} P_N(m),$$

et

$$P_N(m) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk}{2\pi} e^{-ikm} \hat{P}_N(k),$$

obtenir une relation entre $\hat{P}_N(k)$ et $\hat{P}_{N-1}(k)$. En déduire $\hat{P}_N(k)$ en supposant qu'à l'instant initial $P_0(m) = \delta_{m,0}$.

2. Montrer que $P_N(m)$ peut s'écrire comme

$$P_N(m) = \left[\frac{1 + (-1)^{N+m}}{2\pi} \right] I_N(m)$$

où $I_N(m)$ est une intégrale entre $-\pi/2$ et $\pi/2$ à déterminer.

3. En déduire l'expression de $P_N(m)$ pour N grand.

Solution page 374.

■ Exercice 4.9. Oscillateur harmonique et théorie des nombres

Considérons un système formé d'une infinité d'oscillateurs harmoniques, de fréquences propres ω_i , qui sont telles que

$$\hbar\omega_1 = 1 ; \hbar\omega_2 = 2 ; \hbar\omega_k = k$$

Le zéro de l'énergie est choisi de telle sorte que l'énergie de l'état fondamental de chaque oscillateur soit 0 et non pas $\hbar\omega_i/2$.

1. Montrer que la fonction de partition $Z(\beta)$ de ce système peut s'écrire de deux manières : la première, comme un produit infini à déterminer et la seconde, comme

$$Z(\beta) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\beta n} \Omega(n) \quad (4.92)$$

où $\Omega(n)$ est le nombre de partitions de l'entier n . Par exemple, $\Omega(4) = 5$ car

$$\begin{aligned} 4 &= 4 \\ &= 3 + 1 \\ &= 2 + 2 \\ &= 2 + 1 + 1 \\ &= 1 + 1 + 1 + 1. \end{aligned} \quad (4.93)$$

2. À l'aide du théorème des résidus, exprimer $\Omega(n)$ comme une intégrale dans le plan complexe.

3. En se servant de la formule d'Euler-MacLaurin

$$\sum_{n=1}^{\infty} \ln [1 - e^{-\beta n}] = \frac{-\pi^2}{6\beta} - \frac{1}{2} \ln(\beta) + \frac{1}{2} \ln(2\pi) + O(\beta)$$

obtenir l'expression asymptotique de $\Omega(n)$ pour n très grand. Ce résultat est connu sous le nom de Formule de Hardy-Ramanujan.

Solution page 375.

Appendice A

Fonctions d'une variable complexe

Dans cette annexe, quelques définitions et propriétés relatives aux fonctions d'une variable complexe sont rappelées sommairement.

Analyticité

Fonctions holomorphes. f est une fonction analytique (ou holomorphe) en $z_0 \in \mathbb{C}$ si elle est dérivable sur un voisinage de z_0 . Dans ce cas, en posant $z = x + iy$, $P = \operatorname{Re} f$, et $Q = \operatorname{Im} f$, nous avons (conditions de Cauchy) :

$$\begin{aligned}\frac{\partial P}{\partial x}(x_0, y_0) &= \frac{\partial Q}{\partial y}(x_0, y_0), \\ \frac{\partial Q}{\partial x}(x_0, y_0) &= -\frac{\partial P}{\partial y}(x_0, y_0).\end{aligned}$$

Une conséquence de ces conditions de Cauchy est que les fonctions $P(x, y)$ et $Q(x, y)$ sont harmoniques, c'est-à-dire de Laplacien nuls :

$$\Delta P = 0 \quad \text{et} \quad \Delta Q = 0.$$

Une fonction entière est une fonction analytique sur tout $\mathbb{C}$.

Singularités. Les points en lesquels une fonction n'est pas holomorphe sont appelés singularités. Nous rappelons ci-dessous les divers types de singularités, simplement à l'aide d'un exemple typique correspondant :

- Artificielle ou apparente ; l'exemple standard est de partir d'une fonction $f(z)$ holomorphe en z_0 et de considérer

$$g(z) = \frac{f(z) - f(z_0)}{z - z_0}.$$

z_0 est une singularité apparente pour $g(z)$ et il est possible de définir g en z_0 avec $g(z_0) = f'(z_0)$.

- Pôle : l'exemple standard est

$$f(z) = \frac{1}{(z - z_0)^n}.$$

De manière plus générale, $f(z)$ a un pôle en z_0 si la fonction $(z - z_0)^n f(z)$ a une singularité apparente en z_0 ; n est alors l'ordre du pôle.

- Essentielle : l'exemple standard est la fonction $f(z) = \exp(1/z)$ qui a une singularité essentielle en $z = 0$.
- Points de branchement : ils sont associés aux coupures des fonctions multivaluées comme par exemple le logarithme ou une puissance non entière z^α . Dans ce dernier cas, l'origine est un point de branchement, dont doit partir nécessairement une coupure. En effet, lorsqu'on fait un tour complet autour de l'origine, l'argument de z change de 2π , et par conséquent, z^α est multiplié par $e^{2i\pi\alpha}$. Pour α non entier, $e^{2i\pi\alpha} \neq 1$, et afin d'éviter la multivaluation de la fonction z^α , il faut introduire obligatoirement une coupure : les valeurs de la fonction en des points infiniment proches de chaque côté de la coupure sont différentes. Pour une fonction de la forme

$$[P(z)]^\alpha$$

où $P(z)$ est un polynôme en z , il faut d'abord identifier les zéros du polynôme, qui vont être des points de branchement. Pour la raison précédente, de chacun d'entre eux part une coupure. Sa position est complètement arbitraire. Dans la pratique, il est souvent commode de choisir une coupure joignant deux points de branchement.

Fonctions méromorphes. f est méromorphe dans un domaine D si toutes ses singularités dans D sont isolées et sont des pôles.

Série de Laurent. Soit f une fonction holomorphe sur $0 \leq r_1 < |z - z_0| < r_2$. Alors f admet un développement unique dans ce domaine de la forme $f(z) = \sum_{n=-\infty}^{+\infty} c_n (z - z_0)^n$. Si f a un pôle (respectivement une singularité essentielle) en z_0 , alors le nombre de coefficients non nuls d'indice négatif est fini (respectivement infini).

Théorème des résidus et lemmes de Jordan

Théorème des résidus. Soit $D \in \mathbb{C}$ un ouvert simplement connexe, f une fonction méromorphe sur D et C un chemin fermé simple contenu dans D ne passant pas par les singularités de f . Alors,

$$\oint_C dz f(z) = \pm 2i\pi \sum_k \text{Res}(f, P_k).$$

Dans cette expression, les signes $+$ et $-$ correspondent à un parcours effectué respectivement dans le sens trigonométrique et anti-trigonométrique ; la

somme porte sur les pôles de f à l'intérieur de $\mathcal{C}$ et $\text{Res}(f, P_k)$ désigne le résidu de f en P_k , c'est-à-dire le coefficient de $1/(z - z_k)$ dans le développement de Laurent de la fonction $f(z)$ au voisinage de z_k .

Lemmes de Jordan. Soient D le domaine $\{z = re^{i\theta}; r > 0, 0 \leq \theta_1 \leq \theta \leq \theta_2 \leq \pi\}$ et $\mathcal{C}_r$ l'arc de cercle $\{re^{i\theta}; \theta_1 \leq \theta \leq \theta_2\}$.

- Soit $f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ une fonction continue sur D telle que $zf(z) \rightarrow 0$ lorsque $|z| \rightarrow \infty$ et $z \in D$. Alors,

$$\int_{\mathcal{C}_r} dz f(z) \rightarrow 0 \quad \text{quand} \quad r \rightarrow +\infty.$$

- Soit $f : \mathbb{C} \rightarrow \mathbb{C}$ une fonction continue sur D telle que $f(z) \rightarrow 0$ lorsque $z \rightarrow \infty$ avec $z \in D$. Alors,

$$\int_{\mathcal{C}_r} dz f(z) e^{iz} \rightarrow 0 \quad \text{quand} \quad r \rightarrow +\infty.$$

Partie principale de Cauchy et distribution de Dirac

Partie principale. Soit f une fonction ayant un pôle simple z_0 réel avec $z_0 \in [a, b]$. La partie principale de Cauchy est définie comme :

$$\text{PP} \int_a^b dz f(z) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \left\{ \int_a^{z_0 - \epsilon} dz f(z) + \int_{z_0 + \epsilon}^b dz f(z) \right\}.$$

Par exemple

$$\text{PP} \int_{-1}^1 \frac{dz}{z} = 0.$$

Enfin, au sens des distributions, on a

$$\boxed{\lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \frac{1}{x \pm i\epsilon} = \text{PP} \frac{1}{x} \mp i\pi \delta(x).} \quad (\text{A.1})$$

Distribution de Dirac. Nous profitons de cette annexe pour rappeler la propriété suivante de la distribution de Dirac :

$$\boxed{\int_a^b dx g(x) \delta[f(x)] = \sum_{x_0} \frac{g(x_0)}{|f'(x_0)|}} \quad (\text{A.2})$$

où la somme porte sur tous les points $x_0 \in [a, b]$ tels que $f(x_0) = 0$. Cette identité s'obtient simplement par changement de variable.

Appendice B

Transformée de Laplace

Cette annexe présente des rappels succincts sur la transformée de Laplace.

Définition. Soit $F(t)$ une fonction définie pour $t \in [0, +\infty[$: la transformée de Laplace de F , notée $\mathcal{L}[F]$, est une fonction de la variable complexe s , définie par :

$$\mathcal{L}[F](s) = \int_0^{\infty} dt e^{-st} F(t).$$

Domaine de définition. S'il existe α_0 , M et t_0 finis tels que, $\forall t > t_0$, $|e^{-\alpha_0 t} F(t)| \leq M$, alors $\mathcal{L}[F]$ est analytique pour $\operatorname{Re} s > \alpha_0$.

Exemples.

- La fonction $F(t) = e^{kt}$ admet, pour $\operatorname{Re} s > \operatorname{Re} k$, la transformée de Laplace

$$\mathcal{L}[F](s) = \frac{1}{s - k}.$$

Cette fonction peut être prolongée dans tout le plan complexe, où elle est analytique, sauf au point $s = k$, qui est un pôle simple.

- Par contre, $F(t) = \exp(t^2)$ n'admet pas de transformée de Laplace.
- Notons enfin que si $F(t) = O(1/t^n)$ en $t = 0$ avec $n \geq 1$, alors F n'a pas de transformée de Laplace.
- Nous indiquons dans le tableau ci-dessous quelques transformées de Laplace de fonctions couramment utilisées. Comme dans le chapitre 1, nous avons besoin de la transformée de Laplace pour $s = -iz$, nous donnons ce tableau pour cet argument.

$F(t)$	1	t^n	$\cos \omega t$	$\sin \omega t$	$\operatorname{ch} \omega t$	$\operatorname{sh} \omega t$
$\mathcal{L}[F](-iz)$	$\frac{i}{z}$	$\frac{n!}{(-iz)^{n+1}}$	$\frac{iz}{z^2-\omega^2}$	$\frac{-\omega}{z^2-\omega^2}$	$\frac{iz}{z^2+\omega^2}$	$\frac{-\omega}{z^2+\omega^2}$

TAB. B.1 – Transformée de Laplace de quelques fonctions usuelles.

Propriétés. Sous réserve que les transformées de Laplace correspondantes soient bien définies, on a les propriétés élémentaires suivantes :

- 1. Linéarité : $\mathcal{L}[aF + bG] = a\mathcal{L}[F] + b\mathcal{L}[G]$.
- 2. La transformée de Laplace de la dérivée d’une fonction est :

$$\mathcal{L}[F'](s) = s\mathcal{L}[F](s) - F(0^+).$$

(B.1)

- 3. Généralisation à la dérivée d’ordre n :

$$\mathcal{L}[F^{(n)}](s) = s^n\mathcal{L}[F] - s^{n-1}F(0^+) - s^{n-2}F'(0^+) - \dots - F^{(n-1)}(0^+).$$

- 4. $\mathcal{L}[e^{at}F(t)](s) = \mathcal{L}[F](s - a)$.
- 5. $\mathcal{L}[\delta(t - t_0)] = e^{-st_0}$ pour $t_0 > 0$.

Convolution. Soient F_1 et F_2 deux fonctions définies sur $[0, \infty[$. Définissons

$$C_{F_1 F_2}(t) = \int_0^t dt' F_1(t - t')F_2(t').$$

La transformée de Laplace de $C_{F_1 F_2}$ est le produit de celles de F_1 et F_2 :

$$\mathcal{L}[C_{F_1 F_2}] = \mathcal{L}[F_1]\mathcal{L}[F_2].$$

Transformation inverse. Soit $f(z) = \mathcal{L}[F](s = -iz)$ la transformée de Laplace de $F(t)$, pour $s = -iz$. Alors

$$F(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty+i\gamma}^{+\infty+i\gamma} dz e^{-izt} f(z)$$

(B.2)

où γ est tel que $\gamma > \text{Sup}[\text{Im}(\text{Pôles de } f)]$. Le domaine d’intégration est représenté sur la figure B.1.

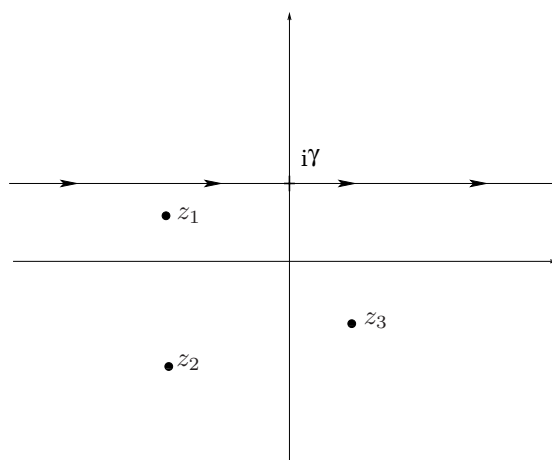


FIG. B.1 – *Domaine d'intégration utilisé pour le calcul de la transformée de Laplace inverse ; les points z_1, z_2, z_3 représentent les pôles de $f(z)$ et le contour est choisi au-dessus de tous ces points.*

Preuve. L'idée est de s'inspirer de la transformation de Fourier inverse. Pour cela, définissons

$$\begin{aligned} G(t) &= e^{-\gamma t} F(t) \quad \text{pour } t > 0, \\ G(t) &= 0 \quad \text{pour } t < 0 \end{aligned}$$

où γ est choisi de telle sorte que G admette une transformée de Fourier. On a alors

$$G(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \int_{-\infty}^{+\infty} dx e^{i\omega x} G(x).$$

Il s'ensuit que

$$\begin{aligned} F(t) &= e^{\gamma t} G(t), \\ &= \frac{e^{\gamma t}}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} \int_0^{\infty} dx e^{i\omega x - \gamma x} F(x), \\ &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty + i\gamma}^{+\infty + i\gamma} dz e^{-izt} \mathcal{L}[F](z) \end{aligned}$$

où on a posé $z = \omega + i\gamma$ et utilisé la définition de la transformée de Laplace de F .

Appendice C

Opérateurs différentiels à une variable

Dans cette annexe, nous indiquons une méthode de calcul de la fonction de Green causale associée à un opérateur différentiel à une variable. Nous rappelons ensuite la méthode de variation de la constante.

Fonction de Green causale

Soit $G^+(t; t')$ la fonction de Green causale de l'opérateur différentiel linéaire

$$\mathcal{O} = a_n(t) \frac{d^n}{dt^n} + a_{n-1}(t) \frac{d^{n-1}}{dt^{n-1}} + \cdots + a_0(t).$$

Par définition, elle vérifie

$$\mathcal{O}_t G^+(t; t') = \delta(t - t') \quad (\text{C.1})$$

avec

$$G^+(t; t') = 0 \quad \text{pour} \quad t < t'.$$

Cette fonction de Green s'exprime comme :

$$\boxed{G^+(t; t') = \theta(t - t') Z(t; t')} \quad (\text{C.2})$$

où Z est la solution de l'équation homogène $\mathcal{O}_t Z(t; t') = 0$ avec les conditions initiales

$$\boxed{\begin{aligned} Z(t = t'; t') &= Z'(t = t'; t') = \cdots = Z^{(n-2)}(t = t'; t') = 0, \\ Z^{(n-1)}(t = t'; t') &= \frac{1}{a_n} \end{aligned}}$$

avec la notation $Z^{(j)} = (\partial^j Z / \partial t^j)$. Pour prouver ce résultat, remarquons avant tout que $G^+(t; t')$ ainsi définie est bien causale. Commençons alors par calculer $(\partial G^+ / \partial t)$. Nous trouvons :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} G^+(t; t') &= \frac{\partial \theta(t-t')}{\partial t} Z(t; t') + \theta(t-t') \frac{\partial Z(t; t')}{\partial t} \\ &= \delta(t-t') Z(t; t') + \theta(t-t') Z'(t; t') \\ &= \theta(t-t') Z'(t; t') \end{aligned}$$

compte tenu des conditions initiales vérifiées par Z . Un raisonnement par récurrence permet alors de montrer que pour $k \leq n-1$

$$\frac{\partial^{(k)}}{\partial t^{(k)}} G^+(t; t') = \theta(t-t') Z^{(k)}(t; t').$$

En dérivant par rapport à t ce résultat pour $k = n-1$, et en prenant en compte la condition initiale $Z^{(n-1)}(t = t'; t') = 1/a_n$, on obtient

$$\frac{\partial^{(n)}}{\partial t^{(n)}} G^+(t; t') = \theta(t-t') Z^{(n)}(t; t') + \frac{1}{a_n} \delta(t-t').$$

Il est alors clair que $G^+(t; t')$ est solution de l'équation différentielle (C.1).

Méthode de variation de la constante

Soit l'équation différentielle linéaire du deuxième ordre :

$$\ddot{\Phi} + \alpha(t) \dot{\Phi} + \beta(t) \Phi = F(t) \quad (\text{C.3})$$

avec $\dot{\Phi} = (d\Phi/dt)$. Supposons que soient connues deux solutions indépendantes, Φ_1 et Φ_2 , de l'équation homogène associée. Leur Wronskien est défini par

$$W = \Phi_1 \dot{\Phi}_2 - \Phi_2 \dot{\Phi}_1.$$

Alors une solution de l'équation (C.3) s'écrit sous la forme

$$\boxed{\Phi(t) = -\Phi_1(t) \int_{t_0}^t dx \frac{\Phi_2(x) F(x)}{W(x)} + \Phi_2(t) \int_{t_1}^t dx \frac{\Phi_1(x) F(x)}{W(x)}} \quad (\text{C.4})$$

où t_0 et t_1 sont des constantes. Ces constantes sont à ajuster en fonction des conditions initiales imposées sur Φ . Rappelons que pour prouver ce résultat, on recherche Φ sous la forme

$$\Phi(t) = C_1(t) \Phi_1(t) + C_2(t) \Phi_2(t)$$

en imposant

$$\dot{C}_1 \Phi_1 + \dot{C}_2 \Phi_2 = 0. \quad (\text{C.5})$$

L'équation différentielle (C.3) est alors équivalente au système linéaire

$$\begin{pmatrix} \Phi_1 & \Phi_2 \\ \dot{\Phi}_1 & \dot{\Phi}_2 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \dot{C}_1 \\ \dot{C}_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ F \end{pmatrix}$$

qui s'inverse facilement en $\dot{C}_1 = -(\Phi_2 F/W)$ et $\dot{C}_2 = (\Phi_1 F/W)$. Il suffit alors d'intégrer ces expressions.

Rappelons aussi que cette méthode se généralise à une équation différentielle d'ordre n , dont n solutions homogènes indépendantes Φ_i sont connues. Pour cela, il faut chercher Φ sous la forme $\Phi(t) = \sum_{i=1}^N C_i(t) \Phi_i(t)$ avec

$$\sum_i \dot{C}_i \Phi_i = 0 \quad ; \quad \sum_i \dot{C}_i \dot{\Phi}_i = 0 \quad ; \quad \cdots \quad ; \quad \sum_i \dot{C}_i \Phi_i^{(n-1)} = F.$$

Application. Supposons que l'on cherche la fonction de Green $G(t; t')$ associée à l'équation (C.3) sur l'intervalle $[a, b]$ avec comme conditions aux limites $G(a; t') = 0$ et $G(b, t') = 0$. On peut alors choisir $t_0 = b$ et $t_1 = a$ dans le résultat (C.4) à condition d'imposer que $\Phi_1(a) = 0$ et que $\Phi_2(b) = 0$. Comme $F(x) = \delta(x - t')$ dans le cas de la fonction de Green, l'expression (C.4) devient

$$G(t; t') = \Phi_1(t) \int_t^b dx \frac{\Phi_2(x) \delta(x - t')}{W(x)} + \Phi_2(t) \int_a^t dx \frac{\Phi_1(x) \delta(x - t')}{W(x)}.$$

Il faut alors distinguer les cas $t < t'$ et $t > t'$. Le résultat est :

$$G(t; t') = \theta(t' - t) \frac{\Phi_1(t) \Phi_2(t')}{W(t')} + \theta(t - t') \frac{\Phi_2(t) \Phi_1(t')}{W(t')}. \quad (\text{C.6})$$

Appendice D

Espaces de Hilbert et notation de Dirac

Cette annexe a pour but de rappeler quelques propriétés relatives aux espaces de Hilbert, en particulier la notation de Dirac et la relation de fermeture.

Kets d'un espace de Hilbert

De manière très schématique, un espace de Hilbert est un espace vectoriel de dimension infinie, muni d'un produit scalaire. Ainsi, un vecteur de cet espace n'est autre qu'une fonction $\psi(\mathbf{r})$ d'un domaine $\mathcal{D}$ dans $\mathbb{C}$. Elle est désignée par $|\psi\rangle$, dit « ket ψ », suivant la terminologie introduite par Dirac. Cette notation, introduite à l'origine dans le cadre de la mécanique quantique, peut être utilisée pour n'importe quel autre problème, où la quantité physique d'intérêt appartient à un espace de Hilbert. Soulignons que $|\psi\rangle$ est le strict analogue d'un vecteur $\mathbf{u}$ dans un espace vectoriel de dimension finie.

Produit scalaire

Le produit scalaire du ket $|\psi_b\rangle$ avec le ket $|\psi_a\rangle$, noté $\langle\psi_b|\psi_a\rangle$ avec $\langle\psi_b|$ dit « bra ψ_b », est défini par le *bracket*

$$\langle\psi_b|\psi_a\rangle = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} \, \psi_b^*(\mathbf{r}) \psi_a(\mathbf{r})$$

où $\psi_b^*(\mathbf{r})$ est le complexe conjugué de $\psi_b(\mathbf{r})$. Notons qu'ici l'équivalent du produit scalaire usuel $\mathbf{u}_b \cdot \mathbf{u}_a$ n'est plus invariant dans l'échange des deux vecteurs puisque $\langle\psi_a|\psi_b\rangle = (\langle\psi_b|\psi_a\rangle)^*$. Par contre les autres propriétés habituelles du produit scalaire sont conservées.

Base $|\mathbf{r}\rangle$

La distribution de Dirac $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$, conçue comme une fonction de $\mathbf{r}$ à $\mathbf{r}'$ donné, est un vecteur particulier noté $|\mathbf{r}'\rangle$. L'ensemble des vecteurs $|\mathbf{r}'\rangle$ où $\mathbf{r}'$ parcourt $\mathcal{D}$ forme une base complète et orthonormée de l'espace considéré. En particulier, avec la définition du produit scalaire, on obtient aisément

$$\langle \mathbf{r}'' | \mathbf{r}' \rangle = \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}').$$

Par ailleurs, le produit scalaire du vecteur $|\mathbf{r}\rangle$ par le vecteur $|\psi\rangle$ se réduit à la valeur de la fonction ψ au point $\mathbf{r}$, c'est-à-dire

$$\langle \mathbf{r} | \psi \rangle = \psi(\mathbf{r}).$$

N'importe quel vecteur $|\psi\rangle$ peut être décomposé en une combinaison linéaire unique des $|\mathbf{r}\rangle$, i.e. :

$$|\psi\rangle = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} \, c(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle,$$

où les coefficients $c(\mathbf{r})$ sont les analogues des coefficients c_i de la décomposition de n'importe quel vecteur $\mathbf{v}$ sur une base $\{\mathbf{u}_i, i = 1, \dots, d\}$ d'un espace vectoriel de dimension finie d . En exploitant l'orthonormalité de la base $\{|\mathbf{r}\rangle, \mathbf{r} \in \mathcal{D}\}$, on montre facilement que les coefficients $c(\mathbf{r})$ de cette combinaison linéaire s'identifient à $\psi(\mathbf{r})$, soit

$$|\psi\rangle = \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} \, \psi(\mathbf{r}) |\mathbf{r}\rangle.$$

Projecteurs orthogonaux

L'image d'un vecteur $|\psi\rangle$, par l'opérateur linéaire $\mathcal{P}_a$ de projection orthogonale suivant le vecteur $|\psi_a\rangle$, est un vecteur $\mathcal{P}_a|\psi\rangle$ colinéaire à $|\psi_a\rangle$ avec un facteur de proportionnalité qui n'est autre que le produit scalaire $\langle \psi_a | \psi \rangle$:

$$\mathcal{P}_a|\psi\rangle = \langle \psi_a | \psi \rangle |\psi_a\rangle.$$

Il est commode d'introduire la notation

$$\mathcal{P}_a = |\psi_a\rangle \langle \psi_a|,$$

l'image $\mathcal{P}_a|\psi\rangle$ étant alors simplement obtenue en associant le bra ψ_a avec le ket ψ pour former le produit scalaire $\langle \psi_a | \psi \rangle$ qui multiplie le vecteur $|\psi_a\rangle$. Soulignons que cette notation ket-bra $|\psi_a\rangle \langle \psi_a|$ définit un opérateur et non pas un vecteur.

Relation de fermeture

Étant donnée une base orthonormée formée de vecteurs $|\psi_a\rangle$ où l'indice a décrit un certain ensemble A de valeurs (discrètes et/ou continues), la composante suivant $|\psi_a\rangle$ d'un vecteur $|\psi\rangle$, est donnée par le produit scalaire $\langle\psi_a|\psi\rangle$. Ainsi la décomposition correspondante de $|\psi\rangle$ peut être réécrite comme l'action de l'opérateur $\sum_{a\in A} \mathcal{P}_a$ sur $|\psi\rangle$. Ceci étant valable pour n'importe quel vecteur, la somme sur a des opérateurs de projection orthogonale suivant $|\psi_a\rangle$ n'est autre que l'opérateur identité $\mathcal{I}$, ce qui s'écrit

$$\boxed{\sum_{a\in A} |\psi_a\rangle\langle\psi_a| = \mathcal{I}.} \quad (\text{D.1})$$

Cette relation, dite de fermeture ou de complétude, est valable pour n'importe quelle base orthonormée.

Opérateurs

Soit enfin un opérateur linéaire $\mathcal{O}$, défini originellement par son action sur une fonction quelconque $\psi(\mathbf{r})$. Alors l'image du vecteur correspondant $|\psi\rangle$ par $\mathcal{O}$, notée $\mathcal{O}|\psi\rangle$, est définie par l'ensemble de ses composantes $\langle\mathbf{r}'|\mathcal{O}|\psi\rangle$ sur la base $\{|\mathbf{r}'\rangle, \mathbf{r}' \in \mathcal{D}\}$, chaque composante étant identifiée à $\mathcal{O}\psi(\mathbf{r}')$. De manière plus générale, n'importe quel opérateur linéaire $\mathcal{O}$ est défini à partir d'une base orthonormée $\{|\psi_a\rangle, a \in A\}$ par la donnée de tous les éléments de matrice $\langle\psi_b|\mathcal{O}|\psi_a\rangle$. L'opérateur $\mathcal{O}$ peut donc se réécrire comme :

$$\boxed{\mathcal{O} = \sum_{a,b} \langle\psi_b|\mathcal{O}|\psi_a\rangle |\psi_b\rangle\langle\psi_a|.$$

Appendice E

Calcul d'intégrales gaussiennes

Dans cette annexe nous allons montrer, à travers des exemples, comment calculer des intégrales gaussiennes qui apparaissent très souvent en physique. Les techniques utilisées dans chacun des exemples peuvent être combinées de façon à aborder le cas le plus général que l'on puisse imaginer d'intégrale gaussienne. Dans les trois cas, l'idée consiste à se ramener à l'intégrale

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dx \, e^{-ax^2} = \sqrt{\frac{\pi}{a}}.} \quad (\text{E.1})$$

Transformée de Fourier d'une gaussienne réelle

Le premier exemple correspond à la transformée de Fourier d'une fonction gaussienne réelle. Ce type d'intégrale apparaît, par exemple, dans le calcul des fonctions de Green pour l'équation de diffusion. Pour calculer des intégrales du type :

$$I_{\sigma}(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} dk \, \exp(ikx - \sigma k^2),$$

nous commençons par la réécrire comme

$$I_{\sigma}(x) = \exp[-x^2/(4\sigma)] \int_{-\infty}^{+\infty} dk \, \exp\{-\sigma[k - (ix/2\sigma)]^2\}.$$

Remarquons ensuite que l'intégrale

$$\oint_{\mathcal{C}_R} dz \, \exp\{-\sigma[z - (ix/2\sigma)]^2\} \quad (\text{E.2})$$

définie sur le contour $\mathcal{C}_R$ du plan complexe donné par la figure (E.1) est nulle du fait que l'intégrand est analytique à l'intérieur du contour.

Prenons la limite $R \rightarrow \infty$:

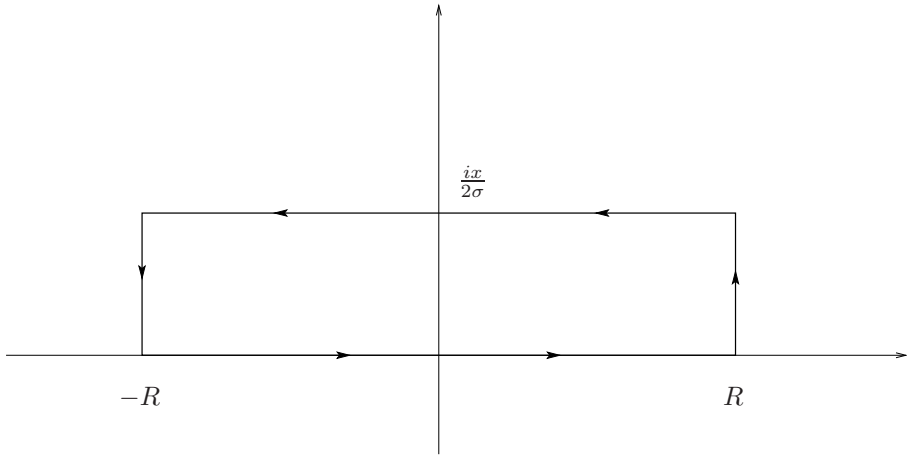


FIG. E.1 – Contour C_R utilisé pour le calcul de l'intégrale (E.2).

- On peut montrer très facilement que la contribution des segments verticaux du contour tend vers zéro ;
- Celle de l'axe réel nous donne l'intégrale $I_\sigma(x)$ que nous voulons calculer ;
- Finalement celle du segment horizontal avec $\text{Im } z = x/(2\sigma)$ est tout simplement l'intégrale d'une gaussienne qui vaut $-\sqrt{\pi/\sigma}$.

Le résultat final est donc :

$$\int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp(ikx - \sigma k^2) = \sqrt{\frac{\pi}{\sigma}} \exp[-x^2/(4\sigma)]. \quad (\text{E.3})$$

Terme quadratique imaginaire pur

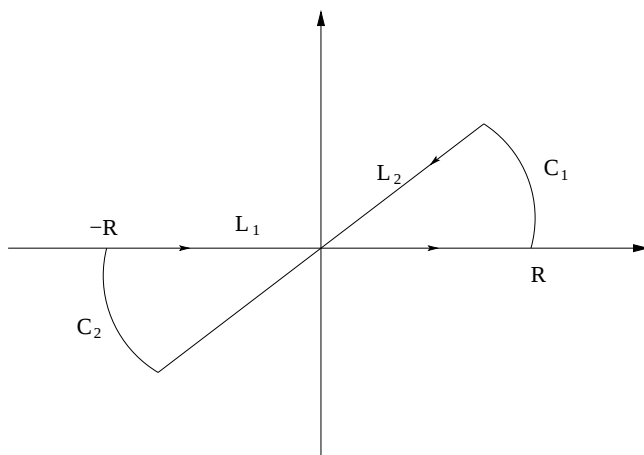
Considérons comme deuxième exemple d'intégrale gaussienne celle dont le coefficient de la partie quadratique est imaginaire pur. Ce type d'intégrale se retrouve, par exemple, dans le calcul du propagateur de la particule libre en mécanique quantique. Considérons alors une intégrale de la forme

$$J_\sigma = \int_{-\infty}^{\infty} dx \exp(i\sigma x^2). \quad (\text{E.4})$$

Pour déterminer J_σ , nous allons calculer l'intégrale complexe

$$\oint_{\mathcal{D}_R} dz \exp(i\sigma z^2) \quad (\text{E.5})$$

sur le contour fermé $\mathcal{D}_R$ composé par : le segment de l'axe réel $L_1 = [-R, R]$, les arcs de cercle C_1 et C_2 donnés par $z = Re^{i\theta}$, $0 \leq \theta \leq \pi/4$ et $\pi \leq \theta \leq 5\pi/4$ respectivement ; l'élément L_2 donné par $z = \rho e^{i\pi/4}$, $-R \leq \rho \leq R$ (voir figure (E.2)).

FIG. E.2 – Contour $\mathcal{D}_R$ utilisé pour le calcul de l'intégrale (E.5).

- Comme la fonction $e^{i\sigma z^2}$ n'a pas de singularités à l'intérieur du contour d'intégration, il est clair que l'intégrale sur ce contour fermé vaut 0.
- Par ailleurs, dans la limite $R \rightarrow \infty$, l'intégrale sur le segment L_1 s'identifie avec J_σ .
- De plus, nous savons calculer la contribution de l'élément L_2 , qui vaut :

$$-i^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{-\sigma x^2} = -(i\pi/\sigma)^{1/2}.$$

- Il reste à montrer que l'intégrale sur les arcs de cercle C_1 et C_2 tend vers 0 pour $R \rightarrow \infty$. Nous allons montrer pour cela que le module de l'intégrale sur C_1 est borné par une fonction qui tend vers 0 pour $R \rightarrow \infty$ (l'extension au cas de C_2 étant immédiate). En effet,

$$\left| \int_{C_1} dz e^{i\sigma z^2} \right| = R \left| \int_0^{\pi/4} d\theta e^{i\theta + i\sigma R^2 e^{2i\theta}} \right| \leq 4R \int_0^{\pi/4} d\theta \cos \theta e^{-\sigma R^2 \sin(2\theta)},$$

où nous avons utilisé l'inégalité $\cos \theta \geq \sin \theta$ pour $0 \leq \theta \leq \pi/4$. Dans ce même domaine, nous avons aussi l'inégalité $\sin(2\theta) \geq \sin \theta$ qui permet d'écrire :

$$\begin{aligned} 4R \int_0^{\pi/4} d\theta \cos \theta e^{-\sigma R^2 \sin(2\theta)} &\leq 4R \int_0^{\pi/4} d\theta \cos \theta e^{-\sigma R^2 \sin \theta}, \\ &\leq \frac{4}{R} \int_0^{\frac{R^2}{\sqrt{2}}} dx e^{-\sigma x} \end{aligned}$$

qui tend vers zéro pour $R \rightarrow \infty$.

Ceci achève la démonstration et on a donc

$$\boxed{\int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\sigma x^2} = \left(\frac{i\pi}{\sigma}\right)^{1/2}}, \quad (\text{E.6})$$

avec $Z^{1/2} = \sqrt{|Z|} e^{i \arg(Z)/2}$ et sa coupure sur $]-\infty, 0]$.

Intégrales multiples

Terminons cette annexe avec le calcul de deux intégrales multiples, sur d variables réelles $(x_1, \dots, x_d)$. La première intégrale est :

$$I_C = \int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{x} \exp(-\mathbf{x}^T \cdot C \cdot \mathbf{x}) \quad (\text{E.7})$$

où nous avons écrit les variables $(x_1, \dots, x_d)$ sous la forme d'un vecteur colonne $\mathbf{x}$ avec $\mathbf{x}^T$ le transposé de $\mathbf{x}$. Dans cette expression, C est une matrice $d \times d$ réelle, symétrique et définie positive (toutes ses valeurs propres sont positives).

Diagonalisation de la forme quadratique. L'intégration directe sur les variables x_i du facteur gaussien n'est pas immédiate car toutes ces variables sont couplées dans la forme quadratique définie par la matrice C . Afin de découpler ces variables, il est judicieux de diagonaliser C . Cette matrice est bien diagonalisable, car elle est réelle et symétrique. Il existe donc une matrice orthogonale R , telle que $R^T R = \mathcal{I}$ réelle, qui diagonalise C :

$$R^T C R = \begin{pmatrix} \mu_1 & 0 & 0 & \cdot \\ 0 & \mu_2 & 0 & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \mu_d \end{pmatrix}. \quad (\text{E.8})$$

Effectuons le changement de variables $(x_1, \dots, x_d) \rightarrow (\xi_1, \dots, \xi_d)$ défini par

$$\boldsymbol{\xi} = R^T \mathbf{x}.$$

Son Jacobien est égal à $|\text{Det } R|$, et il se réduit à 1 en vertu du caractère orthogonal de R . En effet, l'identité $R^T R = \mathcal{I}$ implique $[\text{Det } R]^2 = 1$. Le nouveau domaine d'intégration est encore $\mathbb{R}^d$. Enfin, dans les nouvelles variables, la forme quadratique originelle devient

$$\mathbf{x}^T \cdot C \cdot \mathbf{x} = \sum_i \mu_i \xi_i^2. \quad (\text{E.9})$$

Les intégrations sur les nouvelles variables sont maintenant complètement découplées, de sorte que l'intégrale gaussienne (E.7) devient un produit d'intégrales simples

$$I_C = \prod_{i=1}^d \left[\int_{\mathbb{R}} d\xi_i \exp(-\mu_i \xi_i^2 / 2) \right].$$

Notons à ce niveau que les d valeurs propres μ_i sont par hypothèse réelles et strictement positives. Nous sommes alors ramenés à la simple évaluation d'intégrales gaussiennes sur une seule variable, ce qui donne le résultat

$$I_C = \sqrt{\frac{(2\pi)^d}{\mu_1 \mu_2 \cdots \mu_d}}. \quad (\text{E.10})$$

Ce dernier se réécrit :

$$\boxed{\int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{x} \, e^{-\mathbf{x}^T C \mathbf{x}} = \sqrt{\frac{\pi^d}{\text{Det } C}}}$$

où $\text{Det } C$ est le déterminant de la matrice C . Remarquons que I_C , donnée par l'équation (E.10), peut se réécrire

$$I_C = \sqrt{\frac{(2\pi)^d}{\mu_1 \mu_2 \cdots \mu_d}} = \exp\left\{\frac{1}{2} \sum_{i=1}^d \ln[2\pi/\mu_i]\right\}. \quad (\text{E.11})$$

Généralisons maintenant ce calcul à celui de l'intégrale

$$\int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{x} \, \exp(-\mathbf{x}^T \cdot C \cdot \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{y})$$

où $\mathbf{y}$ est un vecteur donné et C une matrice symétrique réelle définie positive comme précédemment. Comme pour l'intégrale à une variable correspondante, cette intégrale se calcule en remarquant que

$$-\mathbf{x}^T \cdot C \cdot \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \cdot \mathbf{y} = -(\mathbf{x} - \frac{1}{2}C^{-1}\mathbf{y})^T \cdot C \cdot (\mathbf{x} - \frac{1}{2}C^{-1}\mathbf{y}) + \frac{1}{4}\mathbf{y}^T \cdot C^{-1} \cdot \mathbf{y}.$$

Le résultat est alors

$$\boxed{\int_{\mathbb{R}^d} d\mathbf{x} \, \exp[-\mathbf{x}^T C \mathbf{x} + \mathbf{x}^T \mathbf{y}] = \sqrt{\frac{\pi^d}{\text{Det } C}} \exp\left[\frac{1}{4}\mathbf{y}^T C^{-1} \mathbf{y}\right]}. \quad (\text{E.12})$$

Appendice F

Généralités sur les transformations de coordonnées

Cette annexe donne des rappels succincts sur les changements de coordonnées.

Métrie. Désignons par $\{\xi^i\}$ avec $i = 1, \dots, d$ les coordonnées d'un domaine (variété) en d dimensions et par $\{\mathbf{e}_i\}$ la base de vecteurs (définis dans l'espace tangent) associée à ces coordonnées. L'élément de ligne infinitésimal ds est donc donné par :

$$ds = d\xi^i \mathbf{e}_i = \sum_{i=1}^d d\xi^i \mathbf{e}_i,$$

où nous avons adopté la convention d'Einstein pour laquelle on somme sur les indices muets répétés. Si on définit un produit interne pour les éléments de cette base par

$$\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{e}_j = g_{ij},$$

alors la matrice symétrique g_{ij} est la métrique pour les coordonnées $\{\xi^i\}$, ce qui signifie en particulier que

$$ds^2 = g_{ij} d\xi^i d\xi^j.$$

Changement de coordonnées. Imaginons maintenant que soit fait un changement de coordonnées $\xi^i \mapsto \tilde{\xi}^j$ avec la matrice de transformation

$$J_{ij} = \frac{\partial \xi^i}{\partial \tilde{\xi}^j}$$

et son inverse $(\partial \tilde{\xi}^j / \partial \xi^i)$. Les lois de transformation correspondantes sont alors

$$d\tilde{\xi}^i = \frac{\partial \tilde{\xi}^i}{\partial \xi^j} d\xi^j.$$

Pour les éléments de la nouvelle base $\{\tilde{\mathbf{e}}_i\}$, associée aux coordonnées $\tilde{\xi}^i$, et définis par $ds = d\tilde{\xi}^i \tilde{\mathbf{e}}_i$, nous avons :

$$\tilde{\mathbf{e}}_i = \frac{\partial \xi^j}{\partial \tilde{\xi}^i} \mathbf{e}_j.$$

Il vient alors dans les nouvelles coordonnées :

$$ds^2 = \tilde{g}_{ij} d\tilde{\xi}^i d\tilde{\xi}^j$$

avec $\tilde{g}_{ij}$ les éléments de matrice de la métrique dans les nouvelles coordonnées $\{\tilde{\xi}^i\}$:

$$\tilde{g}_{ij} = g_{lm} \frac{\partial \xi^l}{\partial \tilde{\xi}^i} \frac{\partial \xi^m}{\partial \tilde{\xi}^j}.$$

Élément infinitésimal de volume. Supposons que la transformation $\xi^i \mapsto \tilde{\xi}^j$ soit orientée, c'est-à-dire que $\text{Det } J > 0$ où $\text{Det } J$ désigne le déterminant de la matrice J . Alors,

$$d\xi^1 d\xi^2 \cdots d\xi^n = \text{Det } J d\tilde{\xi}^1 d\tilde{\xi}^2 \cdots d\tilde{\xi}^n.$$

À partir de cette loi de transformation et des résultats précédents, il est possible de définir un élément de volume invariant sous les transformations de coordonnées i.e. :

$$\sqrt{\text{Det } g} d\xi^1 d\xi^2 \cdots d\xi^n = \sqrt{\text{Det } \tilde{g}} d\tilde{\xi}^1 d\tilde{\xi}^2 \cdots d\tilde{\xi}^n. \quad (\text{F.1})$$

Distribution de Dirac. Le résultat (F.1) permet de montrer la loi de transformation

$$\frac{1}{\sqrt{\text{Det } g}} \prod_{i=1}^d \delta(\xi^i) = \frac{1}{\sqrt{\text{Det } \tilde{g}}} \prod_{i=1}^d \delta(\tilde{\xi}^i) \quad (\text{F.2})$$

pour la distribution de Dirac.

Gradient. L'expression du gradient d'une fonction scalaire ϕ dans n'importe quel système de coordonnées est :

$$\nabla \phi = g^{ij} \frac{\partial \phi}{\partial \xi^j} \mathbf{e}_i = \tilde{g}^{ij} \frac{\partial \phi}{\partial \tilde{\xi}^j} \tilde{\mathbf{e}}_i \quad (\text{F.3})$$

où g^{ij} désigne les éléments de la matrice inverse de g , $g^{ij} g_{jk} = \delta_i^k$ avec δ_i^k le symbole de Kronecker.

Divergence. La divergence d'une fonction vectorielle $\mathbf{A} = A^i \mathbf{e}_i = \tilde{A}^i \tilde{\mathbf{e}}_i$ s'exprime comme :

$$\boxed{\nabla \cdot \mathbf{A} = \frac{1}{\sqrt{\text{Det } g}} \frac{\partial}{\partial \xi^i} \left(\sqrt{\text{Det } g} A^i \right) = \frac{1}{\sqrt{\text{Det } \tilde{g}}} \frac{\partial}{\partial \tilde{\xi}^i} \left(\sqrt{\text{Det } \tilde{g}} \tilde{A}^i \right).} \quad (\text{F.4})$$

Laplacien. Pour obtenir le Laplacien d'une fonction scalaire ϕ , il suffit de prendre la divergence de son gradient, ce qui donne :

$$\boxed{\Delta \phi = \frac{1}{\sqrt{\text{Det } g}} \frac{\partial}{\partial \xi^i} \left(\sqrt{\text{Det } g} g^{ij} \frac{\partial \phi}{\partial \xi^j} \right).} \quad (\text{F.5})$$

Appendice G

Harmoniques sphériques

Dans cette annexe, nous rappelons quelques propriétés relatives aux harmoniques sphériques.

Soit donc Ψ une solution de l'équation de Laplace, $\Delta\Psi = 0$. En coordonnées sphériques (r, θ, φ) , cette équation s'écrit¹

$$\frac{1}{r} \frac{\partial^2}{\partial r^2} (r\Psi) + \frac{1}{r^2 \sin \theta} \frac{\partial}{\partial \theta} \left(\sin \theta \frac{\partial \Psi}{\partial \theta} \right) + \frac{1}{r^2 \sin^2 \theta} \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \varphi^2} = 0. \quad (\text{G.1})$$

Séparation des variables. Cette équation est séparable en prenant Ψ comme un produit de fonctions de chacune des variables

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = U(r)P(\theta)Q(\varphi).$$

En effet, en utilisant cette forme pour Ψ et en multipliant l'équation (G.1) par $(r^2 \sin^2 \theta / \Psi)$, le dernier membre de cette équation devient une fonction de φ uniquement, alors que cette variable est absente dans les autres termes². Cette équation n'a alors de solution que lorsque le dernier terme, fonction de φ uniquement, est égal à une constante, que l'on va écrire comme $-m^2$, soit :

$$\frac{1}{Q} \frac{d^2 Q}{d\varphi^2} = -m^2.$$

Il vient donc $Q(\varphi) = e^{\pm im\varphi}$. Comme $\Psi(r, \theta, \varphi + 2\pi) = \Psi(r, \theta, \varphi)$, m doit être un entier.

On peut continuer ce raisonnement et séparer aussi la partie en r et θ avec une autre constante de séparation c pour obtenir les équations :

$$\frac{1}{\sin \theta} \frac{d}{d\theta} \left(\sin \theta \frac{dP}{d\theta} \right) + \left(c - \frac{m^2}{\sin^2 \theta} \right) P = 0,$$

1. L'appendice F permet de retrouver ce résultat.

2. Cette situation est similaire à celle obtenue en mécanique analytique par la méthode de séparation de variables pour l'équation de Hamilton-Jacobi (voir par exemple [Goldstein] ou [José]).

et

$$\frac{d^2 V}{dr^2} - \frac{c}{r^2} V = 0 \quad (\text{G.2})$$

pour $V(r) = rU(r)$.

Fonctions de Legendre associées. L'équation pour $P(\theta)$ donne des solutions finies, si et seulement si, $c = l(l+1)$ avec $l \geq |m|$ entier. Les solutions correspondantes sont les fonctions de Legendre associées, $P_l^m(x)$, avec $x = \cos \theta$. Ces fonctions satisfont donc à l'équation différentielle

$$\boxed{\frac{d}{dx}[(1-x^2)\frac{dP_l^m}{dx}] + [l(l+1) - \frac{m^2}{1-x^2}]P_l^m(x) = 0.}$$

Dans le cas $m = 0$, les fonctions $P_l(x) = P_l^0(x)$ correspondent aux polynômes de Legendre qui vérifient, notamment, les propriétés suivantes :

$$\begin{aligned} P_l(-x) &= (-1)^l P_l(x), \\ P_0(x) &= 1, \quad P_1(x) = x, \quad P_2(x) = \frac{1}{2}(3x^2 - 1), \\ \int_{-1}^1 dx P_l(x) P_{l'}(x) &= \frac{2\delta_{ll'}}{2l+1}, \\ \sum_{l=0}^{+\infty} \frac{2l+1}{2} P_l(x) P_l(x') &= \delta(x-x'), \end{aligned}$$

les deux dernières propriétés signifiant respectivement que ces polynômes sont orthogonaux et qu'ils forment une base complète des fonctions définies sur $[-1, 1]$.

Les fonctions de Legendre associées vérifient, entre autres, les propriétés suivantes :

$$\begin{aligned} P_l^m(x) &= (1-x^2)^{\frac{m}{2}} \frac{d^m}{dx^m} P_l(x) \quad \text{pour } m > 0, \\ P_l^{-m}(x) &= (-1)^m \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(x), \\ \int_{-1}^1 dx P_l^m(x) P_{l'}^m(x) &= \frac{2}{2l+1} \frac{(l+m)!}{(l-m)!} \delta_{ll'}. \end{aligned}$$

Harmoniques sphériques. Les harmoniques sphériques sont alors définies par

$$\boxed{Y_{lm}(\theta, \varphi) = (-1)^m \sqrt{\frac{2l+1}{4\pi} \frac{(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos \theta) e^{im\varphi}.$$

Elles forment une base complète de l'ensemble des fonctions définies sur la sphère :

$$\sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\theta', \varphi') Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta(\varphi - \varphi') \delta(\cos \theta - \cos \theta'). \quad (\text{G.3})$$

Elles sont orthonormées :

$$\int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^\pi \sin \theta d\theta Y_{l'm'}^*(\theta, \varphi) Y_{lm}(\theta, \varphi) = \delta_{mm'} \delta_{ll'}.$$

Fonctions harmoniques. Finalement, comme $c = l(l+1)$, l'équation (G.2) donne

$$U(r) = A r^l + B r^{-l-1}.$$

Toute fonction harmonique peut alors s'écrire comme une superposition des solutions obtenues, soit

$$\Psi(r, \theta, \varphi) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l [A_{l,m} r^l + B_{l,m} r^{-l-1}] Y_{lm}(\theta, \varphi)$$

où $A_{l,m}$ et $B_{l,m}$ sont des constantes.

Appendice H

Dérivée fonctionnelle

Considérons un espace de fonctions $f(x_i)$ à N variables x_i définies dans un domaine de $\mathbb{R}^N$ (le plus souvent le domaine est $\mathbb{R}^N$ lui-même). Nous allons supposer que toutes les fonctions $f(x_i)$ s'annulent dans le bord du domaine ou tendent suffisamment vite vers zéro si le domaine est $\mathbb{R}^N$.

Soit une fonctionnelle $F[f]$ de f . Sa dérivée fonctionnelle notée

$$\frac{\delta}{\delta f(x_i)} F[f]$$

est définie à partir des propriétés fondamentales suivantes :

i) Linéarité :

$$\frac{\delta}{\delta f(x_i)} (F_1[f] + F_2[f]) = \frac{\delta}{\delta f(x_i)} F_1[f] + \frac{\delta}{\delta f(x_i)} F_2[f].$$

ii) Distributivité :

$$\frac{\delta}{\delta f(x_i)} (F_1[f] F_2[f]) = F_2[f] \frac{\delta}{\delta f(x_i)} F_1[f] + F_1[f] \frac{\delta}{\delta f(x_i)} F_2[f].$$

iii)

$$\frac{\delta f(y_i)}{\delta f(x_i)} = \prod_{i=1}^N \delta(y_i - x_i).$$

Cette dernière propriété est la généralisation au cas de fonctions continues de la règle de dérivation par rapport à des variables discrètes :

$$\frac{\partial r_i}{\partial r_j} = \delta_{ij}.$$

Ainsi, la fonction $f(x_i)$ évaluée dans chaque point du domaine paramétré par les variables x_i joue le rôle d'une des composantes d'un vecteur avec un

nombre infini et continu de composantes. La dérivée fonctionnelle peut donc être considérée comme la généralisation à des variables continues de la dérivée d'une fonction $h(r_i)$ par rapport à ses variables r_i : $\frac{\partial h}{\partial r_i}$.

Avec les règles que nous venons d'énoncer, il est possible par exemple de calculer :

$$\frac{\delta}{\delta f(x_i)} \int \prod_{i=1}^N dy_i \Phi(y_i) f(y_i) = \Phi(x_i).$$

Il est possible aussi, en utilisant les propriétés de nullité des fonctions f au bord du domaine, de montrer avec une simple intégration par partie que :

$$\frac{\delta}{\delta f(x_i)} \int \prod_{i=1}^N dy_i g(y_i) \frac{\partial}{\partial x_k} [f(y_i)] = - \frac{\partial}{\partial x_k} [g(x_i)].$$

Exemple. Pour finir cet annexe, donnons comme exemple comment obtenir les équations du mouvement de l'oscillateur harmonique à partir de son action $S[q(t)]$:

$$S[q(t)] = \int_{t_i}^{t_f} dt \left(\frac{m\dot{q}^2}{2} - \frac{m\omega^2 q^2}{2} \right).$$

Ici $q(t)$ est la position de la particule à l'instant t , m sa masse et ω la pulsation de l'oscillateur : q joue donc le rôle de la fonction f et le temps t celui des variables x_i . $q(t_i)$ et $q(t_f)$ ne sont pas nécessairement nuls mais sont supposés constants. Les termes de bord ne donneront donc pas de contribution à la dérivée fonctionnelle de l'action par rapport à la fonction $q(t)$. Les équations d'Euler-Lagrange, équivalentes aux équations de mouvement, s'obtiennent en imposant que l'action soit stationnaire par rapport à la variable fonctionnelle $q(t)$:

$$\frac{\delta}{\delta q(t)} S[q(t)] = 0,$$

ce qui donne bien les équations de mouvement pour l'oscillateur harmonique :

$$\ddot{q}(t) + \omega^2 q(t) = 0.$$

Appendice I

Fonctions de Green usuelles

Nous donnons dans cette annexe les fonctions de Green en volume infini G_∞ calculées dans les chapitres 2 et 3.

Opérateur Laplacien $-\Delta$

Dimension	Fonction de Green	Voir page
$d \geq 3$	$G_\infty(\mathbf{r}) = \frac{\Gamma(d/2)}{(d-2)2\pi^{d/2} \mathbf{r} ^{d-2}}$	343, 365
3	$G_\infty(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi \mathbf{r} }$	79
2	$G_\infty(\mathbf{r}) = -\frac{1}{2\pi} \ln(\mathbf{r} /\ell)$	97
1	$G_\infty(x) = -\frac{1}{2} x $	97

Opérateur de Helmholtz $-\Delta + m^2$

Dimension	Fonction de Green	Voir page
3	$G_\infty(\mathbf{r}) = \frac{e^{-m \mathbf{r} }}{4\pi \mathbf{r} }$	79
2	$G_\infty(\mathbf{r}) = \frac{1}{2\pi}K_0(m \mathbf{r})$	96
1	$G_\infty(x) = \frac{1}{2m}e^{-m x }$	96

Opérateur de diffusion $\partial/\partial t - D\Delta$

Dimension	Fonction de Green	Voir page
d	$G_\infty^+(\mathbf{r};t) = \frac{1}{(4\pi Dt)^{d/2}} \exp\left[-\frac{\mathbf{r}^2}{4Dt}\right]$	162

Opérateur associé à une particule quantique libre
 $\partial/\partial t - (i\hbar/2m)\Delta$

Dimension	Fonction de Green	Voir page
3	$G_\infty^+(\mathbf{r};t) = \left(\frac{m}{2\pi i\hbar t}\right)^{3/2} \exp\left[\frac{im\mathbf{r}^2}{2\hbar t}\right]$	170

Opérateur d'Alembertien $(1/c^2)(\partial^2/\partial t^2) - \Delta$

Dimension	Fonction de Green	Voir page
3+1	$G_{\infty}^{+}(\mathbf{r}; t) = \frac{c}{4\pi \mathbf{r} } \delta(ct - \mathbf{r})$	190
2+1	$G_{\infty}^{+}(\mathbf{r}, t) = \frac{c \theta(ct - \mathbf{r})}{2\pi \sqrt{c^2 t^2 - \mathbf{r} ^2}}$	363
1+1	$G_{\infty}^{+}(x, t) = \frac{c}{2} \theta(ct - x)$	365

Appendice J

Solutions des exercices

Chapitre 1

□ Solution de l'exercice 1.1. Fonctions de réponse associées à des opérateurs linéaires

Pour déterminer les fonctions de réponse, il suffit d'utiliser le résultat (C.2), page 309. Pour le premier opérateur différentiel, le résultat est :

$$K_1(t - t') = \theta(t - t')e^{-a(t-t')} \quad \text{et} \quad \chi_1(z) = \frac{1}{a - iz}.$$

Pour $a < 0$, la transformée de Laplace n'est définie que pour $\text{Im } z > -a$, mais le résultat est prolongeable analytiquement sur $\mathbb{C} \setminus \{-ia\}$.

Pour le second opérateur, le résultat est :

$$K_2(t - t') = \frac{1}{\omega}\theta(t - t')\sin(\omega(t - t')) \quad \text{et} \quad \chi_2(z) = \frac{-1}{z^2 - \omega^2}$$

avec $b = \omega^2$. Pour $b = -\omega^2$, il faut remplacer la fonction sinus par la fonction sinus hyperbolique ; le résultat pour χ_2 est alors $\chi_2(z) = -1/(z^2 + \omega^2)$.

□ Solution de l'exercice 1.2. Fonction de réponse d'un circuit RLC

Les deux premiers calculs ne présentent pas de difficulté particulière. Notez qu'il faut d'abord calculer la fonction de réponse reliée à la charge Q du condensateur puis dériver cette fonction pour obtenir la fonction de réponse en intensité. La transformée de Laplace inverse de $\chi(z)$ se calcule en décomposant $\chi(z)$ en éléments simples puis en utilisant le tableau B.1, page 306, de transformées de Laplace de fonctions usuelles. On trouve ainsi les résultats indiqués p. 24. Plutôt que de détailler ce calcul, indiquons comment fonctionne la formule d'inversion (B.2), p. 306, sur l'élément simple $f(z) = 1/(z - z_1)$ avec

$\text{Im } z_1 < 0$. Soit $F(t)$ la transformée de Laplace inverse de $f(z)$. L'application de la formule (B.2) donne :

$$F(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty+i\gamma}^{+\infty+i\gamma} dz \frac{e^{-izt}}{z - z_1}$$

avec $\gamma > \text{Im } z_1$. Prenons par exemple $\gamma = 0$. Il suffit alors de déformer le contour d'intégration comme indiqué sur la figure J.1 et d'appliquer le lemme de Jordan et le théorème des résidus pour trouver :

$$F(t) = \frac{1}{2\pi} (-2i\pi) e^{-iz_1 t} = -i e^{-iz_1 t}.$$

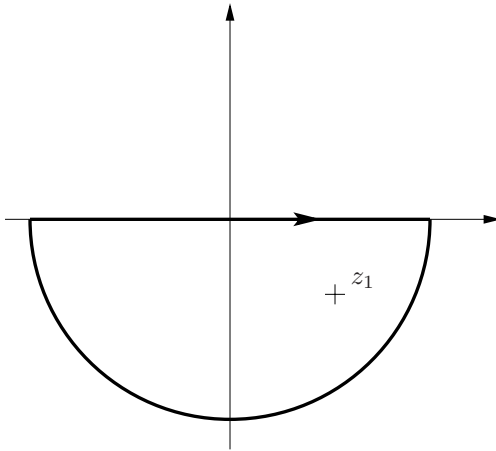


FIG. J.1 – Contour permettant de calculer $F(t)$ par application du lemme de Jordan et théorème des résidus.

□ Solution de l'exercice 1.3. Particule brownienne chargée

1. Il vient immédiatement

$$\chi(z) = \frac{1}{\gamma - imz} \quad \text{et} \quad -iz\mu(z) = \chi(z).$$

La susceptibilité χ satisfait aux relations de K.K sous leur forme usuelle, car $\chi(z)$ est analytique sur l'axe réel. Par contre, la susceptibilité μ satisfait aux relations de K.K. généralisées, car $\mu(z)$ présente un pôle simple en $z = 0$.

2. Les fonctions de réponse s'obtiennent aisément (voir les méthodes de l'exercice 1.2) :

$$R(\tau) = \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\frac{\gamma}{m}\tau}), \quad \text{et} \quad V(\tau) = \frac{dR}{d\tau}.$$

3. Le terme constant dans $R(\tau)$ quand $\tau \rightarrow \infty$ est à l'origine du pôle en $z = 0$ pour $\mu(z)$. Ce terme disparaît si on ajoute une force de rappel dans l'équation du mouvement, en mettant par exemple la particule dans un puits de potentiel harmonique. La situation ainsi obtenue est similaire à celle du circuit RLC vue au §1.2.1, page 21, ou au modèle de l'électron élastiquement lié vu p. 30.

□ Solution de l'exercice 1.4. Raie d'absorption

1. Il faut prendre cette combinaison des deux distributions de Dirac centrées en ω_0 et $-\omega_0$ parce que $\chi''(\omega)$ est une fonction impaire de ω .

2. L'application des relations de Kramers-Kronig mène à :

$$\chi'(\omega) = \frac{-2\sigma\omega_0}{\pi(\omega^2 - \omega_0^2)}. \quad (\text{J.1})$$

3. La susceptibilité χ_ϵ peut s'écrire comme :

$$\chi_\epsilon(z) = \frac{-\sigma}{\pi} \left(\frac{1}{z - \omega_0 + i\epsilon} - \frac{1}{z + \omega_0 + i\epsilon} \right).$$

Les parties réelles et imaginaires sont donc :

$$\begin{aligned} \chi'_\epsilon(\omega) &= -\frac{\sigma}{\pi} \left(\frac{\omega - \omega_0}{(\omega - \omega_0)^2 + \epsilon^2} - \frac{\omega + \omega_0}{(\omega + \omega_0)^2 + \epsilon^2} \right), \\ \chi''_\epsilon(\omega) &= \frac{\sigma}{\pi} \left(\frac{\epsilon}{(\omega - \omega_0)^2 + \epsilon^2} - \frac{\epsilon}{(\omega + \omega_0)^2 + \epsilon^2} \right). \end{aligned}$$

Notez que $\chi_\epsilon(z)$ a bien ses singularités dans $\mathbb{C}^-$, en $z = \pm\omega_0 - i\epsilon$. Le résultat (J.1) de la question précédente est bien retrouvé à la limite $\epsilon \rightarrow 0^+$.

4. Pour effectuer ce calcul, il suffit de décomposer en éléments simples les expressions apparaissant dans la relation de Kramers-Kronig,

$$\chi''_\epsilon(\omega) = \frac{\sigma}{\pi^2} \text{PP} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{1}{\omega' - \omega} \left(\frac{\omega' - \omega_0}{(\omega' - \omega_0)^2 + \epsilon^2} - \frac{\omega' + \omega_0}{(\omega' + \omega_0)^2 + \epsilon^2} \right).$$

□ Solution de l'exercice 1.5. Application des relations de Kramers-Kronig en astrophysique

1. Cette autre manière d'écrire les relations de Kramers-Kronig correspond en fait à la formulation originale de ces relations par Kramers. Elle découle simplement des relations (1.23), page 16, et des propriétés de parité et d'impairité respectivement de $\chi'(\omega)$ et $\chi''(\omega)$.

2. Dans un premier temps, écrivons la relation (1.96) pour $\omega = 0$:

$$\chi'(0) = \frac{2}{\pi} \text{PP} \int_0^\infty d\omega' \frac{\chi''(\omega')}{\omega'}. \quad (\text{J.2})$$

Comme $\chi''(\omega') > 0$ dans l'intégrant, la fraction du volume occupé par les grains ρr^3 vérifie

$$\rho r^3 \geq \frac{1}{2\pi^2} \frac{\epsilon_g + 2}{\epsilon_g - 1} \int_{\omega_1}^{\omega_2} d\omega \frac{\chi''(\omega)}{\omega}. \quad (\text{J.3})$$

Ce genre d'arguments a été développé et utilisé par E.M. Purcell en 1969 pour l'étude du milieu interstellaire.

□ Solution de l'exercice 1.6. Règles de somme

Pour obtenir $\tilde{\chi}(z)$ et $\tilde{\tilde{\chi}}(z)$, nous utilisons tout d'abord l'équation (1.13), p. 12, qui donne directement $\tilde{\chi}(z)$:

$$\tilde{\chi}(z) = -K_0(0) - iz\chi(z).$$

En réitérant ce résultat, nous obtenons :

$$\tilde{\tilde{\chi}}(z) = -K'_0(0) + izK_0(0) - z^2\chi(z).$$

Par hypothèse, $\tilde{\chi}(z)$ et $\tilde{\tilde{\chi}}(z)$ satisfont toutes les deux aux relations de K.K. ainsi qu'à la règle de somme (1.27), page 18, avec leur fonction de réponse respective. Les règles de somme demandées sont alors obtenues en exprimant les parties réelles de $\tilde{\chi}$ et $\tilde{\tilde{\chi}}$ en termes de χ' et χ'' , puis en écrivant ensuite la règle de somme (1.27) pour $\tilde{\chi}$ et $\tilde{\tilde{\chi}}$.

□ Solution de l'exercice 1.7. Réponse à un bruit

1. On montre aisément que $\langle x^2(t) \rangle = \alpha \int_{-\infty}^t dt_1 K^2(t; t_1)$.

2. La fonction de réponse de cet opérateur s'obtient facilement et vaut

$$K(\tau) = \frac{1}{m(\alpha_- - \alpha_+)} (e^{-\alpha_+\tau} - e^{-\alpha_-\tau})$$

avec $\alpha_{\pm} = \frac{\gamma}{2m} \left(1 \pm \sqrt{1 - 4 \frac{m^2 \omega^2}{\gamma^2}} \right)$. Il suffit alors d'effectuer le calcul de l'intégrale précédente.

□ Solution de l'exercice 1.8. Relations de Kramers-Kronig pour un métal

1. Pour pouvoir considérer que le champ est homogène dans l'échantillon, il faut que la taille de ce dernier soit très inférieure à la longueur d'onde du champ électrique, cette dernière étant donnée par le rapport de la vitesse de la lumière sur la fréquence.

2. La densité de courant s'exprime comme :

$$\mathbf{j} = \frac{\partial \mathbf{P}}{\partial t} = -i\omega\epsilon_0(\epsilon(\omega) - 1)\mathbf{E}.$$

D'autre part, dans la limite statique, la densité de courant est reliée au champ électrique par la conductivité σ :

$$\mathbf{j} = \sigma \mathbf{E}.$$

En comparant ces deux expressions, nous obtenons l'expression voulue pour la constante diélectrique à basse fréquence.

3. Il s'agit d'un cas particulier de susceptibilité avec des pôles simples sur l'axe réel. Nous pouvons donc utiliser les relations de K.K. généralisées (1.24), page 18, ce qui donne :

$$\epsilon''(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{PP} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{\epsilon'(\omega')}{(\omega' - \omega)} + \frac{\sigma}{\epsilon_0 \omega},$$

l'autre relation restant inchangée.

4. L'expression pour la constante diélectrique à grande fréquence est obtenue en supposant les électrons comme libres ; ils obéissent alors à l'équation différentielle

$$m \frac{d^2 \mathbf{r}}{dt^2} = q \mathbf{E}$$

ce qui donne :

$$\epsilon(\omega) - 1 \rightarrow -\frac{nq^2}{\epsilon_0 m \omega^2} \quad \text{lorsque} \quad \omega \rightarrow \infty.$$

Comme ce terme en $1/\omega^2$ est réel, il est clair que $\epsilon''(\omega)$ décroît plus vite que $1/\omega^2$. On en déduit donc par comparaison avec les développements (1.15) et (1.16), page 13, que $K_0(0) = 0$ et $K'_0(0) = nq^2/(\epsilon_0 m)$ où $K_0(\tau)$ est la

fonction de réponse associée à $\varepsilon(z) - 1$. La règle de somme (1.28), page 19 donne alors :

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega \, \omega \varepsilon''(\omega) = \frac{\pi n q^2}{\varepsilon_0 m}.$$

5. $\varepsilon''(\omega)$ satisfait bien aux contraintes que nous avons mentionnées pour ω petit et grand ainsi qu'à la condition de positivité pour $\omega > 0$. La règle de somme fixe alors $\tau = (m\sigma/nq^2)$.

6. C'est le modèle dit de Drude, dans lequel chaque charge est soumise à une simple force de frottement visqueux. Notons que ce modèle peut s'obtenir à partir de la limite $\omega_0 \rightarrow 0$ du modèle microscopique d'électrons élastiquement liés étudié au §1.2.2 (voir page 28). On peut en plus superposer à cette susceptibilité celle d'électrons liés correspondant à $\omega_0 \neq 0$ et simuler ainsi la contribution de différentes bandes électroniques (conduction, valence etc.).

□ Solution de l'exercice 1.9. Propagation des signaux dans les milieux diélectriques

1. Il faut imposer que $G(\tau)$ décroisse suffisamment vite à l'infini.

2. L'amplitude g_z correspond à la transformée de Laplace de $F(0, t)$. Comme $F(0, t)$ est bornée et causale, g_z est analytique dans le demi-plan complexe supérieur, ce qui justifie que $\gamma > 0$ dans la formule de la transformée de Laplace inverse (voir équation (B.2), page 306).

3. La forme générale de $F(x, t)$ s'obtient à partir de $F(0, t)$ et de l'équation d'onde :

$$F(x, t) = \int_{-\infty+i\gamma}^{\infty+i\gamma} dz \, g_z \, e^{-iz \left(t - \frac{\sqrt{\epsilon(z)}}{c} x \right)}.$$

Calculons cette intégrale pour $x > ct$: comme $\epsilon(z) \rightarrow 1$ quand $z \rightarrow \infty$, nous pouvons fermer le contour par le haut, avec un demi-cercle dont le rayon tend vers l'infini, et choisir γ suffisamment grand pour que $\sqrt{\epsilon(z)}$ soit analytique à l'intérieur du contour. L'application du lemme de Jordan et du théorème de Cauchy garantissent alors que cette intégrale est nulle. Bien sûr, pour $x < ct$ le résultat est différent car dans ce cas le domaine d'intégration est fermé par le bas : cela donne donc un contour d'intégration à l'intérieur duquel on aura des singularités. Notez que nous utilisons des arguments similaires dans l'exemple du chapitre 3, au §3.2.5, page 223.

Chapitre 2

□ Solution de l'exercice 2.1. Fonction de Green G_∞ du Laplacien en 3d

1. Comme $G_\infty(\mathbf{r})$ ne dépend que de r , l'équation (2.120) s'écrit pour $r \neq 0$:

$$\frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{dG_\infty}{dr} \right) = \frac{d^2 G_\infty}{dr^2} + \frac{2}{r} \frac{dG_\infty}{dr} = 0.$$

2. Deux solutions indépendantes de cette équation sont A/r et B où A et B sont des constantes. Cependant, la seconde solution est incompatible avec la condition aux limites à l'infini de telle sorte que $G_\infty(r) = A/r$.

3. La constante A peut être fixée en utilisant le théorème de Gauss, qui s'obtient en intégrant l'équation (2.120) dans un volume V contenant l'origine :

$$-\int_V d\mathbf{r} \Delta G_\infty = -\int_{\partial V} dS \mathbf{n} \cdot \nabla G_\infty = 1.$$

Prenons pour V une sphère centrée à l'origine : comme $\mathbf{n} \cdot \nabla G_\infty = (\partial G_\infty / \partial r) = -(A/r^2)$, nous obtenons le résultat attendu i.e. $4\pi A = 1$.

□ Solution de l'exercice 2.2. Fonction de Green G_∞ du Laplacien en dimension $d \geq 3$

Pour $d > 2$, deux solutions indépendantes de l'équation $\Delta f(r) = 0$ sont $f(r) = (A/r^{d-2})$ et $f(r) = B$. Seule la première de ces solutions satisfait la condition aux limites. Finalement, la constante A est fixée, comme dans l'exercice 2.1 par le théorème de Gauss de telle sorte que

$$G_\infty(r) = \frac{1}{(d-2)\Omega_d r^{d-2}}.$$

Notez que l'exercice 3.7, page 238, permet aussi de calculer cette fonction de Green, à partir de la fonction de Green de l'équation de diffusion. On trouve alors $\Omega_d = (2\pi^{d/2}/\Gamma(d/2))$ où la fonction d'Euler Γ vérifie $\Gamma(x+1) = x\Gamma(x)$, $\Gamma(1) = 1$ et $\Gamma(1/2) = \sqrt{\pi}$.

□ **Solution de l'exercice 2.3. Fonctions de Green du Laplacien en 1d et 2d**

1. Il est clair que l'origine peut être prise en x' sans perte de généralité. Il faut donc calculer :

$$-\frac{1}{2} \int_{-\infty}^{\infty} dx f(x) \frac{d^2}{dx^2} |x|.$$

En intégrant une fois par parties, nous obtenons :

$$-\frac{1}{2} \int_{-\infty}^0 dx \frac{df(x)}{dx} \frac{d}{dx} x + \frac{1}{2} \int_0^{\infty} dx \frac{df(x)}{dx} \frac{d}{dx} x = -f(0)$$

où nous avons supposé que $\lim_{x \rightarrow \pm\infty} f(x) = 0$. Ce résultat confirme bien que

$$\frac{1}{2} \Delta(|x|) = \delta(x).$$

2. Pour le cas bi-dimensionnel, nous commençons par écrire le Laplacien de $G(r)$ en coordonnées polaires :

$$\Delta G(r) = -\frac{1}{2\pi} \left[\frac{d^2}{dr^2} \ln r + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \ln r \right].$$

Nous appliquons ensuite une fonction-test $f(r, \theta)$ et évaluons :

$$-\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} dr r f(r, \theta) \left[\frac{d^2}{dr^2} \ln r + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \ln r \right].$$

Nous pouvons ensuite intégrer par parties le terme en $(d^2/dr^2) \ln r$; cela donne, après simplifications :

$$\frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\theta \int_0^{\infty} dr r \frac{\partial}{\partial r} (f(r, \theta)) \frac{d}{dr} \ln r = -f(\mathbf{r} = 0).$$

Nous avons là aussi supposé que f s'annule à l'infini. Ce résultat montre donc qu'à deux dimensions

$$\frac{1}{2\pi} \Delta(\ln r) = \delta(\mathbf{r}).$$

□ **Solution de l'exercice 2.4. Symétrie des fonctions de Green du Laplacien avec C.L. de Dirichlet homogènes**

Appliquons la seconde formule de Green (2.20), page 73, à $u(\mathbf{r}) = G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1)$ et à $v(\mathbf{r}) = G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_2)$ où G est une fonction de Green quelconque du Laplacien. Cela donne :

$$G(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2) - G(\mathbf{r}_2; \mathbf{r}_1) = \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma \mathbf{n} \cdot [G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1) \nabla G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_2) - G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_2) \nabla G(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1)]. \quad (\text{J.4})$$

Si G satisfait des C.L. de Dirichlet homogènes, le terme de droite dans l'équation précédente est nul et donc G est symétrique.

□ **Solution de l'exercice 2.5. Fonctions de Green de Neumann spéciales du Laplacien**

1. La fonction F s'obtient facilement à partir du résultat (J.4) de l'exercice 2.4.

$$F(\mathbf{r}) = -\frac{1}{S} \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma'' G_{\bar{N}}(\mathbf{r}''; \mathbf{r}).$$

Comme la différence entre $\tilde{G}_{\bar{N}}$ et $G_{\bar{N}}$ est une fonction ne dépendant que de $\mathbf{r}'$, $\tilde{G}_{\bar{N}}(\mathbf{r}; \mathbf{r}')$ est aussi une fonction de Green du Laplacien ; de plus, elle vérifie la C.L. (2.122) et la C.L. (2.123) avec $\tilde{c}(\mathbf{r}') = c(\mathbf{r}') + F(\mathbf{r}')$. C'est donc bien une fonction de Green de Neumann spéciale, qui de plus est symétrique.

2. La différence entre les deux expressions (2.39) obtenues avec $\tilde{G}_{\bar{N}}$ et $G_{\bar{N}}$ vaut :

$$\delta\phi(\mathbf{r}) = F(\mathbf{r}) \left(\int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \rho(\mathbf{r}') + \oint_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \phi(\mathbf{r}') \right),$$

qui s'annule par le théorème de Green-Ostrogradski.

□ **Solution de l'exercice 2.6. Règles de somme et résolvante**

1. On montre que

$$\int_0^1 \prod_{i=1}^m dy_i \, G_\lambda(y_1, y_2) \cdots G_\lambda(y_{m-1}, y_m) G_\lambda(y_m, y_1) = \sum_n \frac{1}{(\lambda_n + \lambda)^m} \quad (\text{J.5})$$

simplement à partir de la représentation spectrale (2.77), page 101, et de l'orthonormalité des fonctions propres ψ_n . Notons que l'expression ainsi calculée n'est rien d'autre que la trace de l'opérateur $1/(\mathcal{O} + \lambda)^m$. On trouve ainsi une famille de règles de somme pour la fonction de Green G_λ .

2. Tout d'abord, la fonction de Green ainsi exprimée satisfait bien aux conditions de Dirichlet homogènes. Il est facile de vérifier qu'elle est solution de l'EDP (2.124) en réécrivant cette fonction en termes de $\theta(\pm(x - x'))$. Une possibilité est de faire le changement de variables adéquat dans l'expression (2.52), page 88. En effet, pour $\lambda = \omega^2 \pi^2$, G_λ est la fonction de Green de Dirichlet homogène de l'opérateur d'Helmholtz sur le segment $[0, 1]$. Une autre méthode consiste à utiliser le résultat (C.6), page 311.

3. Pour répondre à cette question, il suffit d'écrire la règle de somme (J.5) pour $\lambda = \omega^2 \pi^2$ et $m = 1$, sachant que $\lambda_n = n^2 \pi^2$.

4. La fonction de Green pour $z = 0$ s'obtient facilement et vaut

$$G_0(x; x') = -x_{<}(x_{>} - 1).$$

Le résultat demandé s'obtient en appliquant à nouveau la règle de somme (J.5) avec $m = 1$.

□ Solution de l'exercice 2.7. Plan conducteur

1. $\hat{G}_{DH}(x; x'; \mathbf{k})$ est solution de l'équation différentielle

$$\left(-\frac{\partial^2}{\partial x^2} + k^2\right) \hat{G}_{DH}(x; x'; \mathbf{k}) = \delta(x - x').$$

De plus $\hat{G}_{DH}(x; x'; \mathbf{k})$ s'annule en $x = 0$ et pour $x \rightarrow +\infty$. $\hat{G}_{DH}$ s'identifie donc avec la fonction de Green de Dirichlet homogène de l'opérateur de Helmholtz unidimensionnel dans le domaine $x \geq 0$.

2. Prenons comme solutions indépendantes de l'équation homogène

$$-\frac{d^2 \phi}{dx^2} + k^2 \phi = 0$$

les fonctions $\phi_{\pm}(x) = e^{\pm kx}$ de Wronskien $-2k$. L'application de la méthode de variation de la constante (voir page 310) donne alors :

$$\hat{G}_{DH}(x; x'; k) = \frac{1}{2k} \left(e^{-k|x-x'|} - e^{-k|x+x'|} \right). \quad (\text{J.6})$$

Ce résultat intermédiaire illustre bien sûr la méthode des images puisque les premiers et seconds termes dans l'équation (J.6) correspondent à la fonction de Green (2.66) de l'opérateur de Helmholtz unidimensionnel avec C.L. à l'infini pour des sources respectivement en x' et en son image $-x'$ par rapport à l'origine ! Notons que ce résultat peut aussi être obtenu en prenant la limite appropriée de la fonction de Green de Dirichlet homogène de l'opérateur de Helmholtz sur un segment de longueur L , donnée par l'équation (2.52).

3. Donnons quelques étapes du calcul de la transformée de Fourier inverse de $\tilde{G}_{DH}$. Après être passé aux coordonnées polaires (k, θ) puis avoir intégré sur k , il faut évaluer l'intégrale

$$\int_0^{2\pi} d\theta \frac{1}{i\rho \cos \theta - |x \pm x'|},$$

où $\rho = \sqrt{(y - y')^2 + (z - z')^2}$. Cette intégrale se calcule en passant dans le plan complexe en posant $z = e^{i\theta}$. Cela nous conduit à l'intégrale

$$\oint_{\mathcal{C}} dz \frac{2}{(z^2 + \frac{2i|x \pm x'|}{\rho}z + 1)} \quad (\text{J.7})$$

où le contour d'intégration $\mathcal{C}$ est le cercle unité. Pour la calculer, il faut utiliser le théorème des résidus. Les deux pôles de l'intégrand sont en

$$z_{\pm} = -\frac{i}{\rho} \left(|x \pm x'| \pm \sqrt{|x \pm x'|^2 + \rho^2} \right)$$

mais seul z_- est à l'intérieur du contour d'intégration (voir figure J.2). Le

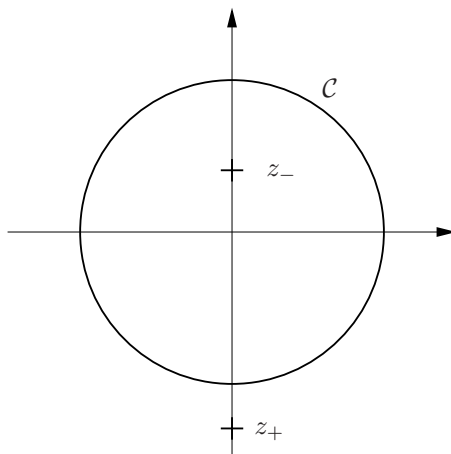


FIG. J.2 – Contour d'intégration $\mathcal{C}$ associé au calcul de l'intégrale (J.7) : seul le pôle z_- est à l'intérieur de $\mathcal{C}$.

résultat final est bien sûr

$$G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = G_{\infty}(\mathbf{r} - \mathbf{r}') - G_{\infty}(\mathbf{r} - \mathbf{r}'_{im}) \quad (\text{J.8})$$

où $\mathbf{r}'_{im}$ est l'image de $\mathbf{r}'$. Cet exercice est une illustration de l'efficacité de la méthode des images. En effet, le résultat (J.8) est obtenu beaucoup moins rapidement par transformée de Fourier que par la méthode des images!

□ Solution de l'exercice 2.8. Fonctions de Green du Laplacien en coordonnées sphériques

1. Pour répondre à cette question, il faut écrire le Laplacien de G en coordonnées sphériques et identifier terme à terme avec le développement de $\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}')$ en harmoniques sphériques. Il s'ensuit que $g_{lm}(r; r')$ ne dépend pas de m et est solution de l'équation différentielle

$$\frac{1}{r^2} \frac{\partial}{\partial r} \left(r^2 \frac{\partial g_l}{\partial r} \right) - \frac{l(l+1)}{r^2} g_l = -\frac{1}{r^2} \delta(r - r'). \quad (\text{J.9})$$

Les solutions de l'EDP homogène associée à l'EDP (J.9) correspondent bien sûr à la partie radiale des fonctions harmoniques. Elles sont obtenues par exemple en posant $h_l = r g_l$ et sont de la forme $A_l r^l + B_l r^{-(l+1)}$.

2. Le résultat (2.125) est obtenu par application de la formule¹ (C.6) à

$$\Phi_1(r) = r^l - \frac{a^{2l+1}}{r^{l+1}} \quad \text{et} \quad \Phi_2(r) = \frac{1}{r^{l+1}} - \frac{r^l}{b^{2l+1}},$$

qui sont solutions de l'équation homogène, s'annulent respectivement en $r = a$ et en $r = b$, restent finies respectivement lorsque $a \rightarrow 0$ et $b \rightarrow \infty$, et ont pour Wronskien

$$-\frac{2l+1}{r^2} \left[1 - \left(\frac{a}{b} \right)^{2l+1} \right].$$

3. La limite $a \rightarrow 0$ dans l'expression (2.125) de la fonction de Green $G_{a,b}$ donne le résultat (2.126) recherché pour G_b .

4. De même, la limite $b \rightarrow \infty$ dans l'expression (2.125) de la fonction de Green $G_{a,b}$ donne le résultat (2.127) recherché pour G_a .

5. Pour conclure cet exercice, il faut simplement prendre la limite $a \rightarrow 0$ dans l'expression de G_a , ou bien la limite $b \rightarrow \infty$ dans G_b , ce qui ne pose pas de difficulté.

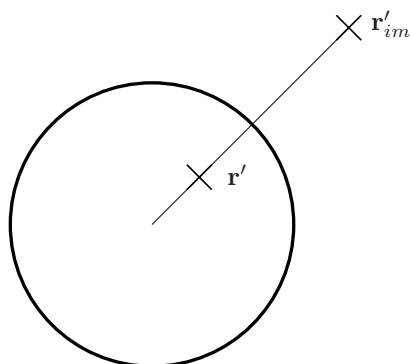
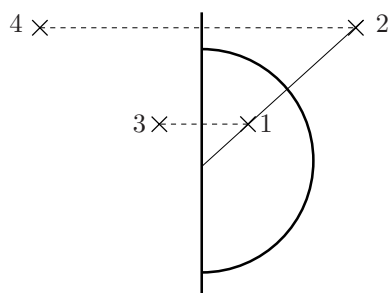
□ Solution de l'exercice 2.9. Charge ponctuelle dans une sphère conductrice

1. Les C.L. recherchées sont garanties si la charge fictive, de valeur $-a/r'$, est placée en $r'_{im} = a^2/r'$ et avec les mêmes angles orbitaux et azimutaux que $\mathbf{r}'$ (voir figure J.3). Nous retrouvons alors le résultat² (2.126).

2. Il suffit de placer des charges fictives supplémentaires, symétriques par rapport au plan $x = 0$, *i.e.* avec $\tilde{\varphi} = -\varphi' + \pi$ (voir figure J.4).

1. Il faut prendre garde dans l'application de cette formule au facteur $-1/r^2$ multipliant la fonction de Dirac dans le terme de droite de l'équation (J.9).

2. Bien entendu, b doit être remplacé par a dans l'expression (2.126).

FIG. J.3 – Charge en r' et charge image en r'_{im} .FIG. J.4 – Sur cette figure, la charge en r' est appelée 1. La charge image 2 a pour valeur $-a/r'$, celle en 3 la valeur -1 et celle en 4 la valeur a/r' .

3. La limite à prendre est tout simplement $a \rightarrow \infty$ qui s'obtient facilement pour ensuite reconnaître l'expression correspondant à deux charges identiques et symétriques par rapport au plan $x = 0$.

□ Solution de l'exercice 2.10. Charge ponctuelle et sphère diélectrique

1. La fonction $\psi(\mathbf{r})$ est harmonique à l'intérieur et à l'extérieur de la sphère et tend vers zéro à l'infini. Sa forme est donc :

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{B_l}{r^{l+1}} P_l(\cos \theta) \quad \text{pour } r > R, \quad (\text{J.10})$$

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l r^l P_l(\cos \theta) \quad \text{pour } r < R. \quad (\text{J.11})$$

2. La fonction ϕ_0 et sa dérivée sont continues sur la sphère. De plus, comme $R < r_0$,

$$\phi_0(R, \theta) = \frac{q}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{R^l}{r_0^{l+1}} P_l(\cos \theta).$$

Les conditions de passage à la surface de la sphère sont donc :

$$B_l = A_l R^{2l+1}, \quad (\text{J.12})$$

$$\frac{q}{4\pi} \frac{l R^{l-1}}{r_0^{l+1}} - (l+1) \frac{B_l}{R^{l+2}} = \frac{q}{4\pi} \epsilon \frac{l R^{l-1}}{r_0^{l+1}} + \epsilon l R^{l-1} A_l. \quad (\text{J.13})$$

Elles se résolvent facilement pour donner

$$A_l = \frac{q}{4\pi} \frac{(1-\epsilon)l}{r_0^{l+1} [(1+\epsilon)l+1]}.$$

Le lecteur peut remarquer que $A_0 = 0$, ce qui indique que le terme monopolaire dans l'expression du potentiel électrique n'est pas affecté par la présence de la sphère. Ceci n'est en fait que la manifestation de sa neutralité électrique. Concluons en donnant l'expression du potentiel électrique pour $r > r_0$:

$$\phi(\mathbf{r}) = \frac{q}{4\pi} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{1}{r^{l+1}} \left(r_0^l - \frac{R^{2l+1}}{r_0^{l+1}} \frac{(\epsilon-1)l}{[(1+\epsilon)l+1]} \right) P_l(\cos \theta).$$

□ Solution de l'exercice 2.11. Fonction de Green G_{∞} du Laplacien en coordonnées cylindriques

1. Pour établir le résultat demandé, il faut commencer par appliquer la formule (F.2), page 324, donnant l'expression de la distribution de Dirac lors d'un changement de coordonnées. Ainsi

$$\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{\rho} \delta(\rho - \rho') \delta(\varphi - \varphi') \delta(z - z').$$

L'expression (2.130) de l'énoncé vient alors de la réécriture des distributions de Dirac portant sur ϕ et sur z .

2. L'équation différentielle recherchée est :

$$\frac{\partial}{\partial \rho} \left(\rho \frac{\partial g_{mk}}{\partial \rho} \right) - \left(k^2 \rho + \frac{m^2}{\rho} \right) g_{mk}(\rho; \rho') = -\delta(\rho - \rho').$$

Elle est obtenue à partir de l'écriture de l'opérateur Laplacien en coordonnées cylindriques.

3. Supposons $\rho < \rho'$ et appliquons le résultat (C.4), page 310, avec

$$F(x) = -\frac{1}{x}\delta(x - \rho'), \quad \Phi_1(\rho) = I_m(k\rho), \quad \Phi_2(\rho) = K_m(k\rho),$$

et enfin $t_0 = \infty$, $t_1 = 0$. Il vient ainsi $g_{mk}(\rho, \rho') = I_m(k\rho)K_m(k\rho')$ d'où le résultat final par symétrie entre ρ et ρ' .

□ Solution de l'exercice 2.12. Tenseur d'Oseen

1. La pression p vérifie l'équation

$$-\Delta p = \nabla \cdot \mathbf{f}.$$

Elle est donc univoquement déterminée si des C.L. de Dirichlet ou de Neumann sont imposées sur $\partial\mathcal{D}$. La vitesse est alors solution de l'équation

$$\eta\Delta\mathbf{v} = \mathbf{f} + \nabla p$$

et, donc, à nouveau, des C.L. de Dirichlet ou de Neumann rendent la solution unique. Bien entendu, ces C.L. doivent être compatible avec la condition $\nabla \cdot \mathbf{v} = 0$!

2. La pression s'exprime ainsi en termes de f :

$$p(\mathbf{r}) = \int d\mathbf{r}' G_\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \nabla_{\mathbf{r}'} \cdot \mathbf{f}(\mathbf{r}'). \quad (\text{J.14})$$

La pression est inchangée lors de la transformation proposée.

3. La vitesse est simplement donnée par :

$$\eta v_i(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r}' G_\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [f_i(\mathbf{r}') + \partial'_i p(\mathbf{r}')]]$$

avec $\partial'_i = (\partial/\partial x'_i)$. Il faut alors utiliser le résultat (J.14). L'expression ainsi obtenue peut se réécrire comme

$$\eta v_i(\mathbf{r}) = - \int d\mathbf{r}' d\mathbf{r}'' G_\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}') [\delta_{ij} \delta(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'') + \partial'_i \partial'_j G_\infty(\mathbf{r}' - \mathbf{r}'')] f_j(\mathbf{r}''),$$

qui fait apparaître le tenseur dit d'Oseen. À nouveau, $\mathbf{v}$ est inchangée lors de la transformation proposée.

□ **Solution de l'exercice 2.13. Fonction de Green en théorie de l'élasticité**

1. $\mathbf{g}_0^i(\mathbf{r})$ s'obtient directement à partir de la fonction de Green G_∞ du Laplacien :

$$\mathbf{g}_0^i(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi r} \mathbf{e}_i.$$

L'EDP satisfaite par $\mathbf{g}_1^i(\mathbf{r})$ est :

$$(1 - 2\sigma)\Delta\mathbf{g}_1^i(\mathbf{r}) + \nabla(\nabla \cdot \mathbf{g}_1^i(\mathbf{r})) = -\nabla(\nabla \cdot \mathbf{g}_0^i(\mathbf{r})). \quad (\text{J.15})$$

2. En prenant le rotationnel de l'équation ci-dessus, on obtient que

$$\Delta(\nabla \wedge \mathbf{g}_1^i(\mathbf{r})) = 0,$$

qui, combiné aux C. L., impose $\nabla \wedge \mathbf{g}_1^i(\mathbf{r}) = 0$. la fonction $\mathbf{g}_1^i$, dont le rotationnel est nul, peut donc être écrite comme le gradient d'une fonction scalaire.

3. ϕ^i satisfait à l'équation

$$\Delta\phi^i(\mathbf{r}) = -\frac{1}{8\pi(1-\sigma)} \frac{\partial}{\partial x_i} \frac{1}{r}. \quad (\text{J.16})$$

Le lecteur peut vérifier facilement que l'expression donnée dans l'énoncé pour ϕ^i est une solution qui produit les C. L. adéquates pour $\mathbf{g}_1^i$.

4. Ayant l'expression pour $\mathbf{g}_0^i(\mathbf{r})$ et $\mathbf{g}_1^i(\mathbf{r})$, nous pouvons calculer les composantes du tenseur de Green :

$$G^{ij}(\mathbf{r}) = \frac{1}{4\pi} \left[\frac{\delta^{ij}}{r} - \frac{1}{4(1-\sigma)} \frac{\partial^2}{\partial x_i \partial x_j} r \right]. \quad (\text{J.17})$$

□ **Solution de l'exercice 2.14. Laplacien discret et réseau de résistances**

1. Le courant circulant de $\mathbf{r} + \mathbf{e}_i$ à $\mathbf{r}$, deux sites voisins du réseau, est donné par (voir figure J.5)

$$[V(\mathbf{r} + \mathbf{e}_i) - V(\mathbf{r})]/R.$$

En l'absence d'ohmmètre le courant total entrant dans chaque vertex doit être nul, ce qui nous donne automatiquement $\Delta V(\mathbf{r}) = 0$.

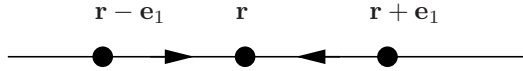


FIG. J.5 – Bilan des courants arrivant au point $\mathbf{r}$ dans le cas uni-dimensionnel.

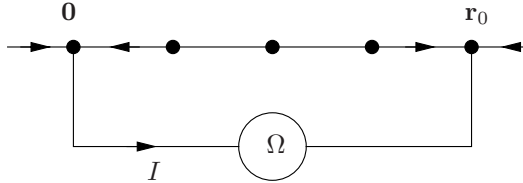


FIG. J.6 – Représentation du cas unidimensionnel. L’ohmmètre mesure la résistance entre les deux points $\mathbf{0}$ et $\mathbf{r}_0$.

2. Comme des courants I et $-I$ sont injectés aux vertex $\mathbf{r}_0$ et $\mathbf{0}$ respectivement, la loi de Kirchhoff nous impose (voir figure J.6)

$$\Delta V(\mathbf{r}) = RI (\delta_{\mathbf{r},\mathbf{r}_0} - \delta_{\mathbf{r},\mathbf{0}}). \quad (\text{J.18})$$

3. La résistance entre $\mathbf{r}_0$ et $\mathbf{0}$ est donnée par $R(\mathbf{r}_0) = (V(0) - V(\mathbf{r}_0))/I$. Or, la solution de l’équation (J.18) est

$$V(\mathbf{r}) = RI [G(\mathbf{r}) - G(\mathbf{r} - \mathbf{r}_0)].$$

En conséquence,

$$R(\mathbf{r}_0) = 2R [G(0) - G(\mathbf{r}_0)]$$

où le résultat $G(\mathbf{r}) = G(-\mathbf{r})$ a été utilisé.

4. En écrivant

$$G(\mathbf{r}) = \int_{[-\pi,\pi]^d} \frac{d^d k}{(\sqrt{2\pi})^d} \hat{G}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}$$

nous obtenons

$$\hat{G}(\mathbf{k}) = \frac{1}{(\sqrt{2\pi})^d} \left(\frac{1}{2(d - \sum_i \cos k_i)} \right).$$

Le résultat final pour la résistance est

$$R(\mathbf{r}_0) = R \int_{[-\pi,\pi]^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1 - e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}_0}}{d - \sum_i \cos k_i}.$$

En une dimension, cette intégrale se calcule par le théorème des résidus pour obtenir le résultat attendu : $R(\mathbf{r}_0) = Rr_0$.

5. Pour $|\mathbf{r}_0| \gg 1$, les termes dominants dans l'intégrale qui définit $R(\mathbf{r}_0)$ sont donnés par les petits $|\mathbf{k}|$. Nous pouvons donc écrire $2(d - \sum_i \cos k_i) \simeq d\mathbf{k}^2$ et nous retrouvons l'expression de la fonction de Green du Laplacien en deux dimensions. Donc, le terme dominant dans $R(\mathbf{r}_0)$ est $(R/\pi) \ln r_0$. Par ailleurs, l'expression pour la résistance entre deux sites voisins s'obtient très facilement en observant que $R(\mathbf{e}_1) = R(\mathbf{e}_2)$ et que :

$$R(\mathbf{e}_1) + R(\mathbf{e}_2) = R \int_{[-\pi, \pi]^2} \frac{d^2 k}{(2\pi)^2} = R$$

de telle sorte que $R(\mathbf{e}_1) = (R/2)$.

□ Solution de l'exercice 2.15. Méthode des images pour un problème bidimensionnel

1. Pour obtenir l'expression de Φ en termes de sa valeur sur le bord du domaine, nous utilisons l'expression (2.37) faisant intervenir la fonction de Green G_{DH} satisfaisant aux conditions de Dirichlet homogènes. Cette dernière s'obtient facilement avec la méthode des images :

$$G_{DH}(\mathbf{r}; \mathbf{r}') = -\frac{1}{4\pi} \ln \left(\frac{(x - x')^2 + (y - y')^2}{(x + x')^2 + (y - y')^2} \right).$$

Une fois obtenue la dérivée normale de la fonction de Green, le résultat final est :

$$\Phi(x, y) = \frac{x}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dy' \left[\frac{f(y')}{x^2 + (y - y')^2} \right].$$

2. Vérifier que l'expression obtenue satisfait bien aux conditions au bord voulues revient à remarquer que la fonction

$$d(x, y) = \frac{x}{\pi(x^2 + y^2)}$$

tend, au sens des distributions, vers la fonction $\delta(y)$ pour $x \rightarrow 0$. Pour cela, on peut par exemple appliquer des fonctions test, ou de façon moins formelle, remarquer que

$$\lim_{x \rightarrow 0} d(x, y) \rightarrow 0$$

pour tout $y \neq 0$ et que

$$\int_{-\infty}^{\infty} dy d(x, y) = 1, \quad \forall x.$$

3. Pour montrer que $\Phi(x, y)$ ainsi obtenue est une fonction harmonique pour $x > 0$, nous pouvons remarquer que la fonction $d(x, y)$ est la partie réelle de la fonction analytique $\mathcal{F}(z) = 1/(\pi z)$.

□ **Solution de l'exercice 2.16. Hangar semi-cylindrique soumis au vent**

1. Les C.L. satisfaites par $\mathbf{u}$ sont : $\mathbf{u}_\perp = 0$ sur le sol et sur le hangar (C.L. de Neumann), et $\mathbf{u} = \mathbf{u}_0$ à l'infini.

2. Pour trouver la transformation conforme recherchée, on peut remarquer que

$$\cos \theta = \frac{1}{2} \left(e^{i\theta} + \frac{1}{e^{i\theta}} \right),$$

ce qui signifie que lorsque $\exp(i\theta)$ décrit le demi-cercle supérieur, $x = \cos \theta$ décrit le segment $[-1, 1]$. Ceci nous oriente donc vers la transformation

$$Z = z + \frac{R^2}{z}.$$

3. En procédant comme au §2.2.5, nous trouvons $\phi(r, \theta) = u_0 r \cos \theta (1 + \frac{R^2}{r^2})$. Par ailleurs,

$$\begin{aligned} u_x &= u_0 \left(1 - \frac{R^2}{r^2} \cos(2\theta) \right) & ; & & u_y &= -u_0 \frac{R^2}{r^2} \sin 2\theta, \\ u_r &= u_0 \cos \theta \left(1 - \frac{R^2}{r^2} \right) & ; & & u_\theta &= -u_0 \sin \theta \left(1 + \frac{R^2}{r^2} \right). \end{aligned} \quad (\text{J.19})$$

4. Partant de la décomposition de $\phi(r, \theta)$ en série de Fourier,

$$\phi(r, \theta) = \sum_{l=0}^{+\infty} c_l(r) \cos(l\theta),$$

obtenue en exploitant le caractère réel de ϕ , on trouve que les C.L. imposent que seuls $c_0(r)$ et $c_1(r)$ sont non nuls. De plus $c_0(r)$ est une pure constante sans effet sur le champ de vitesse, alors que $c_1(r) = u_0 r [1 + (R^2/r^2)]$, ce qui redonne bien le champ de vitesse précédent.

5. Pour calculer cette force, il faut utiliser la relation de Bernoulli; on trouve $F_y = \frac{8}{3} \rho u_0^2 L R$. Il y a une dépression et le toit est arraché!

□ **Solution de l'exercice 2.17. Opérateur de Dirac**

1. Cette question ne pose pas de difficulté : il suffit d'agir avec l'opérateur étudié sur l'expression de $f_i(\mathbf{r})$ proposée.

2. Pour déterminer la matrice de Green G , remarquons que

$$\begin{pmatrix} \partial_x & \partial_y \\ \partial_y & -\partial_x \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \partial_x & \partial_y \\ \partial_y & -\partial_x \end{pmatrix} = \Delta \mathcal{I}$$

où Δ est l'opérateur Laplacien bi-dimensionnel. Ainsi, la matrice G satisfait l'équation matricielle

$$\Delta_{\mathbf{r}} G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \begin{pmatrix} \partial_x & \partial_y \\ \partial_y & -\partial_x \end{pmatrix} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}').$$

Cette équation se résout à l'aide de la fonction de Green (2.67), page 97, de l'opérateur Laplacien bi-dimensionnel, i.e. :

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \int_{\mathbb{R}^2} d\mathbf{r}'' \frac{1}{2\pi} \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}''| \begin{pmatrix} \partial_{x''} & \partial_{y''} \\ \partial_{y''} & -\partial_{x''} \end{pmatrix} \delta(\mathbf{r}'' - \mathbf{r}'),$$

qui donne le résultat final

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{1}{2\pi} \begin{pmatrix} \partial_x & \partial_y \\ \partial_y & -\partial_x \end{pmatrix} \ln |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|.$$

3. Une intégration par parties mène au résultat :

$$f_1 \rightarrow f_1 + h \quad \text{et} \quad f_2 \rightarrow f_2.$$

□ Solution de l'exercice 2.18. Avance du périhélie de Mercure

1. La fonction de Green se calcule facilement :

$$G(\phi - \phi') = \theta(\phi - \phi') \sin(\phi - \phi').$$

2. La démonstration de l'équation intégrale (2.137) ne pose pas de difficulté. La fonction $h(\phi)$ sert juste à assurer les conditions initiales. Remarquons que nous obtenons ainsi une équation intégrale pour la solution d'une équation différentielle non-linéaire.

3. La fonction recherchée vaut $h(\phi) = \alpha(1 + e) \cos \phi$.

4. Pour répondre à cette question, partons de l'équation intégrale (2.137), p. 140, et appliquons la méthode vue page 102 dans un autre contexte. Notons $u_0(\phi) = \alpha(1 + e \cos \phi)$. Il vient alors :

$$u(\phi) \simeq u_0(\phi) + \beta \int_0^\phi d\phi' G(\phi - \phi') u_0^2(\phi').$$

Le calcul s'effectue alors sans difficulté majeure et mène à :

$$\begin{aligned} A &= \frac{1+e^2}{2}, & B &= -\frac{1+e^2}{2} - \frac{e^2}{6}, \\ C &= -\frac{e^2}{6}, & D &= e. \end{aligned}$$

La solution fait apparaître un terme correctif par rapport à u_0 mais qui a, entre autres, un comportement en $\phi \sin \phi$ dont l'amplitude croît avec le temps, ce qui est la principale limite de ce développement perturbatif.

5. Pour répondre à cette question il suffit d'examiner l'équation $\dot{u}(\phi) = 0$.

6. Comme $D = e$, on a alors

$$\epsilon = 2\pi\beta\alpha = \frac{6\pi G^2 M^2}{L^2 c^2}$$

qui se réécrit aussi

$$\epsilon = \frac{6\pi MG}{ac^2(1-e^2)}.$$

Le calcul donne 43,05 secondes d'arc par siècle alors que l'observation donne $43,11 \pm 0,45$ secondes d'arc par siècle. Notez que plusieurs effets expliquent pourquoi la planète Mercure a joué historiquement un rôle important : tout d'abord, le demi-grand axe a est faible et donc l'effet plus important par rapport aux autres planètes ; ensuite, elle effectue 415 révolutions par siècle.

□ Solution de l'exercice 2.19. Oscillateur harmonique en présence d'une impureté

1. En insérant deux relations de fermeture puis en faisant la transformée de Laplace, on trouve

$$\hat{G}_0(x_a, x_b; z) = \sum_{n=0}^{+\infty} \frac{\psi_n(x_a)\psi_n^*(x_b)}{z + E_n}.$$

En utilisant la valeur des polynômes d'Hermite en zéro, on obtient

$$\hat{G}_0(0, 0; z) = \frac{1}{\sqrt{\pi}l} \sum_{p=0}^{+\infty} \frac{(2p-1)!!}{2^p p!} \frac{1}{z + (2p + \frac{1}{2})\hbar\omega}.$$

Pour obtenir $G_0(0, 0; \beta)$, il faut effectuer la transformée de Laplace inverse de chaque terme de la série en utilisant le tableau B.1 de l'annexe B et resommer la série pour trouver

$$G_0(0, 0; \beta) = \frac{1}{\sqrt{2\pi \operatorname{sh}(\beta\hbar\omega)l}}.$$

2. Pour cette question, il suffit d'appliquer les méthodes du paragraphe 2.2.3, page 113, ce qui donne :

$$\rho_0(E) = \sum_{n=0}^{+\infty} \delta \left(E - (n + \frac{1}{2})\hbar\omega \right).$$

3. L'équation (2.138) est à nouveau obtenue de façon similaire à l'exemple du paragraphe 2.2.3. Elle se résout en

$$\hat{G}(x_a, x_b; z) = \hat{G}_0(x_a, x_b; z) - V l \frac{\hat{G}_0(x_a, 0; z) \hat{G}_0(0, x_b; z)}{1 + V l \hat{G}_0(0, 0; z)}. \quad (\text{J.20})$$

4. Le fait que $H_{2p+1}(0) = 0$ montre immédiatement que le second terme de $\hat{G}$ dans l'équation (J.20) est régulier en $z = -(2p + 1 + \frac{1}{2})\hbar\omega$, ce qui garantit que l'expression totale a toujours des pôles en $z = -(2p + 1 + \frac{1}{2})\hbar\omega$. En revanche, il suffit de prendre le terme dominant dans l'équation (J.20) pour z proche de $-(2p + \frac{1}{2})\hbar\omega$ pour voir que cette singularité se compense. Ces singularités sont remplacées par de nouvelles, provenant de l'annulation du dénominateur du dernier membre de l'équation (J.20). On trouve donc une nouvelle série d'énergies propres dont la valeur $E(V)$ de chacune d'elles doit satisfaire à l'équation

$$\sum_{p=0}^{+\infty} \frac{(2p-1)!!}{2^p p!} \frac{1}{E(V) - (2p + \frac{1}{2})\hbar\omega} = \frac{\sqrt{\pi}}{V}. \quad (\text{J.21})$$

5. Quand $V \rightarrow 0$, on écrit $E_0(V)$ comme $\frac{1}{2}\hbar\omega + \delta E$ et on développe dans l'équation (J.21) au premier ordre en δE . On obtient ainsi $\delta E = \frac{V}{\sqrt{\pi}} + O(V^2)$.

Quand $V \rightarrow -\infty$, on a $\hbar\omega \ll |V|$ et nous nous retrouvons donc dans le cas d'une particule dans un potentiel en δ , ce qui correspond à l'exemple du paragraphe 2.2.3. L'énergie du fondamental a été obtenue à l'équation (2.107), page 118, ce qui donne le résultat recherché en effectuant la correspondance $Vl = -V_0$.

Quand $V \rightarrow +\infty$, on pose $E(V) = E_0^\infty + \delta E$. E_0^∞ satisfait clairement à la relation

$$\sum_{p=0}^{+\infty} \frac{(2p-1)!!}{2^p p!} \frac{1}{E_0^\infty - (2p + \frac{1}{2})\hbar\omega} = 0.$$

Il est clair que pour obtenir zéro, il faut avoir des termes positifs et négatifs dans cette somme, ce qui implique que $E_0^\infty > \frac{1}{2}\hbar\omega$. Ensuite, le premier ordre dans le développement de Taylor en δE nous donne

$$-S(E_0^\infty)\delta E + O(\delta E^2) = \frac{\sqrt{\pi}}{V}$$

avec

$$S(E_0^\infty) = \sum_{p=0}^{+\infty} \frac{(2p-1)!!}{2^p p!} \frac{1}{[E_0^\infty - (2p + \frac{1}{2})\hbar\omega]^2}.$$

Chapitre 3

□ Solution de l'exercice 3.1. Unicité des solutions des équations de diffusion et de d'Alembert

1. Pour répondre à cette question, il faut commencer exactement comme dans le cas statique, page 73 : considérer deux solutions ϕ_1 et ϕ_2 de l'équation de diffusion ; définir la différence $\alpha = \phi_1 - \phi_2$, qui est alors solution de l'équation de diffusion homogène

$$\frac{\partial}{\partial t'} \alpha(\mathbf{r}', t') - D \Delta_{\mathbf{r}'} \alpha(\mathbf{r}', t') = 0.$$

Multiplier ensuite cette équation par $\alpha^*(\mathbf{r}', t')$, intégrer sur le domaine $\mathcal{D}$ puis entre le temps initial t_0 et $t > t_0$. En répétant cette procédure pour l'équation de diffusion homogène satisfaite par $\alpha^*(\mathbf{r}', t')$ qui est elle multipliée par $\alpha(\mathbf{r}', t')$, on obtient

$$\int_{t_0}^t dt' \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \left[\frac{\partial}{\partial t'} |\alpha(\mathbf{r}', t')|^2 - D \alpha^*(\mathbf{r}', t') \Delta_{\mathbf{r}'} \alpha(\mathbf{r}', t') - D \alpha(\mathbf{r}', t') \Delta_{\mathbf{r}'} \alpha^*(\mathbf{r}', t') \right] = 0.$$

Pour le premier terme de cette équation, l'intégrale sur t' peut être effectuée. Pour les second et troisième termes, il faut utiliser la première formule de Green (2.19), page 72, avec $(u = \alpha^*, v = \alpha)$ et $(u = \alpha, v = \alpha^*)$ respectivement. On obtient ainsi l'équation

$$\begin{aligned} & \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' |\alpha(\mathbf{r}', t)|^2 + 2D \int_{t_0}^t dt' \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' |\nabla_{\mathbf{r}'} \alpha(\mathbf{r}', t')|^2 \\ &= \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' \alpha^2(\mathbf{r}', t_0) + D \int_{t_0}^t dt' \int_{\partial \mathcal{D}} d\Sigma' [\alpha^*(\mathbf{r}', t') \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \alpha(\mathbf{r}', t') \\ & \quad + \alpha(\mathbf{r}', t') \mathbf{n}' \cdot \nabla_{\mathbf{r}'} \alpha^*(\mathbf{r}', t')]. \end{aligned}$$

Les conditions aux limites choisies sont telles que le terme de droite de cette égalité est nul. La nullité du terme de gauche implique alors $\alpha(\mathbf{r}, t) = 0$ et donc l'unicité de la solution.

2. Pour le d'Alembertien, il faut multiplier l'équation homogène

$$\frac{1}{c^2} \frac{\partial^2}{\partial t'^2} \alpha(\mathbf{r}', t') - \Delta_{\mathbf{r}'} \alpha(\mathbf{r}', t') = 0,$$

par $(\partial \alpha^* / \partial t')$ au lieu de α^* . La suite du raisonnement est alors analogue à celui mené pour la diffusion.

□ Solution de l'exercice 3.2. Relations de réciprocité

Cet exercice est une généralisation de l'exercice 2.4, page 129. Notons $G_1 \equiv G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}_1; t_1 - t)$ et $G_2 \equiv G_H^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}_2; t - t_2)$ qui sont solutions respectivement des équations aux dérivées partielles :

$$\begin{aligned} -\square_{\mathbf{r},t} G_1 &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_1) \delta(t - t_1), \\ -\square_{\mathbf{r},t} G_2 &= \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_2) \delta(t - t_2). \end{aligned} \quad (\text{J.22})$$

Multiplions alors la première de ces équations par G_2 et la seconde par G_1 , effectuons ensuite la différence, puis intégrons finalement sur $\mathbf{r} \in \mathcal{D}$ et sur t entre t_i et t_f avec $t_i < t_2 < t_1 < t_f$. Cette procédure mène à

$$\begin{aligned} G_H^+(\mathbf{r}_1; \mathbf{r}_2; t_1 - t_2) - G_H^+(\mathbf{r}_2; \mathbf{r}_1; t_1 - t_2) = \\ \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r} \int_{t_i}^{t_f} dt \left\{ \frac{1}{c^2} \frac{\partial}{\partial t} (G_2 \dot{G}_1 - G_1 \dot{G}_2) \right\} \\ + \oint_{\partial \mathcal{D}} d\Sigma \int_{t_i}^{t_f} dt \mathbf{n} \cdot \{G_1 \nabla_{\mathbf{r}} G_2 - G_2 \nabla_{\mathbf{r}} G_1\}. \end{aligned}$$

Le second terme du membre de droite de cette équation est nul parce que G_H^+ satisfait à des conditions aux limites de Dirichlet ou de Neumann homogènes. Le premier terme s'intègre et donne donc quatre termes. Il est alors aisé de montrer que chacun de ces quatre termes est nul car la fonction de Green G_H^+ est causale et $t_i < t_2 < t_1 < t_f$.

□ Solution de l'exercice 3.3. Équation pour les câbles longs

Pour exprimer $V(x, t)$ en fonction de $\rho(x, t)$, commençons par écrire :

$$V(x, t) = v(x, t) + V_0$$

de telle sorte que l'équation satisfaite par $v(x, t)$ soit

$$\lambda^2 \frac{\partial^2 v(x, t)}{\partial x^2} - \tau_0 \frac{\partial v(x, t)}{\partial t} - v(x, t) = \rho(x, t).$$

Cette dernière équation se résout à l'aide de la fonction de Green causale $G_\infty^+(x - x'; t - t')$ associée à cette EDP. Cette fonction de Green est elle-même obtenue à partir de la représentation spectrale (3.15) de la page 150. Ici, l'opérateur $\mathcal{O}_x$ correspond à $[\lambda^2(\partial^2/\partial x^2) - 1]$, de fonctions propres³ e^{ikx} de telle sorte que :

$$G_\infty^+(x - x'; t - t') = \theta(t - t') \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} dk Z_k(t - t') e^{ik(x - x')}.$$

3. *Stricto sensu*, il faudrait considérer le domaine $\mathcal{D} = [-L, L]$ puis prendre la limite $L \rightarrow \infty$.

Les fonctions $Z_k(t-t')$ sont obtenues facilement comme solutions de l'équation

$$[-\tau_0(\partial/\partial t) - (1 + \lambda^2 k^2)] Z_k(t-t') = 0$$

avec comme C.I. $Z_k(0) = -(1/\tau_0)$. Ainsi, cette procédure mène à :

$$G_\infty^+(x-x'; t-t') = -\frac{\theta(t-t')}{(2\tau_0\pi)} \int_{-\infty}^{+\infty} dk \exp[ik(x-x') - \frac{1+\lambda^2 k^2}{\tau_0}(t-t')]$$

puis, en utilisant le résultat (E.3), page 318, à

$$G_\infty^+(x-x'; t-t') = -\frac{\theta(t-t')e^{-(t-t')/\tau_0}}{(4\tau_0\pi\lambda^2(t-t'))^{1/2}} \exp\left[-\frac{\tau_0(x-x')^2}{4\lambda^2(t-t')}\right].$$

Le facteur d'amortissement présent dans la fonction de Green G_∞^+ est dû bien sûr à la présence du terme proportionnel à τ_0 et du premier ordre dans l'EDP (3.165). Notons que ce résultat peut aussi s'obtenir en posant

$$G_\infty^+(x-x'; t-t') = \frac{1}{\tau_0} e^{-(t-t')/\tau_0} g_\infty^+(x-x'; t-t').$$

En effet, $g_\infty^+(x-x'; t-t')$ est alors la fonction de Green causale de l'équation de diffusion en une dimension pour $D = \lambda^2$ et $t \rightarrow t/\tau_0$.

□ Solution de l'exercice 3.4. Conditions de Neumann en théorie de la diffraction

Le calcul avec les C.L. de Neumann est encore plus simple que celui avec les C.L. de Dirichlet ! L'équation (3.118), p. 205, donne en effet

$$A_N(\mathbf{r}) = -\int_0^\infty d\tau \int_{S_t} d\Sigma' e^{i\omega\tau} G_{NH}^+(\mathbf{r}; \mathbf{r}'; \tau) \frac{\partial A_N}{\partial z'}(\mathbf{r}').$$

L'intégrale sur τ est alors immédiate à partir de l'expression (3.120) de G_{NH}^+ et de celle de G_∞^+ , p. 190. On trouve ainsi le résultat (3.123).

□ Solution de l'exercice 3.5. Fonction de Green du d'Alembertien en dimension 2 + 1

1. Le résultat (3.166) peut être montré de deux manières. La première, en appliquant directement l'opérateur d'Alembertien à 2 + 1 dimensions à l'expression proposée pour G_2^+ . L'expression ainsi obtenue peut alors être réécrite comme

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{+\infty} dz \left(\frac{1}{c^2} \partial_t^2 - \partial_x^2 - \partial_y^2 - \partial_z^2 \right) G_3^+(x-x_0, y-y_0, z, t-t_0) \\ + \int_{-\infty}^{+\infty} dz \partial_z^2 G_3^+(x-x_0, y-y_0, z, t-t_0). \end{aligned}$$

Il faut alors utiliser le fait que G_3^+ est une fonction de Green du d'Alembertien à 3 + 1 dimensions et que sa dérivée $\partial_z G_3^+(x - x_0, y - y_0, z, t - t_0)$ est nulle à l'infini.

La seconde méthode fait appel aux transformées spatio-temporelles de Fourier de G_3^+ et G_2^+ , qui sont reliées par la relation

$$\widehat{G}_2^+(k_x, k_y, \omega) = \widehat{G}_3^+(k_x, k_y, k_z = 0, \omega).$$

La relation (3.166) s'obtient alors par transformation de Fourier inverse.

2. Le calcul de G_2^+ ne pose pas de difficulté majeure puisque G_3^+ est proportionnelle à une distribution de Dirac. Le lecteur aura intérêt à définir

$$\rho = \sqrt{(x - x_0)^2 + (y - y_0)^2}$$

et à se convaincre d'abord que $G_2^+(x - x_0, y - y_0, t - t_0) = 0$ pour $\rho > c(t - t_0)$. Pour $\rho < c(t - t_0)$, il faut utiliser la règle (A.2), page 303, avec

$$f(z) = \sqrt{\rho^2 + z^2} - c(t - t_0).$$

Le résultat final est

$$G_2^+(|\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|, t - t_0) = \frac{c\theta(c(t - t_0) - |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|)}{2\pi\sqrt{c^2(t - t_0)^2 - |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|^2}}. \quad (\text{J.23})$$

3. Contrairement au cas de l'espace-temps à 3 + 1 dimensions, en 2 + 1 dimensions, la fonction de Green du d'Alembertien n'est pas localisée sur le cylindre de lumière, ce qui signifie qu'elle n'est pas proportionnelle à $\delta(c(t - t_0) - |\mathbf{r} - \mathbf{r}_0|)$. Elle a un front avant qui avance à la vitesse c mais pas de front arrière (voir figure J.7). Notez que c'est cette propriété qui a été annoncée au §3.1.6, page 192.

4. La discussion proposée à cette question est similaire à celle menée au chapitre 2, page 97. Comme la figure J.8 l'illustre, pour une telle source ρ , on peut se placer par exemple dans le plan $z = 0$ et le problème devient alors bi-dimensionnel. En effet, la solution de l'équation de d'Alembert associée à cette source ρ est donnée par l'expression (3.103), page 193, et se réduit au terme de source,

$$\begin{aligned} \phi(\mathbf{r}, t) &= \int d\mathbf{r}' \int_{-\infty}^t dt' \lambda \delta(x' - x_0) \delta(y' - y_0) \delta(t' - t_0) G_3^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t'), \\ &= \lambda G_2^+(x - x_0, y - y_0, t - t_0). \end{aligned}$$

Cette solution s'identifie donc à la fonction de Green du d'Alembertien en dimension 2 + 1. L'interprétation en dimension 3 + 1 de la propriété vue à la question précédente est la suivante : en un point de l'espace, à partir

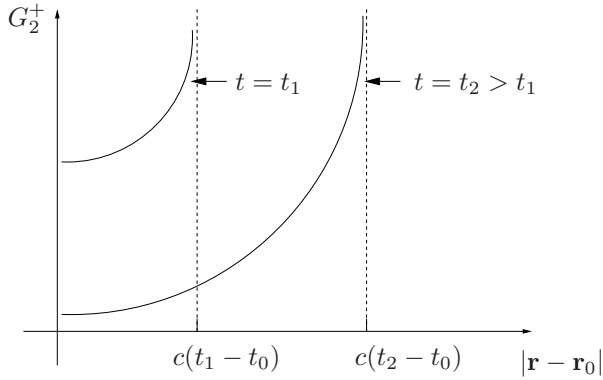


FIG. J.7 – Représentation de la fonction de Green $G_2^+(|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|, t-t_0)$ du d'Alembertien à 2+1 dimensions, donnée par l'équation (J.23), en fonction de $|\mathbf{r}-\mathbf{r}_0|$ et pour deux temps t_1 et $t_2 > t_1$. Il existe un front d'onde avant mais pas de front d'onde arrière.

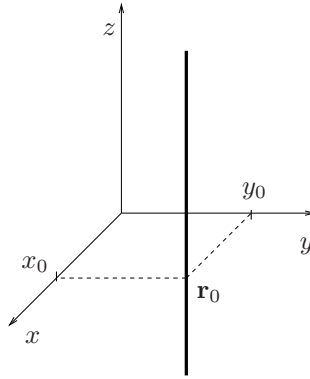


FIG. J.8 – Pour une source linéaire, la situation est identique pour tout plan orthogonal à la source et on peut donc se placer dans le plan $z = 0$ pour analyser la situation.

du moment où un observateur commence à recevoir un signal provenant du point le plus proche de la droite où sont localisées les sources, il reçoit ensuite continuellement les signaux venant des points d'émission plus éloignés et donc avec une amplitude de plus en plus faible.

□ **Solution de l'exercice 3.6. Fonction de Green du d'Alembertien en dimension 1 + 1**

La représentation spectrale (3.93) de $G_1^+(x - x_0, t - t_0)$ est :

$$G_1^+(x - x_0, t - t_0) = \frac{c}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{k} e^{ik(x-x_0)} \sin(kc(t-t_0)).$$

Il reste à calculer cette intégrale, ce qui ne pose pas de difficulté. On obtient :

$$G_1^+(|x - x_0|, t - t_0) = \frac{c}{2} \theta [c(t - t_0) - |x - x_0|]. \quad (\text{J.24})$$

La discussion faite à l'exercice précédent pour le d'Alembertien à 2 + 1 dimensions est aussi valable dans le cas à 1 + 1 dimensions. L'analogie de la figure J.7 est reproduit sur la figure J.9. Notez que l'interprétation à 3 + 1

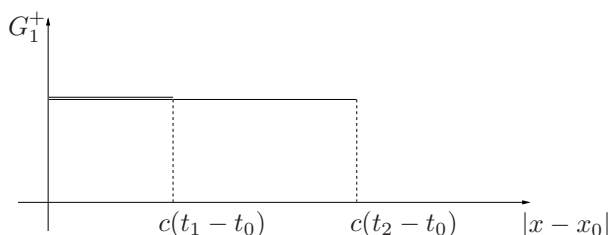


FIG. J.9 – Représentation de la fonction de Green $G_1^+(|x - x_0|, t - t_0)$ du d'Alembertien à 1 + 1 dimensions, donnée par l'équation (J.24), en fonction de $|x - x_0|$ et pour deux temps t_1 et $t_2 > t_1$. Il existe un front d'onde avant mais pas de front d'onde arrière.

dimensions de G_1^+ passe par l'introduction d'une source planaire (voir page 97). Par ailleurs, le calcul de G_1^+ peut être effectué de manière analogue à celui mené à l'exercice précédent pour G_2^+ . Il est cependant plus facile d'utiliser la représentation spectrale de G_1^+ .

□ **Solution de l'exercice 3.7. Fonction de Green G_∞ du Laplacien en dimension $d \geq 3$**

1. Pour cette question, il suffit de raisonner exactement comme à l'exercice 3.5, le plus simple étant ici de remarquer, à partir de la discussion page 157, que

$$G_\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = D\tilde{G}_\infty^+(\mathbf{r} - \mathbf{r}'; s = 0).$$

2. Le changement de variable est $u = (|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^2/4Dt)$. On trouve alors :

$$G_\infty(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{\Gamma\left(\frac{d}{2} - 1\right)}{4\pi^{\frac{d}{2}}|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|^{d-2}}.$$

On retrouve bien le résultat obtenu page 343 avec l'expression de l'angle solide Ω_d donnée à cette même page.

□ Solution de l'exercice 3.8. Diffusion de la chaleur dans une boule

Étant donnée la symétrie du problème, le plus simple est ici de calculer directement $T(r, t)$. Ainsi, la fonction $[T(r, t) - T_b]$ est solution de l'équation de diffusion homogène. De plus, elle doit s'annuler en $r = R$ et doit valoir $T_0 - T_b$ en $t = 0$ pour tout $r \neq R$. Suivons alors le raisonnement mené page 149 pour obtenir la représentation spectrale des fonctions de Green causales homogènes. Comme

$$\Delta\psi_n(r) = \frac{1}{r^2} \frac{d}{dr} \left(r^2 \frac{d\psi_n}{dr}(r) \right) = -\frac{n^2\pi^2}{R^2}\psi_n(r),$$

les fonctions $\psi_n(r)$ sont des fonctions propres du Laplacien, de valeur propre $-(n^2\pi^2/R^2)$. L'analogue de l'équation (3.34), page 159, est alors :

$$T(r, t) - T_b = \sum_{n=1}^{\infty} C_n e^{-\frac{Dn^2\pi^2}{R^2}t} \psi_n(r).$$

Les coefficients C_n sont fixés par la condition initiale en $t = 0$, l'orthonormalité des $\{\psi_n\}$ et la propriété,

$$\int_0^R dr \, r^2 \, \psi_n(r) = (-1)^{n+1} \sqrt{\frac{2}{R}} \frac{R^2}{n\pi}.$$

Le résultat final est :

$$T(r, t) = T_b - \frac{2R(T_b - T_0)}{\pi r} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{(-1)^{n+1}}{n} \sin\left(\frac{n\pi r}{R}\right) e^{-\frac{Dn^2\pi^2}{R^2}t}.$$

Notez que la C.L. $T(r, t) = T_0$ pour $t \rightarrow 0^+$ et pour $r \neq R$ conduit à une règle de somme.

□ **Solution de l'exercice 3.9. Des conditions de Dirichlet aux conditions de Robin**

1. On trouve comme résultat intermédiaire :

$$\phi(x) = c(x)e^{hx} \quad \text{puis} \quad c(x) = - \int_{+\infty}^x du e^{-hu} b(u).$$

2. Dans le cas de l'équation de la diffusion, la procédure utilisée à l'exercice 3.1 mène à

$$\begin{aligned} \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' |\alpha(\mathbf{r}', t)|^2 + 2D \int_{t_0}^t dt' \int_{\mathcal{D}} d\mathbf{r}' |\nabla_{\mathbf{r}'} \alpha(\mathbf{r}', t')|^2 \\ + 2D \int_{t_0}^t dt' \int_{\partial\mathcal{D}} d\Sigma' h(\mathbf{r}', t') |\alpha(\mathbf{r}', t')|^2 = 0 \end{aligned}$$

où α est la différence entre deux solutions. Comme h est une fonction positive, nous avons bien $\alpha = 0$, et donc l'unicité de la solution. La démonstration pour le cas de l'équation de d'Alembert est similaire.

Notez que cette démonstration s'applique aussi à l'équation de Poisson et montre donc que les C.L. de Dirichlet et de Neumann ne sont pas les seules C.L. garantissant l'unicité de cette EDP.

3. La fonction b_D est solution de l'EDP

$$(\mathcal{O}_{\mathbf{r}} + \mathcal{O}_t) b_D(x, t) = -\frac{\partial}{\partial x} \rho(x, t) + h\rho(x, t).$$

Par définition, elle vérifie des C.L. de Dirichlet homogènes sur $\partial\mathcal{D}$ et des C.I. nulles en t_0 .

4. On a simplement :

$$\begin{aligned} b_D(x, t) &= \int_0^\infty dx'' \int_{t_0}^t dt'' G_{DH}^+(x; x''; t - t'') \left(-\frac{\partial}{\partial x''} \rho(x'', t'') + h\rho(x'', t'') \right), \\ \phi_R(x, t) &= \int_0^\infty du e^{-hu} b_D(x + u, t). \end{aligned}$$

□ **Solution de l'exercice 3.10. Conditions de Robin pour l'équation de la chaleur**

1. D'un côté, la loi de Fourier implique que la chaleur traversant l'élément de surface $d\Sigma$ par unité de temps vaut

$$\frac{dQ}{dt} = -\mathbf{n} \cdot \mathbf{j}_Q d\Sigma = \lambda \mathbf{n} \cdot \nabla \phi d\Sigma.$$

De l'autre côté, en considérant $|T - T_0| \ll T_0$ la linéarisation de la loi de Stefan-Boltzmann mène à

$$\frac{dQ}{dt} \simeq -4aT_0^3 \phi \, d\Sigma.$$

La comparaison de ces deux expressions donne la condition au bord recherchée avec $h = (4aT_0^3/\lambda)$.

2. L'expression demandée pour $G_R^+(x; x'; \tau)$ est obtenue en appliquant le résultat de la question **4.** de l'exercice précédent à

$$\rho(x'', t'') = \delta(x'' - x')\delta(t'' - t').$$

3. Pour obtenir l'expression finale de G_R^+ , il faut utiliser le résultat

$$G_{DH}^+(x + u; x'; \tau) = G_{NH}^+(x + u; x'; \tau) - 2G_\infty^+(x + u; -x'; \tau),$$

qui découle de la méthode des images. Une autre relation utile pour répondre à cette question est

$$\frac{\partial}{\partial x'} G_{DH}^+(x + u; x'; \tau) = -\frac{\partial}{\partial u} G_{NH}^+(x + u; x'; \tau).$$

Notez que lorsque h s'annule, les fonctions de Green G_R^+ et G_{NH}^+ coïncident bien, comme il se doit.

□ Solution de l'exercice 3.11. Équation de Cattaneo en 3d

1. Pour répondre à la première question, il suffit de faire une transformation de Fourier exactement comme cela a été fait page 222.

2. L'intégration sur les angles est immédiate. Notez qu'un calcul similaire a été effectué à la page 79.

3. Il est alors facile de relier le résultat au calcul à 1d. On trouve :

$$g_\infty^+(\mathbf{r}; t) = \frac{c}{4\pi r} \delta(ct - r) + \frac{a^2 c}{8\pi \sqrt{t^2 - r^2/c^2}} \theta(ct - r) I_1\left(\frac{a^2 c^2}{2} \sqrt{t^2 - r^2/c^2}\right) \quad (\text{J.25})$$

où I_1 est la dérivée de I_0 .

□ **Solution de l'exercice 3.12. Équation de Klein-Gordon**

1. Le calcul est similaire à celui effectué au §3.2.5 pour l'équation de Cattaneo. On obtient successivement

$$\begin{aligned} G_1^+(x; t) &= \frac{ic}{4\pi} \int_{-\infty+i\gamma}^{+\infty+i\gamma} dz \frac{e^{-izt+i(-m^2c^2+z^2)^{1/2}\frac{|x|}{c}}}{(-m^2c^2+z^2)^{1/2}} \\ &= \theta(ct - |x|) \frac{c}{4\pi} \int_{-1}^1 dw \left[\frac{e^{mc(iwt - \sqrt{1-w^2}\frac{|x|}{c})}}{\sqrt{1-w^2}} + \frac{e^{mc(-iwt - \sqrt{1-w^2}\frac{|x|}{c})}}{\sqrt{1-w^2}} \right]. \end{aligned}$$

En effectuant un changement de variable similaire à celui de la section 3.2.5, on obtient finalement

$$\boxed{G_1^+(x; t) = \theta(ct - |x|) \frac{c}{2} J_0[mc\sqrt{t^2 - (x^2/c^2)}]}. \quad (\text{J.26})$$

2. La fonction de Green à trois dimensions se calcule à partir du résultat

$$G_3^+(\mathbf{r}; t) = -\frac{1}{2\pi r} \frac{\partial}{\partial r} G_1^+(r; t)$$

démonstré à l'exercice précédent. On trouve

$$\boxed{G_3^+(\mathbf{r}; t) = \frac{c}{4\pi r} \delta(ct - r) - \frac{m}{4\pi} \frac{\theta(ct - r)}{\sqrt{t^2 - r^2/c^2}} J_1(mc\sqrt{t^2 - r^2/c^2})}. \quad (\text{J.27})$$

Notez que le résultat (J.27) se déduit du résultat (J.25) en effectuant $m \rightarrow -im$ conformément à la remarque p. 222 et en utilisant les relations

$$J_0(x) = I_0(-ix) \quad \text{et} \quad J_1(x) = iI_1(-ix)$$

entre fonctions de Bessel.

Chapitre 4

□ Solution de l'exercice 4.1. Comportement asymptotique de la fonction de Bessel J_0

Appliquons la formule (4.15) de la phase stationnaire, p. 254. Nous trouvons :

$$\theta_c = 0, \quad \frac{\partial^{(2p)}\varphi}{\partial\theta^{(2p)}}(\theta_c; \lambda) = (-1)^{p+1}\lambda, \quad \frac{\partial^{(2p+1)}\varphi}{\partial\theta^{(2p+1)}}(\theta_c; \lambda) = 0.$$

Ainsi,

$$J_0(\lambda) \simeq \frac{1}{\pi} \operatorname{Re} \left[\sqrt{2\pi} e^{i\lambda} (i\lambda)^{-1/2} \right] \simeq \sqrt{\frac{2}{\pi\lambda}} \operatorname{Re} \left\{ \exp \left[i \left(\lambda - \frac{\pi}{4} \right) \right] \right\}$$

où nous avons pris la détermination (4.25), p. 259, pour la fonction $Z^{-1/2}$. La légitimité de cette approximation peut être simplement établie. En effet,

$$\frac{\partial^p \varphi}{\partial \theta^p}(\theta_c; \lambda) \left[\frac{\partial^2 \varphi}{\partial \theta^2}(\theta_c; \lambda) \right]^{-p/2} = O(\lambda^{1-p/2}).$$

□ Solution de l'exercice 4.2. Coefficients du binôme

1. Cette relation est une conséquence directe de la relation

$$(1+z)^n = \sum_{p=0}^n C_n^p z^p$$

et du théorème des résidus (ici en $z = 0$).

2. Écrivons dans un premier temps

$$C_n^{nx} = \frac{1}{2\pi i} \oint dz \frac{1}{z} \exp[-nf(z)] \quad \text{avec} \quad f(z) = -\ln(1+z) + x \ln z.$$

Cette intégrale est donc du type (4.28), p. 260, avec $\ell(z) = 1/z$ et un paramètre de contrôle, $\lambda = n$, multiplicatif de telle sorte qu'il est légitime d'appliquer la méthode du point selle. Un calcul indique que la dérivée de f s'annule pour

$$z_c = \frac{x}{1-x} \quad \text{avec} \quad f''(z_c) = -\frac{(1-x)^3}{x}.$$

Appliquons la formule du point selle (4.29) en remarquant auparavant que la singularité en $z = 0$ n'est pas rencontrée lorsque le contour d'intégration $\mathcal{C}$ est déformé pour passer par le point selle z_c (voir figure J.10). On trouve alors

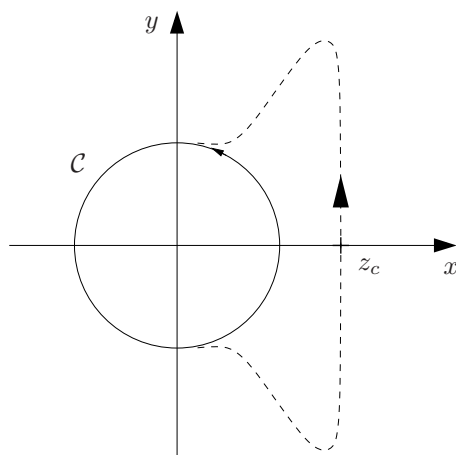


FIG. J.10 – Le contour d'intégration original C est déformé pour passer par le point selle z_c . Remarquons que l'angle θ , défini par l'équation (4.19), p. 257, vaut π de telle sorte que le chemin de descente la plus raide est parallèle à l'axe des y (voir équation (4.22)).

$$C_n^{mx} \simeq \frac{1}{2\pi i} \frac{1}{z_c} \left(\frac{2\pi}{n f''(z_c)} \right)^{1/2} \exp[-n f(z_c)],$$

et finalement, avec la détermination (4.25), p. 259, le résultat (4.87).

□ Solution de l'exercice 4.3. Forme asymptotique de la fonction de Green de Helmholtz

Appliquons la méthode du col pour

$$f(t; r) = \frac{r^2}{4t} + m^2 t + \frac{d}{2} \ln t$$

avec $r \rightarrow \infty$. Nous trouvons

$$t_c(r) = \frac{r}{2m} (1 + O(1/r)) \quad \text{et} \quad \frac{\partial^2 f}{\partial t^2}(t_c(r); r) = \frac{4m^3}{r} + O(1/r^2) > 0,$$

$$f(t_c(r); r) = mr + \frac{d}{2} \ln \left(\frac{r}{2m} \right) + O(1/r).$$

La formule du col donne alors :

$$G_\infty(\mathbf{r}) \simeq \frac{1}{(4\pi)^{d/2}} e^{-mr} \left(\frac{r}{2m} \right)^{-d/2} \sqrt{\frac{2\pi r}{4m^3}},$$

et donc le résultat (4.88). Il est par ailleurs facile de vérifier la validité de l'approximation dans le régime asymptotique. Notons pour conclure, que pour $d = 3$, on retrouve bien le comportement en $e^{-mr}/(4\pi r)$ vu p. 86.

□ **Solution de l'exercice 4.4. Ensemble isotherme-isobare**

Pour cet exercice, il suffit de raisonner exactement comme au §4.2.2, page 270. Pour cela, il faut appliquer, dans la limite $N \rightarrow \infty$, la méthode du col à la fonction $\beta_0 G^*(E, V, N)$ avec

$$G^*(E, V, N) = P_0 V + E - T_0 S(E, V, N).$$

Cette fonction dépend donc des deux variables E et V . Commençons par déterminer le point (E_0, V_0) où elle est extrémale. Les conditions d'extremum donnent

$$\frac{P_0}{T_0} = \frac{\partial S}{\partial V}(E_0, V_0, N) \quad \text{et} \quad \frac{1}{T_0} = \frac{\partial S}{\partial E}(E_0, V_0, N).$$

La formule du col (4.35), p. 263, donne alors :

$$Q_N(P_0, T_0) \simeq e^{-\beta_0(P_0 V_0 + E_0 - T_0 S(E_0, V_0, N))} \frac{2\pi \Lambda^{-1} \Delta^{-1}}{\sqrt{\text{Det}[A_0(N)]}} \quad (\text{J.28})$$

où $A_0(N)$ est la matrice des dérivées secondes de $\beta_0 G^*(E, V, N)$ par rapport à E et V , prises en (E_0, V_0) . En supposant que le système a des propriétés d'extensivité, $\ln \text{Det} A_0(N)$ est proportionnel à $\ln N$. De manière analogue à la discussion p. 274 sur l'équivalence entre les ensembles microcanonique et canonique, la différence entre les énergies libres de Gibbs microcanonique et « isotherme-isobare » par nombre de particules, est donc en $(\ln N/N)$. Il y a donc équivalence entre les deux ensembles à la limite thermodynamique.

□ **Solution de l'exercice 4.5. Évolution d'un paquet d'ondes et vitesse de groupe**

Appliquons la méthode de la phase stationnaire ou, plus précisément, la méthode du col complexe pour une intégrale du type (4.28), p. 260, avec un paramètre multiplicatif. Pour cela, faisons l'identification :

$$\lambda \rightarrow t \quad ; \quad \ell(z) \rightarrow F(z) \quad ; \quad f(z; \lambda) \rightarrow -i(zv - \omega(z))t.$$

Comme $(\partial f / \partial z) = -i(v - \omega'(z))t$, le point col z_c correspond à un k_0 , supposé unique, tel que la vitesse de groupe $d\omega/dk(k_0)$ soit égale à v . La formule du col (4.29) donne alors :

$$\begin{aligned} P(x(t), t) &\simeq \sqrt{2\pi} F(k_0) e^{it(k_0 v - \omega(k_0))} (it\omega''(k_0))^{-1/2}, \\ &\simeq \sqrt{\frac{2\pi}{t}} F(k_0) e^{it(k_0 v - \omega(k_0)) + i\pi/4} \omega''(k_0)^{-1/2}. \end{aligned}$$

Notez que l'amplitude décroît en $\frac{1}{\sqrt{t}}$.

□ **Solution de l'exercice 4.6. De la fonction de Green de Cattaneo à celle de l'équation de diffusion**

Pour retrouver la fonction de Green de l'équation de diffusion, il faut prendre la limite $c \rightarrow \infty$. Appliquons alors la formule du col complexe (4.26) à

$$f(z; c) = -mc\sqrt{t^2 - x^2/c^2} \sin z$$

en $z_c = \pi/2$. Nous trouvons $(\partial^2 f / \partial z^2)(z_c; c) = mc\sqrt{t^2 - x^2/c^2}$ puis, dans la limite $c \rightarrow \infty$,

$$g_{\infty}^+(x; t) \simeq \frac{c}{4\pi} \sqrt{2\pi} e^{mc\sqrt{t^2 - x^2/c^2}} (mc\sqrt{t^2 - x^2/c^2})^{-1/2}.$$

Il suffit alors de prendre le terme dominant de cette expression, ce qui redonne bien pour $G_{\infty}^+(x; t)$ la fonction de Green de l'équation de diffusion.

□ **Solution de l'exercice 4.7. Modèle d'Ising avec des interactions à longue portée**

1. La réponse à la première question s'obtient tout simplement en évaluant l'intégrale gaussienne

$$\left(\frac{N\beta}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp(-N\beta\lambda^2/2 + \beta\lambda \sum_i S_i) = \exp\left(\frac{\beta}{2N} \sum_{i,j} S_i S_j\right).$$

La somme sur toutes les configurations des variables de spins $\{S_i\}$ avec $S_i = \pm 1$ donne facilement

$$\begin{aligned} Z &= \left(\frac{N\beta}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp(-N\beta\lambda^2/2) \prod_i \left(\sum_{S_i=\pm 1} e^{\beta(\lambda+h)S_i} \right), \\ &= \left(\frac{N\beta}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda \exp(-N\beta\lambda^2/2) [2 \operatorname{ch}(\beta(\lambda+h))]^N. \quad (\text{J.29}) \end{aligned}$$

Nous identifions alors la fonction $A(\lambda)$:

$$A(\lambda) = \frac{\lambda^2}{2} - \frac{\ln(2 \operatorname{ch}(\beta(\lambda+h)))}{\beta}.$$

2. Comme nous sommes intéressés par la limite où N est très grand, nous pouvons appliquer la méthode du col (avec paramètre multiplicatif) à l'intégrale (J.29). Le point col λ_0 correspond à

$$A'(\lambda_0) = \lambda_0 - \operatorname{th}(\beta(\lambda_0 + h)) = 0 \quad (\text{J.30})$$

et

$$A''(\lambda_0) = 1 - \beta / \operatorname{ch}^2(\beta(\lambda_0 + h)) = 1 - \beta(1 - \lambda_0^2) > 0. \quad (\text{J.31})$$

La formule (4.3) donne ainsi :

$$Z = \left(\frac{1}{A''(\lambda_0)} \right)^{1/2} \exp(-N\beta A(\lambda_0)) (1 + O(1/N)).$$

L'énergie libre f est donc donnée par $A(\lambda_0)$ dans la limite $N \rightarrow \infty$. Notez que la fonction $A(\lambda)$ peut avoir un minimum secondaire mais dans la limite $N \rightarrow \infty$, la contribution autour du minimum absolu est prépondérante. Ce dernier résultat permet alors d'interpréter les équations (J.30) et (J.31) comme les conditions pour que le système adopte une configuration correspondant à un minimum du potentiel thermodynamique associé à l'énergie libre. Ces équations provenant d'une condition purement mathématique prennent donc un sens physique concret.

3. La signification physique de λ_0 apparaît simplement à travers l'expression suivante de l'aimantation m ,

$$m = -\frac{\partial f}{\partial h} = \operatorname{th}(\beta(\lambda_0 + h)) + O(1/N) = \lambda_0 + O(1/N).$$

Finalement, l'équation (J.30) déterminant le col devient identique, pour N grand, à celle obtenue par l'approximation du champ moyen moléculaire. Donc cette approximation champ moyen devient exacte quand $N \rightarrow \infty$. En l'absence de champ appliqué ($h = 0$), on trouve

$$m = \operatorname{th}(\beta m)$$

qui pour $\beta < 1$ a pour unique solution $m = 0$ (on vérifie facilement que (J.31) est satisfaite). En revanche, pour $\beta > 1$, deux autres solutions non-nulles entrent en jeu, et la condition (J.31) nous dit que ces solutions sont celles à retenir pour que la méthode du col soit valable. Nous avons donc, pour $\beta > 1$ une valeur de l'aimantation non nulle. Le point $\beta_c = 1$ est particulier ($A''(\lambda_0)$ est nul en ce point), il correspond au point de transition où la fonction de partition, estimée au premier ordre par la méthode du col, est singulière pour $h = 0$. Notez ici que l'ordre des limites est important. Nous avons d'abord pris $N \rightarrow \infty$ puis $h \rightarrow 0$.

□ Solution de l'exercice 4.8. Marche aléatoire de Bernoulli

1. La relation entre $\hat{P}_N(k)$ et $\hat{P}_{N-1}(k)$ est tout simplement donnée par :

$$\hat{P}_N(k) = \cos k \hat{P}_{N-1}(k).$$

Par ailleurs, comme $P_1(m) = \frac{1}{2} [\delta_{m,-1} + \delta_{m,1}]$, sa transformée de Fourier est $\hat{P}_1(k) = \cos k$ et donc $\hat{P}_N(k) = \cos^N k$.

2. L'expression de $P_N(m)$ s'obtient par la transformée de Fourier inverse. Nous obtenons ainsi la formule donnée avec :

$$I_N(m) = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} dk e^{-ikm} \cos^N k.$$

Notez que, par construction, pour tous les temps N pairs (impairs), la particule est sur un site m pair (impair). Il est donc cohérent de trouver que la probabilité de présence $P_N(m)$ s'annule pour $N + m$ impair.

3. L'intégrale peut être évaluée par la méthode du col pour N grand :

$$P_N(m) \simeq \frac{1 + (-1)^{N+m}}{\sqrt{2\pi N \left(1 - \left(\frac{m}{N}\right)^2\right)}} \left(\frac{1 + \left(\frac{m}{N}\right)}{1 - \left(\frac{m}{N}\right)}\right)^{-\frac{m}{2}} \frac{1}{\left(1 - \frac{m^2}{N^2}\right)^{\frac{N}{2}}}.$$

Notez que le lien avec la fonction de Green (3.41), p. 162, de l'équation de diffusion à une dimension se fait à la limite continue avec $m = x/a$, $t = N\tau$ et x/a d'ordre $\sqrt{N}$ où a est le pas du réseau, en posant par ailleurs $D = a^2/(2\tau)$.

□ Solution de l'exercice 4.9. Oscillateur harmonique et théorie des nombres

1. Les oscillateurs harmoniques étant indépendants, la fonction de partition $Z(\beta)$ n'est autre que le produit des fonctions de partitions de chaque oscillateur

$$Z(\beta) = \prod_{n=1}^{\infty} z_n \quad \text{avec} \quad z_n = \frac{1}{1 - e^{-\beta n}}.$$

L'autre manière de calculer $Z(\beta)$ est de raisonner sur l'énergie. Ainsi, dans l'expression (4.92) de $Z(\beta)$, la multiplicité de chaque entier m qui intervient dans $\Omega(n)$ (par exemple la multiplicité de $m=1$ quand on écrit $4 = 1+1+1+1$) correspond au niveau auquel est excité l'oscillateur de fréquence $\hbar\omega_m = m$.

2. Il vient simplement

$$\Omega(n) = \frac{1}{2\pi i} \oint \frac{d\xi}{\xi^{n+1}} Z(\beta = -\ln \xi)$$

où l'intégrale porte sur un cercle autour de l'origine.

3. Pour $n \rightarrow \infty$, nous pouvons appliquer la méthode du col dans le plan complexe pour évaluer l'intégrale. De plus, nous utilisons l'expression d'Euler-MacLaurin pour développer le terme dans l'exponentielle de l'intégrant. La

validité de ce développement se vérifie *a posteriori* en remarquant que l'équation du col nous donne un β_{col} d'autant plus petit que n est grand. En ne gardant que le terme dominant et la contribution des fluctuations nous obtenons la formule de Hardy-Ramanujan :

$$\Omega(n) \simeq \frac{\exp \left[\pi \sqrt{\frac{2n}{3}} \right]}{4\sqrt{3}n}.$$

Appendice K

Références bibliographiques

Références générales pour les mathématiques

Il existe de nombreux ouvrages mathématiques présentant des notions utiles en physique. Le lecteur peut consulter les livres [Appel], [Arfken], [Courant], [Morse] et [Snieder]. Pour des thèmes plus spécifiques, voir le tableau ci-dessous :

Thème	Références
Variable complexe	[Churchill],[Conway],[Hamilton],[Rudin]
Distributions	[Kanwal],[Schwartz]
Géométrie différentielle	[Choquet],[Gockeler],[Nakahara],[Spivak]

Références pour le chapitre 1

Références générales. Les références sur l'analyticité et sa relation avec la causalité sont également très nombreuses. Une référence classique est [Wigner]. Une référence générale qui contient beaucoup d'exemples de fonctions de réponse, y compris pour des équations intégrales, est [Roach]. Dans le domaine de l'électrodynamique classique, où les relations de K.K. sont de très grande importance pour étudier la propagation d'ondes dans des milieux dispersifs, les ouvrages [Jackson], [Melrose] ou [Stratton] sont à mentionner. En particulier, le lecteur y trouvera aussi des discussions relatives aux propriétés des diélectriques. L'article [Lucarini] présente une discussion détaillée de règles de somme utilisées en optique. On trouvera dans [Kadanoff 1963] et [Kadanoff 2000] un exposé très complet sur l'application des relations de K.K. en hydrodynamique et en physique des plasmas. Enfin, pour ce qui concerne la réponse linéaire en théorie des champs, deux références utiles sont [Gasiorowicz] et [Hilgevoord].

Références relatives aux exemples.

§	Thème	Références
1.2.3	Mécanique des fluides	[Guyon, Landau VI]
	Fonctions de Bessel	[Arfken, Gradshteyn, Morse]
1.2.4	Équation de Vlasov Plasmas	[Liboff] [Ichimaru]
1.2.5	Équation de Liouville Formule de Kubo Formule de Kubo en matière condensée	[Pottier] [Akhiezer],[Kreuzer],[Kubo],[McLennan] [Callaway],[Mahan]

Références relatives aux exercices. L'article [Purcell] contient la dérivation, à partir des relations de Kramers-Kronig, de la limite inférieure du volume occupé par les grains composant le milieu interstellaire.

Références pour les chapitres 2 et 3

Références générales. Des ouvrages de référence sur les fonctions de Green associées à des opérateurs différentiels, notamment pour les équations de Laplace, de diffusion et de propagation sont [Arfken], [Courant], [Morse], [Pikulin], [Rubinstein], [Snieder], [Sommerfeld], [Vladimirov] et [Wyld]. Le lecteur pourra trouver de nombreuses identités relatives aux opérateurs Laplacien et de d'Alembert dans [Roach]. Dans [Farlow], il existe une classification des différentes équations différentielles qui peuvent apparaître en physique, ainsi qu'une présentation détaillée des méthodes numériques correspondantes.

Pour approfondir l'étude des transformations conformes dans le plan complexe, on peut se référer à [Churchill], [Conway], [Hamilton], [Nehari] et [Rudin].

On trouvera des applications des fonctions de Green pour l'équation de diffusion dans [Beck] et [Sommerfeld]. Pour le mouvement brownien, le lecteur peut consulter des ouvrages de mécanique statistique comme [Reiff], ou ceux relatifs aux processus stochastiques comme [Karatzas] ou [Rogers].

Les fonctions de Green en mécanique quantique sont analysées dans [Economou]. Par ailleurs, les ouvrages de mécanique quantique comme [Cohen 1974], [Landau III], [Le Bellac 2003], [Merzbacher], [Messiah] et [Schiff] exposent l'utilisation de la fonction de Green pour des problèmes de diffusion. Enfin, [Joachain] est entièrement consacré à la théorie de la diffusion en mécanique quantique.

On trouvera dans [Jackson] et [Schwinger] une présentation des fonctions de Green en électrodynamique, notamment pour les équations de Laplace et de d'Alembert.

Références relatives aux exemples.

§	Thème	Références
2.2.2	Effet Meissner	[de Gennes],[Tinkham]
3.2.2	Diffraction	[Born],[Perez]
3.2.5	Équation de Cattaneo	[Joseph],[Morse]

Références relatives aux exercices.

Ex.	Thème	Références
2.5	Relations de réciprocité	[Kim]
2.6	Règles de somme	[Sukumar]
3.9	C.L. de Robin pour cordes vibrantes	[Farlow]
3.10	Fonction de Green avec C.L. de Robin	[Bondurant]
3.12	Équation de Klein-Gordon	[Bjorken],[Itzykson],[Zinn-Justin 1989]

Références pour le chapitre 4

Références générales. La méthode du col est traitée dans des ouvrages de méthodes mathématiques pour la physique comme [Arfken] ou [Morse]. Pour l'intégrale fonctionnelle on peut consulter [Martin], [Schulman] et [Simon].

Références relatives aux exemples.

§	Thème	Références
4.2.2	Ensembles thermodynamiques	[Huang]
4.2.3	Cristal harmonique	[Ashcroft],[Kittel],[Landau V],[Marder]
4.2.4	Modèle d'Ising	[Amit],[Le Bellac 1988],[Parisi],[Zinn-Justin 1989]
4.2.5	Approximation semi-classique	[Feynman],[Kleinert],[Roepstorff],[Zinn-Justin 2004]

Références relatives aux exercices. L'article [Tran] donne une discussion détaillée du lien entre la partition d'un entier et la fonction de partition d'oscillateurs harmoniques.

Bibliographie

- [Akhiezer] : A. Akhiezer et S. Péletminski, *Les Méthodes de la Physique Statistique*, Mir (1980).
- [Amit] : D.J. Amit, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena*, McGraw-Hill (1978).
- [Appel] : W. Appel, *Mathématiques pour la Physique et les physiciens !*, H & K Éditions (2002).
- [Arfken] : G.B. Arfken and H.J. Weber, *Mathematical Methods for Physicists 4th Ed.*, Academic Press (1995).
- [Arnold] V.I. Arnold, *Leçons sur les équations aux dérivées partielles*, Cassini (1997).
- [Ashcroft] : N.W. Ashcroft et N.D. Mermin, *Solid State Physics*, Saunders (1976).
- [Beck] : J.V. Beck, *Heat Conduction Using Green's Function*, Taylor & Francis (1992).
- [Bjorken] : J.D. Björken et S.D. Drell, *Relativistic Quantum Fields*, McGraw-Hill (1965).
- [Bondurant] : J.D. Bondurant et S.A. Fulling, *The Dirichlet-to-Robin Transform*, J. Phys. A, **38**, p. 1505 (2005).
- [Born] M. Born et E. Wolf, *Principles of optics : electromagnetic theory of propagation, interference and diffraction of light*, Cambridge University Press (2002).
- [Callaway] : J. Callaway, *Quantum Theory of the Solid State*, Academic Press (1991).
- [Choquet] Y. Choquet-Bruhat, Y. Dewitt-Morette et M. Dillard-Bleick, *Analysis, manifolds and physics*, Tomes 1 et 2, North Holland (1989).
- [Churchill] : R.V. Churchill and J.W. Brown, *Complex Variables and Applications*, McGraw-Hill (1996).
- [Cohen 1974] : C. Cohen-Tannoudji, F. Laloe et B. Diu, *Mécanique Quantique*, Tome I et II, Hermann (1974).
- [Cohen 2001] : C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc et G. Grynberg, *Processus d'interaction entre photons et atomes*, EDP Sciences et CNRS Éditions, Collection Savoirs actuels (1996) et *Photons et atomes, Introduction à l'électrodynamique quantique*, EDP Sciences et CNRS Éditions, Collection Savoirs actuels (1987).

- [Conway] J.B. Conway, *Functions of One Complex Variable I*, (Graduate Texts in Mathematics 11), Springer (1978).
- [Courant] : R. Courant and D. Hilbert, *Methods of Mathematical Physics, Volume 1 and 2*, Wiley (1991).
- [de Gennes] : P.G. de Gennes, *Superconductivity of Metals and Alloys*, Addison-Wesley (1989).
- [Economou] : E.N. Economou, *Green's Functions in Quantum Physics*, Springer-Verlag (1979).
- [Farlow] : S.J. Farlow, *Partial Differential Equations for Scientists and Engineers*, Dover (1993).
- [Fetter-Walecka] : A.L. Fetter et J.D. Walecka, *Quantum theory of many-particle systems*, International series in pure and applied physics, McGraw-Hill (1971).
- [Feynman] : R.P. Feynman et A.R. Hibbs, *Quantum Mechanics and Path Integrals*, McGraw-Hill (1965).
- [Gasiorowicz] : S. Gasiorowicz, *Elementary Particle Physics*, Wiley (1965).
- [Gockeler] : M. Gockeler et T. Schücker, *Differential geometry, gauge theories, and gravity* (Cambridge Monographs on Mathematical Physics) (1990).
- [Goldstein] : H. Goldstein, *Classical Mechanics* (Addison-Wesley, 2nd edition) (1980).
- [Gradshteyn] : I.S. Gradshteyn et I.M. Ryzhik, *Table of Integrals, Series and Products*, Academic Press, New York (1965).
- [Gutzwiller] : M.C. Gutzwiller, *Chaos in classical and quantum mechanics*, Interdisciplinary Applied Mathematics, Volume 1, Springer (1990).
- [Guyon] : E. Guyon, J.-P. Hulin et L. Petit, *Hydrodynamique physique*, EDP Sciences et CNRS Éditions, Collection Savoirs actuels (2001).
- [Hamilton] : H.J. Hamilton, *A primer of complex variables, with an introduction to advanced techniques*, Wadsworth Publishing Co. (1966).
- [Hansen] : J.-P. Hansen et I.R. McDonald, *Theory of Simple Liquids*, Academic Press (2006).
- [Heitler] : W. Heitler, *The quantum theory of radiation*, New York : Dover Publications (1984).
- [Hilgevoord] : J. Hilgevoord, *Dispersion Relations and Causal Description : an Introduction to Dispersion Relations in Field Theory*, North Holland (1960).
- [Huang] : K. Huang, *Introduction to statistical physics*, Taylor and Francis (2001).
- [Ichimaru] : S. Ichimaru, *Basic Principles of Plasma Physics : A Statistical Approach*, Frontiers in Physics, W.A. Benjamin Advanced Book Program (1973).
- [Itzykson] : C. Itzykson et J.-B. Zuber, *Quantum Field Theory*, McGraw-Hill (1980).
- [Jackson] : J.D. Jackson, *Classical Electrodynamics 3rd Ed.*, Wiley (1999).
- [Joachain] : C.J. Joachain, *Quantum Collision Theory*, North-Holland (1987).
- [Joseph] : D.D. Joseph et L. Preziosi, *Heat Waves*, Reviews of Modern Physics, **61**, p. 41 (1989).

- [José] : J.V. José et E.J. Saletan, *Classical Dynamics : A Contemporary Approach*, Cambridge University Press (1998).
- [Kadanoff 1963] : L.P. Kadanoff and P.C. Martin, *Hydrodynamic Equations and Correlation Functions*, Annals of Physics : **24**, p. 419-469 (1963).
- [Kadanoff 2000] : L.P. Kadanoff, *Statistical Physics : Statics, Dynamics and Renormalization*, World Scientific (2000).
- [Kanwal] : R.P. Kanwal, *Generalized Functions : Theory and Applications*, Birkhauser (2004).
- [Karatzas] : I. Karatzas, S.E. Shreve, *Brownian Motion and Stochastic Calculus*, Springer ; 2nd edition (2006).
- [Kim] : K.-J. Kim et J.D. Jackson, *Proof that the Neumann Green's function in electrostatics can be symmetrized*, Am. J. Phys., **61** (12), p. 1144 (1993).
- [Kittel] : C. Kittel, *Physique de l'état solide*, 7^e édition, Dunod (2005).
- [Kleinert] : H. Kleinert, *Path Integrals in Quantum Mechanics, Statistical Physics and Polymer Physics*, World Scientific (1990).
- [Kreuzer] : H.J. Kreuzer, *Non Equilibrium Thermodynamics and its Statistical Foundations*, Oxford University Press (1981).
- [Kubo] : R. Kubo, M. Toda, and N. Hashitsume, *Statistical Physics II : Non Equilibrium Statistical Mechanics*, Springer-Verlag (1983).
- [Landau II] : L. Landau et E. Lifshitz, *Physique théorique tome II : théorie des champs*, Ed. Mir (1989).
- [Landau III] : L. Landau et E. Lifshitz, *Physique théorique tome III : mécanique quantique, théorie non relativiste*, Ed. Mir (1975).
- [Landau IV] : L. Landau et E. Lifshitz, *Physique théorique tome IV : théorie quantique relativiste*, Ed. Mir (1973).
- [Landau V] : L. Landau et E. Lifshitz, *Physique théorique tome V : physique statistique*, Ed. Mir (1994).
- [Landau VI] : L. Landau et E. Lifshitz, *Physique théorique tome VI : mécanique des fluides*, Ed. Mir (1989).
- [Le Bellac 1988] : M. Le Bellac, *Des Phénomènes Critiques aux Champs de Jauges*, Inter Editions (1988).
- [Le Bellac 2003] : M. Le Bellac, *Physique Quantique*, EDP Sciences et CNRS Editions, Collection Savoirs actuels (2003).
- [Liboff] : R.L. Liboff, *Kinetic Theory : Classical, Quantum and relativistic Description*, Prentice Hall (1990).
- [Lucarini] : V. Lucarini, F. Bassani, K.-E. Peiponen et J.J. Saarinen, *Dispersion theory and sum rules in linear and nonlinear optics*, Rivista Del Nuovo Cimento, **26**, p. 12 (2003).
- [Mahan] : G.D. Mahan, *Many-Particle Physics* 2nd edition, Plenum Press (1990).
- [Marder] : M.P. Marder, *Condensed Matter Physics*, John Wiley & Sons (2000).
- [Martin] : P.A. Martin, *L'intégrale fonctionnelle*, Presses Polytechniques Universitaires Romandes (1996).
- [Martin-Rothen] : P.A. Martin et F. Rothen, *Problèmes à N-corps et champs*

- quantiques : cours élémentaire*, Presses polytechniques et universitaires romandes (1990).
- [McLennan] : J.A. McLennan, *Introduction to non Equilibrium Statistical Mechanics*, Prentice Hall (1989).
- [Mehta] : M.L. Mehta, *Random Matrices*, Academic Press, troisième édition (2004).
- [Melrose] : D.B. Melrose and R.C. McPhedran, *Electromagnetic Processes in Dispersive Media*, Cambridge University Press (1991).
- [Merzbacher] : E. Merzbacher, *Quantum Mechanics 3rd Ed.*, John Wiley and Sons (1998).
- [Messiah] : A. Messiah, *Mécanique Quantique : Tome 2*, Dunod (1999).
- [Morse] : P.M. Morse and H. Feshbach, *Methods of Theoretical Physics, Part I and II*, McGraw-Hill (1953).
- [Nakahara] : M. Nakahara, *Geometry, Topology and Physics*, IoP (1992).
- [Nehari] : Z. Nehari, *Conformal mapping*, McGraw-Hill (1952).
- [Parisi] : G. Parisi, *Statistical Field Theory*, Addison-Wesley (1988).
- [Perez] : J.-P. Pérez, *Optique : fondements et applications*, Dunod (2000).
- [Pikulin] : V.P. Pikulin et S.I. Pohoazev, *Equations in Mathematical Physics : A Practical Course*, Birkhäuser Verlag (2001).
- [Pottier] : N. Pottier, *Physique statistique hors d'équilibre : Processus irréversibles linéaires*, EDP Sciences et CNRS Editions, Collection Savoirs actuels (2007).
- [Purcell] : E.M. Purcell, *On the absorption and emission of light by interstellar grains*, The Astrophysical Journal, **158**, p. 433 (1969).
- [Reif] : F. Reif, *Fundamentals of Statistical and Thermal Physics*, McGraw-Hill (1965).
- [Roach] : G.F. Roach, *Green's Functions*, Cambridge University Press (1982).
- [Roepstorff] : G. Roepstorff, *Path Integral Approach to Quantum Physics*, Springer-Verlag (1994).
- [Rogers] : L.C.G. Rogers et D. Williams, *Diffusions, Markov Processes, and Martingales*, Cambridge University Press ; 2nd edition (2000).
- [Rubinstein] : I. Rubinstein et L. Rubinstein, *Partial Differential Equations in Classical Mathematical Physics*, Cambridge University Press (1998).
- [Rudin] : W. Rudin *Real and complex Analysis* (Higher Mathematics Series), McGraw-Hill (1986).
- [Schiff] : L. Schiff, *Quantum Mechanics*, McGraw-Hill (1955).
- [Schulman] : L. Schulman et S. Lawrence, *Techniques and applications of path integration*, New York : Wiley (1981).
- [Schwartz] : L. Schwartz, *Théorie des distributions*, Hermann, Paris (1966).
- [Schwinger] : J. Schwinger, *Classical Electrodynamics*, Perseus (1998).
- [Simon] : B. Simon, *Functional integration and quantum physics*, Pure and applied mathematics (vol. 86), Academic Press (1979).
- [Snieder] : R. Snieder, *A Guided Tour of Mathematical Methods for the Physical Sciences*, Cambridge University Press (2004).

- [Sommerfeld] : A. Sommerfeld, *Partial Differential Equations in Physics*, New York : Academic Press (1949).
- [Spivak] : M. Spivak, *Calculus on Manifolds*, Benjamin (1965).
- [Stratton] : J.A. Stratton, *Electromagnetic Theory*, McGraw-Hill (1963).
- [Sukumar] : C.V. Sukumar, *Green's functions and a hierarchy of sum rules for the eigenvalues of confining potentials*, Am. J. Phys., **58** (6), p. 561 (1990).
- [Tinkham] : M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity*, Huntington New-York (1975).
- [Tran] : M.N. Tran, M.V.N. Murthy, R.K. Bhaduri, *On the Quantum Density of States and Partitioning an Integer*, Annals of Physics, **311** (2004), p. 204-219.
- [Vladimirov] : A.S. Vladimirov, *Equations of Mathematical Physics*, Mir (1986).
- [Weinberg] : S. Weinberg, *Gravitation and cosmology : principles and applications of the general theory of relativity*, J. Wiley (1972).
- [Wigner] : E.P. Wigner (Ed.), *Dispersion Relations and their Connection with Causality*, Academic Press (1960).
- [Wyld] : H.W. Wyld, *Mathematical Methods for Physics*, Parseus Books, Advanced Books Classics (1999).
- [Zinn-Justin 1989] : J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*, Oxford Science Publications (1989).
- [Zinn-Justin 2004] : J. Zinn-Justin, *Path Integrals In Quantum Mechanics*, Oxford Graduate Texts (2004).

Index

A

Absorption, 25, 44, 55
Action de Ginzburg-Landau, 283
Admittance, **22**, 30
Approximation de Born, 121
Approximation semi-classique, 287

B

Bessel, fonctions de, 33, 95, 134, 226, 294
Bloch, équation de, 177

C

Cattaneo, équation de, **221**, 242
Causalité, 4, 145, 150
Chaleur, 155, 221, 238, 240
spécifique, 273, 277
Champ
électrique, 25, 40, 46, 51, 54, 57, 71, 106, 203, 214, 227
magnétique, 108, 203, 214, 285
moyen, 39, 286, 297
Circuit RLC, 21
Classe d'universalité, 287
Col, voir Méthode du col
Conditions
aux limites, voir opérateur par opérateur
de Dirichlet, 73
de Neumann, 74
de Robin, 239, 240
initiales, 3, 145
Conducteur, 71, **104**, 131, 132
Conductivité
électrique, 45–53, 57
thermique, 241

Courant, 21, 45–52, 57
Cristal harmonique, 275

D

d'Alembert, voir Opérateur de d'Alembert
Densité d'états, 113–115, 117
Dérivée fonctionnelle, 331
Développement perturbatif, 47, **102**, 118, 121, 140, **173**, 228
Diélectrique, **25**, 58, 106, 133, 234
Diffraction, **203**, 237
Diffusion
en mécanique quantique, 119–122
équation, voir Équation de diffusion
Dipôle, 82, 111, 212
Dirac
distribution, 303
notation, 313
Dirichlet, conditions de, 73
Dissipation, 9, 10, 24, 38, 52

E

Écoulement
irrotationnel, 107, 122, 138
oscillant, 31–38
Effet
Cherenkov, 220
d'écran, 44, 106
tunnel, 292
Élasticité, 135
Émission spontanée, 234
Énergie libre, 270, 271, 274, 296, 297
Ensemble
canonique, 270
isotherme-isobare, 295

micro-canonique, 270

Équation de Bloch, 177

Équation de Cattaneo, **221**, 242

Équation de d'Alembert, voir
Opérateur de d'Alembert

Équation de diffusion, 155–165, 199,
238, 240
analyse des C.L., 156
définition, 156
expression de la solution, 158
avec C.L. de Dirichlet, 163
avec C.L. de Neumann, 164
fonctions de Green, 157, 162, 200
représentation spectrale, 159,
160, 199
unicité des solutions, 156, 236

Équation de Helmholtz, voir
Opérateur de Helmholtz

Équation de Klein-Gordon, 222, 242

Équation de la chaleur, voir Équation
de diffusion

Équation de Laplace
définition, 73
en hydrodynamique, 107, 123, 138
fonctions harmoniques, 94
utilisation des transformations
conformes, 94

Équation de Poisson, 71–83
analyse des C. L., 71
définition, 71
expression de la solution, 81
avec C. L. de Dirichlet, 81
avec C. L. de Neumann, 81
avec la fonction de Green G_∞ ,
82

Équation de Schrödinger, 47, 98, 114,
165–177, 228
comparaison avec la diffusion, 171
développement perturbatif, 173
expression de la solution, 168,
172, 173, 175, 176
fonctions de Green, 168, 169
particule libre, 170

Équation de Vlasov, 40

Espaces de Hilbert, 313

Extensivité, 270, 273

F

Fluctuations, 52, 249, 279, 286

Fonction de partition, 267, 271, 275,
281, 295, 297, 299

Fonction de réponse
causalité, 4, 58
comportement aux temps longs, 6
comportement aux temps courts,
6
définition, 5
rôle de la dissipation, 6

Fonctions de Bessel, voir Bessel

Fonctions de Green
d'Alembert, voir Opérateur de
d'Alembert
dynamiques
définition, 146
représentation spectrale, 149,
155
transformation de Laplace,
154

Équation de diffusion, voir
Équation de diffusion

Équation de Schrödinger, voir
Équation de Schrödinger

Helmholtz, voir Opérateur de
Helmholtz

Laplacien, voir Opérateur de
Laplace

statiques
définition, 64
relations de réciprocité, 66, 69
représentation spectrale, 68
usuelles, 333

Formule
de Kirchhoff, 209
de Kubo, 49, 50
de Stirling, 267–269
de Van Vleck, 291

Formules de Green
première, 72
seconde, 73

Fraunhofer, voir Diffraction

Front d'onde, 192, 215, 218–219, 363,
365

G

Gauss, voir Théorème de Gauss

Ginzburg-Landau, action de, 283
 Green
 fonctions, voir Fonctions de Green
 formules, voir Formules de Green
 Green-Ostrogradski, théorème de, 72, 345

H

Harmoniques sphériques, 79, 110, 131, **327**
 Helmholtz, voir Opérateur d'Helmholtz
 Hilbert, espaces de, 313
 Hubbard-Stratonovitch, transformation de, 282
 Hydrodynamique, 107, 122, 134, 138

I

Images, voir Méthode des images
 Indiscernabilité, 267
 Inertie, 7, 24, 30
 Intégrale de chemin, 290
 Intégrales gaussiennes, 317
 Ising, voir Modèle d'Ising

K

Kirchhoff, voir Formule de Kirchhoff
 Klein-Gordon, voir Équation de Klein-Gordon
 Kramers-Kronig, voir Relations de Kramers-Kronig

L

Laplace
 équation, voir Équation de Laplace
 opérateur, voir Opérateur de Laplace
 transformée, voir Transformée de Laplace
 Laplacien, voir Opérateur de Laplace
 Laurent, voir Série de Laurent
 Lemme de Jordan, 14, 191, 223, **303**, 338, 342

M

Mécanique quantique, 46, 98, 113, 119, 165, 227

Méthode de variation de la constante, 310
 Méthode des images, **104**, 131, 132, 137, 205
 Méthode du col
 intégrale fonctionnelle, 266
 intégrale multiple, 263
 intégrale simple
 col complexe, 260
 fonction réelle, 249, 252
 phase stationnaire, 254, 261
 Métrique, 90, 323–324
 Modèle d'Ising, 280, 297

N

Neumann, conditions de, 74
 Non-linéaire, 139, 235
 Notation de Dirac, 313

O

Onde de choc, 215, 218, 219
 Ondes
 progressives, 197
 sonores, 209
 Opérateur d'Helmholtz, 157, 183
 analyse des C. L., 84
 définition, 83
 fonctions de Green, 85
 1d, 96
 1d segment, 88
 2d, 95
 3d, 86
 forme asymptotique, 295
 Opérateur de d'Alembert
 analyse des C. L., 182
 définition, 181
 expression de la solution, 184
 avec C.L. de Dirichlet, 186
 avec C.L. de Neumann, 188
 avec la fonction de Green G_{∞}^{+} , 193
 fonctions de Green, 183
 1d, 238
 2d, 237
 3d, 189
 relations de réciprocité, 185
 représentation spectrale, 184
 ondes stationnaires, 187

Opérateur de Laplace
 analyse des C. L., 73
 définition, 70
 discret, 136
 fonctions de Green, 74, 128
 1d, **97**, 128
 2d, **97**, 128
 3d, **78**, 128, 132, 134
 relations de réciprocité, 129

Oscillateur harmonique, 277, 278,
 298, 332
 Oseen, tenseur de, 134

P

Paquet d'ondes, 296
 Particule libre, 77, 102, 115, 170–172,
 334
 Partie principale, **15**, 42, 115, **303**
 Phonons, 277
 Plan conducteur, 104, 131
 Plasma, 38–45, 86
 Plasmons, 45
 Poiseuille, formule de, 37
 Poisson, voir Équation de Poisson
 Polarisabilité, 227
 Polarisation, 29, 57, 228, 279
 Polynômes de Legendre, 110, 328
 Potentiel
 de Debye, 86
 de Yukawa, 122
 électrique, 71
 retardé, 198
 Principe de Huygens-Fresnel, 207
 Propagateur thermique, 177–180, 266,
 287
 Propagation, 146, 181, 192–198,
 221–225
 Puissance, 11, 24, 38, 44, 52, 233

R

Réflexions multiples, 195–197
 Règles de somme, 18, 28, 56, 130,
 160, 161, 188
 Relation de complétude, 315
 Relations de Kramers-Kronig, **16**, 18,
 20, 27, 55, 57
 démonstration, 13–16
 généralisées, 18, 341

Relations de réciprocité, 66, 69, 185,
 236
 Relativité générale, 139
 Représentation spectrale, **68**, 80, 101,
149, 155, 159, 160, 168, 184
 Résolvante, **100**, **114**, 120, 130, 154,
154, 166, 169, 174–178, 229
 Robin, conditions de, 239, 240

S

Schrödinger, voir Équation de
 Schrödinger
 Second son, 227
 Selle de cheval (point), 255, 260
 Série de Laurent, 12, **302**
 Singularité, 9, 17, 27, 101, 114,
 117–118, 171, 231, 301–302
 Source, 61, 70, 75, 97, 100, 143, 146
 Stefan-Boltzmann, loi de, 241
 Stirling, voir Formule de Stirling
 Supraconducteur, 108
 Susceptibilité, 7–20, 188
 définition, 7
 développement asymptotique, 12
 Kramers-Kronig, **16**, 18, 20
 propriétés analytiques, 8
 règles de somme, 18

T

Théorème
 de Gauss, 77, 81, 343
 des résidus, 14, 85, 191, 223, 255,
302, 338, 342, 347
 fluctuation-dissipation, 52
 Théorie des nombres, 298
 Transformations conformes, 89–91,
 125, 138
 Transformée de Fourier, 80, 151, 155,
 190
 Transformée de Laplace
 d'une EDP, 152, 166, 182
 définition, 305
 des fonctions de Green, 148, 154,
 155, 157, 161, 167, 183
 en réponse linéaire, 8, 24
 fonctions usuelles, 305
 transformée inverse, 54, 337

U

Unicité des solutions, 147

équation de d'Alembert, 182, 236

équation de diffusion, 156, 236

équation de Helmholtz, 84

équation de Poisson, 75

équation de Schrödinger, 166

Universalité, voir Classe d'universalité

V

Van Vleck, formule de, 291

Vent, 122, 138

Vlasov, équation de, 40

W

WKB, 293

Y

Yukawa, voir Potentiel de Yukawa