# Quelques remarques complémentaires

## A. Force de Langevin et force instantanée.

– La théorie de Mori permet de reprendre sur des bases plus solides la discussion de la page (II-10) relative à la comparaison entre force de Langevin et force instantanée.

On se limitera dans ce § à une seule variable $A = A^+$.

– Force (totale) à $t = 0$

$$|F(0)\rangle = |\dot{A}\rangle = i\mathcal{L}|A\rangle \qquad (XII-1)$$

Comme $\langle A|\mathcal{L}|A\rangle = 0$, $P\mathcal{L}|A\rangle = 0$ et $i\mathcal{L}|A\rangle = iQ\mathcal{L}|A\rangle$

Donc à $t = 0$, la force de Langevin $iQ\mathcal{L}A$ et la force totale $i\mathcal{L}A$ coïncident.

– Fonction de corrélation de la force de Langevin (on suppose pour simplifier $\langle A|A\rangle = 1$)

$$\tilde{M}(t) = \langle iQ\mathcal{L}A|e^{iQ\mathcal{L}Qt}|iQ\mathcal{L}A\rangle = \langle A|\mathcal{L}\, e^{iQ\mathcal{L}Qt}\mathcal{L}|A\rangle \qquad (XII-2)$$

(on a utilisé le fait que $i\mathcal{L}A = iQ\mathcal{L}A$). Soit $M(\omega)$ la transformée de Fourier–Laplace de $\tilde{M}(t)$. On a

$$M(\omega) = \langle A|\mathcal{L}\frac{i}{\omega + Q\mathcal{L}}\mathcal{L}|A\rangle \qquad (XII-3)$$

– Fonction de corrélation de la force totale

$$\tilde{\phi}(t) = \langle i\mathcal{L}A|\,e^{i\mathcal{L}t}\,|i\mathcal{L}A\rangle \qquad (XII-4)$$

On utilise maintenant l'opérateur d'évolution global $e^{i\mathcal{L}t}$ et non l'opérateur "réduit" au sous espace rapide $e^{iQ\mathcal{L}Qt}$

Si $\phi(\omega)$ est la T.F.L. de $\tilde{\phi}(t)$

$$\phi(\omega) = \langle A|\mathcal{L}\frac{i}{\omega+\mathcal{L}}\mathcal{L}|A\rangle \qquad (XII-5)$$

– Relations entre $\phi(\omega)$ et $M(\omega)$

Partons de l'identité opératorielle

$$\frac{1}{\omega+Q\mathcal{L}} - \frac{1}{\omega+\mathcal{L}} = \frac{1}{\omega+\mathcal{L}}\underbrace{(\omega+\mathcal{L}-\omega-Q\mathcal{L})}_{P\mathcal{L}}\frac{1}{\omega+Q\mathcal{L}} \qquad (XII-6)$$

En prenant les éléments de matrice des 2 membres de (XII-6) entre $\langle A|\mathcal{L}$ et $\mathcal{L}|A\rangle$, on obtient compte tenu de (XII-3) et (XII-5):

$$-iM(\omega) + i\phi(\omega) = \langle A|\mathcal{L}\frac{1}{\omega+\mathcal{L}}|A\rangle\underbrace{\langle A|\mathcal{L}\frac{1}{\omega+Q\mathcal{L}}\mathcal{L}|A\rangle}_{-iM(\omega)} \qquad (XII-7)$$

Or,

$$\langle A|\mathcal{L}\frac{1}{\omega+\mathcal{L}}|A\rangle = \frac{1}{\omega}\langle A|\mathcal{L}\frac{1}{\omega+\mathcal{L}}\,\omega+\mathcal{L}-\mathcal{L}|A\rangle$$

$$= \frac{1}{\omega}\langle A|\mathcal{L}|A\rangle - \frac{1}{\omega}\langle A|\mathcal{L}\frac{1}{\omega+\mathcal{L}}\mathcal{L}|A\rangle$$

$$= 0 + \frac{i}{\omega}\phi(\omega) \qquad (XII-8)$$

On en déduit finalement

$$-M(\omega)+\phi(\omega) = -\frac{i}{\omega}\,\phi(\omega)\,M(\omega) \qquad (XII\text{-}9)$$

d'où l'on tire, soit $M(\omega)$ en fonction de $\phi(\omega)$

$$M(\omega) = \frac{\phi(\omega)}{1-\frac{i}{\omega}\phi(\omega)} \qquad (XII\text{-}10)$$

soit $\phi(\omega)$ en fonction de $M(\omega)$

$$\phi(\omega) = \frac{M(\omega)}{1+\frac{i}{\omega}M(\omega)} \qquad (XII\text{-}11)$$

La formule (XII-10) est souvent utilisée pour remplacer $M(\omega)$ en fonction de $\phi(\omega)$ qui est la fonction de corrélation d'une vraie force.

– Allure de $\phi(\omega)$

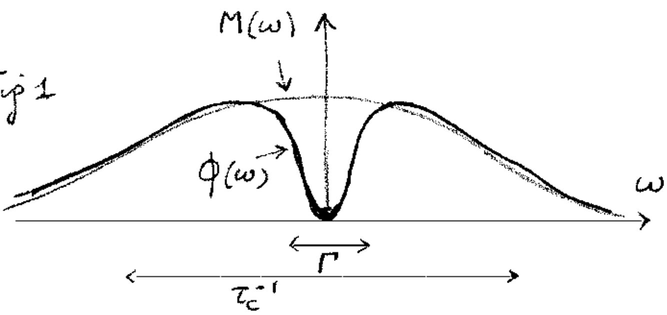
Pour $\omega \ll M(0) = \Gamma$, le dénominateur de (XII-11) est très grand
Donc

$$\omega \ll \Gamma \quad \rightarrow \quad \phi(\omega) \simeq 0 \qquad (XII\text{-}12)$$

Par contre, pour $\omega \gg M(0) = \Gamma$, le dénominateur de (XII-1) est pratiquement égal à 1
Donc

$$\omega \gg \Gamma \quad \rightarrow \quad \phi(\omega) \simeq M(\omega) \qquad (XII\text{-}13)$$

Fig 1




On en déduit l'allure générale de $\phi(\omega)$ comparée à celle de $M(\omega)$ [Fig. 1]
2 constantes de temps apparaissent donc dans $\tilde{\phi}(t)$ : une constante de temps courte $\tau_c$ (inverse de la largeur de $M(\omega)$) et une constante de temps longue, de l'ordre de $\Gamma^{-1}$ (inverse de la largeur du "trou" apparaissant sur la figure 1 au voisinage de $\omega = 0$), provenant de la force de friction qui intervient dans la force totale.
L'annulation de $\phi(\omega)$ en $\omega = 0$ traduit le fait que l'intégrale de $\tilde{\phi}(t)$ est nulle [voir discussion de la page II-10].

## B- Exemple important de variable lente : grandeur obéissant à une loi de conservation.

### ① Exemple simple de loi de conservation

– Soit une grandeur physique dépendant du point $\vec{r}$, par exemple une densité de magnétisation $M(\vec{r})$ associée à des densités $n_\pm(\vec{r})$ de spins 1/2 dans l'état + ou –, de moment magnétique individuel $\mu$

$$M(\vec{r}) = \mu\left[n_+(\vec{r}) - n_-(\vec{r})\right] \qquad (XII\text{-}14)$$

- On suppose que cette grandeur physique obéit à une loi de conservation : son intégrale sur $\vec{r}$ est constante

$$\int d^3r \; M(\vec{r}) = C^{te} \qquad (XII-15)$$

Par exemple, les particules portant les spins interagissent par des forces indépendantes des spins, de sorte que le spin total est une constante du mouvement.

- A la loi de conservation globale (XII-15) correspond une loi de conservation locale

$$\frac{d}{dt} M(\vec{r},t) + \vec{\nabla}\cdot\vec{J}(\vec{r},t) = 0 \qquad (XII-16)$$

où $\vec{J}(\vec{r},t)$ est le courant de magnétisation (que l'on peut exprimer en fonction de la position et de la vitesse des diverses particules)

## ② Pourquoi une grandeur conservée varie-t-elle lentement ?

- Introduisons les transformées de Fourier spatiales de $M$ et $\vec{J}$

$$M(\vec{k},t) = \int d^3r \; e^{-i\vec{k}.\vec{r}} \; M(\vec{r},t) \qquad (XII-17)$$

$$\vec{J}(\vec{k},t) = \int d^3r \; e^{-i\vec{k}.\vec{r}} \; \vec{J}(\vec{r},t) \qquad (XII-18)$$

L'équation de continuité (XII-16) devient

$$\frac{d}{dt} M(\vec{k},t) = i\vec{k}\cdot\vec{J}(\vec{k},t) \qquad (XII-19)$$

- On voit alors immédiatement que si $\vec{k}\to 0$, $\frac{d}{dt}M(\vec{k},t)\to 0$ les composantes de Fourier spatiales de grande longueur d'onde d'une variable conservée sont donc des variables lentes.

Interprétation physique : soit une fluctuation de $\langle M(\vec{r},t)\rangle$ de longueur d'onde $\lambda$. Les particules portant les spins doivent diffuser sur une longueur $\lambda$ pour faire disparaître cette fluctuation. Plus $\lambda$ est grand, plus le "temps de relaxation" est long.

## ③ Modèle hydrodynamique

- Pour des phénomènes variant lentement dans le temps et dans l'espace, il est possible d'adopter un point de vue <u>hydrodynamique</u>

Dans le cas de l'exemple précédent on introduit une nouvelle équation <u>phénoménologique</u> (équation constitutive) reliant les valeurs moyennes $\langle M\rangle$ et $\langle\vec{J}\rangle$ de $M$ et $\vec{J}$ :

$$\langle\vec{J}(\vec{r},t)\rangle = -D\,\vec{\nabla}\langle M(\vec{r},t)\rangle \qquad (XII-20)$$

Cette équation, où $D$ est un <u>coefficient de diffusion</u>, exprime que le courant de magnétisation est associé à une diffusion des particules des régions de $\langle\vec{M}\rangle$ élevé vers les régions de $\langle\vec{M}\rangle$ faible.

L'équation (XII-20) joue, pour le modèle hydrodynamique un rôle tout à fait analogue à l'équation

$$\frac{d}{dt}\langle v(t)\rangle = -\Gamma\langle v(t)\rangle \tag{XII-21}$$

pour le modèle de Langevin du mouvement Brownien

- En portant (XII-20) dans l'équation de conservation (XII-16), on obtient l'équation de diffusion

$$\frac{d}{dt}\langle M(\vec r,t)\rangle = D\,\Delta\langle M(\vec r,t)\rangle \tag{XII-22}$$

qui, dans l'espace des $\vec k$, s'écrit

$$\frac{d}{dt}\langle M(\vec k,t)\rangle = -Dk^2\langle M(\vec k,t)\rangle \tag{XII-23}$$

$\langle M(\vec k,t)\rangle$ s'amortit donc avec une constante de temps

$$\tau(k) = \frac{1}{Dk^2} \tag{XII-24}$$

qui tend vers l'infini quand $k \to 0$. On retrouve bien l'interprétation physique donnée plus haut. Pour faire disparaître la fluctuation $k$, les particules doivent diffuser sur une longueur $\lambda = 1/k$, ce qui exige un temps $\tau$ tel que $D\tau = \lambda^2 = \frac{1}{k^2}$

- Introduisons enfin la T.F.L. $\langle M(\vec k,\omega)\rangle$ de $\langle M(\vec k,t)\rangle$ (que nous noterons désormais $\langle \tilde M(\vec k,t)\rangle$) :

$$\langle M(\vec k,\omega)\rangle = \int_0^\infty dt\; e^{i\omega t}\langle \tilde M(\vec k,t)\rangle \tag{XII-25}$$

De (XII-23) on déduit

$$\langle M(\vec k,\omega)\rangle = \frac{\langle \tilde M(\vec k,0)\rangle}{-i\omega + Dk^2} \tag{XII-26}$$

## ④ Lien entre réponse linéaire et hydrodynamique

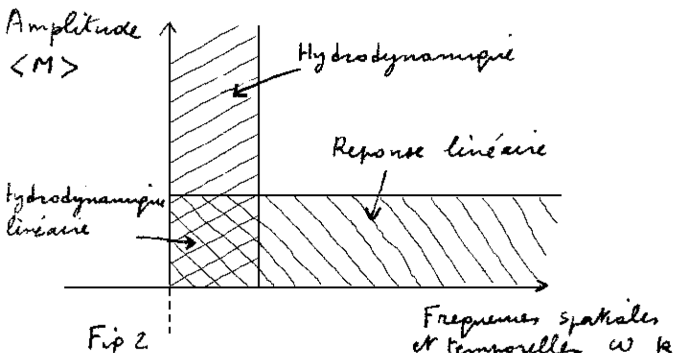



Fig 2

- L'hydrodynamique est valable pour $k$ et $\omega$ petits (Fig 2), alors que la théorie de la réponse linéaire suppose des amplitudes $\langle M\rangle$ faibles. Les 2 théories ont une "intersection" correspondant à l'hydrodynamique linéaire

- En confrontant les prévisions de l'hydrodynamique XII-26 valables pour $k, \omega \to 0$ à celles de la réponse linéaire, on doit pouvoir obtenir des relations (relations de Kubo) entre les paramètres hydrodynamiques, tels que le coefficient de diffusion $D$, et les fonctions de corrélation dans l'équilibre thermodynamique qui apparaissent dans la théorie de la réponse linéaire.

## ⑤ Exemple de relation de Kubo

- Pour calculer les prévisions de la théorie de la réponse linéaire concernant $\langle M(\vec{k},\omega)\rangle$, supposons que l'on applique un champ magnétique perturbateur de vecteur d'onde $\vec{k}$

$$B(\vec{r},t) = b(t)\, e^{-i\vec{k}\vec{r}} \qquad (\text{XII-27})$$

où $b(t) = b\, e^{\varepsilon t}\,\theta(-t)$ correspond à un branchement adiabatique entre $-\infty$ et $0$ puis à une coupure brusque à $t=0$.

L'hamiltonien d'interaction s'écrit alors :

$$-\int d^3r\ B(\vec{r},t)\ \tilde{M}(\vec{r},t) = -\,b(t)\ \tilde{M}(\vec{k},t) \qquad (\text{XII-28})$$

- On peut alors appliquer les résultats du § 3 page V-7 relatifs à l'étude de la relaxation et obtenir l'évolution de $\langle\tilde{M}(\vec{k},t)\rangle$ pour $t>0$ [ cf formule V-41 ].

$$\frac{1}{b}\langle\tilde{M}(\vec{k},t)\rangle = \frac{1}{\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'\ \frac{\xi_{MM}(\vec{k},\omega')}{\omega'-i\varepsilon}\ e^{-i\omega' t} \qquad (\text{XII-29})$$

où $\xi_{MM}(\vec{k},\omega)$ est la fonction spectrale correspondant à une excitation et à une détection sur la même grandeur $M(\vec{k})$, qui coïncide donc avec la partie imaginaire $\chi''$ de la susceptibilité magnétique

$$\xi_{MM}(\vec{k},\omega') = \chi''(\vec{k},\omega') \qquad (\text{XII-30})$$

Par ailleurs, on a ( voir équation V-40)

$$\langle\tilde{M}(\vec{k},t=0)\rangle = b\ \chi(\vec{k},\omega=0) \qquad (\text{XII-31})$$

où $\chi(\vec{k},\omega=0) = \chi(\vec{k},0)$ est la susceptibilité statique pour une excitation magnétique statique de vecteur d'onde $\vec{k}$, ce qui permet d'éliminer $b$ de l'équation (XII-29)

- Calculons alors la T.F.L. $\langle M(\vec{k},\omega)\rangle$ de $\langle\tilde{M}(\vec{k},t)\rangle$. En portant (XII-29) dans (XII-25), on obtient, compte tenu de (XII-31) :

$$\langle M(\vec{k},\omega)\rangle = \frac{\langle\tilde{M}(k,0)\rangle}{\chi(\vec{k},0)}\ \frac{1}{i\pi}\int_{-\infty}^{+\infty} d\omega'\ \frac{\chi''(\vec{k},\omega')}{\omega'-i\varepsilon}\ \frac{1}{\omega'-\omega-i\eta} \qquad (\text{XII-32})$$

(Il faut faire tendre $\varepsilon$ et $\eta$ vers $0_+$ ). Or,

$$\frac{1}{\omega'-i\varepsilon}\ \frac{1}{\omega'-\omega-i\eta} = \frac{1}{\omega}\left[\frac{1}{\omega'-\omega-i\eta} - \frac{1}{\omega'-i\varepsilon}\right] \qquad (\text{XII-33})$$

Comme, d'après (V-20)

$$\frac{1}{\pi}\int d\omega'\ \frac{\chi''(\vec{k},\omega')}{\omega'-\omega-i\varepsilon} = \chi(\vec{k},\omega) \qquad (\text{XII-34})$$

on réécrit aisément (XII-32) sous la forme

$$\langle M(\vec{k},\omega)\rangle = \langle\tilde{M}(\vec{k},0)\rangle\ \frac{1}{i\omega}\left[\chi(\vec{k},\omega)\,\chi^{-1}(\vec{k},0) - 1\right] \qquad (\text{XII-35})$$

– Identifions alors, à la limite $\vec{k}, \omega \to 0$, les prévisions de l'hydrodynamique (XII-26) et celles de la réponse linéaire (XII-35). Il vient

$$\frac{1}{-i\omega + Dk^2} = \frac{1}{i\omega}\left[\chi(\vec{k},\omega)\,\chi^{-1}(\vec{k},0) - 1\right] \qquad (XII\text{-}36)$$

c-à-d en prenant la partie réelle des 2 membres

$$\frac{Dk^2}{\omega^2 + (Dk^2)^2} = \frac{1}{\omega}\,\chi''(\vec{k},\omega)\,\chi^{-1}(\vec{k},0) \qquad (XII\text{-}37)$$

d'où l'on déduit la relation de Kubo

$$D\chi = \lim_{\omega\to 0}\left[\lim_{k\to 0}\frac{\omega}{k^2}\,\chi''(\vec{k},\omega)\right] \qquad (XII\text{-}38)$$

où $\chi$ est la susceptibilité statique (pour une excitation uniforme)
(Attention à l'ordre des 2 limites).

## ⑥ Comment retrouver le modèle hydrodynamique à partir des équations de Mori.

– Dans ce §, on montre comment on peut arriver à la dépendance en $\omega$ de $\langle M(\vec{k},\omega)\rangle$ contenue dans la formule (XII-26) à partir des équations de Mori. On montre également que la formule exacte correspondant à XII-26 s'obtient en remplaçant le coefficient $D$ par une fonction de $\vec{k}$ et $\omega$, $D(\vec{k},\omega)$.

– Soit $C(\vec{k},\omega)$ la (T.F.L. de la) fonction de corrélation canonique de $M(\vec{k})$

$$\langle M(\vec{k})\,|\,e^{i\mathcal{L}t}\,|\,M(\vec{k})\rangle \qquad (XII\text{-}39)$$

(qui donne l'évolution de $\langle\tilde{M}(\vec{k},t)\rangle$ à partir d'un état légèrement hors d'équilibre). D'après la théorie de Mori,

$$C(\vec{k},\omega) = \frac{\langle M(\vec{k})\,|\,M(\vec{k})\rangle}{-i\omega + R(\vec{k},\omega)} \qquad (XII\text{-}40)$$

où $R(\vec{k},\omega)$ est la T.F.L. de la fonction de mémoire

$$\frac{1}{\langle M(\vec{k})\,|\,M(\vec{k})\rangle}\,\langle \dot{M}(\vec{k})\,|\,\varphi\, e^{i\varphi\mathcal{L}\varphi t}\,\varphi\,|\,\dot{M}(\vec{k})\rangle \qquad (XII\text{-}41)$$

– Or d'après l'équation de conservation (XII-19)

$$\dot{M}(\vec{k}) = i\sum_i k_i\,J_i(\vec{k},t) \qquad (XII\text{-}42)$$

On a donc

$$R(\vec{k},\omega) = \sum_{ij} k_i\,D_{ij}(\vec{k},\omega)\,k_j \qquad (XII\text{-}43)$$

où

$$D_{ij}(\vec{k},\omega) = \frac{1}{\langle M(\vec{k})\,|\,M(\vec{k})\rangle}\,\langle J_i(\vec{k})\,|\,\varphi\,\frac{i}{\omega + \varphi\mathcal{L}\varphi}\,\varphi\,|\,J_j(\vec{k})\rangle \qquad (XII\text{-}44)$$

Par suite de la symétrie sphérique, le tenseur $D_{ij}$ est proportionnel à $\delta_{ij}$, de sorte que (XII-43) peut s'écrire

$$R(\vec{k},\omega) = k^2 D(\vec{k},\omega) \qquad \text{(XII-45)}$$

où, d'après XII-44, $D(\vec{k},\omega)$ est une fonction de $\vec{k}$ et $\omega$ variant lentement au voisinage de $k,\omega=0$ [ $\langle M(\vec{k}) | M(\vec{k}) \rangle$ est une susceptibilité statique qui varie lentement avec $k$, et la variable $J_i(\vec{k})$ apparaissant au numérateur de XII-44 est une variable rapide, n'obéissant pas à une loi de conservation, de sorte que le numérateur de (XII-44) varie lentement avec $\omega$ ].

- On voit ainsi que l'origine du terme $k^2$ apparaissant en facteur dans la fonction de mémoire est liée à la loi de conservation (XII-42) qui associe un facteur $k$ à la fois au ket $|\dot{M}(k)\rangle$ et au bra $\langle \dot{M}(k)|$

Si l'on remplace au voisinage de $k,\omega=0$ $D(\vec{k},\omega)$ par $D = D(\vec{0},0)$, on retrouve la dépendance en $\dfrac{1}{-i\omega + Dk^2}$ de l'hydrodynamique

Utiliser l'équation phénoménologique (XII-20) revient donc à négliger les effets de retard et les effets non locaux contenus dans la dépendance en $\vec{k}$ et $\omega$ de $D(\vec{k},\omega)$

## 7 Cas où il y a plusieurs variables lentes :

Dans l'exemple précédent, il y a une seule variable conservée $M(\vec{r},t)$

Dans un fluide monoatomique, il y a 5 grandeurs conservées : la densité de particules, la densité d'énergie, les 3 densités des 3 composantes de l'impulsion.

Il faut alors généraliser les calculs précédents pour tenir compte de l'existence de plusieurs variables lentes.

On obtient en particulier des densités spectrales qui ne sont plus forcément lorentziennes (raie Rayleigh et raies Brillouin observées en diffusion de la lumière ...)

# Quelques références (liste non exhaustive)

## Mouvement Brownien - Processus aléatoires classiques.

N. Wax - Selected papers on Noise and Stochastic Processes (Dover 1954)

M.C. Chang, G.E. Uhlenbeck Rev. Mod. Phys. (1945), 17, 323

F. Reif - Statistical and Thermal Physics (Mc Graw Hill 1965) section 15

D.K. Mc Donald - Noise and fluctuations - An introduction (Wiley 1962)

B. Picinbono - Cours donné au D.E.A. de Physique Atomique et Statistique

## Réponses linéaires - Fluctuations dissipations.

C. De Dominicis - Cours donné au D.E.A. de Physique Atomique et Statistique

R. Balian - Cours donné à l'école d'été de Physique des Particules
Gif sur Yvette - Septembre 1971

R. Kubo - Reports in Progress in Physics 29, 255 (1965)
et références in
- Tokyo summer lectures in Theoretical Physics (ed R. Kubo)
Part I. Tokyo 1965

P. Martin "Many Body Physics" Les Houches 67 (eds C. De Witt et R. Balian)
Gordon and Breach, New-York 1968

L.P. Kadanoff et P.C. Martin, Ann. Phys. (1965), 24, 419

## Equations de Langevin-Mori, Opérateurs de projections, Fonctions de corrélation et fonctions de mémoire.

R.W. Zwanzig Lectures in Theoretical Physics (eds W.E. Brittin et al)
Vol 4 Wiley 1961

H. Mori Progr. Theor. Phys. (Japan) (1965), 33, 423
" " " (1965), 34, 399 (développement en fractions continues)

B.J. BERNE "Physical Chemistry, an advanced treatise"
(eds H. EYRING et al) Vol 8B, Ac. Press 1971

J.T. Hynes et J.M. Deutsch Même série Vol XI-B Ac. Press 1975

B.J. Berne et G.D. Harp Advances Chem Phys (1970), 22, 63

D. Forster "Hydrodynamic fluctuations, Broken symmetries and Correlation functions" Benjamin 1975

## Equivalence entre les équations de Langevin-Mori et l'équation pilote

H. Grabert, Zeit. für Physik B (1977), B 26, 79