COMPTES RENDUS de l'Académie des sciences

1878-1535 (electronic)

Physique



Volume 21, Special Issue 6, 2020

Special issue / Numéro thématique Prizes of the French Academy of Sciences 2019 (continued) / Prix 2019 de l'Académie des sciences (suite)

Académie des sciences — Paris



INSTITUT DE FRANCE Académie des sciences



Comptes Rendus Physique

Objective of the journal

Comptes Rendus Physique is a peer-reviewed electronic journal of international standing, covering all fields of physics and astrophysics. It publishes mainly thematic issues, but also original research articles, preliminary announcements, review articles, historical perspectives, pedagogical texts or conference proceedings, without length limit, in English or in French. It also publishes special issues devoted to certain recent and/or significant aspects of the discipline, whose authors are chosen from among the most active researchers on the subject and whose coordination is assured by guest editors.

Comptes Rendus Physique is published according to a virtuous policy of diamond open access, free for authors (no publication fees) as well as for readers (immediate and permanent open access).

Editorial director: Étienne Ghys

Editors-in-Chief: D. Gratias, J. Villain

Editorial Board: Jacqueline Bloch, Christian Bordé, Hélène Bouchiat, Alexandre Bouzdine, Yves Bréchet, Françoise Combes, Jean Dalibard, Michel Davier, Daniel Estève, Stéphan Fauve, Pierre Fayet, Frédérique de Fornel, Maurice Goldman, Guy Laval, Chaouqi Misbah, Jean-Yves Ollitrault, Nathalie Palanque-Delabrouille

Editorial secretary: Julien Desmarets

About the journal

All journal's information, including the text of published articles, which is fully open access, is available from the journal website at https://comptes-rendus.academie-sciences.fr/physique/.

Author enquiries

For enquiries relating to the submission of articles, please visit this journal's homepage at https://comptes-rendus.academie-sciences.fr/physique/.

Contact

Académie des sciences 23, quai de Conti, 75006 Paris, France Tel: (+33) (0)1 44 41 43 72 CR-Physique@academie-sciences.fr



The articles in this journal are published under the license Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0) https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.en



Contents / Sommaire

Jacques Villain Foreword	501-506
Gilles Pijaudier-Cabot Fracture and permeability of concrete and rocks	507-525
Jihed Zghal, Nicolas Moës Analysis of the delayed damage model for three one-dimensional loading scenarii	527-537
Benoît Noetinger Statistical physics and applied geosciences: some results and perspectives	539-560
Rémi Rhodes, Vincent Vargas A probabilistic approach of Liouville field theory	561-568
Yvan Castin Marche au hasard d'une quasi-particule massive dans le gaz de phonons d'un superflu- ide à très basse température	571-618



Prizes of the French Academy of Sciences 2019 (continued) / *Prix 2019 de l'Académie des sciences (suite)*

Foreword

Avant-propos

Jacques Villain^a

^{*a*} Theory Group, Institut Laue Langevin, F-38054 Grenoble Cedex 9, France *E-mail:* jvillain@infonie.fr

This issue of CR Physique brings together three contributions relating to cracks in materials by Gilles Pijaudier-Cabot (Dolomieu prize 2019), Nicolas Moes (ONERA prize) and Benoît Noetinger (Adrien Constantin de Magny Prize). In addition it contains an article by Rémi Rhodes and Vincent Vargas (Marc Yor Prize) related to quantum gravity, and an article by Yvan Castin on superfluids.

Some physicist would perhaps tend to disdain the physics of materials. However the first three articles introduce a remarkable phenomenon, namely softening under stress: the stress decreases when the deformation increases! Another property which may arouse the interest of the layman is a paradox not necessarily known to all physicists, but Pijaudier-Cabot reminds us of it at the beginning of his article: if we calculate by the classical theory of elasticity the stress necessary to break an elastic material, we obtain a value of the order of a third of the Young's modulus *E*, which is 10 to 100 times larger than the experimental value [1]. This paradox, as Pijaudier-Cabot explains, was partly resolved by Griffith almost a century ago. However, much remains to be done to fully understand the damage to a material.

The article by Pijaudier-Cabot has the merit of combining experiments and modeling. Concerning the modeling aspect, the author introduces a damage parameter D (0 < D < 1) which depends on the history of the material. As long as the strain ϵ does not exceed a critical value Y_{D0} , there is no damage and D = 0. If ϵ has exceeded the value Y_{D0} at any time, then D is some function of the maximum value Y reached by ϵ over time. The damage is irreversible, D never decreases. In particular, if $\epsilon(t)$ is an increasing function of time t, then $Y = \epsilon(t)$. The function D(Y)is chosen as

$$D = 1 - \exp(Y_{D0} - Y)$$
 if $Y > Y_{D0}$; $D = 0$ if $Y < Y_{D0}$

The stress σ corresponding to a strain ϵ is assumed equal to $\sigma = (1-D)E\epsilon$, and in the model just defined it is given by figure 6 of the article. Thus, beyond a certain threshold, the stress decreases when the strain increases! It is clear that in an elastic material this is impossible. But the material defined by the model is not an elastic material because its behavior is irreversible: if we increase the strain, the stress decreases, but if we decrease the strain, the stress also decreases.

Such materials do exist, in which the stress irreversibly decreases as the strain increases. This phenomenon is called strain softening. However, in the model first considered by Pijaudier-Cabot, the material is unstable: it breaks as soon as the strain exceeds the value Y_{D0} . Indeed the break makes it possible to gain an elastic energy proportional to the volume of the sample, much greater than the energy cost of the break. The trouble with this is that the failure occurs without any energy input, which is an artifact of the model. The author therefore modifies the model by introducing a characteristic length, which is the size of the area in which the constraint is located. A cracking energy is thus regained, in agreement with experiment. The reader will find the details in the article.

The article by Jihed Zghal and Nicolas Moes is also devoted to damage, and here again the parameter *D* is introduced to describe this phenomenon. The authors, however, consider a model in which the material does not respond instantly to a constraint: the response takes a time τ_c to be established. As a result, the response is not the same if the stress is applied gradually or if it is applied suddenly. The authors' idea is just to compare the breakage of a bar in these two cases (which in fact makes three because the second case splits into two separate cases). In the case of a stress applied suddenly, the description of the failure seems correct. However, in the case of a stress applied progressively, the description is incorrect, because the failure occurs without any supply of energy, and therefore as if the edges of the fracture had no surface energy.

An important property of cracked materials, especially rocks, is that they allow liquids, which can be water, but also, for example, petroleum, to pass through. The transport of a liquid in a homogeneous, porous material satisfies Darcy's law [2,3]. In a disordered material a local form of this law should be applied. Such a generalization is $\mathbf{q} = -(k/\eta)(\nabla p - \rho \mathbf{g})$, or $\mathbf{q} = -(k/\eta)\nabla(p - \rho \mathbf{g}z)$, where **q** is the flux of the liquid, η its viscosity, p is the pressure, ρ the specific mass of the fluid, z the altitude and g the gravity [4]. The coefficient k varies from point to point, partly at random. The conservation of fluid matter imposes the condition $\nabla \cdot \mathbf{q} = 0^1$. For practical applications, we do not want to have a description which is too local, at the scale of the centimeter for example. And yet, if we want to calculate the flows from first principles, we must start from formulae that are valid on a very small scale, such as Poiseuille's law, as we are reminded in the article by Pijaudier-Cabot. How can we go from the microscopic scale to the macroscopic scale? This "up scaling" is the subject of Benoît Noetinger's article. This is a common problem in statistical mechanics, but in the case of geological materials in which the author is interested, the problem is made particularly difficult by the inevitable presence of disorder, since the coefficient k of Darcy's law is not the same everywhere. This article provides a fairly comprehensive summary of the situation, and a considerable bibliography which will allow the reader to delve deeper.

The following article, by Rhodes and Vargas, uses a technique of mathematical physics known as bootstrap, whose mysterious name calls for a few words of etymology. It is taken from the story of Baron Münchausen (1720–1797) who would have had the talent to hoist himself in the air by catching his bootstrap. This theory was developed in the 1960s by particle physicist G. Chew. He made elementary particles both the vector of nuclear forces and the result of the interaction.

The ideas of conformal field theory were developed from the 1970s by Polyakov and several later collaborators. To the usual symmetries, translation, Lorentz group, they added scale invariance and more generally all conformal transformations, that is to say preserving angles. If scale invariance were to appear to result from fixed points of the renormalization group, the physical realization of which manifests itself at critical points of phase transitions, the assumption of invariance by the whole conformal group is stronger. In particular in dimension two this symmetry

¹It is of interest to compare with the diffusion of atoms B dissolved in a fluid or a homogeneous solid A. If **q** is the flux of B and ρ is its concentration, $\partial \rho / \partial t = -\nabla \cdot \mathbf{q}$ only vanishes in the stationary regime. In contrast, in a flow through a porous material the cavities are assumed to be completely filled.

comprises an infinity of generators, since any analytical transformation z' = f(z) of the complex plane preserves the angles. In 1984 Belavin, Polyakov and Zamolodchikov characterized conformal field theories by an algebra of operators on which the conformal group acts. The classification of irreducible representations of this (Virasoro) algebra leads in simple cases, in fact most solvable two-dimensional models, to exact values for the scale dimensions of the fields (e.g. critical exponents). In this point of view, the models that we address are defined, not by a Lagrangian or Hamiltonian, but by a parameter, the central charge, which characterizes the representation of algebra. Now, in physics, there is a Lagrangian, and this Lagrangian does appear in the article by Rhodes and Vargas. These authors deal with the same problem of conformal field theory, now starting from Liouville's field theory, also introduced by Polyakov in his study of two-dimensional gravity. In classical mathematics, the Liouville equation characterizes surfaces of constant negative curvature; the relationship with gravity stems from subtle reasoning which will not be discussed here. In this theory the Lagrangian contains an exponential interaction in the fields, and the authors introduce a probabilistic construction of the path integral of quantum theory. This allows them to rigorously find the results that had been deduced from the previous algebraic approach for the structure constants (defined in the article by Rhodes and Vargas). This remarkable work opens up new perspectives in this very active field.

The last article, by Yvan Castin, is devoted to the random walk of a massive quasi-particle (of finite, non-vanishing effective mass) in a superfluid. It may, for example, be a "BCS quasi-particle" in a gas of paired spin 1/2 cold fermionic atoms. To obtain a given number n of BCS quasiparticles, one can put N atoms in the spin state + and N + n in the spin state – in a trap with a flat bottom, thus at low temperature N pairs of Cooper and n BCS quasi-particles will be obtained. Realistic values are $N = 10^6$ and n = 1000 for example. Each quasi-particle collides with the phonons of the superfluid and therefore undergoes a random walk analogous to the Brownian motion of a mesoscopic particle in a liquid. A remarkable result obtained by Castin is that the correlation function $C(t) = \langle \mathbf{v}(t).\mathbf{v}(0) \rangle$ of the speed is damped with two very different time scales τ_1 and τ_2 at low temperature T. The time τ_1 , proportional to T^{-8} , corresponds to the decorrelation of the modulus of the wave vector of the massive quasi-particle. The time τ_2 , proportional to T^{-9} , corresponds to the decorrelation of the direction of the wave vector. According to Castin, $C(t) = C_1(t) + C_2(t)$, where $C_2(0)/C_1(0)$ is proportional to T as well as τ_1/τ_2 . It follows that the effective spatial diffusion coefficient passes over time through two different values, depending on whether $\tau_1 \ll t \ll \tau_2$ or $t \gg \tau_2$ (true asymptotic regime).

We thank the authors for accepting our invitation to present their work. The first three articles may help to bridge the gap between physics and technology, which unfortunately tends to become wider. The last two build a bridge between mathematics and physics.

We also thank Edouard Brézin for his help in writing this introduction.

Avant-propos

Ce numéro des C.R. Physique regroupe trois contributions relatives aux fissures dans les matériaux, par Gilles Pijaudier-Cabot (prix Dolomieu 2019), Nicolas Moes (prix ONERA) et Benoît Noetinger (Prix Adrien Constantin de Magny); il contient en outre un article de Rémi Rhodes et Vincent Vargas (Prix Marc Yor) lié à la gravité quantique, et un article d'Yvan Castin sur les superfluides

Pour le physicien qui aurait tendance à dédaigner la physique des matériaux, on peut préciser que les trois premiers articles introduisent un phénomène remarquable qui est l'adoucissement sous contrainte : la contrainte décroît quand la déformation croît! Une autre propriété qui pourra éveiller l'intérêt du profane est un paradoxe pas forcément connu de tous les physiciens, rappelé par Pijaudier-Cabot au début de son article : si on calcule par la théorie classique de l'élasticité la contrainte nécessaire pour casser un matériau élastique, on obtient une valeur de l'ordre du tiers du module d'Young *E*, soit 10 à 100 fois supérieure à la valeur expérimentale [1]. Ce paradoxe, comme l'explique Pijaudier-Cabot, a été en partie résolu par Griffith il y a presque un siècle. Cependant il reste beaucoup à faire pour comprendre complètement l'endommagement d'un matériau.

L'article de Pijaudier-Cabot a le mérite de combiner l'expérimentation et la modélisation. Insistons sur l'aspect modélisation. L'auteur introduit un paramètre d'endommagement *D* compris entre 0 et 1, qui dépend de l'histoire du matériau. Tant que la déformation ϵ ne dépasse pas une valeur critique Y_{D0} , il n'y a pas de dommage et D = 0. Si ϵ a dépassé la valeur Y_{D0} à un moment quelconque, alors *D* est une certaine fonction de la valeur maximale *Y* atteinte par ϵ au cours des temps. Le dommage est irréversible, *D* ne peut pas décroître. En particulier, si $\epsilon(t)$ est une fonction croissante du temps *t*, alors $Y = \epsilon(t)$. La fonction D(Y) est choisie de la forme

$$D = 1 - \exp(Y_{D0} - Y)$$
 si $Y > Y_{D0}$; $D = 0$ si $Y < Y_{D0}$

La contrainte σ correspondant à une déformation ϵ est supposée égale à $\sigma = (1 - D)E\epsilon$, et dans le modèle qu'on vient de définir elle est donnée par la figure 6 de l'article. Ainsi, au-delà d'un certain seuil, la contrainte diminue quand la déformation augmente! Il est clair que dans un matériau élastique, cela est impossible. Mais le matériau défini par le modèle n'est pas un matériau élastique car son comportement est irréversible : si on augmente la déformation, la contrainte diminue aussi.

De tels matériaux existent, dans lesquels la contrainte diminue irréversiblement quand la déformation augmente. Ce phénomène s'appelle en anglais strain softening. La traduction française officielle est écrouissage négatif, mais on peut lui préférer la traduction littérale adoucissement sous contrainte. Toutefois, dans le modèle considéré d'abord par Pijaudier-Cabot, le matériau est instable : il se casse dès que la déformation dépasse un tant soit peu la valeur Y_{D0} . En effet la cassure permet de gagner une énergie élastique proportionnelle au volume de l'échantillon, très supérieure à l'énergie que coûte la cassure. L'ennui est que la rupture se fait sans qu'il faille fournir d'énergie, ce qui est un artefact du modèle. L'auteur modifie donc le modèle en introduisant une longueur caractéristique, qui est la taille de la zone dans laquelle la contrainte se localise. Il retrouve ainsi une énergie de fissuration conforme aux mesures expérimentales. Nous laissons le lecteur lire la suite dans l'article.

Dans l'article de Jihed Zghal et Nicolas Moes il est également question d'endommagement et ici encore on introduit le paramètre D pour décrire ce phénomène. Mais l'auteur considère un modèle dans lequel le matériau ne répond pas instantanément à une contrainte : la réponse met un temps τ_c à s'établir. Il en résulte que la réponse n'est pas la même si la contrainte est appliquée de façon progressive et si elle appliquée de façon brusque. L'idée des auteurs est précisément de comparer la rupture d'une barre dans ces deux cas (qui en font en fait trois car le second cas se décompose en deux). Dans le cas d'une contrainte appliquée brusquement, la description de la rupture semble correcte. Par contre dans le cas d'une contrainte appliquée progressivement, la description est incorrecte car la rupture se produit sans qu'on ait d'énergie à fournir, donc comme si les bords de la cassure n'avaient pas d'énergie de surface.

Une propriété importante des matériaux fissurés, et notamment des roches, est de laisser passer les liquides, qui peuvent être l'eau, mais aussi par exemple du pétrole. Le transport d'un liquide dans un matériau poreux homogène obéit à la loi de Darcy [2, 3]. Dans un matériau désordonné il faut avoir recours à une forme locale de cette loi. Une telle formule locale est $\mathbf{q} = -(k/\eta)(\nabla p - \rho \mathbf{g})$, soit $\mathbf{q} = -(\mathbf{k}/\eta)\nabla(\mathbf{p} - \rho \mathbf{gz})$, où \mathbf{q} est le flux de liquide, p est la pression, ρ la masse volumique du fluide, η sa viscosité, z l'altitude et g l'accélération de la pesanteur [4]. Le coefficient k varie d'un point à un autre, de façon en partie aléatoire. La conservation de la matière fluide impose la condition $\nabla \cdot \mathbf{q} = 0^2$. Pour les applications pratiques, on ne souhaite pas avoir une description trop locale, à l'échelle du centimètre par exemple. Et pourtant, si on veut calculer les débits à partir des premiers principes, il faut partir de formules valables à très petite échelle, comme la loi de Poiseuille rappelée dans l'article de Pijaudier-Cabot. Comment passer de l'échelle microscopique à l'échelle macroscopique? Cette « dilatation d'échelle » est l'objet de l'article de Benoît Noetinger. C'est un problème usuel en mécanique statistique, mais dans le cas des matériaux géologiques auxquels s'intéresse l'auteur, le problème est rendu particulièrement difficile par la présence inévitable du désordre, puisque le coefficient k de la loi de Darcy n'est pas le même partout. On trouvera dans cet article un résumé assez complet de la situation, et une bibliographie considérable qui permettra au lecteur d'approfondir.

L'article suivant, de Rémi Rhodes et Vincent Vargas, fait appel à une technique de physique mathématique dite bootstrap, dont le nom mystérieux appelle quelques mots d'étymologie. Il est tiré de l'histoire du baron de Münchhausen (1720–1797) qui aurait eu le talent de se hisser en l'air en attrapant ses tirants de botte (*bootstrap*). Cette terminologie fut introduite dans les années 1960 par le physicien des particules G. Chew. Celui-ci faisait des particules élémentaires à la fois le vecteur des forces nucléaires et le résultat de l'interaction.

Les idées de la théorie conforme des champs furent développées à partir des années 1970, par Polyakov et plusieurs collaborateurs ultérieurs. Aux symétries usuelles, translation, groupe de Lorentz, ils ajoutaient l'invariance d'échelle et plus généralement toutes les transformations conformes, c'est-à-dire conservant les angles. Si l'invariance d'échelle devait apparaître comme résultant de points fixes du groupe de renormalisation, dont la réalisation physique se manifeste aux points critiques des transitions de phase, l'hypothèse de l'invariance par tout le groupe conforme est plus forte. En particulier en dimension deux cette symétrie comporte une infinité de générateurs, puisque toute transformation analytique z' = f(z) du plan complexe conserve les angles. En 1984 Belavin, Polyakov et Zamolodchikov caractérisèrent les théories conformes des champs par une algèbre d'opérateurs sur laquelle agit le groupe conforme. La classification des représentations irréductibles de cette algèbre (de Virasoro) conduit dans des cas simples, en fait la plupart des modèles bidimensionnels résolubles, à des valeurs exactes pour les dimensions d'échelle des champs (telles que les exposants critiques). Dans ce point de vue, les modèles que l'on résout sont définis, non pas par un Lagrangien ou Hamiltonien, mais par un paramètre, la charge centrale, qui caractérise la représentation de l'algèbre. Or, en physique, il y a un Lagrangien, et celui-ci apparaît dans l'article de Rhodes et Vargas. Ces auteurs traitent ce même problème de théorie des champs conformes en partant de la théorie des champs de Liouville, introduite elle-aussi par Polyakov dans son étude de la gravité à 2 dimensions. En mathématique classique l'équation de Liouville caractérise les surfaces de courbure constante négative; la relation avec la gravité découle d'un raisonnement subtil qui ne sera pas abordé ici. Dans cette théorie le Lagrangien contient une interaction exponentielle dans les champs, et les auteurs introduisent une construction probabiliste de l'intégrale de chemin de la théorie quantique. Cela leur permet de retrouver de manière rigoureuse les résultats qui avaient été déduits de l'approche algébrique antérieure pour les constantes de structure (définies dans l'article de Rhodes et Vargas). Ce travail remarquable ouvre des perspectives nouvelles dans ce domaine très actif.

Le dernier article, par Yvan Castin, est consacré à la marche au hasard d'une quasi-particule massive (de masse effective finie et non nulle) dans un superfluide. Il peut s'agir par exemple d'une « quasi-particule BCS » dans un gaz d'atomes froids fermioniques de spin 1/2 appariés.

²Il est intéressant de comparer avec la diffusion d'une matière B dissoute dans un liquide ou un solide A homogène. Si **q** est le flux de B et ρ sa concentration, $\partial \rho / \partial t = -\nabla \cdot \mathbf{q}$ n'est nul qu'en régime stationnaire. Mais dans un écoulement en milieu poreux on suppose que les pores sont saturés, c'est-à-dire remplis.

Pour obtenir un nombre donné *n* de quasi-particule BCS il suffit de mettre *N* atomes dans l'état de spin + et *N* + *n* dans l'état de spin – dans un piège à fond plat, on obtiendra ainsi à basse température *N* paires de Cooper et *n* quasi-particules BCS. Des valeurs réalistes sont $N = 10^6$ et n = 1000 par exemple. Chaque quasi-particule est bousculée par les phonons du superfluide et subit donc une marche au hasard analogue au mouvement brownien d'une particule mésoscopique dans un liquide. Un résultat remarquable obtenu par Castin est que la fonction de corrélation $C(t) = \langle \mathbf{v}(t).\mathbf{v}(0) \rangle$ de la vitesse s'amortit avec deux échelles de temps τ_1 et τ_2 très différentes à basse température *T*. Le temps τ_1 , proportionnel à T^{-8} , correspond à la thermalisation du module du vecteur d'onde de la quasi-particule massive. Le temps τ_2 , proportionnel à T^{-9} , correspond à la décorrélation de la direction du vecteur d'onde. Selon Castin, $C(t) = C_1(t) + C_2(t)$, où $C_2(0)/C_1(0)$ est proportionnel à *T* ainsi que τ_1/τ_2 . Il en résulte que le coefficient de diffusion spatiale effectif passe au cours du temps par deux valeurs différentes, suivant que $\tau_1 \ll t \ll \tau_2$ ou que $t \gg \tau_2$ (vrai régime asymptotique).

Nous remercions les auteurs d'avoir accepté notre invitation à exposer leurs travaux. Les trois premiers articles pourront aider à consolider la passerelle entre la physique et la technologie, qui tend malheureusement à se rétrécir. Les deux derniers établissent plutôt des ponts entre la mathématique et la physique.

Edouard Brézin est également remercié chaleureusement pour son aide dans la rédaction de cette introduction.

Jacques Villain Editor-in-Chief jvillain@infonie.fr

References

- [1] Y. Quéré, Physique des matériaux. Cours et problèmes, Ellipses, 1988.
- [2] G. de Marsily, Quantitative hydrogeology, groundwater hydrology for Engineers, Academic Press, 1986.
- [3] E. Guyon, J.-P. Hulin, L. Petit, Hydrodynamique physique, 2nd ed., Savoirs actuels, CNRS Editions, 2001.
- [4] P. Cormault, "Hydraulique", in *Encyclopedia Universalis*, Encyclopedia Universalis, vol. 12, Encyclopedia Universalis SA, 2008, p. 7.



Prizes of the French Academy of Sciences 2019 (continued) / Prix 2019 de l'Académie des sciences (suite)

Fracture and permeability of concrete and rocks

Rupture et perméabilité des bétons et des roches

Gilles Pijaudier-Cabot^{a, b}

 $^{\it a}$ Université de Pau et des Pays de l'Adour, E2S UPPA, CNRS, Total, LFCR, Anglet, France

^b Institut Universitaire de France, France *E-mail:* Gilles.Pijaudier-Cabot@univ-pau.fr

Abstract. Continuum Damage Mechanics provides a framework for the description of the mechanical response of concrete and rocks which encompasses distributed micro-cracking, macro-crack initiation, and then its propagation. In order to achieve a consistent setting, an internal length needs to be introduced to circumvent the difficulties inherent to strain softening and to avoid failure without dissipation of energy. Upon inserting this internal length, structural size effect is captured too. This paper reviews some the progresses achieved by the author since the introduction of the nonlocal damage model in 1987. Among them, the early proposals exhibited a proper description of the inception of failure but a poor one for complete failure since it is not straightforward to model a discrete cracking with a continuum approach. Candidate solutions, e.g. by considering a variable internal length are outlined. Then, the coupled effects between material damage and material permeability are considered. Is is recalled that the permeability of the material should be indexed on the damage growth in the regime of distributed cracking. Upon macro-cracking, there is a change of regime and it is the crack opening that controls the fluid flow in the cracked material. Both regimes may be captured with a continuum damage approach, however.

Résumé. La mécanique de l'endommagement fournit un cadre qui permet de décrire l'ensemble du processus de rupture d'un matériau quasi-fragile sollicité par un chargement mécanique, à savoir une micro fissuration distribuée tout d'abord, puis l'amorçage et la propagation d'une macro-fissure. Une longueur interne doit être introduite afin d'obtenir une énergie dissipée non nulle à la rupture. Cette longueur interne induit un effet de taille cohérent lui aussi avec les données expérimentales. Cet article passe en revue quelquesuns des progrès réalisés par l'auteur depuis l'introduction du modèle d'endommagement non local en 1987. Parmi ceux-ci, les premiers modèles permettaient de bien décrire l'amorçage de la rupture mais moins bien la rupture complète, qui est une chose peu naturelle dans le contexte d'une description continue d'un solide. Des solutions possibles à ce problème, par exemple en faisant varier la longueur interne, sont évoquées. Puis, les effets couplés entre l'endommagement et la perméabilité d'un matériau sont abordés. La perméabilité du matériau doit être indexée sur la croissance des dommages dans le régime de fissuration distribuée. Lors de la macro-fissuration, il y a un changement de régime et c'est l'ouverture de fissure qui contrôle l'écoulement du fluide dans le matériau fissuré. Cependant, ces deux régimes peuvent être décrits avec un formalisme unique basée, au plan mécanique, sur la mécanique de l'endommagement. Keywords. Damage, Cracking, Permeability, Size effect, Strain softening, Strain localisation, Internal length. Mots-clés. Endommagement, Fissuration, Perméabilité, Effet d'échelle, Adoucissement, Localisation, Longueur interne.

1. Introduction

Fracture Mechanics—the theory that governs the propagation of cracks in solids—is over a century old. Pioneering motivations originated from the observation that, for crystals, the material strength was an order of magnitude less experimentally than that predicted by strength of material theories. The presence of flaws and cracks in the material, prior to any load, could explain such a mismatch. The playground of fracture mechanics has been initially that of metal alloys. Analytical and later on numerical models have been developed extensively, with applications to crack propagation under static, dynamic and fatigue loads. These developments were based upon the description of a crack in a solid as a displacement discontinuity resulting into an eigen state of stress in elasticity [1]. Because calculations show that the stress is infinite at the tip of the discontinuity, the crack propagation conditions could not be based on a stress-based criterion, but rather on a quantity called fracture toughness (see e.g. [2]), or on a fracture energy defined as the energy consumed in order to propagate a crack over an area of unit surface [3]. This theory relies on the assumption that the material is elastic and perfectly brittle and defines the conditions of propagation of the crack. It can be also easily extended to the case where the material is not elastic, typically if it has entered in the plastic regime in an infinitely small region about the crack tip (under the so-called small-scale yielding assumption).

In the 1970's, linear elastic fracture mechanics started to be applied to geomaterials, concrete and rocks, at first with limited success because these materials are not brittle, but quasi-brittle. The degradation processes involved during the crack propagation occur in such materials over a zone called the Fracture Process Zone (FPZ). Due to the size of material heterogeneities (grains which maybe up to several centimeters as opposed to the micron scale in alloys), this zone is much larger in concrete and rocks than in alloys and its size can no longer be considered as infinitely small. Consequently, the energy consumed upon crack propagation is not solely due to the propagation of the tip of macro-crack, it is also due to the propagation of the FPZ that surrounds the macro-crack.

In order to illustrate this important feature, let us consider the response of notched beams made of mortar under three-point bending loads (Figure 1). The mechanical set-up consists of a three-point-bend loading system controlled by a Crack Mouth Opening Displacement (CMOD) sensor. This sensor is a clip gage attached on both sides of the notch. The load is adjusted so that the CMOD is monotonically increasing with time. At the same time, the deflection at mid-span is measured with a laser extensometer. The deflection is the vertical displacement of a point located at mid-span and mid-height on the lateral surface of the beam. Typical mechanical responses will be illustrated in Section 3, let us focus here on data obtained from acoustic emission during the loading.

Acoustic Emission (AE) transducers are placed on the surface of the specimen in order to localise the acoustic emissions that are generated by the occurrence of micro-cracks. Indeed, upon their opening, micro-cracks generate a stress wave (like tiny earthquakes) that can be recorded by piezoelectric sensors. If three sensors at least are used and if the wave speed in the



Figure 1. Three-point bending experiment on mortar beams. Mechanical set-up (left) and acoustic emission set-up (right).

material is known, the records of the time of arrival of the stress wave on the sensors provide the location of the acoustic event by simple triangularisation.

In the present experiments [4], the accuracy of the localization is ± 4 mm. Figure 2 shows the cumulative location of acoustic emission events throughout the test; the plotted points indicate the detected AE sources, we have also plotted the observed crack path that appeared after the test at complete failure. It is clear that the FPZ located around the crack (dark line) is large. Its width is about 7 cm here. The resulting fracture energy is no longer related to the propagation of a single discontinuity, but rather to the propagation of the FPZ.

The cohesive crack model was developed for this purpose by Barenblatt [5] and Dugdale [6] for ductile materials, and applied by Hillerborg *et al.* [7] to concrete. The theory assumes that the width of the FPZ (measured orthogonally to the crack surface) collapses onto the crack surface. Ahead of the crack tip, the cohesive zone follows a stress-relative displacement (or crack opening equivalently) softening relationship.

Fracture mechanics describes the conditions of crack propagation, which must be complemented with a criterion for crack initiation and crack orientation. Continuum Damage Mechanics (CDM) provides a broader framework. It covers distributed cracking, macro-crack initiation, and then its propagation within a single continuum setting. As we will see in Section 2, progressive micro-cracking is captured via the degradation of the elastic constants of the material. Its application to quasi-brittle materials dates back to the 1980's [8], but in order to achieve a consistent description of the fracture process, it is necessary to introduce, aside from the pointwise stressstrain constitutive relationship, an internal length that defines indirectly the size of the FPZ. This yielded the so-called nonlocal damage model [9] which opened the path to a wide variety of constitutive models, denoted as nonlocal continua with local strains [10]. Section 3 presents the nonlocal damage models and discusses the variety of possible localisation limiters that arose since then.

The issue of fracture of geomaterials should not be regarded as completely solved however. A typical example is encountered when considering coupled effect between fracture and permeability (e.g. those involved in hydraulic fracturing of rocks). Section 4 discusses this problem.

2. Continuum modelling of progressive cracking

The issue addressed in this section is the following: in a continuum setting, i.e. in a framework where the response of a material to a mechanical load is described by a local (pointwise) constitutive relation that relates the strain (derivative of displacements) to the stress (force



Figure 2. Cumulative location of AE events in a three-point bending test (after [4]). The large circular dots represent the sensors and the black line the macro-crack.

per unit surface of material), how should the progressive micro-cracking of the material be described? Typically, this question is related to two issues:

- First, it questions the equivalence between a solid that contains micro-cracks and a homogeneous solid with elastic properties that depend on the amount of micro-cracking. This equivalence can be performed with the help of homogenisation.
- Second, it is required to formalise how the response is, or not, irreversible due to the growth of micro-cracking: given a state of stress (or strain) and micro-cracking, it means that for a loading increment where micro-cracking progresses, the incremental mechanical response should be different compared to the case where the loading increment is such that micro-cracking does not change. This will be performed with a framework that is similar to elasto-plasticity (see e.g. [11]).

Let us first consider an approach based on elastic-brittle lattices where the second issue is captured with a simplified material response: lattice elements are elastic, up to a threshold strain where breakage occurs. Before the threshold, the element is elastic, after, it can no longer carry a load.

2.1. Failure in elastic-brittle disordered lattices

The lattice described in the following was used in the past for the study of the failure mechanism of quasi-brittle materials. The mechanical problem is substituted by an electrical analogue, simplifying the analysis within each lattice element from vectorial quantities (forces, displacements)



Figure 3. Lattice model.

to scalar quantities (current, voltage difference). From the mechanical point of view, it is as if the lattice would be made of bars instead of beams. In the case of a lattice of infinite size and prior bond breakage, it is a discrete approximation of an elastic continuum with a fixed Poisson's ratio (see e.g. [12]).

The model, depicted in Figure 3, is a regular two-dimensional lattice. The lattice size is $L \times L$ where *L* is related to the total number of bonds $n = 2L^2$. The strain ε is substituted with the voltage difference *v*, the stress σ with the current *i*, and the Young's Modulus *E* (material stiffness) with the conductance *G*. So in elasticity, we substitute the mechanical constitutive equation

$$\sigma = E \cdot \varepsilon \tag{1}$$

with:

$$i = G \cdot \nu. \tag{2}$$

Periodicity is imposed along the boundaries and a constant unit jump of voltage is applied between the horizontal boundaries, corresponding to an imposed relative displacement in the vertical direction.

Every bond of the lattice behaves in the electric problem as an analogy with an elastic-brittle material. The conductance is equal to 1 and when it reaches a threshold current i_c , it falls to zero. i_c differs from bond to bond following a uniform random distribution between 0 and 1. Figure 4 shows a typical current vs. voltage response.

The lattice does not represent a real material. In fact, we are interested in its scaling properties: as the lattice size tends to infinity, its response tends to a thermodynamic limit which is the response of a single point in a continuum approach. Hence, we shall look at the variables that describe the evolution of the lattice response with bond breakage, independently from its size. These variables are those which appear in a continuum formulation. For this, we introduce the moments calculated according to the formula:

$$M_m = \int i^m N(i) \,\mathrm{d}i \tag{3}$$

where i is the current of each bond, N(i) is the number of bonds whose current is i, and m is the order of moment. The zero-order moment is the number of unbroken bonds, the first order moment is proportional to the average value of the current (stress). The second order moment is proportional to the overall conductance of the lattice (stiffness in the mechanical problem).

Figure 5 represents the average moments for different lattice sizes as a function of the moment of order 2 until the peak current. We observe that until the peak, the curves of M_0 , M_1 , M_2 and M_3



Figure 4. Typical intensity (load) versus voltage (relative displacement) response of a lattice of size 64 (after [13]).



Figure 5. Opposite of the logarithm of the moments of order 0 to 4 as a function of the opposite of the logarithm of the moment of order 2. For each order of moments, results for lattice sizes ranging from 16 to 128 are superimposed (after [13]).

versus M_2 are almost independent from the size of the lattice. Hence, the average conductance is a parameter that may describe the distribution of current whatever the size of the lattice. It was also shown that the number of broken bonds could not characterise the state of damage in a size independent way [13].

2.2. Continuum damage

Because the average conductance (or lattice stiffness in the mechanical problem) is the parameter which represents local bond breakage in the continuum approach, the effect of micro-

cracking on the mechanical response of a material viewed as homogeneous may be properly captured with a degradation of its elastic stiffness. This is exactly the purpose of continuum damage mechanics. For the sake of simplicity (and for the sake of avoiding complex mathematical developments), we present in this section a one dimensional continuum damage model that can easily be extended to a 3D setting [8]. The constitutive relation given in (1) in the case of elasticity becomes:

$$\sigma = (1 - D) \cdot E \cdot \varepsilon \tag{4}$$

where D is the damage variable ranging from 0 for a material without micro-cracks to 1 for a material that is totally cracked. Here the damage variable is a scalar, in 3D and if it is still a scalar, damage is isotropic, meaning that the degradation of stiffness is the same whatever the direction considered (random micro-crack orientation).

The growth of damage is defined following a framework that is common to many non-linear (rate-independent) constitutive relations. A distinction has to be made between an increment of strain during which micro-cracking grows and an increment of strain where it does not. The growth of damage is controlled by the tensile strain:

$$\tilde{\varepsilon} = \frac{\varepsilon + |\varepsilon|}{2}.$$
(5)

The limit of the elastic domain is defined by:

$$f(\varepsilon) = \tilde{\varepsilon} - Y = 0$$
 with $Y = \max(Y_{D0}, \tilde{\varepsilon})$ over the loading history (6)

Y is the history variable that keep tracks of the past applied loads that possibly produced some damage and Y_{D0} is a damage threshold. The growth of damage is defined according to the following conditions:

If
$$f(\varepsilon) < 0$$
 or if $f(\varepsilon) = 0$ and $\dot{\varepsilon} \le 0$ then $\dot{D} = 0$ (7a)

If
$$f(\varepsilon) = 0$$
 and $\dot{\varepsilon} > 0$ then $D = 1 - \frac{1}{\exp(B \cdot (\tilde{\varepsilon} - Y_{D0}))}$. (7b)

Equation (7a) corresponds to conditions where damage should not grow and (7b) corresponds to the case of growing damage due to an excess of tensile strain. Time derivatives in these equations represent the sequence of loading because the material response is rate-independent. Equations (5)–(7) set a framework for the non-linear response of the material due to micro-cracking that is very similar to elasto-plasticity. The difference is that the non-linear response is controlled here by strain-based quantities, whereas it is controlled by stress-based quantities in classical elasto-plasticity.

Figure 6 shows a typical tensile response obtained with the model. The material parameters (E, Y_{D0} , and B) are typically those of concrete. Under monotonically increasing strain and following the elastic regime and the peak stress which corresponds to the onset of damage, the response exhibits *strain softening*, that is a decreasing stress with increasing strain.

It is important here to consider the case where the strain is not monotonically increasing. Say that the strain has first increased so as to reach point A on the material response in Figure 6. Then, the strain rate is reversed and unloading occurs. Because of the conditions in (7a), damage stays constant. According to (4), the stress decreases linearly towards the origin of the curve. The slope is $E \cdot (1 - D)$ instead of the slope observed at the onset of loading which is *E*. The comparison of these two slopes is the evidence of damage in experimental results. At point A, a positive incremental strain was is referred to as "loading" and (7b) applies in order to calculate the increment of damage. At point A, a negative incremental strain is referred to as "unloading" and damage is constant according to (7a). As we will see next, both incremental strains may yield the same incremental stress. This is the source of the localisation of strain and damage.



Figure 6. Stress–strain relation in tension (E = 37.7 GPa, $Y_{D0} = 10^{-4}$, B = 14,000).



Figure 7. Tensile bar.

3. Strain and damage localisation

For many years, strain softening has been considered as something impossible in continuum mechanics, although multiscale analyses of progressive cracking were clearly pointing out that it was an expected property. The tangent modulus of the material in the softening regime E_t (the ratio of the increment of stress divided by the increment of strain) is negative. Infinitesimal waves cannot propagate because their celerity, which involves the square root of the tangent modulus, is not real. This violates Hadamard's condition [14]. The consequence is that the incremental equations of equilibrium, along with the classical boundary conditions in statics form an ill-posed problem from the mathematical point of view (the governing differential equations are hyperbolic instead of being elliptic). This can be easily illustrated in the example of a softening bar subjected to tension [15].

3.1. Localisation in a tensile bar

Consider a tensile bar, clamped at one end and to which a monotonically increasing displacement *U* is imposed at the other end (Figure 7).

The bar is initially at equilibrium, in a state of homogeneous strain ε_0 and the corresponding displacement is $U_0 = L \cdot \varepsilon_0$. The stress is derived directly from the constitutive relation, we assume that it belongs to the softening branch e.g. at point A in Figure 6. Since the strain is constant, the stress is also constant and therefore, the equilibrium conditions are verified.

Consider now that an incremental displacement δU is applied from this initial state of equilibrium. A possible solution is that the strain increases and remains constant over the bar. There are, however, other possible solutions: assume that the profile of the incremental strain is set according to Figure 8: a part of the bar of length h undergoes loading with a positive incremental



Figure 8. Incremental perturbation due to an incremental displacement δU : strain profile (left) and constitutive law (right). The initial state corresponds to a displacement $U_0 = L \cdot \varepsilon_0$ where the strain ε_0 is uniform over the bar and lies in the strain softening regime.

strain $\delta \varepsilon_t$, and the rest undergoes unloading with a negative incremental strain $\delta \varepsilon_u$. We say that the strain localises over the bar length *h*. The unloading and tangent moduli are fixed by the constitutive relation (considered here bilinear for simplicity, Figure 8). Equilibrium requires that the incremental stress is the same in both part of the bar:

$$E_t \cdot \delta \varepsilon_t = E_u \cdot \delta \varepsilon_u. \tag{8}$$

Meanwhile, the compatibility between the imposed incremental displacement δU and the incremental strain requires that:

$$\delta U = (L - h)\delta\varepsilon_u + h\delta\varepsilon_t. \tag{9}$$

For each possible value of *h*, and for a given incremental displacement δU , it is possible to find a suitable set of incremental strains ($\delta \varepsilon_t$, $\delta \varepsilon_u$) that satisfies the two equations of the problem (Equations (8), (9)). In addition, the relation between the incremental force applied to the bar δF and the incremental displacement δU is:

$$\delta F = k \cdot \delta U$$
 with $k = \frac{A \cdot E_u}{\left[(L-h) + \frac{hE_u}{E_t}\right]}$ (10)

where *A* is the area of the cross section of the bar. When h = L, the entire bar undergoes a positive incremental strain and the tangent stiffness $k = AE_t/L$ is negative. When *h* tends to zero, the tangent stiffness becomes $k = AE_u/L$ and it is positive. For any value of *h* in between, the tangent stiffness is given by (10). This simple problem shows that, there is an infinite number of solutions in response to an applied incremental displacement at the bar end. This is the reason why the mechanical problem is ill-posed. It is due to strain softening otherwise equilibrium cannot be satisfied, and it may occur right after the peak load is reached.

But then, which solution the bar is going to follow? The solution is not provided by the equilibrium equation, but rather by stability considerations. The path followed by the structure is the one that maximises dissipation of energy locally. It corresponds to h = 0, which means that positive incremental strain exists in a segment of the bar of vanishing length only, the rest of the bar is unloading. Accordingly, the response of the bar is the one shown in Figure 9.

Under increasing displacement, the bar is first elastic until it reaches the threshold of damage growth (Equation (6) is satisfied). According to Figure 6, this threshold is the peak load. It is at the peak load that strain has the first opportunity to localise, meaning that because the tangent modulus upon loading becomes negative, a distribution of the incremental strain illustrated in Figure 8 becomes admissible. The solution that maximises the local dissipation at this stage of the loading history corresponds to h = 0 because it yields the largest possible positive increment of



Figure 9. Response of a tensile softening bar.

strain locally (infinite when h = 0) and the corresponding stiffness of the bar is provided by (10): $k = AE_u/L$. It is *exactly* the same stiffness as the one observed during loading, but this time, the increment of displacement is negative (9) and *the response of the bar will be exactly the same as during loading, followed in a reversed way* as the strain at the material point where damage grows increases towards infinity (and the force decreases to zero). When, complete failure is reached and the displacement may increase again, but with a vanishing applied force on the bar.

It follows that the energy dissipated during failure, which is the area under the response of the bar in this figure is zero—failure occurs without energy dissipation which is physically unrealistic. It should be stressed here that under monotonically increasing displacement, the force will suddenly jump from the peak load to zero, following the vertical dashed line in Figure 9. Then, the area under the force displacement curve is not seen as being zero. One should be cautious, however: at peak load, the bar is no longer stable meaning that a small perturbation of the control parameter (positive perturbation of the applied displacement) does not yield a small perturbation of the response (rather a large, finite size, jump). Upon the application of a positive incremental displacement, the bar jumps into a dynamic regime and the mechanical work is converted into kinematic energy. It is not converted into energy dissipated during fracture as the response of the bar snaps back during this dynamic process and still follows the response illustrated by the arrows in Figure 9.

3.2. Nonlocal damage model

In the above problem, the important feature is that upon strain localisation, the size of the localisation band (*h* in the problem) is arbitrary. Therefore, a direct way to avoid the occurrence of an infinite number of solutions is to set the size of the segment of the bar where strain localises. This is achieved indirectly by the nonlocal damage model. The tensile strain (5) is substituted by its spatial average $\bar{\epsilon}$ in the equations governing the growth of damage [9]:

$$\overline{\varepsilon} = \frac{\int \phi(x-s)\widetilde{\varepsilon}(s) \,\mathrm{d}s}{\int \phi(x-s) \,\mathrm{d}s} \tag{11}$$

where ϕ is a weight function, for instance the Gaussian function:

$$\phi(x-s) = \exp\left[-\left(\frac{2|x-s|}{l}\right)^2\right]$$
(12)

l is the internal length of the model, a new model parameter. It is this internal length which sets the size of the zone in which strain localises, or more generally, the width of the FPZ observed in Figure 1.



Figure 10. Response of the bar in tension with the nonlocal damage model: force displacement response (left), damage profiles (right). The internal length is set large enough in order to better illustrate the growth of damage.

This model is nonlocal (in the sense that a pointwise quantity is a spatial average) with local strains. Only the variable that controls damage is nonlocal, which is easier to handle compared to a fully nonlocal constitutive relation. With the model parameters given in Figure 6, for a bar of length 1 m, and an internal length l = 0.32 m, the response of the bar is shown in Figure 10 along with the evolution of the profiles of damage. Of course, inserting an internal length in a constitutive relation raises several questions, among them the issue of the experimental determination of this parameter. This length may be approached by considering a tensile test in which strain localisation occurs and comparing the response with an experiment in which strains are constrained to remain uniform (e.g. by gluing elastic fibers on the surface of the specimen). This comparison has been performed by Bažant and Pijaudier-Cabot [16] on concrete and provided an estimate of the internal length ($l \approx 3d$) where d is the maximum size of the heterogeneity.

Another technique consists in considering size effect on fracture (for a detailed discussion of structural size effect see [17]). Upon strain localisation and fracture, the elastic energy stored in the specimen flows in the FPZ where it is dissipated by micro-cracking. Because the size of the fracture process zone is fixed, its ratio with the size of the specimen is changing when the later changes. The amount of flowing energy depends on the size of the structure and it yields size effect. Macroscopically, this induces a dependence of the fracture energy on the crack length [18] and also a dependence of the "nominal strength" of the structure on its size that can be illustrated by considering experiments on geometrically similar specimens.

Figure 11 shows experiments on three-point bending notched specimens of four different sizes similar to those in Figure 1. They are geometrically similar. Going from one size to another, dimensions are multiplied by two, except the thickness which is kept constant.

Because the beams are geometrically similar, they all have the same elastic stiffness. When the size of the beam is multiplied by two, and assuming that the peak load is reached when the nominal tensile strength is reached at the tip of the notch, the maximum load should, according to elasticity and strength of materials, be multiplied by two. This is not the case experimentally, as observed in Figure 11. Going from one size to the next one, the peak load is changed by a factor which is always less than 2. Therefore, the nominal tensile strength of the material decreases as the size of the beam increases. The nonlocal damage model captures such a size effect, and the inverse analysis of these experiments (e.g. using the finite element method) yields the internal length [20].

This original version of the nonlocal model suffers from several shortcomings. Among these, the model cannot capture complete failure with a constant width of the FPZ. The FPZ enlarges indefinitely upon failure and this is due to the averaging across the FPZ: two material points



Figure 11. Geometrically similar bending specimens (left) and their mechanical response (right), after [19]. n = 4 is the smallest size and average of experimental response are shown.

located on both sides of a crack surface do interact; e.g. enter in the spatial averaging centered on one side of the crack, which is not realistic. Enhancements of the nonlocal model aimed at solving this problem have been proposed in the literature, either by indexing the weight function on the stress state [21], or by defining the weight function from interactions between defects [22]. Also, the treatment of averaging near the boundary of a solid is somewhat arbitrary as the weight function is chopped off. This induces an improper description of crack initiation near the boundary of the solid [23] and also a bias in the description of size effect when unnotched beams are considered [24]. Again, the initial nonlocal model can be enhanced with a variation of the internal length nearby boundaries of the structure in order to solve this issue. These enhancements may be, however, regarded as second order ingredients in most practical cases, the important feature being the proper description of progressive damage, its localisation in order to form a FPZ, which in many instances corresponds to the maximum load that the structure can carry and is the important quantity for design.

3.3. Other localisation limiters

The nonlocal damage model belongs to a class of constitutive model called "localisation limiters". An internal length is inserted in order to set a non-zero size of the FPZ, and thus to "limit" localisation. Since the early nonlocal damage proposal, there has been many other proposals inspired from the same point of departure. Here, we shall restrict ourselves to damage-based constitutive models, as many others are based on plasticity (see [25]), following the same principles.

The most popular one is the gradient damage model [26]. Instead of (11), the nonlocal strain is the solution of the following partial differential equation:

$$\overline{\varepsilon} - c\nabla^2 \overline{\varepsilon} = \tilde{\varepsilon} \tag{13}$$

where $\nabla^2 x$ is the Laplacian of *x*, *c* is a quantity with dimension m^2 , the square of an internal length. In fact, this equation is exactly the same as (11), if a specific exponential weight function is used. Later on, Pijaudier-Cabot and Burlion [27] derived a more general gradient damage model, extending in the nonlinear regime the theory of materials with voids due to [28]. This theory, initially developed for porous materials such as bones, embeds a general variational framework [29] which is very similar to the gradient damage model proposed by Fremond and Nedjar [30] derived from the principle of virtual power. In the work of Cowin and Nunziatto,

however, the equation governing the growth of damage is not introduced a priori, it is intended to capture the effects of dilation centers, i.e. forces that produce a growth of the voids or cracks in the material. The equation governing the growth of damage reads [27]:

$$D - k_l \nabla^2 D - \mathscr{F} = 0 \tag{14}$$

where k_l is the square of an internal length and \mathscr{F} is a function that defines the growth of damage, typically a function of the local strains. It is one of the governing equation of the boundary value problem, along with the equilibrium equation. Boundary conditions on damage must be enforced, raising the issue of damage initiation near a free boundary, same as in the integral model. These are set arbitrarily in the absence of any theoretical or physical motivation.

About two decades ago, a new kind of failure model became popular: the phase-field models. The phase-field theory was designed originally to model solidification, often a first order phase transition, and proved being very effective for this purpose [31]. The liquid and a solid state of the material are treated as two materials with the appropriate conditions that transform the former into the latter (and vice versa). The extension to failure is appealing, each state of damage describing the material as a specific "phase" (of micro-cracking), the equation controlling the growth of damage providing the conditions for "phase changes".

Phase-field model have been first implemented in dynamic brittle fracture problems [32]. Later on Miehe and co-workers were among those who developed the theory for failure analyses (see e.g. [33]), and benefited from the regularized setting of the variational theory of linear elastic fracture (see e.g. [34]). The extension to cohesive fracture, or progressive cracking at the crack tip, is not trivial however, mainly because the crack opening needs to be computed. Verhoosel and de Borst [35] illustrated this difficulty. They also came out with the conclusion that for cohesive fracture, phase-field modelling of fracture and gradient damage model are very similar. The phase-field approach provides a better description of complete failure that can be achieved with the later by letting the internal length tend to zero upon complete failure. Recently also, the phase-field and continuum damage approaches have been unified into a single model which is capable to capture size and boundary effects for concrete [36].

4. Coupled damage and permeability evolutions

Up to now, we have been interested in the description of the mechanical response of a material undergoing progressive and localised micro-cracking due to mechanical loads. In practice, most geomaterials are porous and contain one or several fluids. These fluids are transported in the pore network of the material and there is a strong interest at looking at the interaction between the state of damage and cracking and the consecutive evolution of these transport properties. Typically, one may think to the stimulation of geological reservoirs that contain hydrocarbon [37], to the evolution of the tightness of nuclear vessels [38] or to the durability of concrete structures as the fluid present in the pore may carry aggressive species.

4.1. Evolving permeability of a damaged material

At first, let us consider again the lattice discussed in Section 2. In order to represent the influence of material damage on the permeability, it is reasonable to assume that when a bond fails in the mechanical lattice, it opens a larger path for fluid flow in the perpendicular direction. This basic scheme is depicted in Figure 12 [39]. A hydraulic lattice is attached to the mechanical one following this principle, with bonds that are perpendicular to the mechanical lattice (Figure 13).

The fluid flow at the micro-scale level (bond level) is described by Darcy's equation:

$$\vec{q} = -k \overrightarrow{\operatorname{grad}(p)} \quad \text{and} \quad k = \frac{\kappa}{\mu}$$
 (15)



Figure 12. Basic scheme for the coupled hydro-mechanical lattice analysis. When a mechanical bond fails, the permeability of a perpendicular bond increases suddenly.



Figure 13. The mechanical and the hydraulic lattices (after [39]).

where \vec{q} is the flow rate, *p* is the pressure, and *k* is the permeability of the material. This permeability is a function of the dynamic viscosity of the fluid μ , and an intrinsic permeability denoted as κ which depends on the pore network only (some tortuosity factor is also added in this formula traditionally). We are going to assume that when a bond fails, the permeability in the perpendicular direction is increased by an amplification factor which is very large, typically of the order of 10^6 .

Periodic boundary conditions are also applied to the hydraulic lattice. A constant drop of pressure equal to 1 is applied at the vertical boundaries of the hydraulic lattice. At each step of damage in the mechanical lattice, the flow rate is computed in the dual lattice and the various moments of its distribution are computed too.

It is worthwhile to point out that we analyse here the permeability of the unloaded material. There is no effect of the applied stress on the permeability in the reversible regime and it cannot be expected to be observed in the present computations. Following the same technique as in the mechanical problem, we look at the moments of the distribution of the hydraulic flow rate, and we try to find for which moment of the distribution of the local stress the plots collapse on the same curve for different sizes.

The second order moment in the mechanical problem is a natural candidate since it is this one which describes the evolution of mechanical damage. Figure 14 shows the evolution of the lattice permeability (second order moment of the flow rate distribution) as a function of the evolution of stiffness in the mechanical lattice. For all the sizes considered, the plots collapse onto the same curve for stiffness variations ranging from 0 to 0.2 approximately, before the peak load. For



Figure 14. Permeability versus Young Modulus reduction according to the lattice analysis (after [39]).

large variations of the stiffness, macro-cracking has occurred and the lattice size starts to play an important role because it controls the spacing between the macro-cracks. Results cannot be interpreted in this case.

It follows that for a correct description of the coupled effects between the growth of microcracking and the growth of permeability in a porous material, the permeability should depend on the damage variable. Typically, a power law is used in the literature [38]:

$$\kappa \approx \kappa_0 \cdot 10^{A_D D} \tag{16}$$

where κ_0 is the initial intrinsic permeability for the undamaged material and A_D is a model parameter.

4.2. Permeability of a cracked material

At complete rupture, one or several macro-cracks are expected and fluid flow will be governed by these cracks. Poiseuille's law should be considered instead of Darcy's law. For a fluid flowing between two parallel plates, we have:

$$\vec{q} = -k_p \overrightarrow{\text{grad}(p)} \quad \text{where } k_p = \frac{[u]^2}{12\mu}$$
 (17)

 k_p is the permeability, [u] is the crack opening, i.e. the distance between the plates, and μ is the dynamic viscosity of the fluid. Some factor taking into account the crack roughness may be added too and provide a decrease of the permeability compared to the case of a perfectly flat crack. As opposed to (16), this equation does not define the permeability at a material point but rather it defines the fluid flow inside an opened crack. Typically, this quantity is several orders of magnitude larger than the fluid flow in the porous material governed by Darcy's law for tight materials such as concrete and rocks.

On one hand and prior to the localisation of damage, the fluid flow is described within a continuum description. On the other hand, after damage has localised, fluid flow is governed by the crack opening, and it is typically a "discrete" description in the sense that the crack opening is a displacement discontinuity in the material. The transition between the two regimes could be seen as the percolation of micro-cracks which connect themselves and form a macro-crack.

In order to capture the two regimes of the hydraulic problem in a single framework, similarly to the mechanical model which captures both distributed and localised micro-cracking, it is



Figure 15. Maps of damage and fluid pressure in a hydraulic fracturing process in the presence of a vertical pre-existing joint (after [41]).

necessary to calculate crack opening from the mechanical continuum model. This is not a trivial issue because at first, we assumed that the quantities describing the deformation in the material should be continuous and therefore, a displacement discontinuity is not allowed. Now there is a need to transform back from a continuum into a *discontinuum*. There are several possibilities for calculating this crack opening. The simplest one is to define the law that governs the growth of damage as a function of a crack opening displacement which is directly calculated as the product of the strain by a fixed length h_c . This length is related to the internal length in the nonlocal continuum, in fact it is the thickness of the FPZ which is proportional to the internal length in the nonlocal damage model. What is being done here is to collapse the FPZ onto a line, assuming that the opening of the crack is the relative displacement at opposite boundaries of the FPZ. This model is very close to the crack band model proposed by Bažant and Oh [40], and further quite similar to the cohesive crack model for concrete [7]. It is a very effective approach which has been used e.g. for modelling hydraulic fracturing [41].

Figure 15 shows the calculation of the propagation of a crack in a hydraulic fracture process and its interaction with an existing joint in the rock mass perpendicular to the crack propagation. The maps of the fluid pressure and damage have been superimposed. We can see that the joint arrests the initial crack and that new cracks develop at the tips of the joint in this calculation.

This simple approach assumes that the width of the FPZ is known in advance, that it is constant, and therefore that it does not depend on the applied loads or on the load history that yielded damage. If one wants to avoid this assumption, a possibility is to extract a crack opening displacement from the results of computations with the nonlocal damage model. The method, proposed originally by Dufour *et al.* [42] consists in comparing the nonlocal strain field $\bar{\epsilon}$ across the FPZ, calculated according to (11), to the analytical nonlocal strain field that would be obtained from a displacement discontinuity across the crack path. The displacement discontinuity is an heavyside function and therefore the nonlocal strain field reduces to the displacement jump times the (normalised) weight function. The comparison yields (1) the displacement jump that fits best the analytical field with the nonlocal strain field, and (2) an error which characterizes the quality of the fit, that is how the calculated profile is close to the analytical one. From this error, one may decide whether or not a macro-crack that connects the micro-cracks has formed (by comparing this error to a given threshold defined a priori), and in this case what is the crack opening displacement. Then, the crack permeability (17) can be calculated and within a continuum setting, it is smeared over the FPZ so that the fluid flow in the FPZ is the same than inside the macro-crack [43].

A side result to this comparison addresses the following question: does the description of nonlocal (continuum) damage model converge to the description of a discrete crack when the material is totally damaged? This is not the case if the internal length in the nonlocal model is set constant [44, 45]. It should tend to zero upon full damage, or the weight function in the nonlocal averaging process should better capture the interactions between micro-cracks during their coalescence towards a macro-crack [22].

5. Concluding remarks

Failure due to progressive micro-cracking occurs in geomaterials such as rocks or concrete subjected to tensile loads. The material response is quasi-brittle. Micro-cracks propagate and are arrested or their path deviated due to the material heterogeneity, and this process cannot be captured by linear elastic fracture mechanics. Within a continuum mechanics framework, the material response may be described by continuum damage mechanics. Due to progressive micro-cracking, the material stiffness decreases. It results in strain softening.

In order to avoid spurious strain and damage localisation, it is necessary to introduce an internal length in the constitutive model so that failure occurs with a non-zero energy dissipation. This is the purpose on nonlocal continua with local strains, the nonlocal damage model being the first of this kind historically. A feature of such a model is size effect on the nominal strength, which is observed in laboratory tests and may have a great importance in civil engineering and geomechanics because experiments are always conducted on small specimens compared to the real structures. Since the apparent strength decreases when the size of the specimen increases, strength-based design (which is the usual engineering practice) ought to account for this size effect.

There are today a wide variety of failure models based on damage mechanics, phase field approaches or cohesive cracking that incorporate such an internal length. It has become a standard, although there is still a debate on whether this internal length should be viewed as a constant or not.

This consistent continuum approach to failure opened also the path to solving coupled problems. Here, we have considered hydro-mechanical coupled effects. Micromechanics shows that the permeability of the material ought to be indexed to the damage growth in the regime of distributed cracking. Upon macro-cracking, there is a change of regime and it is the crack opening that controls the fluid flow in the cracked material. Both regimes may be captured with a continuum damage approach, however.

To conclude, there is a wide variety of coupled problems involving fracture and damage coupled with other chemo-physical mechanisms. To name a few, let us mention calcium leaching yielding to the dissolution of the material (important for the long-term safety of waste containments), and salt or ice crystallisation in the pore structure of geomaterials and alcali-silica reactions in concrete which induces internal cracking. These problems, gathered today under the name of "durability mechanics" are intrinsically multi-disciplinary, and are not solely concerned with geomaterials. Biological materials and materials for energy storage are also of concern because they are porous materials which exchange fluids with their environment.

Acknowledgements

The author would like to thank Z. P. Bažant, N. Burlion, G. Chatzigeorgiou, M. Choinska, A. Delaplace, F. Dufour, D. Grégoire, A. Huerta, A. Khelidj, A. Krayani, V. Lefort, L. Rojas Solano, and

S. Roux for their great help and inspiration which lead to the results summarised in this paper. This work has been partially supported by the Investissement d'Avenir French programme (ANR-16-IDEX-0002) under the framework of the E2S UPPA hub Newpores.

References

- [1] G. R. Irwin, "Analysis of stresses and strains near the end of a crack traversing a plate", *Trans. ASME, J. Appl. Mech.* **24** (1957), p. 361-364.
- [2] J. F. Knott, Fundamentals of Fracture Mechanics, Butterworth and Co., Delft, the Netherlands, 1973.
- [3] A. A. Griffith, "The theory of rupture", in *Proc. 1st Int. Conf. of Applied Mech.*, 1924, p. 55-63.
- [4] K. Haidar, G. Pijaudier-Cabot, J. F. Dube, A. Loukili, "Correlation between internal length, fracture process zone and size effect in mortar and model materials", *Mater. Struct.* 38 (2005), p. 201-210.
- [5] G. I. Barenblatt, "The mathematical theory of equilibrium cracks in brittle fracture", *Adv. Appl. Mech.* **7** (1962), p. 55-129.
- [6] D. Dugdale, "Yielding of steel sheets containing slits", J. Mech. Phys. Solids 8 (1960), p. 100-108.
- [7] A. Hillerborg, M. Modeer, P. E. Petersson, "Analysis of crack formation and crack growth in concrete by means of fracture mechanics and finite elements", *Cement Concr. Res.* 6 (1976), p. 773-782.
- [8] J. Mazars, G. Pijaudier-Cabot, "Continuum damage theory—application to concrete", J. Eng. Mech ASCE 115 (1989), p. 345-365.
- [9] G. Pijaudier-Cabot, Z. P. Bažant, "Nonlocal damage theory", J. Eng. Mech. ASCE 113 (1987), p. 1512-1533.
- [10] Z. P. Bažant, G. Pijaudier-Cabot, "Nonlocal continuum damage, localization instability and convergence", *Trans. ASME, J. Appl. Mech.* 55 (1988), p. 287-294.
- [11] J. Lemaitre, J. L. Chaboche, Mécanique des matériaux solides, Dunod, Paris, France, 1985.
- [12] D. Krajcinovic, J. G. M. Van Mier, Damage and Fracture of Disordered Materials, CISM Courses and Lectures No. 410, Springer Verlag, Wien, Austria, 2000.
- [13] A. Delaplace, G. Pijaudier-Cabot, S. Roux, "Progressive damage in discrete models and consequences on continuum modeling", J. Mech. Phys. Solids 44 (1996), p. 99-136.
- [14] J. Hadamard, *Leçons sur la propagation des ondes et les équations de l'hydrodynamique*, Hermann, Paris, France, 1903.
- [15] Z. P. Bažant, "Instability, ductility and size effect in strain-softening concrete", J. Eng. Mech. ASCE 102 (1976), p. 331-344.
- [16] Z. P. Bažant, G. Pijaudier-Cabot, "Measurement of the characteristic length of nonlocal continuum", J. Eng. Mech. ASCE 115 (1989), p. 755-767.
- [17] Z. P. Bažant, J. Planas, Fracture and Size Effect in Concrete and Other Quasi-brittle Materials, CRC Press, London, UK, 1998.
- [18] Z. P. Bažant, P. A. Pfeiffer, "Determination of fracture energy from size effect and brittleness number", ACI Mater. J. (1987), p. 463-480.
- [19] D. Grégoire, L. Rojas-Solano, G. Pijaudier-Cabot, "Failure and size effect for notched and unnotched concrete beams", Int. J. Numer. Anal. Methods Geomech. 37 (2013), p. 1434-1452.
- [20] C. Le Bellego, J. F. Dube, G. Pijaudier-Cabot, B. Gérard, "Calibration of nonlocal damage model from size effect tests", *Eur. J. Mech. A* 22 (2003), p. 33-46.
- [21] C. Giry, F. Dufour, J. Mazars, "Stress-based nonlocal damage model", Int. J. Solids Struct. 48 (2011), p. 3431-3443.
- [22] L. Rojas Solano, D. Grégoire, G. Pijaudier-Cabot, "Interaction based nonlocal damage model for failure in quasibrittle materials", *Mech. Res. Commun.* 54 (2013), p. 56-62.
- [23] A. Simone, H. Askes, L. J. Sluys, "Incorrect initiation and propagation of failure in non-local and gradient-enhanced media", Int. J. Solids Struct. 41 (2004), p. 351-363.
- [24] A. Krayani, G. Pijaudier-Cabot, F. Dufour, "Boundary effect on weight function in nonlocal damage model", Eng. Fract. Mech. 76 (2009), p. 2217-2231.
- [25] Z. P. Bažant, M. Jirasek, "Nonlocal integral formulations of plasticity and damage: survey of recent progress", J. Eng. Mech. ASCE 128 (2002), p. 1119-1149.
- [26] R. H. J. Peerlings, R. de Borst, W. A. M. Brekelmans, J. H. P. de Vree, "Gradient enhanced damage for quasibrittle materials", Int. J. Numer. Methods Eng. 39 (1996), p. 3391-3403.
- [27] G. Pijaudier-Cabot, N. Burlion, "Damage and localisation in elastic materials with voids", *Mech. Cohesive Frict. Mater.* 1 (1996), p. 129-144.
- [28] S. C. Cowin, J. W. Nunziato, "Linear elastic materials with voids", J. Elast. 13 (1983), p. 125-147.
- [29] S. C. Cowin, M. A. Goodman, "A variational principle for granular materials", Z. Angew. Math. Mech. 56 (1976), p. 281-286.

- [30] M. Fremond, B. Nedjar, "Endommagement et principe des puissances virtuelles", C. R. Acad. Sci., Paris II (1993), p. 857-864.
- [31] N. Provatas, K. Elder, *Phase-field Methods in Material Science and Engineering*, Wiley-VCH Verlag GmbH & Co. KGaA, Weinheim, 2010.
- [32] A. Karma, D. A. Kessler, H. Levine, "Phase-field model for mode III dynamic fracture", *Phys. Rev. Lett.* 87 (2001), article no. 045501.
- [33] C. Miehe, M. Hofacker, F. Welshinger, "A phase field model for rate-independent crack propagation: robust algorithmic implementation based on operator split", *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* **199** (2010), p. 2765-2778.
- [34] B. Bourdin, G. Francfort, J. J. Marigo, The Variational Approach to Fracture, Springer, New York, USA, 2008.
- [35] C. V. Verhoosel, R. de Borst, "A phase-field model for cohesive fracture", Int. J. Numer. Methods Eng. 96 (2013), p. 43-62.
- [36] D. C. Feng, J. Y. Wu, "Phase-field regularised cohesive zone model and size effect of concrete", *Eng. Fract. Mech.* 197 (2018), p. 66-79.
- [37] G. Pijaudier-Cabot, C. La Borderie, T. Rees, W. Chen, O. Maurel, F. Rey-Betbeder, A. de Ferron, *Electrohydraulic Fracturing of Rocks*, ISTE-Wiley, London, UK, 2016.
- [38] L. Jason, G. Pijaudier-Cabot, S. Ghavamian, A. Huerta, "Hydraulic behaviour of a representative structural volume for containment buildings", *Nucl. Eng. Des.* 237 (2007), p. 1259-1274.
- [39] G. Chatzigeorgiou, V. Picandet, A. Khelidj, G. Pijaudier-Cabot, "Coupling between progressive damage and permeability of concrete: analysis with a discrete model", *Int. J. Numer. Anal. Methods Geomech.* 29 (2005), p. 1005-1018.
- [40] Z. P. Bažant, B. H. Oh, "Crack band theory for fracture of concrete", Mater. Struct. 16 (1983), p. 155-177.
- [41] V. Lefort, O. Nouailletas, D. Grégoire, G. Pijaudier-Cabot, "Lattice modelling of hydraulic fracture: theoretical validation and interactions with cohesive joints", *Eng. Fract. Mech.* **235** (2020), article no. 107178.
- [42] F. Dufour, G. Pijaudier-Cabot, M. Choinska, A. Huerta, "Extraction of crack opening from a continuous approach using regularised damage models", *Comput. Concr.* **5** (2008), p. 375-388.
- [43] G. Pijaudier-Cabot, F. Dufour, M. Choinska, "Permeability due to the increase of damage in concrete: from diffuse to localised damage distributions", J. Eng. Mech. ASCE 135 (2009), p. 1022-1028.
- [44] D. Grégoire, L. Rojas Solano, G. Pijaudier-Cabot, "Continuum to discrete transition in nonlocal damage models", Int. J. Multiscale Comp. Eng. 10 (2012), p. 567-580.
- [45] G. Pijaudier-Cabot, D. Grégoire, "A review of nonlocal continuum damage: modelling of failure?", Netw. Heterog. Media 9 (2014), p. 575-597.



Prizes of the French Academy of Sciences 2019 (continued) / Prix 2019 de l'Académie des sciences (suite)

Analysis of the delayed damage model for three one-dimensional loading scenarii

Analyse du modèle d'endommagement à effet retard pour trois scenarii de chargement mono-dimensionnel

Jihed Zghal^{*a*} and Nicolas Moës^{*, b, c}

^{*a*} Laboratoire Energetique Mecanique Electromagnetisme (LEME), University of Paris Nanterre, 50 rue de sèvres 92410 Ville d'Avray, France

^b Ecole Centrale de Nantes, GeM Institute, UMR CNRS 6183, 1 rue de la Noë, 44321 Nantes, France

^c Institut Universitaire de France (IUF), France

E-mails: jzghal@parisnanterre.fr (J. Zghal), nicolas.moes@ec-nantes.fr (N. Moës)

Abstract. The delayed damage model has been introduced by Allix and Deü [1] as a way to overcome spurious mesh dependency in failure analysis involving damage and dynamic loading. The damage rate is bounded through a time scale which, combined with the wave speed, introduces implicitly a length scale. In this paper, the delayed damage model is analyzed through numerical experiments on three different loading cases of a bar: a slow loading leading to a dynamic failure, pulses and impact. We observe and discuss the load level needed for failure (and the dependence of this load level with respect to the loading rate), as well as the dissipation and extent of the fully damaged zone at failure. Observations lead to the following conclusions. First, the delayed damage model has no regularization effect for a dynamic failure initiating from rest. Second, for pulse loadings, the loading rate has no influence on the minimal load level needed for failure (even though the delayed damage model is a time-dependent model), and beyond this minimal load level for failure, the extent of the fully damage zone rises, proportionally to the length scale. Third, regarding the impact, the velocity needed to reach failure depends only the time-independent parameters of the models, and not the ones linked to the delayed damage.

Résumé. Le modèle d'endommagement à effet retard a été introduit par Allix et Deü [1] pour surmonter dans le cas de chargement dynamique la dépendance de maillage non-physique observée dans l'analyse de rupture. Le taux d'endommagement est limité via un temps caractéristique qui, combiné à la vitesse des ondes, introduit implicitement une longueur caractéristique. Dans cet article, le modèle d'endommagement à effet retard est analysé par des simulations numériques sur trois cas de chargement différents d'une barre : un chargement lent conduisant à une rupture dynamique, des impulsions et un impact. Nous observons et discutons le niveau de charge nécessaire à la rupture (et la dépendance de ce niveau de charge à la vitesse du chargement), ainsi que la dissipation et l'étendue de la zone entièrement endommagée lors de la rupture. Les observations conduisent aux conclusions suivantes. Premièrement, le modèle à effet retard n'a aucun effet de

^{*} Corresponding author.

régularisation pour une défaillance dynamique démarrant du repos. Deuxièmement, pour les chargements par impulsions, la vitesse de chargement n'a aucune influence sur le niveau de charge minimal nécessaire à la rupture (alors que le modèle à effet retard est pourtant un modèle dépendant du temps), et au-delà de ce niveau de charge minimal pour la rupture, l'étendue du dommage total est proportionnelle à la longueur caractéristique. Troisièmement, en ce qui concerne l'impact, la vitesse nécessaire pour atteindre la rupture dépend uniquement des paramètres affectant la version indépendante du modèle (et non ceux liés à l'effet retard).

Keywords. Damage, Delay effect, Dynamics, Localization, Softening.

Mots-clés. Endommagement, Effet retard, Dynamique, Localisation, Adoucissement.

1. Introduction

Damage growth simulation up to failure presents many challenges among which the need to introduce a length scale in the material model to avoid spurious mesh dependency even in the case of dynamic loading. This was observed already in [2] and further analyzed in [3] based on a viscoplastic model with void growth. If the length is absent, a single layer of elements may be affected by the damage localization. The level of dissipation to reach failure is then completely linked to the mesh size and not a physical parameter.

The length scale may be introduced directly in an explicit manner in the model. We find different types of approaches in this category as the non-local approach [4, 5] in which the damage growth at a point depends on the average of some quantity at some distance around the point. Kinematically based higher order gradient models [6, 7] develop a higher order kinematics (and equilibrium) introducing a length scale. Gradient based damage models [8–10] are yet other ways to introduce a length scale. The free energy depends both on damage and it's gradient. One can also mention, more recent works as the phase-field approach emanating from the physics community [11], the variational approach to fracture [12] and the thick level set approach [13].

Another way to introduce a length scale in problems involving inertia effect is to rely on a time scale. This time scale multiplied by the wave speed introduces implicitly a length scale in the model. The time scale is usually introduced through a rate dependent model as in the early work by Needleman and co-workers [14] for plasticity and void growth. A comprehensive study may be found in the study [15]. Regarding damage, time-dependent version, may be traced back to [16], with further progress and application to concrete in [17]. These models are inspired from Perzyna plasticity [18].

Other rate dependent damage models have been proposed later to alleviate spurious localization as the delayed damage model which is the main focus of the paper. It was introduced in [1, 19]. The main difference between the previous form of rate dependency is that the delayed damage model bounds the damage rate to a material data parameter. Rate-dependent model are appealing from the computational point of view since they only affect the local constitutive stress update.

The goal of this paper is to test the robustness of the delayed damage model in specific scenarii. The first scenario is the sudden rupture of a pre-loaded bar. This scenario is interesting because the rupture is dynamical (unloading stress wave emanating from the rupture zone) while there is no initial kinetic energy in the bar. The second scenario, already considered in [2], deals with a bar loaded suddenly at both extremities. As the loading waves (pulses) reach the middle of the bar, they provoke rupture. Note that the loading is set so that damage can only start when both loadings superpose. The third scenario, considered first in [20], deals with the impact at the extremity of the bar: a sudden pulling velocity is applied. As in the first scenario, kinetic energy is

not initially present. Finally, even tough the paper is dedicated to the delayed damage model, we will also discuss other formats for the introduction of the rate dependency as in [16] and [17].

We now detail the content of the paper. The next section gives the salient characteristics of the delayed damage model. The next three sections deal with one after the other the three scenarii, starting with the sudden rupture of pre-loaded bar, followed by the bar subjected to symmetrical tension pulses, and, finally, the impact scenario. Section 5 gives conclusions and discusses the expected results with other types of rate dependent damage models.

2. Delayed damage model for dynamics

The delayed damage model introduces a time scale denoted τ_c [1, 19]. The main equation of the model is given by (1). It relates the damage rate \dot{D} to the energy release rate Y:

$$\begin{cases} \dot{D} = \frac{1}{\tau_c} (1 - \exp(-a\langle f(Y, D) \rangle_+)) & \text{if } D < 1\\ D = 1 & \text{otherwise} \end{cases}$$
(1)

where *a* is a coefficient, $\langle x \rangle_+ = (x + |x|)/2$ and the criteria *f* is given by:

$$f(Y,D) = \frac{\sqrt{Y} - \sqrt{Y_0}}{\sqrt{Y_c}} - D.$$
(2)

The value of *Y* for which damage starts is denoted by Y_0 . The second parameter, Y_c , governs the damage hardening. It is clear from (1) that the damage rate is bounded by $1/\tau_c$. Multiplied by the wave speed *c*, the time scale brings a length scale l_c :

$$l_c = c\tau_c, \quad c = \sqrt{E/\rho} \tag{3}$$

where *E* is the Young modulus and ρ the density. In this paper, we will be considering onedimensional models. The stress, σ is related to the strain ϵ by the elasticity relation:

$$\sigma = E(1 - D)\varepsilon \tag{4}$$

and the energy release rate is defined by:

$$Y = \frac{1}{2}E\epsilon^2.$$
 (5)

Equations (1)-(2), (4)-(5) fully define the delayed-damage material model. For different imposed strain rates, Figure 1 shows the stress–strain relation, in which stress and strain have been normalized by their values when damage initiates:

$$\sigma_0 = \sqrt{2Y_0E}, \quad \epsilon_0 = \sqrt{2Y_0E^{-1}}.$$
(6)

3. First scenario: sudden rupture of a bar from rest

We now challenge the delayed damage model in the transition from a quasi-static to a dynamical situation. We consider a bar of length *L* and section *S* initially at rest and loaded in a quasi-static (ie infinitely slowly) manner to its limit point (top point on the quasi-static stress–strain curve, Figure 1). Because of the quasi-static nature of the loading, the bar reaches the limit point without any kinetic energy. Quantities at the limit point are denoted with the *i*. They may be obtained analytically:

$$D_i = \frac{\epsilon_c - \epsilon_0}{2\epsilon_c}, \quad \epsilon_i = \frac{\epsilon_c + \epsilon_0}{2}, \quad \sigma_i = (1 - D_i)E\epsilon_i \tag{7}$$

where $\epsilon_c = \sqrt{(2Y_c/E)}$.



Figure 1. Stress vs strain for the delayed damage model considering different strain rates. The case 0⁺ corresponds to a quasi-static loading.

Table 1. Material and geometrical properties properties (identical to those used in [1])

E (MPa)	ho (kg/m ³)	Y_c (MPa)	Y_0 (MPa)	a	τ_c (s)	<i>L</i> (m)	<i>S</i> (m ²)
5.7×10^4	2280	0.23	0.05	10	2×10^{-6}	0.1	10^{-6}

When the limit point has been reached, the loading is stopped and a small extra damage (related to η below) is applied at x = 0. The bar enters a dynamical regime towards rupture. Initial and boundary conditions for the displacement u are given by:

$$u(x, t = 0) = \epsilon_i x, \quad \dot{u}(x, t = 0) = 0, \quad D(x, t = 0) = \begin{cases} D_i, & x > 0\\ (1+\eta)D_i, & x = 0 \end{cases}$$
(8)

$$u(x = 0, t) = 0, \quad u(x = L, t) = \epsilon_i L.$$
 (9)

The dynamic regime is governed by the linear momentum balance and strain compatibility:

$$\frac{\partial \sigma}{\partial x} = \rho \ddot{u}, \quad \epsilon = \frac{\partial u}{\partial x}.$$
(10)

The solution is sought over a time interval denoted *T*. The numerical values used for the simulations throughout the paper are given by Table 1.

Simulations are carried out using a classical explicit dynamic scheme [21]. In practice, η is taken at 0.01 and applied to the first element. Even though the loading does not evolve, the string is lead to catastrophic failure. During the simulation, we observe that damage grows only on the first element and faster as it reaches D = 1. The size of the zone which has reached D = 1, denoted l_1 , and called failure length is thus restricted to a single element. This may be observed in Figure 2 giving the evolution of l_1 with the mesh size. Regarding the dissipated energy

$$W_d = S \int_T \int_L Y \dot{D} \, \mathrm{d}x \, \mathrm{d}t \tag{11}$$

it is shown in Figure 3. The fact that it does not stabilize with the mesh size is a clear sign of spurious localization. Indeed, as the mesh size goes to zero, no energy is lost in the bar rupture. So, the fact that a minimal time is needed to reach D = 1 in the model does not preclude spatial spurious localization in this example.



Figure 2. Failure length as a function of mesh size for the string problem.



Figure 3. Evolution of the dissipated energy as a function of mesh size.

4. Second scenario: a bar subjected to a sudden loading at both extremities

This scenario was already considered in [2]. Due to symmetry only half of the bar is considered (Figure 4). Initial and boundary conditions are

$$u(x, t = 0) = 0, \quad \dot{u}(x, t = 0) = 0, \quad D(x, t = 0) = 0$$
 (12)

$$u(x=0,t) = 0, \quad \sigma(x=L/2,t) = \bar{\sigma}(t).$$
 (13)

The loading evolution is given by:

$$\bar{\sigma}(t) = \min\left(\frac{E\dot{\epsilon}t}{2}, \frac{\bar{\Sigma}}{2}\right) \tag{14}$$

where \dot{c} is the loading rate affecting the duration, $t_l = \bar{\Sigma}/(E\dot{c})$, of the initial slope. We consider the loading to be small enough such that damage may only start when reflection occurs.

To analyze the damage pattern, as for the first scenario, we use the failure length concept introduced in [22] and denoted l_1 . It corresponds at the end of the simulation to the size of the zone over which the damage has reached 1. We analyze numerically the relation between l_1 , the



Figure 4. Bar under a pulse loading.



Figure 5. Failure length l_1 as a function of the applied stress $\bar{\Sigma}$ for different strain rates. Dashed lines correspond to a linear fit of the data.

applied load, $\bar{\Sigma}$, and the strain rate, $\dot{\epsilon}$. A linear relation between l_1 and the log of the stress is observed in Figure 5 and summarized below:

$$l_1 / l_c \sim \alpha(\dot{e}) \log\left(\max\left(\frac{\Sigma}{\sigma_{\text{loc}}}, 1\right) \right).$$
(15)

For the same final applied stress, the failure length tends to decrease when the loading rate increases. We also observe that the failure length collapses to zero for a given stress independently of the strain rate. We denote this stress as σ_{loc} and call it localization stress. It is the minimal stress needed to break the bar. It is observed numerically that $\sigma_{loc}/\sigma_0 = 1.3$ for the material parameter given in Table 1.

When the loading is in between σ_{loc} and σ_0 , damage develops but not enough to reach D = 1, so $l_1 = 0$. If the loading is below σ_0 , damage does not develop at all. These regimes are illustrated in Figure 6 and summarized below.

$$\begin{cases} 0 < \bar{\Sigma} < \sigma_0 & \text{No Damage: } D = 0 \\ \sigma_0 \le \bar{\Sigma} < \sigma_{\text{loc}} & \text{Damage but no failure: } 0 \le D < 1 \\ \bar{\Sigma} = \sigma_{\text{loc}} & \text{Damage and failure: } D = 1 \text{ and } l_1 \to 0 \\ \bar{\Sigma} > \sigma_{\text{loc}} & \text{Damage and failure: } D = 1 \text{ and } l_1 > 0 \end{cases}$$


Figure 6. Three regimes depending on the stress level but independent of the loading rate.



Figure 7. Failure length (a) as a function of mesh size and dissipated energy (b) when the localization stress is applied.

Note that a logarithmic relation between l_1 and the applied stress was already given in [22, 23] but the dependence of l_1 on the strain rate was not studied and the case where l_1 was possibly zero was also not studied.

Figure 7(a) confirms that when the localization stress is applied, only a single element reaches D = 1, $(l_1 = h)$. Should we be worried by the fact that the failure length in the delayed damage may be limited to a single element? To answer this question, we analyze the energy dissipated. Figure 7(b) depicts the evolution of the dissipated energy with the mesh size. It seems to stabilize with the mesh size. We also analyze in Figure 8 the energy dissipated in the hardening and softening regions, respectively. At any given time, the hardening region is defined as the set of material points for which damage is not growing, or growing under a rising stress. The complementary part is the softening region, corresponding to a damage growth under diminishing stress.

$$W_d = W_d^{\text{hard}} + W_d^{\text{soft}}.$$
 (16)

Both hardening W_d^{hard} and softening W_d^{soft} dissipated energy do stabilize with respect to the mesh size. So, on the contrary to the first scenario, for which the dissipation dropped constantly with the mesh size, dissipation stabilizes with the mesh size in the second scenario. The stabilization



Figure 8. Dissipated energy in the hardening (a) and softening (b) zones as a function of the mesh size.



Figure 9. Damage profile in the bar at the end of the simulation. The horizontal dotted line corresponds to $D = D_i$.

is however harder to get for higher loading rates. This fact may be related to the damage profiles obtained at the end of the simulation and shown in Figure 9(a). The damage gradient is extremely steep and gets steeper for a higher loading rate.

5. Third scenario: sudden loading at one extremity of a bar

The bar is now loaded only at its right extremity with a given velocity \bar{v} . Initial and boundary conditions are given by

$$u(x, t = 0) = 0, \quad \dot{u}(x, t = 0) = 0, \quad D(x, t = 0) = 0$$
 (17)

$$\sigma(x=0,t) = 0, \quad u(x=L,t) = \bar{v}t.$$
 (18)

This problem was studied for a time-independent model in [20,24]. These papers give analytical informations on the solution. In particular, it gives the imposed velocity needed to break the material at the extremity. We shall call this velocity localizing velocity v_{loc} . It is given by

$$\nu_{\rm loc} = \int_0^{\epsilon_i} c(\epsilon) \,\mathrm{d}\epsilon \tag{19}$$

where $c(\epsilon)$ is the wave speed for a strain ϵ and $T(\epsilon)$ the tangent to the stress–strain curve:

$$c(\epsilon) = \sqrt{\frac{T(\epsilon)}{\rho}}, \quad T(\epsilon) = \frac{\mathrm{d}\sigma}{\mathrm{d}\epsilon}.$$
 (20)

When applied to the time-independent limit case of the delayed damage model (curve 0^+ in Figure 1), we get

$$\nu_{\rm loc} = c_0 \epsilon_0 + \int_{\epsilon_0}^{\epsilon_i} c(\epsilon) \,\mathrm{d}\epsilon = c_0 \epsilon_0 + c_0 \int_{\epsilon_0}^{\epsilon_i} \left(\frac{2(\epsilon_i - \epsilon)}{\epsilon_c}\right)^{1/2} \,\mathrm{d}\epsilon = c_0 \left(\epsilon_0 + \frac{\epsilon_c}{3} (1 - \epsilon_0 / \epsilon_c)^{3/2}\right). \tag{21}$$

We observe numerically with the delayed damage model that the above velocity is the minimal velocity to reach D = 1 at the extremity of the bar. We also note that with the above velocity l_1 is restricted to the last element. Only one element reaches D = 1. Next to this element, the damage gradient is very steep.

We now analyze whether or not there is a relationship between σ_{loc} observed in the second scenario and v_{loc} . In the second scenario, the stress wave yields a velocity step of $\sigma_{loc}/(\rho c_0)$ when the wave reflects. Using the numerically observed value $\sigma_{loc} = 1.3\sigma_0$, we get a velocity step of 8.6 m/s which is very close to the 8.5 m/s given in (21).

6. Conclusions and discussion

The delayed damage model is an appealing approach to avoid spurious localization in damage analysis leading to failure. Indeed, its introduction in simulation tool is restricted to the constitutive model. The goal of this paper was to analyse whether or not the model was keeping its promises on three different loading scenarii.

For the first scenario, sudden dynamic failure from rest, the delayed damage model fails to regularize. The damage only evolves in a single element during failure and as a consequence, the energy needed for failure goes to zero as the mesh size goes to zero. One may argue that delayed damage model was designed for situations involving a fair amount of kinetic energy and that the observed spurious localization for the first scenario is not an issue in practice. We believe that caution is in order. Indeed, as dissipation occurs, a high level of kinetic energy might eventually yield to situation close to rest in which unwanted further failure with zero dissipation might occur. A final note on the first scenario is that even though damage time derivative is controlled by the delayed damage model, the space derivative is not controlled.

For the second scenario, our findings show that there exist a minimal stress, loading rate independent, to break the bar. For this minimal loading, a single element reaches failure. There is however no spurious localization per se because the dissipated energy (even the softening part) tends to stabilize with the mesh size. This stabilization requires however a very fine mesh since the damage gradient is very high. The fact that the minimal stress needed for failure is independent of the loading rate is an issue since in general the load to failure is observed experimentally as growing with the loading rate. Another thing that needs to be confronted to experiments is that the delayed damage model predicts (for higher loading than the localization stress) a finite size of the fully damaged zone (meaning in practice that a part of the bar turns into powder).

For the third scenario, impact case, the minimal imposed velocity needed for failure was obtained numerically and turns out to be given by the von Karman formula. This formula uses the time-independent part of the model. In other words the obtained limit load does not depend on the *a* and τ_c parameter of the delayed damage model. Finally, the limit load of the third scenario was connected to the one of the second scenario. We thus conjecture that the localization stress of the second scenario may be obtained for any hardening functions *f* by evaluating the localization velocity with the von Karman formula and multiplying the result par ρc_0 .

This paper is dedicated to the delayed damage models. As recalled in the introduction it is neither the only and nor the first model which has introduced a rate dependent effect for damage. The delayed damage model has however a specificity that the damage rate is bounded. A legitimate question is to ask how other types of rate-damage models would perform for the three scenarii. A commonly used rate damage model is the power law model given below in our simple one-dimensional setting, [16]. Relation (1) is replaced by

$$\dot{D} = \frac{1}{\tau_c} \langle af(Y,D) \rangle_+^n \tag{22}$$

where *n* is some positive coefficient and *D* is still restricted not to go beyond one. In the above, the damage rate is no longer bounded.

Using n = 1, and the same parameter as for the delayed damage model for the other parameter, we carried out the three scenarii with the power-law model. For the first scenario results did not change, ie spurious localization in a single element. Regarding the second scenario, the localization stress and the damage profile for $D > D_i$ are not affected. Finally, the localization velocity for the third scenario is not modified either. The fact that le localization velocity and stress are the same for delayed damage and power law model are not surprising since they are linked only to the expression of f (that is the rate-independent part of the model) and not to the specifics of the rate-dependency of the model.

A natural next step to this work is to analyze softening visco-plastic models and check their robustness with regards to the three scenarii.

References

- O. Allix, J.-F. Deü, "Delayed-damage modelling for fracture prediction of laminated composites under dynamic loading", *Eng. Trans.* 45 (1997), no. 1, p. 29-46.
- [2] Z. P. Bazant, T. Belytschko, "Wave propagation in a strain-softening bar: exact solution", J. Eng. Mech. 111 (1985), p. 381-389.
- [3] G. Pijaudier-Cabot, Z. P. Bazant, M. Tabbara, "Comparison of various models for strain softening", *Eng. Comput.* **5** (1988), p. 141-150.
- [4] Z. P. Bazant, T. Belytschko, T.-P. Chang, "Continuum theory for strain-softening", J. Eng. Mech. 110 (1984), p. 1666-1692.
- [5] G. Pijaudier-Cabot, Z. P. Bazant, "Nonlocal dalmage theory", J. Eng. Mech. ASCE 113 (1987), p. 1512-1533.
- [6] H. L. Schreyer, Z. Chen, "One-dimensional softening with localization", J. Appl. Mech. 53 (1986), p. 791-797.
- [7] N. Triantafyllidis, E. Aifantis, "A gradient approach to localization of deformation. I. Hyperelastic materials", *J. Elast.* **16** (1986), p. 225-237.
- [8] M. Frémond, B. Nedjar, "Damage, gradient of damage and principle of virtual power", Int. J. Solids Struct. 33 (1996), no. 8, p. 1083-1103.
- [9] R. Peerlings, R. De Borst, W. A. M. Brekelmans, J. Vree, "Gradient-enhanced damage for quasi-brittle materials", *Int. J. Numer. Methods Eng.* 39 (1996), p. 3391-3403.
- [10] G. Pijaudier-Cabot, N. Burlion, "Damage and localisation in elastic materials with voids", Mech. Cohesive Frict. Mater. 144 (1996), p. 129-144.
- [11] V. Hakim, A. Karma, "Laws of crack motion and phase-field models of fracture", J. Mech. Phys. Solids 57 (2009), no. 2, p. 342-368.
- [12] B. Bourdin, G. a. Francfort, J.-J. Marigo, "The variational approach to fracture", J. Elast. 91 (2008), p. 5-148.
- [13] N. Moës, C. Stolz, P.-E. Bernard, N. Chevaugeon, "A level set based model for damage growth: the thick level set approach", Int. J. Numer. Methods Eng. 86 (2011), no. 3, p. 358-380.
- [14] R. Becker, A. Needleman, O. Richmond, V. Tvergaard, "Void growth and failure in notched bars", J. Mech. Phys. Solids 36 (1988), no. 3, p. 317-351.
- [15] L. J. Sluys, "Wave propagation, localisation and dispersion in softening solids", PhD Thesis, T.U. Delft, 1992.
- [16] J. C. Simo, J. W. Ju, "Strain- and stress-based continuum damage models. I. formulation", Int. J. Solids Struct. 23 (1987), p. 821-840.
- [17] J.-F. Dubé, G. Pijaudier-Cabot, C. L. Borderie, "Rate dependent damage model for concrete in dynamics", J. Eng. Mech. 122 (1996), no. 10, p. 939-947.
- [18] P. Perzyna, "Fundamental problems in viscoplasticity", Adv. Appl. Mech. 9 (1966), p. 243-377.

- [19] O. Allix, J. F. Deü, P. Ladevèze, "A delay damage meso-model for prediction of localisation and fracture of laminates subjected to high rates loading", in *Proceedings, European Conference on Computational Mechanics, München, Germany*, Wiley, 1999.
- [20] T. von Karman, "On the propagation of plastic deformation in solids", Tech. Report 0SRD 365, NDRC Report No A-29, 1942.
- [21] T. Belytschko, L. Wing-Kam, K. Moran, B. Elkhodary, *Nonlinear Finite Elements for Continua and Structures*, 2nd ed., Wiley, UK, 2013.
- [22] A. Suffis, T. Lubrecht, A. Combescure, "Damage model with delay effect: Analytical and numerical studies of the evolution of the characteristic damage length", *Int. J. Solids Struct.* **40** (2003), no. 13–14, p. 3463-3476.
- [23] A. Suffis, A. Combescure, "Modèle d'endommagement à effet retard: Etude numérique et analytique de l'évolution de la longueur caractéristique", *Revu. Euro. Eléments* **11** (2002), no. 5, p. 593-619.
- [24] T. Von Karman, P. Duwez, "The propagation of plastic deformation in solids", *J. Appl. Phys.* **21** (1950), no. 10, p. 987-994.



Prizes of the French Academy of Sciences 2019 (continued) / Prix 2019 de l'Académie des sciences (suite)

Statistical physics and applied geosciences: some results and perspectives

Physique statistique et géosciences appliquées : quelques résultats et perspectives

Benoît Noetinger^a

^a IFP Energies Nouvelles, France *E-mail:* benoit.noetinger@ifpen.fr

Abstract. In this paper, some applications of statistical physics (SP) concepts and techniques in applied geosciences are reviewed. The domain includes hydrology, oil and gas industry, nuclear or CO_2 waste geological disposal, massive energy storage, heat recovery from geothermal formations and many other applications. Several scales are considered: we start from applications of SP at the molecular scale to understand the effect of extreme confinements concerning the fluid transport in nanopores in clay rocks. The paper ends with coarse graining techniques that are employed to build operational models relevant at the practical scale of several kilometers, including strongly fractured geological environments. Perspectives are proposed regarding some issues about the practical use of these often over-parameterized models in connection to random matrix and graph theories and the associated quenched disorder problems and "big data" issues.

Résumé. Dans cette note, nous examinons quelques applications des concepts et outils de la physique statistique (PS) aux géosciences appliquées. Les applications vont de l'hydrologie au stockage de déchets nucléaires ou de CO₂, au stockage massif d'énergie, en passant par l'industrie pétrolière ou gazière, et enfin les applications géothermiques. Vu la complexité intrinsèque des applications de terrain, les ingénieurs s'attachent en général à optimiser un critère économique, tout en veillant à maintenir la meilleure sécurité et en minimisant l'empreinte environnementale des projets. Il s'agit donc d'employer les connaissances les plus actuelles sur les transferts en milieu poreux. On s'intéresse à différentes échelles, des applications de la PS pour formuler les lois de transport dans des milieux extrêmement confinés tels des nanopores constituant la porosité des argiles. Ensuite, on présente les applications de la PS pour modéliser les écoulements à des échelles kilométriques intéressant les ingénieurs en charge d'application. On est dans une situation typique de désordre gelé, hors d'équilibre où les temps de relaxation peuvent être très longs, de l'ordre de plusieurs siècles. Des perspectives sont proposées pour utiliser des outils issus de la théorie des matrices aléatoires afin de faciliter l'utilisation pratique en "aide à la décision" de ces modèles bien souvent sur-paramétrés par des données elles-mêmes incertaines.

Keywords. Statistical physics, Applied geosciences, Porous media, Disorder, Nanopores, Upscaling, Quenched disorder.

Mots-clés. Physique statistique, Géosciences appliquées, Milieux poreux, Désordre, Nanopores, Changement d'échelle, Désordre gelé.

Available online 18th December 2020

1. Introduction

In many applications of geosciences, the basic concern is to inject, to recover or to store some fluid, waste or even thermal energy in subsurface formations at good economical conditions, while minimizing overall environmental risks. As all these transport processes occur in the porosity of natural rocks, studying flow in porous media at several scales is a major fundamental issue. In order to do so, a concise macroscopic description of flow in porous media encompassing several scales without knowing the exact microstructure of the pore space must be obtained. That program is close in spirit to the program of SP, as it was acknowledged long ago by [1–4].

The paper will be focused on several applications of SP methods capable to treat subtle interface effects at the nanometer-scale, as well as understanding the effect of the quenched disorder of these porous rocks at large scales. It is well known that subsurface appears to be heterogeneous from nm to km scales [5]. That feature can lead engineers to build over parameterized numerical models that are used to help decision making on the field [6, 7]: well implantation, injection or recovery strategy, uncertainty management etc... Practical questions of major societal importance may be asked to anticipate the dispersion of some pollutant in an aquifer. How organizing a geothermal plant avoiding as far as possible induced seismicity having low social acceptance [8]? More long-term issues can be addressed: Global climate change may imply strong dryness and/or floods: how karstic formations will react to that change of solicitations is a question of major societal interest [9]. That can have dramatic consequences over water supply, and could imply catastrophic hazards. In that paper, we will illustrate some SP concepts that help to provide some methodology to answer such questions. These concepts arise essentially from the area of phase transitions and disordered systems, e.g. percolation theory. As the disorder is quenched, concepts and methods from spin glass theory may be useful. Self organization theories may also provide useful tools, especially for describing strongly non linear flows with retroaction between the flow and local rock transport properties. Finally, random matrix methods and random graphs are likely to provide useful concepts and results.

The present goal is to provide some answers to the following questions:

- (i) is there some change of the analytical form of Darcy equation and of other transport equations if confinement effects due to small pore size arise? Are molecular simulations able to provide quantitative results, by correcting systematic bias due to the finite size of the simulation domain?
- (ii) is there some change of the analytical form of the coarse grained Darcy equation and other transport equations as the support scale is changing?
- (iii) Is there some self-averaging property and convergence to an effective homogeneous behavior of the system, and do we control this asymptotic convergence?
- (iv) How to describe the large scale tracer advection/dispersion/diffusion in the associated velocity field, and more generally the mixing processes occuring in these random velocity fields?
- (v) In the case of multiphase transport equations leading to hydrodynamic instabilities such as Saffman–Taylor [10] (viscous fingering) or gravity driven instabilities, how does the development of the instabilities interact with the local conductivity heterogeneities?
- (vi) A related issue concerns the strongly non-linear flow (such as non newtonian fluids, acidification leading to local changes of the conductivity, rock fracturation processes), can we observe some emergence of large scales patterns (fingers, wormholes) corresponding to some self-organised processes?

We discard in that paper any discussion about the application of SP to the evaluation of thermodynamics of bulk fluids required by applied geosciences as in many other applied science area. In addition, we do not discuss the increasingly popular Lattice-Boltzmann method that

originates from lattice gas automata (see [11] for the SP background of these methods) that is used to upscale μ CT scan images of rocks from pore to Darcy scale. A recent review may be found in [12] and references therein. We will not discuss in depth the last item (vi), rich of essential SP issues.

The paper is organised as follows: in next Section 1.1, we present some applications of molecular dynamics Monte Carlo studies that permit to get quantitative descriptions of flow in nanopores, even if important finite size bias must be accounted for properly. In a second section, we address the application of SP concepts to understand the form of averaged Darcy and transport equations in porous media characterized by random conductivity distributions Section 1.2. Averaging flow in fractured rocks that is an extreme case is described in Section 1.3 introducing percolation theory, dual porosity models that allow to describe these systems having highly contrasted relaxation times. Continuous time random walk techniques are presented, that yield very efficient computational techniques. In Section 1.4, we show how these considerations may be embedded using general random graphs and/or random matrix framework. Then some applications of random walks to tracer transport are given in Section 1.5. Then we give some elements regarding the influence of the disorder on two phase flows (Section 1.6) in which the disorder couples with the viscous fingering, yielding quite interesting ideas about the up-scaling of non-linear transport equations.

1.1. Molecular dynamics at the pore scale

Since the works of Darcy [13], developing a theory of flow through porous media from first principles was first viewed as a mathematical issue that can be treated by means of homogenization or volume averaging theories [14–17]. Such approaches are correct if the pore-scale Navier–Stokes description may be assumed on the bulk fluid. This description must be completed by the usual no slip boundary conditions at the surface of the pores, yielding a well posed problem. This description relies on the assumption that pore sizes are larger than a typical mean free path if gas transport is considered, or greater than several molecular diameters in the case of liquids. In that case, surface effects (with the notable exception of capillarity effects) may be neglected. In order to test the validity of this set of assumptions, a pioneering study was that of Koplik [18] in which Molecular dynamics (MD) techniques were reported to verify the validity of Navier Stokes description in a tiny pore. It was shown that the parabolic velocity profile as well as the Poiseuille relation relating the mean flow-rate to pressure drop remains quit robust, even for pore sizes of few molecular diameters. The longly debated question of the contact line motion between the rock, oil and water can be elucidated using a combination of MD and continuum methods [19]. The robustness of the usual non-slip boundary condition which combined with Stokes equation gives rise to Darcy's law [20, 21] is more questionable. Experimental capacities, as well as improvements in SP description of non-equilibirum phenomena and continuous increasing power of computers, led to the so-called nanofluidics [22]. In present times, MD may be used to get a better understanding of moving contact lines too in realistic systems. The associated theoretical tools provided by SP allow then to propose rigorous coarse-graining procedures providing macroscopic law of interest for geoscientists [20, 21]. Note that a simplified version of MD gives rise to Lattice Boltzmann simulation algorithm in which molecular motions are over simplified, to give a fast and faithful description of the large scale flow. That allows to estimate directly quantitatively the permeability of rock samples using micro-scanner μ CT images of the pore space [12].

Thanks to continuous increasing computing power, and to improvements in the characterization of fluid and rocks, these MD techniques are presently adapted to model dynamics of complex fluids confined between realistic mineral surfaces such as clays, the structure of which is depicted in Figure 1.



Figure 1. Sketch of molecular dynamics simulations of transport between clay layers. The molecular structure of various clays is accounted for, as well as molecular motions under an imposed pressure gradient. Reprinted (adapted) with permission from [23]. Copyright 2020 American Chemical Society.





Figure 2. Diffusion coefficient of molecules in a confined pore of thickness *H*. On the right, the plain curve represents the result of the hydrodynamic calculation accounting for the systematic bias due to the infinite set of images of the unit cell. The dots are the set of values obtained by MD simulations for various *H*, showing the excellent agreement between simulation and theory. Reprinted (adapted) with permission from [23]. Copyright 2020 American Chemical Society.

Such studies were at the origin of a better understanding of clay swelling phenomena [24, 25]. Density functional theories coupled with homogenization methods [26, 27] give quantitative descriptions of these complex natural media. Tiny electrostatic effects are amplified as soon as pore size may be compared with molecular dimensions, amplifying surface effects. These swelling effects are of primary importance to understand whether cap rock integrity is preserved in waste disposals or in CO_2 geological storage. If mechanical stresses due to swelling induce fracturation, the overall societal interest of the storage may be questionable. These successes motivated many SP studies to describe fluid motion at the nanoscale [20, 22, 25, 28–30]. The main goal is to be able to quantify the net effect of slippage and of electrostatic interactions at the pore boundaries, that may be neglected for usual pore sizes. But due to computing limitations,

these MD simulations are carried out on rather small unit cells usually supplemented by periodic boundary conditions. The convergence to large scale properties may be quite slow, inducing systematic errors. Analytical expressions are proposed to correct these systematic errors, both in the bulk or in nanopores, that is illustrated in Figure 2 [23, 31].

To conclude that section, SP tools such as MD or concepts (fluctuation theory, Kubo relations, density functional), coupled with continuous improvements of the knowledge of molecular fluid and rock properties are leading to rich applications that permit quantitative and more and more predictive descriptions [32]. This fine understanding of flow in nanopores and the associated changes in thermodynamical properties due to confinement have major consequences in applied geosciences, from nuclear waste disposal, CO₂ [33–35], to osmotic energy conversion using fresh and sea-water [36].

1.2. From Darcy to large scale, up-scaling permeability and transport, anomalous dispersion

We jump from nanopore scale to more macroscopic aquifer or reservoir kilometric scales to highlight applications of SP of disordered systems to geosciences, even if SP concepts and methods such as percolation theory were usefully employed at the scale of the cores (some cm). In Figure 3, we sketch the overall scales of reservoir (or aquifer) numerical simulations by depicting the characteristic sizes that enter in any aquifer description in general followed by a numerical simulation because very few analytical solutions are available.

Most applications share the following issue: solving a diffusion-like equation that reads:

$$\phi c_t \frac{\partial p(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot (k(\mathbf{r}) \nabla p(\mathbf{r}, t)) + f(\mathbf{r}).$$
(1)

Here, the parameters $k(\mathbf{r})$, $p(\mathbf{r}, t)$ and $f(\mathbf{r})$ denote respectively the local conductivity, timedependent potential and a source term. Dirichlet or Neumann Boundary conditions are known at the boundary of the domain. All these quantities depend on position vector \mathbf{r} and time t. In most cases, the quenched positive $k(\mathbf{r})$, is represented as being a random function of position. It is characterized by some mean-value and fluctuations that are measured by the geologist, by means of the so-called geostatistical approach, originally founded by Matheron using statistical concepts [37–39]. Log-normal distributions (the logarithm of the conductivity is a Gaussian distributed variable) were observed at the core scale in well defined geological environments [40]. Note that in most cases, the amount of data is not sufficient to provide the form of the probability distribution function (pdf) of k, and high order correlation functions are impossible to determine. As a consequence, even the input stochastic model is questionable. This explains the quasi infinite set of approaches that exist to generate random fields compatible with geological observations, the textbook [41] present the most popular approaches and methods.

The basic issue is to be able to quantify the net effect of heterogeneities about the behaviour of the aquifer, as well as the related uncertainties. In that context, such issue were investigated by hydrogeologists [40, 42–44], mathematicians [45, 46] and physicists, among other [47–54]. So the basic issue is to transfer the small scale spatial fluctuations to a large scale support that encompasses the low spatial frequency components of the fields of interest. The calculations are carried out in practice using some numerical model in which the Laplace equation is solved using a grid of resolution *L* generally considerably much coarser than the input fine geological grid Δ (notations in Figure 3), because the available computing power leads also to continuous improvement of local geological 3D representations. This implies obtaining a coarse grained Laplace equation with a renormalized conductivity map accounting as best as possible to the local subgrid variations. This is a classical issue addressed long ago by Maxwell, Landau and Lifzhitz among others, [40, 55–57]. There is a great amount of literature using SP concepts

such as percolation theory, real-space renormalization techniques, field theoretical methods including diagrams summation techniques [41,47–49,53,54,58–61]. A difficulty is to merge these sophisticated techniques with the pragmatical needs of field engineers solving real time issues. One can average the solution of (1) to get the average head (or pressure) $\langle p(\mathbf{r}, t) \rangle$ in which the ensemble-average $\langle \cdots \rangle$ is to be taken on the quenched disorder of the conductivity field $k(\mathbf{r})$.

Once the velocity field is given, advection dispersion diffusion equation may be solved, e.g. to anticipate the motion of some pollutant, or heat recovery. Modelling multiphase flow leads to solve non linear equations involving the repeated solving of Laplace equation (1), as described in Section 1.6.

1.2.1. Averaging Darcy's law

It can be shown that under quite general hypothesis (statistical stationarity and convergence conditions) that the average potential $\langle p(\mathbf{r}, t) \rangle$ is driven by an effective equation that reads [61]:

$$\phi c_t \frac{\partial \langle p(\mathbf{r}, t) \rangle}{\partial t} = \int_{-\infty}^t \mathrm{d}t' \int \mathrm{d}^D \mathbf{r}' \nabla \cdot (\Sigma(\mathbf{r} - \mathbf{r}', t - t') \nabla p(\mathbf{r}', t')) + f(\mathbf{r}).$$
(2)

The average local flux is a spatially weighted time convolution of the average potential gradient around the considered time and location. It means that the underlying disorder couples different points. That is reminiscent of the "overlap" that arises in quenched average that are provided by replica methods in spin glasses theories, that are the archetype of quenched disorder approaches in SP [62]. The kernel $\Sigma(\mathbf{r}, t)$ may be obtained as a result of a summation of 1P irreducible irreducible diagrams of a perturbation expansion of the solution of (1), in a power series of the conductivity fluctuations, a so-called self-energy [61]. The diagram resummation techniques familiar to SP allows to build in a systematic manner from the perturbation expansion of the average solution $\langle p(\mathbf{r}, t) \rangle$ the equation driving $\langle p(\mathbf{r}, t) \rangle$. As the Green's function of Laplace operator is long-ranged, it is far more practical to manipulate an effective equation. The kernel $\Sigma(\mathbf{r}, t)$ involves a rather complex series of integrals involving the heat kernel and correlation functions of the conductivity of higher and higher order. In the generic case, the spatial range of $\Sigma(\mathbf{r}, t)$ is controlled by the correlation length of the conductivity fluctuations, and it time range is a typical diffusion time over this correlation scale. This structure explains the self-averaging character of the Laplace equation: low frequency components of the potential on one single large realization of the domain behaves like a Monte Carlo average of the potential over many independent realizations of the disorder [46, 61]. This explains why pumping tests (corresponding to point-wise solutions) "homogenize" by themselves It may be shown that for an infinite domain, at long times, the average potential is driven by the following equation:

$$\phi c_t \frac{\partial p(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \nabla \cdot (K_{\text{eff}} \nabla p(\mathbf{r}, t)) + f(\mathbf{r}).$$
(3)

The parameter K_{eff} -given formally by $K_{\text{eff}} = \int_0^{+\infty} \mathrm{d}t \int \mathrm{d}^D \mathbf{r} \Sigma(\mathbf{r}, t)$ is called the effective conductivity. It corresponds to the "natural" large scale relation between the mean flux and the large scale pressure gradient that can be provided by homogenization theories by means of the so-called "auxiliary problem" to be solved numerically in x, y and z directions [46] and references therein, as it is illustrated Figure 4. It can be shown that at long times, for any realisation of the disorder, the behavior of the system will converge to this equation: this is another manifestation of the self averaging property [46].

Many investigators proposed expressions relating K_{eff} to the underlying disorder [64]. For 1 dimension, an elementary analytical calculation provides the harmonic average $K_{\text{eff}} = \langle k^{-1} \rangle^{-1}$. For D = 2, a nice duality argument [14] shows that $K_{\text{eff}} = \exp \langle \text{Log}(k) \rangle$ if the conductivity distribution is log-normal. No simple general analytical expression exists in the general case for $D \ge 3$, even if



Figure 3. Geometry of the problem on a simplified 2D section of an aquifer or reservoir model domain ω . A working coarse grid made of blocks Ω of typical size *L* is superimposed to a geological fine grid of typical size Δ in order to solve the mass conservation equations of interest. The intermediate scale λ serves in posterior treatments for checking the overall consistency of the model. Reprinted (adapted) from Ref. [63]. Copyright 2020 with permission of Elsevier.



Figure 4. Up-scaling geometry. The coarse block of size *L* have a detailed conductivity map given by the geologist. It is up-scaled by solving a steady-state quasi Laplace equation to determine an effective conductivity in the mean flow direction that will serve as input of the simulator at coarse scales. Changing the direction of the mean driving pressure gradient allows to determine a conductivity tensor. The boundary conditions are usually no-flux parallel to the imposed mean flow, or periodic.

a great deal of research was devoted to develop such analytical expressions using additional hypothesis. SP techniques such as field theoretical methods [47,48,53,60,63] were employed to find some robust approximations. Many authors attempted to justify the so called Landau–Lifschitz–Matheron (LLM) [14,56] formula that reads:

$$K_{\text{eff}} \simeq \langle k^{(1-\frac{2}{D})} \rangle^{\frac{1}{(1-\frac{2}{D})}}.$$
(4)



Figure 5. Monte Carlo study of the evolution of the effective conductivity pdf with coarsening scale λ . The overall flow is solved using several realizations of the input log conductivity map (left). The associated local dissipation map (center) allows to evaluate a distribution of coarsened effective conductivities averaged at scale λ [63]. The resulting pdf's are plotted (right). The self averaging (homogenization) is highlighted by the sharply peaked distribution around the geometric average for $\lambda = 128$ units, the stability across scales of the Gaussian distribution may be observed too. Reprinted (adapted) from Ref. [63]. Copyright 2020 with permission of Elsevier.

This formula is found to be exact in 1 and 2D and up to fourth-order in the log-conductivity variance [65]. It remains an approximation in 3D or more [43, 54, 66], moreover, it is quite robust when compared with numerical tests in the case of log normally distributed conductivities [49, 63, 67]. Series resumation techniques [48], renormalization group (RG) arguments [48–50] give some clues in favor of this robustness. The author still thinks that there is some hidden powerful theoretical framework to be developed justifying its robustness and giving some sense to this formula. In 2 dimensions, numerically the log normal distribution appears to be stable under the up-scaling transformation, Figure 5 from [63], analogous to the central limit theorem. That may be related to the duality argument of Matheron [14] that justifies the geometric mean in 2D. In the 3D case, studying the emergence of a "stable" conductivity distribution invariant on the up scaling (RG) transformation would also be useful for studying strongly correlated systems having conductivity correlations decaying as a power law with the lag distance. A related question is to give some sense to the so-called uncorrelated case which may only be valid at a given observation scale that plays the role of the fixed scale while letting the ultraviolet cut off going at infinity, but keeping observed quantities fixed to their nominal values [68]. This may be illustrated on Figure 5 below: in the practical side, in most cases, at present times, using a numerical technique is sufficient. In case of extremely heterogeneous media (that can correspond to bimodal media) at percolation threshold, the well-known percolation transition may occur [58, 59, 63, 69, 70]. The percolation second order transition may be observed on Figure 6.

1.3. Fractured rocks

1.3.1. Upscaling the fracture network

Rocks are almost always fractured, and it may be expected that these fractures control the flow. In this paper, self-organization effects arising from geomechanics (a SP issue in itself!) controlling the overall organization of fracture networks will be ignored [71]. Understanding such flows is essential in many applications, such as geothermal applications, water resources management and oil and gas recovery. That explains the many *ad-hoc* rather empirical models that were developed, in particular the popular double porosity model that represent the rock and the fractures as two superimposed continua [72, 73].



Figure 6. Monte Carlo study of the evolution of the effective conductivity pdf with coarsening scale λ . The overall flow is solved using several realizations of the input bimodal map (left). The associated local dissipation map (center) allows to evaluate a distribution of coarsened effective conductivities averaged at scale λ [63]. The resulting pdf's are plotted (right). As the scale is increasing, the two peaks merge, the bimodal distribution disappears and becomes a (log-normal like?) distribution. The convergence to this asymptotic distribution shows critical slowing-down when the facies proportions are close to percolation threshold. In the infinite contrast case, scaling-laws are recovered [70]. Reprinted (adapted) from Ref. [63]. Copyright 2020 with permission of Elsevier.

In the case of fractured rocks, the heterogeneity is extreme: conductivity may vary by several orders of magnitude between the matrix (that stores the quantity of interest, fluids, energy etc...) and the fractures of almost vanishing measure which carry most of the flow to the outlet. These fractures may have random orientations, power-law distributions of lengths an apertures [74–76] leading to quite complex parameter space and phase diagrams. In that situation, continuous perturbation theories break-down, and other methods must be employed. Percolation theory approaches focused on the role of the fracture network connectivity [58, 59, 70, 74, 76–79] provide an excellent framework for describing these systems controlled by connectivity effects, at least if the system is close to the percolation threshold.

Fracture networks can be quite naturally represented as a random resistor network which corresponding graph shares vertices that represent the fracture intersections and edges representing the connection (fractures) between these intersections. Although the mapping is straightforward in 2D [66, 80], it is far more complex to derive it rigorously in the 3D case considering fractures that are 2 dimensional objects [81, 82] embedded in the usual 3D space. The resulting random resistor network corresponds to a low order approximation that can be improved systematically. This random resistor network may be associated to a weighted Random graph. The associated Laplacian matrix summarizes the hydraulic connections between fractures. Random graphs and random matrices theoretical techniques could provide a useful framework [83–93].

1.3.2. Coupling the fracture network with the matrix, beyond the dual porosity model

Coupling the fracture network with the matrix characterized by larger relaxation times is generally done using the classical dual porosity model of Barenblatt *et al.* [72]. This model allows to account for the smallest relaxation time of the matrix that is related to the eigenvalues of the Laplace operator acting on the matrix domain with Dirichlet boundary conditions [94]. More refined models attempted to improve that description by adding several relaxation times [94–96]. Continuous time random walk (CTRW) techniques were proposed for fast computing of the relaxation of the matrix, thanks to a direct relation between the first exit time distribution of a particle undergoing Brownian motion in the matrix, and the matrix relaxation function directly related to the residence time distribution in the matrix [82, 97, 98]. The same method allows to



Figure 7. A percolation network p = 0.57, red = isolated clusters, black = backbone, green = dead-ends. The zoom on the right shows the underlying matrix in which CTRW are performed, in white. Reprinted (adapted) from Ref. [99]. Copyright 2020 with permission of Springer–Nature.



Figure 8. Exchange coefficient computed for the percolation network p = 0.57. Reprinted (adapted) from Ref. [99]. Copyright 2020 with permission of Springer–Nature.

compute the effective conductivity using Einstein relation for the mean square displacement of the diffusing particle inside the fracture domain. Such a method was implemented on fracture networks generated as 2D bond percolation Figure 7 [99].

In Figure 8, we plotted the dependence $p - p_c$ of the mean residence time $\langle t \rangle$ in the matrix (of diffusivity one unit) with respect to the proportion of active fractures. The different set of points correspond to different mean residence times $\langle t_{exit} \rangle$ *inside the matrix* that depend on the fracture subnetwork that was kept, i.e., all the fractures including non-relevant isolated clusters, or only the percolation backbone without dead ends. Intermediate curves correspond to different

treatments of the remaining clusters. One can note that keeping the whole set of fractures (red dots) (Figure 8) does not lead to any critical divergence of the mean residence times close to p_c . Further studies must be carried out to get a better characterization of the associated critical exponents. It can be remarked that these mean residence time that can have different values may represent relaxation associated to different transport models (pure diffusion in the matrix, diffusion in the fractures, or advection diffusion in the fractures). In practice, it means that the coupling coefficient determined by pressure tests (pure diffusion) on a given fractured reservoir may not be directly applicable to geothermal applications (advection dispersion in the fractures, heat diffusion in the matrix), that concerns the fracture network backbone.

1.4. Up-scaling, graph and random matrix theory

Fracture networks appear naturally as random graphs that provide Laplacian matrices In 2D cases, in which fractures may be viewed as 1D tubes, solving the dominant flow in the fracture network is stricly analogous to determine currents in a random resistor network, the nodes of which being the intersections between fractures [80]. It can be shown that such a construction can be carried out in 3D, even if the intersections between fractures are segments [81,82]. So, one is led to solve large linear systems of equation that reads

$$\forall i \sum_{j \in \langle i \rangle} T_{ij}(P_j - P_i) = Q_i \tag{5}$$

$$\sum_{i} P_i = 0.$$
(6)

The source terms Q_i are such that $\sum_i Q_j = 0$. The set of labels $\langle i \rangle$ denotes the set of vertices connected to vertex *i* by one edge. Note that it is also the case for discretized equations corresponding to Darcy flow in heterogeneous random systems discussed in Section 1.2. Considering the discrete equation corresponding to a Darcy problem, the set of $\langle i \rangle$ is essentially the 2D neighbours of a given cell (using other numerical techniques will essentially change this set of neighbours and the values of the T_{ij}). The coupling coefficients T_{ij} are related to the underlying conductivity maps [63]. In the fractured case, the set of neighbours $\langle i \rangle$ may be arbitrary large, so in that situation, two superimposed disorders are superimposed, one from the structure of the graph, the other from the T_{ij} 's. Gathering all the unknowns in N dimension vectors, the equations may be written under a more compact form $\mathbf{A} \cdot \mathbf{P} = \mathbf{Q}$. The operator \mathbf{A} appears as a random matrix corresponding to a weighted graph of an associated random conductivity network [85, 86, 100–103]. In the fractured case, these matrices may be treated using methods of graph theory [92, 93, 104, 105].

It appears interesting to study the distribution of the "small" eigenvalues of **A**, (as well as the corresponding eigenvectors), the null value having a multiplicity equal to the number of connected components of the associated graph [83]. Retaining one component, these eigenvalues may be denoted by $\lambda_1 = 0 \le \lambda_2 \le \lambda_q \le \lambda_{NC-1}$ n which N_c denotes the number of vertices of the retained connected component. In order to illustrate the idea, consider the case of a simple path graph (node *i* connected to nodes i - 1 and i + 1, at the exception of nodes 1 and N_c having only one connection). The corresponding linear system (6) can be solved easily by recursion, its solution may thus be averaged over the disorder of T_{ij} . This solution is itself given by the solution of an effective linear system sharing the same structure than the original one equation (6) by setting $T_{\text{eff}} = \langle T_{ij}^{-1} \rangle^{-1} = \langle T^{-1} \rangle^{-1}$. So in that simple case, the effective set of equations $\mathbf{A}_{\text{eff}} = \langle \mathbf{A}^{-1} \rangle^{-1}$ has a spectrum given by $\langle T^{-1} \rangle^{-1} 4 \sin^2(\pi q/2N_c)$. That spectrum is itself equivalent to $[\pi^2/N_c^2]q^2$ (small *q*) [83]. The reader should note that \mathbf{A}^{-1} has a well defined sense working on properly defined subspaces. In real space domain problems, small *q* corresponds to small frequencies (large length-scales). But studying small eigenvalues keeps a well-defined sense without being embedded in an Euclidean framework. On that aspect, homogenization theory states that for small *q*, a Laplacian

operator with oscillating coefficients behaves may be replaced by an effective laplacian with an effective conductivity $T_{\rm eff}$ [46], with eigenvalues scaling as $T_{\rm eff}$ [$4\pi^2/N^2$] q^2 (small q). Studying the small eigenvalue spectrum combined with self-averaging properties may lead to new results concerning up scaling: low frequency eigenvalues may behave as $T_{\rm eff}q^2$. This implies that in the case of a random graph with random weights T_{ii} , by identification of the distribution of the smallest eigenvalues, it could be possible to get an effective conductivity $T_{\rm eff}$, and an effective dimension D (possibly > 3 in case of highly connected media) that will characterize the average connectivity structure of the problem at hand. In particular, is it possible to propose a simple averaging formula such as $T_{\text{eff}} \simeq \langle T^{(1-2/D)} \rangle 1/(1-2/D)$? In the considered case, the so-called uncorrelated conductivity distribution has a well-defined sense, in opposition to the corresponding continuous limit in which this concept is basically meaningless [63, 106]. Assuming uncorrelated T_{ii} sharing the same probability distribution, A_{eff} must be related to the adjacency matrix of the graph of the average Laplacian matrix $\langle \mathbf{A} \rangle$. Considering the associated resolvent and Stieltjes transform will provide information about all the moments of the random matrix and also about its density of eigenvalues in the large N limit. In particular, the spectrum of such large matrices that depends randomly on the geological input parameters may provide information about the effective number of relevant degrees of freedom that must be retained to describe the system [107]. Depending on the degree of disorder, some eigenvalues of the associated Laplacian matrix can be expected to provide information while other eigenvalues may follow some universal distribution such as a Marchenko-Pastur distribution [108]. Such topics are deeply connected to classification methods by neural nets [109, 110].

1.5. Transport and mixing issues for passive and reactive flows

A classical issue is to be able to model the spreading of a passive tracer undergoing advection and diffusion/dispersion in a given steady state imposed flow in an heterogeneous/fractured medium. That issue motivated many approaches since the early approach of Saffman [3]. The porous medium was represented as a network of tubes connected at several pore intersections. The tracer spreading was thus represented as deterministic motion of the tracer particles inside the pores, being randomized by random choice of the pore at the intersection. This gives rise to a macroscopic dispersion, the overall motion of a cloud of tracer being described by the following equation:

$$\phi \frac{\partial C(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)C(\mathbf{r}, t)) = \nabla \cdot (\mathbf{D}\nabla C(\mathbf{r}, t)).$$
(7)

In that equation, $\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)$ denotes the Darcy velocity, which is divergence free, implying strong range spatial correlations. A great deal of efforts were carried-out at pore scale, including SP techniques, in order to relate the value of tensor \mathbf{D} to some descriptors of the velocity field and to the molecular diffusion coefficient [111, 112]. The basic mechanisms include Taylor dispersion [113, 114], and the amplification of spreading due to the presence of stagnation point of the flow. These points play the role of bifurcation like zones that over amplify local processes such as smaller scale diffusion/dispersion can be pointed out [115–117]. Specific random walk simulation techniques allow to estimate breakthrough times (BTC) for various Péclet numbers [99, 117], as illustrated in Figure 9 below: at a larger scale, stochastic hydrology [40, 42] techniques were developed to obtain an up-scaled description of the tracer motion. The approach starts from a Darcy scale description that includes an input dispersion tensor $\mathbf{D}_{\text{eff}} \simeq \langle U \rangle \sigma_{\text{Log } k}^2 l_c$ that accounts for subscale effects, that is the so called macrodispersion phenomenon that yields a large scale Fickian like description, as soon as the spatial correlations of the conductivity are short-ranged. In that context, the second order moment of the tracer spreading grows linearly with time. In another study, Matheron and de Marsily [118] shown that transverse diffusion effects on a stratified



Figure 9. Left: three-dimensional visualization of the pore network (blue) and the connected microporosity (yellow) for a sub-volume of 1203 voxels of the (0.8 mm³) Berea sandstone sample studied by [117]. Right: BTCs for pore-scale mobile-immobile transport through the Berea sample for different values of the Peclet number computed by TDRW, Reprinted (adapted) from Ref. [99]. Copyright 2020 with permission of Springer–Nature.

flow may lead to non-diffusive over all behaviour for the longitudinal dispersion. This surprising phenomenon is mainly due to the strong probability of return to the origin regarding transverse diffusion that creates long time tail correlations leading to superdiffusion in the direction of stratification that has an infinite correlation scale. Many contributions, including the one of [119, 120] led to more general descriptions. In another study, renormalization-group ideas "à la Wilson" were set-up to compute the spreading of a tracer in a heterogeneous medium [121]. Field applications provide encouraging results. At the pore and core scale, anomalous dispersion effect leading to a description in terms of fractional derivatives were proposed [122–126]. NMR techniques allow to determine the "anomalous" parameters from laboratory tracer experiments. In the case of fractured media, approaches combining anomalous transport concepts and multiple media ideas may be combined to advanced continuous time random walk techniques [92,93,95,99,127]. This results in the possible emergence of robust stable laws that can be tested on real field experiments. A major related issue of interest that must be addressed in the case of reactive flows is to describe the intimate mixing occurring between fluids flowing in porous media, in which the useful concept of lamella diffusion appears to be very promising [27, 128–131].

1.6. Non-linear issues, coupling between the quenched disorder and flow instabilities

In this section, we are interested by strongly non-linear processes that arise in two phase flow displacements by fluids having different mobilities in the rock. This can be the case of water displacing oil, of CO_2 injection etc...This issue gives rise to the well-known Saffman–Taylor instability called viscous fingering if the displacing fluid is more mobile than the fluid initially in place [132]. Due to its importance for the secondary oil recovery applications (displacing oil with water), this seminal work gave rise to many subsequent works [10, 133–135]. Many SP concepts such as diffusion limited aggregation (DLA) corresponding to the extreme case of air displacing a liquid, fractals were illustrated by experiments involving fingering [10]. The question of the selection of the ultimate finger pattern received many attention [136] in the eighties.

Many of these studies were performed in Hele-Shaw cells on in well-controlled micromodels. Analogous phenomena occur in natural porous media, and the stability criteria can be adapted using the standard description of two phase flow using relative permeability concepts in 3D rocks, as it was explained in the relatively ignored paper of King and Dunayevsky [137] and references therein. It is well known that in that case, it appears a well defined sharp front separating the fluid originally in place and a rich phase that moves at the local velocity of the fluid, as shown in Figure 10, top. That front may become in turn unstable, by the same mechanism than the Saffman–Taylor instability, as shown in Figure 10, bottom. That phenomena arises from the coupling between the fluid motion and the up dating of the local mobility, the criterion being the so-called total mobility jump evaluated ahead and behind the front. The finger selection process is mainly controlled by the underlying heterogeneity of the rock. It is easy to understand that a highly mobile fluid will follow high velocity paths, its presence amplifying thus that advantage by a positive feed-back loop. This is the so called channeling issue. This problem was addressed by De Wit and Homsy [138, 139], and revisited in the stochastic context by [140–142]. The idea of the latter contributions was to adapt the theory developed by King and Dunayevsky [137] using single phase flow perturbation theory techniques. The underlying equations reads:

$$\nabla \cdot [\lambda(S(\mathbf{r}, t))k(\mathbf{r})\nabla p(\mathbf{r}, t)] = 0$$
(8)

$$\phi \frac{\partial S(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla \cdot (f(S(\mathbf{r}, t))\mathbf{U}(\mathbf{r}, t)) = 0$$
(9)

$$\mathbf{U}(\mathbf{r},t) = -\lambda(S(\mathbf{r},t))k(\mathbf{r})\nabla p(\mathbf{r},t).$$
(10)

Here, $(S(\mathbf{r}, t))$, $\lambda(S(\mathbf{r}, t))$ and $f(S(\mathbf{r}, t)S)$ denote respectively the water saturation (local % of water, total mobility and the so-called fractional flow of water). This set of coupled equations may be solved numerically (it is at the heart of any multiphase flow in porous media simulator, to which additional complexities such as phase transitions and boundary condition management must be added). The saturation equation (9) is hyperbolic, leading to the formation of a shock front, whose stability is controlled by the jump of the total mobility $\lambda(S(\mathbf{r}, t))$ at the front.

The technical difficulty for setting-up a perturbation expansion comes from the presence of the front that implies a mobility jump that renders perturbation theory a bit tricky [137, 141]. The difficulty may be avoided by a suitable change of variable, using a working variable x(S, y, t) rather than S(x, y, t). It is thus possible to introduce the function $x(S_f, t)$, in which S_f is the saturation of water just behind the front M_f is the corresponding total mobility jump $M_f = \lambda(S_f)/\lambda(S = 0)$. The randomness of the underlying conductivity field propagates to the randomness of $x(S_f, t)$, of average value $\langle \mathbf{U} \rangle \mathbf{t}$. At long times, the associated two point correlation function can be shown to converge to a well defined function in the stable case, while in unstable case it diverges, a manifestation of the spreading of the front (even if some logarithmic singularities are remaining, due to the singular character of the instability at large wavelengths [143, 144]). A possible approach of practical interest close to the single phase flow approach would be to look at an effective equation driving the ensemble-averaged water saturation $\langle S(\mathbf{r}, \mathbf{t}) \rangle$, or the Y-averaged saturation S(x, t). A diffusive regime arises in the case $M_f = 1$, that corresponds to a marginal stability criterion (corresponding to an order parameter of a phase transition), leading to a macrodispersion equation similar to (7). In the general case, several proposals were reported long ago for characterizing the emerging large scale transport equation [145–149]. In the unstable case, one can consider that long fingers parallel to the imposed flow may be treated as a stratified medium. This leads to modify the fractional flow function with an *ad-hoc* change [145]. In the stable case, it can be shown that the competition between the disorder that distorts the front and the viscous forces that tends to sharpen the front [141] must lead to another form of the effective fractional flow, including some macrodispersion representing the net effect of the averaged disorder. In the infinite



Figure 10. Simulated dynamics of a two phase flow front in a heterogeneous rock, imposed mean flow from left to right, underlying random log normally distributed conductivity map top (a) stable case, (b) *Y* averaged saturation at different times, bottom (c) fingering in the unstable case, (d) associated *Y*-averaged saturation at different times.

contrast case (e.g. immiscible gas injection) diffusion limited aggregation (DLA) models were proposed, leading to a very rich literature involving percolation invasion models, fractals [150–153] with many contributions of SP.

1.7. Conclusions and some perspectives

In that short review, some connections between statistical physics approaches and applied geosciences were presented. These connections are not new and are continuously enriching both communities. At the molecular scales, SP techniques including molecular dynamics tools help to find the form of the constitutive relation relating fluxes to gradient of potential, even for charged real fluids in extremely confined environments. At pore scale, SP may help to describe complex multiphase flow, in particular [19] and by improving lattice Boltzmann methods.

In practice, an essential feature of these natural systems is their overall insufficient characterization, implying that the modeller must find the optimal balance between the details of the model, and the lack of information. A very beautiful model, but completely over-parameterized can be useless [73]. So, one of the first task of the modeller is to be able to identify flow regimes, and the aggregates of most relevant input parameters by means of phase diagrams highlighting the most relevant parameters that control the overall behaviour of the system. Geoscientists must manage huge parameter space and the propagation of the uncertainties due to the lack of an exhaustive description of the system. SP tools help to understand the role of the quenched disorder of the medium present at all scales. Drawing the "phase diagram" of the problem at hand, i.e. the set of dominant parameters controlling the overall behaviour of the system, and providing descriptions of the critical behaviour of the system between the different regions of the phase diagram. Providing coarse renormalized equations describing averaged potential spatial variations, or tracer spreading moments with accuracy with few parameters is a promising approach [154, 155]. Studying the strong coupling (competition or amplification) between the disorder of the porous medium, and the development of viscous and gravitational instabilities such as Saffman–Taylor viscous fingering remains a deep issue. Focusing on the front dynamics moving in a random medium using some KPZ like approaches [156] could be a rich research avenue. A combination of the methods developed by King and Dunayevsky [137, 141] and of stochastic perturbation theory could be an interesting approach, although the existence of a local equation driving the front dynamics remains questionable, in view of the long range character of the Laplace equation Green's function. Such approaches could help to improve empirical descriptions [132, 141, 142, 149, 156, 157].

Studying self-organization phenomena that arise once the transport processes at hand modify the porous media structure with a strong feed-back, implying a strong non-linear coupling [71, 158, 159] using SP concepts is a major research avenue. For engineers, this may help to constrain the parameter space of the problem at hand, in particular the stochastic models of discrete fracture networks that may be over parameterized. These models are close to morphogenesis models of SP [160–162] that may help to describe overall fracture network organization. Such models may be relevant in the context of geomorphology, that could in turn provide some information about the statistical properties of the quenched disorder that was discussed throughout the paper. Those topics involving advanced geoscience and SP concepts, coupled to global climate evolution are well beyond the scope of present paper [153, 163–165].

Subsurface is intrinsically a quenched system that falls in the area of spin glasses issues [62]. The considerable number of degrees of freedom made it a natural candidate for using big data and/or artificial intelligence techniques in order to help the engineers to manage their intrinsic complexity, and to select the most relevant approaches and parameters. As ir was suggested in Section 1.4, studying the spectrum of such large random matrices depending on the geological input parameters may provide information about the effective number of relevant degrees of freedom that must be retained to describe the system [107]. Depending on the degree of disorder, some eigenvalues of the associated Laplacian matrix can be expected to provide information while other eigenvalues may follow some universal distribution such as a Marchenko-Pastur distribution [108]. Such topics are deeply connected to classification methods by neural nets [109, 110]. This set of techniques may be relevant for solving the inverse problems (modifying the model parameters or the model itself to account for continuously arriving data). Such inverse problems may be solve by minimizing a suitable error functional accounting for both these data and prior information [166–169]. All these topics are connected to each other by means of recent developments of spin glass theories [62, 170] that provide useful approaches and algorithms to provide rigorous and operational foundations to uncertainty management allowing to make the best decision with large random parameter sets associated with complex physics. We expect that this short overview highlights numerous applications of statistical physics to applied geosciences and that it will stimulate discussions to build bridges between very active areas of research in statistical physics and geosciences.

Acknowledgments

The author is indebted to Mrs Mickaële le Ravalec, Pauline Simonnin and MM Vincent Artus, Alejandro Boschan, Ivan Colecchio, Fred Delay, Marco Dentz, André Fourno, Philippe Gouze, Tri Dat Ngo, Alejandro Otero, Ludovic Ricard, Benjamin Rotenberg for their useful contributions.

References

- [1] A. E. Scheidegger, "Statistical hydrodynamics in porous media", J. Appl. Phys. 25 (1954), no. 8, p. 994-1001.
- [2] A. E. Scheidegger, "The physics of flow through porous media", Soil Sci. 86 (1958), no. 6, p. 355.
- [3] P. Saffman, "A theory of dispersion in a porous medium", J. Fluid Mech. 6 (1959), no. 3, p. 321-349.
- [4] A. E. Scheidegger, E. F. Johnson, "The statistical behavior of instabilities in displacement processes in porous media", *Canad. J. Phys.* **39** (1961), no. 2, p. 326-334.
- [5] A. Guadagnini, M. Riva, S. P. Neuman, "Recent advances in scalable non-Gaussian geostatistics: the generalized sub-Gaussian model", J. Hydrol. 562 (2018), p. 685-691.
- [6] S. Gorell, R. Bassett *et al.*, "Trends in reservoir simulation: big models, scalable models? Will you please make up your mind?", in *SPE Annual Technical Conference and Exhibition*, Society of Petroleum Engineers, 2001.
- [7] F. J. Floris, M. Bush, M. Cuypers, F. Roggero, A. R. Syversveen, "Methods for quantifying the uncertainty of production forecasts: a comparative study", *Petrol. Geosci.* 7 (2001), no. S, p. S87-S96.
- [8] N. Deichmann, D. Giardini, "Earthquakes induced by the stimulation of an enhanced geothermal system below Basel (Switzerland)", Seismol. Res. Lett. 80 (2009), no. 5, p. 784-798.
- [9] H. Loáiciga, D. R. Maidment, J. B. Valdes, "Climate-change impacts in a regional karst aquifer, Texas, USA", J. Hydrol. 227 (2000), no. 1–4, p. 173-194.
- [10] P. Tabeling, G. Zocchi, A. Libchaber, "An experimental study of the Saffman–Taylor instability", in *Dynamics of Curved Fronts*, Academic Press, 1988, p. 219-234.
- [11] D. H. Rothman, S. Zaleski, "Lattice-gas models of phase separation: interfaces, phase transitions, and multiphase flow", *Rev. Mod. Phys.* 66 (1994), no. 4, p. 1417.
- [12] Y.-L. He, Q. Liu, Q. Li, W.-Q. Tao, "Lattice Boltzmann methods for single-phase and solid–liquid phase-change heat transfer in porous media: a review", *Intl J. Heat Mass Transfer* 129 (2019), p. 160-197.
- [13] H. P. G. Darcy, Les Fontaines publiques de la ville de Dijon. Exposition et application des principes à suivre et des formules à employer dans les questions de distribution d'eau, etc, Dalmont, Paris, 1856.
- [14] G. Matheron, Eléments pour une théorie des milieux poreux, Masson, Paris, 1967.
- [15] S. Whitaker, "Flow in porous media I: a theoretical derivation of Darcy's law", *Trans. Porous Med.* 1 (1986), no. 1, p. 3-25.
- [16] G. Allaire, "Prolongement de la pression et homogénéisation des équations de Stokes dans un milieu poreux connexe", C. R. Acad. Sci. Paris 309 (1989), p. 717-722.
- [17] G. Allaire, "One-phase Newtonian flow", in Homogenization and Porous Media, Springer, New York, 1997, p. 45-76.
- [18] J. Koplik, J. R. Banavar, J. F. Willemsen, "Molecular dynamics of Poiseuille flow and moving contact lines", *Phys. Rev. Lett.* 60 (1988), no. 13, p. 1282.
- [19] U. Lãcis, P. Johansson, T. Fullana, B. Hess, G. Amberg, S. Bagheri, S. Zaleski, "Steady moving contact line of water over a no-slip substrate: Challenges in benchmarking phase-field and volume-of-fluid methods against molecular dynamics simulations", *Eur. Phys. J. Spec. Top.* 229 (2020), no. 10, p. 1897-1921.
- [20] L. Bocquet, J.-L. Barrat, "Flow boundary conditions from nano-to micro-scales", Soft Matt. 3 (2007), no. 6, p. 685-693.
- [21] C. Cottin-Bizonne, S. Jurine, J. Baudry, J. Crassous, F. Restagno, E. Charlaix, "Nanorheology: an investigation of the boundary condition at hydrophobic and hydrophilic interfaces", *Eur. Phys. J. E* **9** (2002), no. 1, p. 47-53.
- [22] L. Bocquet, E. Charlaix, "Nanofluidics, from bulk to interfaces", Chem. Soc. Rev. 39 (2010), no. 3, p. 1073-1095.
- [23] P. Simonnin, B. Noetinger, C. Nieto-Draghi, V. Marry, B. Rotenberg, "Diffusion under confinement: hydrodynamic finite-size effects in simulation", J. Chem. Theory Comput. 13 (2017), no. 6, p. 2881-2889.
- [24] R. M. Shroll, D. E. Smith, "Molecular dynamics simulations in the grand canonical ensemble: application to clay mineral swelling", J. Chem. Phys. 111 (1999), no. 19, p. 9025-9033.
- [25] A. Botan, B. Rotenberg, V. Marry, P. Turq, B. Noetinger, "Carbon dioxide in montmorillonite clay hydrates: thermodynamics, structure, and transport from molecular simulation", J. Phys. Chem. C 114 (2010), no. 35, p. 14962-14969.
- [26] A. C. Rocha, M. A. Murad, C. Moyne, S. P. Oliveira, T. D. Le, "A new methodology for computing ionic profiles and disjoining pressure in swelling porous media", *Comput. Geosci.* 20 (2016), no. 5, p. 975-996.
- [27] T. D. Le, C. Moyne, M. A. Murad, I. Panfilova, "A three-scale poromechanical model for swelling porous media incorporating solvation forces: application to enhanced coalbed methane recovery", *Mech. Mater.* 131 (2019), p. 47-60.
- [28] G. Galliéro, J. Colombani, P. A. Bopp, B. Duguay, J.-P. Caltagirone, F. Montel, "Thermal diffusion in micropores by molecular dynamics computer simulations", *Phys. A* 361 (2006), no. 2, p. 494-510.
- [29] D. Ameur, G. Galliéro, "Slippage of binary fluid mixtures in a nanopore", *Microfluid. Nanofluid.* 15 (2013), no. 2, p. 183-189.
- [30] P. Simonnin, V. Marry, B. Noetinger, C. Nieto-Draghi, B. Rotenberg, "Mineral-and ion-specific effects at clay-water interfaces: structure, diffusion, and hydrodynamics", J. Phys. Chem. C 122 (2018), no. 32, p. 18484-18492.

Benoît Noetinger

- [31] I.-C. Yeh, G. Hummer, "System-size dependence of diffusion coefficients and viscosities from molecular dynamics simulations with periodic boundary conditions", J. Phys. Chem. B 108 (2004), no. 40, p. 15873-15879.
- [32] O. Plümper, A. Botan, C. Los, Y. Liu, A. Malthe-Sørenssen, B. Jamtveit, "Fluid-driven metamorphism of the continental crust governed by nanoscale fluid flow", *Nat. Geosci.* 10 (2017), no. 9, p. 685-690.
- [33] B. Rotenberg, V. Marry, J.-F. Dufrêche, N. Malikova, E. Giffaut, P. Turq, "Modelling water and ion diffusion in clays: a multiscale approach", C. R. Chim. 10 (2007), no. 10–11, p. 1108-1116.
- [34] R. Shukla, P. Ranjith, A. Haque, X. Choi, "A review of studies on CO₂ sequestration and caprock integrity", *Fuel* 89 (2010), no. 10, p. 2651-2664.
- [35] N. Sobecki, C. Nieto-Draghi, A. Di Lella, D. Y. Ding, "Phase behavior of hydrocarbons in nano-pores", *Fluid Phase Equilib.* 497 (2019), p. 104-121.
- [36] A. Siria, P. Poncharal, A.-L. Biance, R. Fulcrand, X. Blase, S. T. Purcell, L. Bocquet, "Giant osmotic energy conversion measured in a single transmembrane boron nitride nanotube", *Nature* 494 (2013), no. 7438, p. 455-458.
- [37] G. Matheron, "Principles of geostatistics", Econ. Geol. 58 (1963), no. 8, p. 1246-1266.
- [38] G. De Marsily, F. Delay, J. Gonçalvès, P. Renard, V. Teles, S. Violette, "Dealing with spatial heterogeneity", *Hydrogeol. J.* 13 (2005), no. 1, p. 161-183.
- [39] J.-P. Chiles, P. Delfiner, Geostatistics: Modeling Spatial Uncertainty, Vol. 497, John Wiley & Sons, New York, 2009.
- [40] L. W. Gelhar, *Stochastic Subsurface Hydrology*, Prentice-Hall, New York, 1993.
- [41] D. T. Hristopulos, Random Fields for Spatial Data Modeling A Primer for Scientists and Engineers, Springer, Netherlands, 2020.
- [42] G. Dagan, Flow and Transport in Porous Formations, Springer-Verlag GmbH & Co. KG, 1989.
- [43] P. Indelman, B. Abramovich, "A higher-order approximation to effective conductivity in media of anisotropic random structure", *Water Resour. Res.* 30 (1994), no. 6, p. 1857-1864.
- [44] B. Abramovich, P. Indelman, "Effective permittivity of log-normal isotropic random media", J. Phys. A 28 (1995), no. 3, p. 693.
- [45] V. V. Jikov, S. M. Kozlov, O. A. Oleinik, Homogenization of Differential Operators and Integral Functionals, Springer Science & Business Media, Berlin, Heidelberg, 2012.
- [46] S. Armstrong, T. Kuusi, J.-C. Mourrat, Quantitative Stochastic Homogenization and Large-Scale Regularity, Vol. 352, Springer, Cham, Switzerland, 2019.
- [47] P. King, "The use of renormalization for calculating effective permeability", *Trans. Porous Med.* **4** (1989), no. 1, p. 37-58.
- [48] B. Noetinger, "The effective permeability of a heterogeneous porous medium", *Trans. Porous Med.* 15 (1994), p. 99-127.
- [49] D. Hristopulos, G. Christakos, "Renormalization group analysis of permeability upscaling", Stoch Environ. Res. Risk Assess. 13 (1999), no. 1–2, p. 131-161.
- [50] B. Nœtinger, "Computing the effective permeability of log-normal permeability fields using renormalization methods", C. R. Acad. Sci. - Ser. IIA - Earth Planet. Sci. 331 (2000), no. 5, p. 353-357.
- [51] S. Attinger, "Generalized coarse graining procedures for flow in porous media", *Comput. Geosci.* 7 (2003), no. 4, p. 253-273.
- [52] J. Eberhard, S. Attinger, G. Wittum, "Coarse graining for upscaling of flow in heterogeneous porous media", *Multiscale Model. Simul.* 2 (2004), no. 2, p. 269-301.
- [53] E. Teodorovich, "Renormalization group method in the problem of the effective conductivity of a randomly heterogeneous porous medium", *J. Expl Theoret. Phys.* **95** (2002), no. 1, p. 67-76.
- [54] Y. A. Stepanyants, E. Teodorovich, "Effective hydraulic conductivity of a randomly heterogeneous porous medium", *Water Resour. Res.* 39 (2003), no. 3, p. 360-373.
- [55] J. C. Maxwell, A Treatise on Electricity and Magnetism, Vol. 1, Clarendon Press, Oxford, 1873.
- [56] L. Landau, E. Lifshitz, Electrodynamics of Continuous Media, Vol. 8, Pergamon, New York, 1960, 41-43 pages.
- [57] Z. Hashin, S. Shtrikman, "A variational approach to the theory of the effective magnetic permeability of multiphase materials", J. Appl. Phys. 33 (1962), no. 10, p. 3125-3131.
- [58] B. Berkowitz, I. Balberg, "Percolation theory and its application to groundwater hydrology", Water Resour. Res. 29 (1993), no. 4, p. 775-794.
- [59] A. Hunt, R. Ewing, B. Ghanbarian, Percolation Theory for Flow in Porous Media, Vol. 880, Springer, Cham, Switzerland, 2014.
- [60] P. King, "The use of field theoretic methods for the study of flow in a heterogeneous porous medium", J. Phys. A 20 (1987), no. 12, p. 3935.
- [61] B. Noetinger, Y. Gautier, "Use of the Fourier–Laplace transform and of diagrammatical methods to interpret pumping tests in heterogeneous reservoirs", *Adv. Water Resour.* **21** (1998), no. 7, p. 581-590.
- [62] M. Mézard, G. Parisi, M. Virasoro, Spin Glass Theory and Beyond: An Introduction to the Replica Method and its Applications, Vol. 9, World Scientific Publishing Company, Singapore, 1987.
- [63] I. Colecchio, A. Boschan, A. D. Otero, B. Noetinger, "On the multiscale characterization of effective hydraulic

conductivity in random heterogeneous media: a historical survey and some new perspectives", *Adv. Water Resour.* (2020), article no. 103594.

- [64] P. Renard, G. De Marsily, "Calculating equivalent permeability: a review", Adv. Water Resour. 20 (1997), no. 5, p. 253-278.
- [65] G. Dagan, "Higher-order correction of effective permeability of heterogeneous isotropic formations of lognormal conductivity distribution", *Trans. Porous Med.* 12 (1993), no. 3, p. 279-290.
- [66] A. De Wit, "Correlation structure dependence of the effective permeability of heterogeneous porous media", *Phys. Fluids* 7 (1995), no. 11, p. 2553-2562.
- [67] S. P. Neuman, S. Orr, "Prediction of steady state flow in nonuniform geologic media by conditional moments: exact nonlocal formalism, effective conductivities, and weak approximation", *Water Resour. Res.* 29 (1993), no. 2, p. 341-364.
- [68] D. J. Amit, V. Martin-Mayor, *Field Theory, the Renormalization Group, and Critical Phenomena: Graphs to Computers*, 3rd ed., World Scientific Publishing Company, Singapore, 2005.
- [69] E. Charlaix, E. Guyon, S. Roux, "Permeability of a random array of fractures of widely varying apertures", *Trans. Porous Med.* 2 (1987), no. 1, p. 31-43.
- [70] D. Stauffer, A. Aharony, Introduction to Percolation Theory, revised 2nd ed., Taylor & Francis, London, Philadelphia, 2014.
- [71] M. Adda-Bedia, Y. Pomeau, "Crack instabilities of a heated glass strip", Phys. Rev. E 52 (1995), no. 4, p. 4105.
- [72] G. I. Barenblatt, I. P. Zheltov, I. Kochina, "Basic concepts in the theory of seepage of homogeneous liquids in fissured rocks [strata]", J. Appl. Math. Mech. 24 (1960), no. 5, p. 1286-1303.
- [73] B. Bourbiaux, "Fractured reservoir simulation: a challenging and rewarding issue", Oil Gas Sci. Technol.-Revue de l'Institut Français du Pétrole 65 (2010), no. 2, p. 227-238.
- [74] O. Bour, P. Davy, "Connectivity of random fault networks following a power law fault length distribution", Water Resour. Res. 33 (1997), no. 7, p. 1567-1583.
- [75] J.-R. De Dreuzy, P. Davy, O. Bour, "Hydraulic properties of two-dimensional random fracture networks following power law distributions of length and aperture", *Water Resour. Res.* 38 (2002), no. 12, p. 12-1.
- [76] J. Maillot, P. Davy, R. Le Goc, C. Darcel, J.-R. De Dreuzy, "Connectivity, permeability, and channeling in randomly distributed and kinematically defined discrete fracture network models", *Water Resour. Res.* 52 (2016), no. 11, p. 8526-8545.
- [77] P. M. Adler, J.-F. Thovert, Fractures and Fracture Networks, Vol. 15, Springer Science & Business Media, Dordrecht, 1999.
- [78] M. Sahimi, Flow and Transport in Porous Media and Fractured Rock: From Classical Methods to Modern Approaches, John Wiley & Sons, Germany, 2011.
- [79] A. G. Hunt, M. Sahimi, "Flow, transport, and reaction in porous media: percolation scaling, critical-path analysis, and effective medium approximation", *Rev. Geophys.* 55 (2017), no. 4, p. 993-1078.
- [80] J. A. Acuna, Y. C. Yortsos, "Application of fractal geometry to the study of networks of fractures and their pressure transient", *Water Resour. Res.* 31 (1995), no. 3, p. 527-540.
- [81] B. Nœtinger, N. Jarrige, "A quasi steady state method for solving transient Darcy flow in complex 3D fractured networks", J. Comput. Phys. 231 (2012), no. 1, p. 23-38.
- [82] B. Nœtinger, "A quasi steady state method for solving transient Darcy flow in complex 3D fractured networks accounting for matrix to fracture flow", J. Comput. Phys. 283 (2015), p. 205-223.
- [83] B. Mohar, Y. Alavi, G. Chartrand, O. Oellermann, "The Laplacian spectrum of graphs", *Graph Theory, Combin. Appl.* 2 (1991), no. 871–898, p. 12.
- [84] B. Mohar, "Some applications of Laplace eigenvalues of graphs", in *Graph Symmetry*, Springer, Dordrecht, 1997, p. 225-275.
- [85] M. Bauer, O. Golinelli, "Core percolation in random graphs: a critical phenomena analysis", *Eur. Phys. J. B* 24 (2001), no. 3, p. 339-352.
- [86] M. Bauer, O. Golinelli, "Random incidence matrices: moments of the spectral density", J. Stat. Phys. 103 (2001), no. 1–2, p. 301-337.
- [87] D. Bauer, L. Talon, A. Ehrlacher, "Computation of the equivalent macroscopic permeability tensor of discrete networks with heterogeneous segment length", J. Hydraul. Eng. 134 (2008), no. 6, p. 784-793.
- [88] C. Bordenave, M. Lelarge, "Resolvent of large random graphs", Random Struct. Algorith. 37 (2010), no. 3, p. 332-352.
- [89] G. Semerjian, L. F. Cugliandolo, "Sparse random matrices: the eigenvalue spectrum revisited", J. Phys. A 35 (2002), no. 23, p. 4837.
- [90] B. Karrer, M. E. Newman, L. Zdeborová, "Percolation on sparse networks", Phys. Rev. Lett. 113 (2014), no. 20, article no. 208702.
- [91] S. Karra, D. O'Malley, J. Hyman, H. S. Viswanathan, G. Srinivasan, "Modeling flow and transport in fracture networks using graphs", *Phys. Rev. E* 97 (2018), no. 3, article no. 033304.

- [92] J. D. Hyman, A. Hagberg, G. Srinivasan, J. Mohd-Yusof, H. Viswanathan, "Predictions of first passage times in sparse discrete fracture networks using graph-based reductions", *Phys. Rev. E* 96 (2017), no. 1, article no. 013304.
- [93] J. D. Hyman, M. Dentz, A. Hagberg, P. K. Kang, "Emergence of stable laws for first passage times in threedimensional random fracture networks", *Phys. Rev. Lett.* 123 (2019), no. 24, article no. 248501.
- [94] P. Landereau, B. Noetinger, M. Quintard, "Quasi-steady two-equation models for diffusive transport in fractured porous media: large-scale properties for densely fractured systems", Adv. Water Resour. 24 (2001), no. 8, p. 863-876.
- [95] R. Haggerty, S. M. Gorelick, "Multiple-rate mass transfer for modeling diffusion and surface reactions in media with pore-scale heterogeneity", *Water Resour. Res.* **31** (1995), no. 10, p. 2383-2400.
- [96] T. Babey, J.-R. De Dreuzy, C. Casenave, "Multi-rate mass transfer (MRMT) models for general diffusive porosity structures", Adv. Water Resour. 76 (2015), p. 146-156.
- [97] B. Noetinger, T. Estebenet, "Up-scaling of double porosity fractured media using continuous-time random walks methods", *Trans. Porous Med.* **39** (2000), no. 3, p. 315-337.
- [98] B. Noetinger, T. Estebenet, P. Landereau, "A direct determination of the transient exchange term of fractured media using a continuous time random walk method", *Trans. Porous Med.* 44 (2001), no. 3, p. 539-557.
- [99] B. Noetinger, D. Roubinet, A. Russian, T. Le Borgne, F. Delay, M. Dentz, J.-R. De Dreuzy, P. Gouze, "Random walk methods for modeling hydrodynamic transport in porous and fractured media from pore to reservoir scale", *Trans. Porous Med.* 115 (2016), no. 2, p. 345-385.
- [100] M. L. Mehta, Random Matrices, Elsevier, Netherlands, 2004.
- [101] T. Rogers, I. P. Castillo, R. Kühn, K. Takeda, "Cavity approach to the spectral density of sparse symmetric random matrices", *Phys. Rev. E* 78 (2008), no. 3, article no. 031116.
- [102] M. Biskup et al., "Recent progress on the random conductance model", Probab. Surv. 8 (2011), p. 294-373.
- [103] M. Potters, J.-P. Bouchaud, A First Course in Random Matrix Theory, Cambridge University Press, 2019, in press.
- [104] M. Valera, Z. Guo, P. Kelly, S. Matz, V. A. Cantu, A. G. Percus, J. D. Hyman, G. Srinivasan, H. S. Viswanathan, "Machine learning for graph-based representations of three-dimensional discrete fracture networks", *Comput. Geosci.* 22 (2018), no. 3, p. 695-710.
- [105] D. O'Malley, S. Karra, J. Hyman, H. S. Viswanathan, G. Srinivasan, "Efficient Monte Carlo with graph-based subsurface flow and transport models", *Water Resour. Res.* 54 (2018), no. 5, p. 3758-3766.
- [106] R. Romeu, B. Noetinger, "Calculation of internodal transmissivities in finite difference models of flow in heterogeneous porous media", *Water Resour. Res.* 31 (1995), no. 4, p. 943-959.
- [107] G. Biroli, J.-P. Bouchaud, M. Potters, "Extreme value problems in random matrix theory and other disordered systems", J. Statist. Mech.: Theory Exp. 2007 (2007), no. 07, article no. 07019.
- [108] V. A. Marchenko, L. A. Pastur, "Distribution of eigenvalues for some sets of random matrices", *Mat. Sborn.* **114** (1967), no. 4, p. 507-536.
- [109] C. Louart, Z. Liao, R. Couillet *et al.*, "A random matrix approach to neural networks", *Ann. Appl. Probab.* 28 (2018), no. 2, p. 1190-1248.
- [110] L. Dall'Amico, R. Couillet, N. Tremblay, "Classification spectrale par la laplacienne déformée dans des graphes réalistes", in XXVII^{ème} colloque GRETSI (GRETSI 2019), Aug 2019, lille, France, 2019, hal-02153901.
- [111] D. L. Koch, J. F. Brady, "Dispersion in fixed beds", J. Fluid Mech. 154 (1985), p. 399-427.
- [112] D. L. Koch, J. F. Brady, "Anomalous diffusion in heterogeneous porous media", *Phys. Fluids* **31** (1988), no. 5, p. 965-973.
- [113] G. I. Taylor, "Conditions under which dispersion of a solute in a stream of solvent can be used to measure molecular diffusion", Proc. R. Soc. Lond. A. Math. Phys. Sci. 225 (1954), no. 1163, p. 473-477.
- [114] P. Saffman, "Dispersion due to molecular diffusion and macroscopic mixing in flow through a network of capillaries", *J. Fluid Mech.* **7** (1960), no. 2, p. 194-208.
- [115] C. Baudet, E. Guyon, Y. Pomeau, "Dispersion dans un écoulement de Stokes", J. Phys. Lett. 46 (1985), no. 21, p. 991-998.
- [116] E. Flekkøy, U. Oxaal, J. Feder, T. Jøssang, "Hydrodynamic dispersion at stagnation points: simulations and experiments", *Phys. Rev. E* 52 (1995), no. 5, p. 4952.
- [117] E. Gjetvaj, A. Russian, P. Gouze, M. Dentz, "Dual control of flow field heterogeneity and immobile porosity on non-Fickian transport in Berea sandstone", *Water Resour. Res.* **51** (2015), no. 10, p. 8273-8293.
- [118] G. Matheron, G. De Marsily, "Is transport in porous media always diffusive? A counterexample", *Water Resour. Res.* 16 (1980), no. 5, p. 901-917.
- [119] J.-P. Bouchaud, A. Georges, "Anomalous diffusion in disordered media: statistical mechanisms, models and physical applications", *Phys. Rep.* 195 (1990), no. 4–5, p. 127-293.
- [120] J.-P. Bouchaud, A. Georges, J. Koplik, A. Provata, S. Redner, "Superdiffusion in random velocity fields", *Phys. Rev. Lett.* 64 (1990), no. 21, p. 2503.
- [121] U. Jaekel, H. Vereecken, "Renormalization group analysis of macrodispersion in a directed random flow", Water Resour. Res. 33 (1997), no. 10, p. 2287-2299.

- [122] M. D. Hürlimann, L. M. Schwartz, P. N. Sen, "Probability of return to the origin at short times: a probe of microstructure in porous media", *Phys. Rev. B* 51 (1995), no. 21, p. 14936.
- [123] N. Krepysheva, L. Di Pietro, M.-C. Néel, "Space-fractional advection-diffusion and reflective boundary condition", *Phys. Rev. E* 73 (2006), no. 2, article no. 021104.
- [124] A. Zoia, M.-C. Néel, A. Cortis, "Continuous-time random-walk model of transport in variably saturated heterogeneous porous media", *Phys. Rev. E* 81 (2010), no. 3, article no. 031104.
- [125] V. Guillon, M. Fleury, D. Bauer, M.-C. Neel, "Superdispersion in homogeneous unsaturated porous media using NMR propagators", *Phys. Rev. E* 87 (2013), no. 4, article no. 043007.
- [126] M.-C. Néel, D. Bauer, M. Fleury, "Model to interpret pulsed-field-gradient NMR data including memory and superdispersion effects", *Phys. Rev. E* 89 (2014), no. 6, article no. 062121.
- [127] M. Dentz, T. Le Borgne, A. Englert, B. Bijeljic, "Mixing, spreading and reaction in heterogeneous media: a brief review", J. Contam. Hydrol. 120 (2011), p. 1-17.
- [128] T. Le Borgne, M. Dentz, D. Bolster, J. Carrera, J.-R. de Dreuzy, P. Davy, "Non-Fickian mixing: temporal evolution of the scalar dissipation rate in heterogeneous porous media", Adv. Water Resour. 33 (2010), no. 12, p. 1468-1475.
- [129] T. Le Borgne, M. Dentz, J. Carrera, "Lagrangian statistical model for transport in highly heterogeneous velocity fields", *Phys. Rev. Lett.* **101** (2008), no. 9, article no. 090601.
- [130] M. Dentz, P. K. Kang, A. Comolli, T. Le Borgne, D. R. Lester, "Continuous time random walks for the evolution of Lagrangian velocities", *Phys. Rev. Fluids* 1 (2016), no. 7, article no. 074004.
- [131] T. Le Borgne, P. D. Huck, M. Dentz, E. Villermaux, "Scalar gradients in stirred mixtures and the deconstruction of random fields", J. Fluid Mech. 812 (2017), p. 578-610.
- [132] P. G. Saffman, G. I. Taylor, "The penetration of a fluid into a porous medium or Hele-Shaw cell containing a more viscous liquid", *Proc. R. Soc. Lond. A* **245** (1958), no. 1242, p. 312-329.
- [133] G. M. Homsy, "Viscous fingering in porous media", Annu. Rev. Fluid Mech. 19 (1987), no. 1, p. 271-311.
- [134] C. Tang, "Diffusion-limited aggregation and the Saffman–Taylor problem", Phys. Rev. A 31 (1985), no. 3, p. 1977.
- [135] B. I. Shraiman, "Velocity selection and the Saffman–Taylor problem", Phys. Rev. Lett. 56 (1986), no. 19, p. 2028.
- [136] J. Langer, "Dendrites, viscous fingers, and the theory of pattern formation", *Science* **243** (1989), no. 4895, p. 1150-1156.
- [137] M. King, V. A. Dunayevsky, "Why waterflood works: a linearized stability analysis", in SPE Annual Technical Conference and Exhibition, Society of Petroleum Engineers, 1989.
- [138] A. De Wit, G. Homsy, "Viscous fingering in periodically heterogeneous porous media. I. Formulation and linear instability", J. Chem. Phys. 107 (1997), no. 22, p. 9609-9618.
- [139] A. De Wit, G. Homsy, "Viscous fingering in periodically heterogeneous porous media. II. Numerical simulations", J. Chem. Phys. 107 (1997), no. 22, p. 9619-9628.
- [140] V. Artus, B. Nœtinger, L. Ricard, "Dynamics of the water-oil front for two-phase, immiscible flow in heterogeneous porous media. 1-stratified media", *Trans. Porous Med.* 56 (2004), no. 3, p. 283-303.
- [141] B. Nœtinger, V. Artus, L. Ricard, "Dynamics of the water-oil front for two-phase, immiscible flow in heterogeneous porous media. 2-isotropic media", *Trans. Porous Med.* 56 (2004), no. 3, p. 305-328.
- [142] V. Artus, B. Noetinger, "Up-scaling two-phase flow in heterogeneous reservoirs: current trends", *Oil Gas Sci. Technol.* 59 (2004), no. 2, p. 185-195.
- [143] K. T. Tallakstad, H. A. Knudsen, T. Ramstad, G. Løvoll, K. J. Måløy, R. Toussaint, E. G. Flekkøy, "Steady-state twophase flow in porous media: statistics and transport properties", *Phys. Rev. Lett.* **102** (2009), no. 7, article no. 074502.
- [144] R. Toussaint, K. J. Måløy, Y. Méheust, G. Løvoll, M. Jankov, G. Schäfer, J. Schmittbuhl, "Two-phase flow: structure, upscaling, and consequences for macroscopic transport properties", *Vadose Zone J.* 11 (2012), no. 3, article no. 2011.0123.
- [145] E. Koval *et al.*, "A method for predicting the performance of unstable miscible displacement in heterogeneous media", Soc. Petrol. Eng. J. 3 (1963), no. 02, p. 145-154.
- [146] M. Todd, W. Longstaff *et al.*, "The development, testing, and application of a numerical simulator for predicting miscible flood performance", *J. Petrol. Tech.* 24 (1972), no. 07, p. 874-882.
- [147] Y. C. Yortsos, "A theoretical analysis of vertical flow equilibrium", Trans. Porous Med. 18 (1995), no. 2, p. 107-129.
- [148] M. Blunt, M. Christie, "How to predict viscous fingering in three component flow", *Trans. Porous Med.* **12** (1993), no. 3, p. 207-236.
- [149] K. Sorbie, H. Zhang, N. Tsibuklis, "Linear viscous fingering: new experimental results, direct simulation and the evaluation of averaged models", *Chem. Eng. Sci.* **50** (1995), no. 4, p. 601-616.
- [150] T. Witten Jr, L. M. Sander, "Diffusion-limited aggregation, a kinetic critical phenomenon", *Phys. Rev. Lett.* 47 (1981), no. 19, p. 1400.
- [151] D. Wilkinson, J. F. Willemsen, "Invasion percolation: a new form of percolation theory", *J. Phys. A* 16 (1983), no. 14, p. 3365.
- [152] L. Paterson, "Diffusion-limited aggregation and two-fluid displacements in porous media", *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984), no. 18, p. 1621.

- [153] J. G. Masek, D. L. Turcotte, "A diffusion-limited aggregation model for the evolution of drainage networks", *Earth Planet. Sci. Lett.* **119** (1993), no. 3, p. 379-386.
- [154] S. Saha, S. Atis, D. Salin, L. Talon, "Phase diagram of sustained wave fronts opposing the flow in disordered porous media", *Europhys. Lett.* 101 (2013), no. 3, p. 38003.
- [155] S. Atis, A. K. Dubey, D. Salin, L. Talon, P. Le Doussal, K. J. Wiese, "Experimental evidence for three universality classes for reaction fronts in disordered flows", *Phys. Rev. Lett.* **114** (2015), no. 23, article no. 234502.
- [156] M. Kardar, G. Parisi, Y.-C. Zhang, "Dynamic scaling of growing interfaces", Phys. Rev. Lett. 56 (1986), no. 9, p. 889.
- [157] B. Noetinger, G. Zargar, "Multiscale description and upscaling of fluid flow in subsurface reservoirs", Oil Gas Sci. Technol. 59 (2004), no. 2, p. 119-139.
- [158] C. E. Cohen, D. Ding, M. Quintard, B. Bazin, "From pore scale to wellbore scale: impact of geometry on wormhole growth in carbonate acidization", *Chem. Eng. Sci.* 63 (2008), no. 12, p. 3088-3099.
- [159] A. De Wit, "Chemo-hydrodynamic patterns in porous media", *Phil. Trans. R. Soc. A* **374** (2016), no. 2078, article no. 20150419.
- [160] L. de Arcangelis, S. Redner, H. Herrmann, "A random fuse model for breaking processes", J. Phys. Lett. 46 (1985), no. 13, p. 585-590.
- [161] L. de Arcangelis, H. Herrmann, "Scaling and multiscaling laws in random fuse networks", *Phys. Rev. B* **39** (1989), no. 4, p. 2678.
- [162] P. L. Krapivsky, S. Redner, F. Leyvraz, "Connectivity of growing random networks", *Phys. Rev. Lett.* **85** (2000), no. 21, p. 4629.
- [163] P. S. Dodds, D. H. Rothman, "Scaling, universality, and geomorphology", *Annu. Rev. Earth Planet. Sci.* 28 (2000), no. 1, p. 571-610.
- [164] D. L. Turcotte, "Self-organized complexity in geomorphology: observations and models", *Geomorphology* **91** (2007), no. 3–4, p. 302-310.
- [165] M. Keiler, J. Knight, S. Harrison, "Climate change and geomorphological hazards in the eastern European Alps", *Phil. Trans. R. Soc. A* 368 (2010), no. 1919, p. 2461-2479.
- [166] A. Tarantola, *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation, Vol. 89*, SIAM, Philadelphia, 2005.
- [167] A. M. Lavenue, B. S. Ramarao, G. De Marsily, M. G. Marietta, "Pilot point methodology for automated calibration of an ensemble of conditionally simulated transmissivity fields: 2. Application", *Water Resour. Res.* 31 (1995), no. 3, p. 495-516.
- [168] A. Abellan, B. Noetinger, "Optimizing subsurface field data acquisition using information theory", *Math. Geosci.* 42 (2010), no. 6, p. 603-630.
- [169] L. Zdeborová, F. Krzakala, "Statistical physics of inference: thresholds and algorithms", *Adv. Phys.* **65** (2016), no. 5, p. 453-552.
- [170] L. Zdeborová, F. Krząkała, "Phase transitions in the coloring of random graphs", *Phys. Rev. E* **76** (2007), no. 3, article no. 031131.



Prizes of the French Academy of Sciences 2019 (continued) / Prix 2019 de l'Académie des sciences (suite)

A probabilistic approach of Liouville field theory

Une approche probabiliste de la théorie des champs de Liouville

Rémi Rhodes^{*, a, b} and Vincent Vargas^c

^{*a*} Aix-Marseille University (AMU), Institut de Mathématiques (I2M), 39 rue F. Joliot Curie, Marseille, France.

^b Institut Universitaire de France (IUF)

 c Institut Galilée, Université Paris 13, 99 avenue Jean-Baptiste Clément, Villetaneuse, France

E-mails: remi.rhodes@univ-amu.fr (R. Rhodes), vargas@math.univ-paris13.fr (V. Vargas)

Abstract. In this article, we present the Liouville field theory, which was introduced in the eighties in physics by Polyakov as a model for fluctuating metrics in 2D quantum gravity, and outline recent mathematical progress in its study. In particular, we explain the probabilistic construction of this theory carried out by David–Kupiainen–Rhodes–Vargas in [1] and how this construction connects to the modern and general approach of Conformal Field Theories in physics, called conformal bootstrap and based on representation theory.

Résumé. Dans cet article, nous présentons la théorie des champs de Liouville, qui fut introduite en physique dans les années 80 par Polyakov comme modèle de métriques aléatoires dans le cadre de la gravité quantique 2D, et donnons un aperçu de la construction probabiliste de cette théorie proposée par David–Kupiainen–Rhodes–Vargas dans [1]. Nous expliquons comment cette construction se relie à l'approche moderne des théories conformes de champs en physique appelée conformal bootstrap et basée sur la théorie des représentations.

Keywords. 2D quantum gravity, path integral, Liouville field theory, conformal bootstrap.

2020 Mathematics Subject Classification. 60D05, 81T40, 81T20.

^{*} Corresponding author.



Figure 1. Typical sample of a random triangulation of the sphere (Wolfram Matematica®code by T. Budd).

1. Introduction

One of the simplest and at the same time most intriguing 2d Conformal Field Theory (CFT) is Liouville field theory. It first appeared in 1981 in Polyakov's formulation of bosonic string theory [2] and, since then, was developed in physics as a model for Euclidean¹ two-dimensional quantum gravity, namely as a way of summing over all possible geometries of a fixed two-dimensional manifold. Ten years ago, this model was also connected to four dimensional gauge theories via the AGT conjecture [3], thus experiencing a considerable renewal of interest.

We will outline below the ideas that have shaped this rich theory, ranging from original Polyakov's path integral formulation to the modern approach of conformal bootstrap.

1.1. Polyakov's path integral

Roughly speaking and in physics, gravity is described by a Riemannian metric g on a fixed Riemann surface \mathcal{M} (namely a two dimensional manifold with holomorphic charts) and quantum gravity can be seen as a way to to sum over the space of Riemannian metrics g on \mathcal{M} (seen up to the action of diffeomorphisms), which we will call $\mathbf{R}(\mathcal{M})$. Thus, quantum gravity aims to construct (probability) measures on $\mathbf{R}(\mathcal{M})$, which is a smooth infinite dimensional manifold. If it were finite-dimensional, the natural procedure in (classical) differential geometry would be to define a metric on $\mathbf{R}(\mathcal{M})$ and then consider the attached volume form as a measure on $\mathbf{R}(\mathcal{M})$. The natural metric on was $\mathbf{R}(\mathcal{M})$ is the L^2 -metric, which is also called the DeWitt metric, so that the measure on $\mathbf{R}(\mathcal{M})$ relevant to quantum gravity should take on the form²

$$F \mapsto \int_{\mathbf{R}(\mathcal{M})} F(g) e^{-S_{\mathrm{EH}}(g)} Dg \tag{1}$$

¹Time is seen as another space variable via an analytic continuation argument called Wick rotation.

²For the sake of simplicity, we skip here the possibility of coupling gravity to conformal matter fields.

where *F* is any arbitrary test function on $\mathbf{R}(\mathcal{M})$, S_{EH} is the Einstein-Hilbert functional³ and Dg the putative volume form associated to the DeWitt metric. The obvious caveat is that $\mathbf{R}(\mathcal{M})$ is infinite-dimensional and there is no mathematically grounded way to define the volume form Dg associated to the DeWitt metric. Yet, this could be faced by taking limits of appropriate finite dimensional approximations. More subtle is the fact that defining Dg involves serious nonlinear problems coming from the fact that, even in the finite-dimensional situation, defining volume forms involves computations of determinants. This problem can be regularized on the lattice: this gives rise to the random planar map approach that we discuss below, but Polyakov's tour de force in his founding paper [2] was to understand how to make sense of the measure (1) directly in the continuum. His key argument, which we specify now to the Riemann sphere (identified with the complex plane \mathbb{C} by stereographic projection), was a change of variables in the measure (1) to write each metric g under the form $g = \psi^* (e^{\varphi(x)} |dx|^2)$, where ψ is a diffeomorphism and ψ^* its pushforward, thus reducing the study of the random metric g to the study of its log-conformal factor $\varphi : \mathbb{C} \to \mathbb{R}$. Performing this change of variables, Polyakov argued that making sense of the integration measure (1) boils down to making sense of the following functional measure

$$\langle F \rangle_{\gamma,\mu} := \int_{\varphi: \mathbb{C} \to \mathbb{R}} F(\varphi) e^{-S_L(\varphi)} D\varphi,$$
 (2)

where $D\varphi$ stands for the formal Lebesgue volume form (volume form of the L^2 -metric) over the space of maps $\varphi : \mathbb{C} \to \mathbb{R}$ with boundary condition $\varphi(x) \sim -2Q \ln |x|$ as $|x| \to \infty$ for some parameter Q > 0, *F* is any bounded reasonable test function and S_L is the action functional:

$$S_L(\varphi) := \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{C}} \left(\left| \nabla \varphi(x) \right|^2 + 4\pi \mu e^{\gamma \varphi(x)} \right) dx.$$
(3)

Here the most important parameter is $\gamma \in (0, 2)$ while $\mu > 0$ is less relevant as the theory obeys a scaling relation in μ so that theories with different μ (and same γ) are essentially the same. Finally Q is fixed by conformal symmetry to the value $Q = \frac{\gamma}{2} + \frac{2}{\gamma}$.

This path integral was subsequently dubbed Liouville field theory due to the fact that critical points φ_c of the functional S_L are solutions to the Liouville equation

$$\Delta \varphi_c = 2\pi \mu \gamma e^{\gamma \varphi_c},\tag{4}$$

hence provides metrics $e^{\gamma \varphi} |dx|^2$ with uniformized Ricci curvature $R_c = -2\pi \mu \gamma^2$, which was instrumental in Poincaré's approach of uniformization of Riemann surfaces. In this respect, Liouville field theory can be seen as the natural probabilistic theory of uniformization of Riemann surfaces.

The gain in trading (1) for (2) is that, although the problem is still infinite-dimensional, the formal definition of the volume form $D\varphi$ is now linear, which highly increases the possibility of giving a proper construction. In spite of this drastic simplification, this path integral has not been fully understood in physics and has mostly served to heuristically justify inputs in another approach, more algebraic, of Liouville field theory called the conformal bootstrap (more later). It is only very recently that a mathematical definition of this path integral has been achieved by David–Kupiainen–Rhodes–Vargas [1, 4], which we will review subsequently.

1.2. Discrete random geometries

Random planar maps have been introduced as a discretization of Polyakov's path integral (1). They can be seen as a way to pick at random discrete geometries on a fixed Riemann surface.

³Its exact definition is not important for our discussion but it involves geometrical quantities related to the metric g such as its volume or mean curvature.



Figure 2. Zooming in the local structure of random triangulations embedded into the sphere. Each triangle carries a unit mass. (Wolfram Matematica® code by T. Budd).

In this manuscript, we will focus on the case of the Riemann sphere and the situation where the discretization consists in triangulating the surface, a standard procedure in Riemannian geometry. One obtains a triangulation of the sphere by gluing equilateral triangles along their edges in order to obtain a surface with the topology of the sphere (see Figure 1). There are finitely many such triangulations of the sphere built out of a given number of triangles up to orientation preserving homeomorphisms. One can thus pick uniformly at random such a triangulation. Also, each triangulation carries naturally a complex structure (holomorphic charts, which means that the gluing can be done holomorphically) and thus each triangulation can be conformally embedded into the sphere via the Riemann mapping theorem. Thus we have a way to pick at random a discretized geometry on the Riemann sphere so that this procedure is sometimes dubbed discrete quantum gravity.

The question is then to determine the scaling limit of such random geometries when the number of triangles is sent to infinity. In physics, it was soon understood [5] that the scaling limit possesses a rich multifractal structure, as illustrated by Figure 2, and conjectured that this scaling limit should correspond to Polyakov's path integral formulation of Liouville field theory with parameter $\gamma = \sqrt{8/3}$. Also, and instead of considering the uniform probability measure among all possible triangulations with a fixed number of triangles, one could pick at random triangulations according to the partition function of some conformal matter field⁴ put on the triangulation, e.g. the critical Ising model: this will modify the value of the parameter γ of the Liouville theory ($\gamma = \sqrt{3}$ for Ising, see [6] for further pedestrian explanations).

Yet, in spite of a huge activity and important recent progress (see [7]), the connection between random triangulations and the measure (1) is not fully understood at the mathematical level.

⁴Say a model of statistical mechanics on the triangulation with parameters tuned at their critical value so that the model acquires conformal symmetry in the scaling limit.

2. Probabilistic construction

Now we describe the construction of the path integral (2) carried out in [1,4]. In the same way that the standard Lebesgue measure serves as the reference measure on finite dimensional spaces, Gaussian measures are often the starting point for constructing measures in infinite-dimensional spaces. The probabilistic construction of [1] relies on a Gaussian random field, called Gaussian Free Field (GFF), associated to the squared gradient in (3)

$$\langle F \rangle_{\rm GFF} := \int_{\varphi: \mathbb{C} \to \mathbb{R}} F(\varphi) e^{-\frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{C}} |\nabla \varphi(x)|^2 dx} D\varphi, \tag{5}$$

where integration still runs over maps with boundary condition $\varphi(x) \sim -2Q \ln |x|$ as $|x| \to \infty$, in such a way that the volume form (2) is defined by a reweighting of the Gaussian measure by the exponential potential

$$\langle F \rangle_{\gamma,\mu} = \left\langle F e^{-\mu \int_{\mathbb{C}} e^{\gamma \varphi(x)} dx} \right\rangle_{\text{GFF}}.$$
(6)

The Gaussian volume form (5) is well understood, both in mathematics and physics. One of its specific feature is that it produces random outputs $(x, \omega) \mapsto \varphi(x, \omega)$ (ω stands for randomness) such that the paths $x \mapsto \varphi(x, \omega)$ (for fixed ω) are too wild to make sense as pointwise defined functions; instead for all ω the "function" $x \mapsto \varphi(x, \omega)$ lives in some space of Schwartz distributions (also called generalized functions). The outcome of this observation is that the field φ cannot be exponentiated straightforwardly to make sense of (6) and this term has to be renormalized: one has to consider a regularization of the field φ , call it φ_{ϵ} , which stands for a smoothing of the field either with an ultraviolet frequency cut-off or a mollification at scale ϵ , in such a way that φ_{ϵ} converges to φ as $\epsilon \to 0$. Since the field $x \mapsto \varphi_{\epsilon}(x)$ is smooth, it can be exponentiated to obtain a regularized version of the potential $\int_{\mathbb{C}} e^{\gamma \varphi_{\epsilon}(x)} dx$. This term diverges as $\epsilon \to 0$ and Gaussian computations enable to show that the rate of divergency is of the order $e^{-\gamma^2/2}$ if the variance of the field behaves like $\operatorname{Var}(\varphi_{\epsilon}(x)) \sim \ln \frac{1}{\epsilon}$. One can then define the regularized potential as the following limit

$$\int_{\mathbb{C}} e^{\gamma \varphi(x)} dx := \lim_{\epsilon \to 0} \int_{\mathbb{C}} e^{\gamma \varphi_{\epsilon}(x) - \frac{\gamma^2}{2} \operatorname{Var}(\varphi_{\epsilon}(x))} dx$$
(7)

where the renormalization by the variance enables to remove the first order divergence. This renormalization procedure is standard in physics and is called Wick renormalization but in the context of the exponential potential it was implemented rigorously in the eighties by the mathematician Kahane [8] (see also [9]) who derived the optimal criterion for the convergence of (7). His theory goes under the name of Gaussian multiplicative chaos and establishes that the limit is indeed non trivial for $\gamma \in (0, 2)^5$, hence justifying the existence of (6) for $\mu > 0$ and $\gamma \in (0, 2)$.

One can then define the correlation functions (observables) of Liouville theory in a similar way. First, for $z \in \mathbb{C}$ and $\alpha \in \mathbb{R}$, one defines the vertex operator

$$V_{\alpha}(z) := e^{\alpha \varphi(z)}$$

Correlation functions (with *n* points) are obtained by choosing arbitrary points of the complex plane $z_1, ..., z_n \in \mathbb{C}$ with respective arbitrary weights $\alpha_1, ..., \alpha_n \in \mathbb{R}$ and by integrating product of vertex operators with respect to the functional integral (2), namely

$$\langle V_{\alpha_1}(z_1) \dots V_{\alpha_n}(z_n) \rangle_{\gamma,\mu}.$$
 (8)

Again, this definition requires a renormalization procedure since the field φ can not be evaluated pointwise. The main result of [1] establishes existence and non triviality of the correlation functions using the aforementionned procedure provided that $\alpha_i < Q$ for all i = 1, ..., n and

⁵A phase transition occurs for this model at γ = 2, reminiscent of the freezing transition of some disordered systems or spin glasses [10].

 $\sum_i \alpha_i > 2Q$, which implies in particular that $n \ge 3$. Moreover, the work [1] gives a new and *explicit* probabilistic formula for the correlations based on the GFF and its exponential (7), i.e. Gaussian multiplicative chaos (it is beyond the scope of this article to write these explicit formulas here). It is proved in [1] that these correlation functions satisfy the axioms of 2d CFT, among which the fact that they are *conformally covariant*. More precisely, if z_1, \dots, z_n are *n* distinct points in \mathbb{C} then for a Möbius map $\psi(z) = \frac{az+b}{cz+d}$ (with $a, b, c, d \in \mathbb{C}$ and ad - bc = 1)

$$\left\langle \prod_{i=1}^{n} V_{\alpha_i}(\psi(z_i)) \right\rangle_{\gamma,\mu} = \prod_{i=1}^{n} \left| \psi'(z_i) \right|^{-2\Delta_{\alpha_i}} \left\langle \prod_{k=1}^{n} V_{\alpha_i}(z_i) \right\rangle_{\gamma,\mu}$$
(9)

where Δ_{α} is called the *conformal weight* of V_{α}

$$\Delta_{\alpha} = \frac{\alpha}{2} \left(Q - \frac{\alpha}{2} \right), \quad \alpha \in \mathbb{C}.$$
(10)

The conformal covariance of the correlation functions (9) is a generic fact of CFTs. Therefore the 3 point correlation functions of a given CFT, here $\langle V_{\alpha_1}(z_1)V_{\alpha_2}(z_2)V_{\alpha_3}(z_3)\rangle_{\gamma,\mu}$, are completely determined by the knowledge of $\langle V_{\alpha_1}(0)V_{\alpha_2}(1)V_{\alpha_3}(\infty)\rangle_{\gamma,\mu}$, which are the so-called structure constants.

3. Conformal bootstrap

It is certainly fair to say that the understanding of Liouville theory via the path integral approach has remained unclear until very recently; instead, most progress (in physics) has been carried out through another approach called the conformal bootstrap, which will be discussed in the case of the Riemann sphere but can also be carried out on other Riemann surfaces (with some non trivial modifications). This concept is born in the eighties following the attempt by Belavin-Polyakov–Zamolodchikov (BPZ, see [11]) to compute the correlation functions of Liouville theory. At that time, BPZ understood that the conformal symmetries that govern 2d CFTs give strong constraints on the theory; in particular they realized that the conformal symmetries of a CFT can be interpreted in terms of a representation of the Lie algebra generated by the symmetries, here called the Virasoro algebra⁶, taking values in the space of operators acting on a Hilbert space. This way, they connected to the classification of Lie algebras in representation theory. They argued that one could parametrize 2d CFTs by a unique parameter c called the central charge and that conformal symmetries can be translated in terms of PDEs (conformal Ward identities), which can be used to obtain expressions for correlation functions in terms of special functions from representation theory. In a nutshell, dilations are symmetries of any CFT and, via the representation of the algebra of symmetries, they give rise to a semigroup of operators acting on some Hilbert space. The generator of this semigroup can be diagonalized to obtain decomposition of the Hilbert space akin to the Plancherel formula in harmonic analysis. With this decomposition, they expressed recursively n point correlation functions into sums of mpoint correlation functions with $3 \le m < n$). In other words, *n* point correlation functions can be computed recursively starting from the structure constants for n = 3, hence the name conformal bootstrap.

They solved this way many 2d CFTs for certain rational values of c when the CFT has discrete spectrum (minimal models, e.g. the critical Ising model) but fell short of solving Liouville theory, which has a continuous spectrum. It is only 10 years later that Dorn–Otto [12] and the

⁶The infinite-dimensional Lie group of local conformal transformations does not exist mathematically speaking. But if it would, then the Virasoro algebra could be seen as its Lie algebra.

Zamolodchikov brothers [13] proposed the following formula, the celebrated DOZZ formula, for the 3 point structure constants of Liouville theory

$$\left\langle V_{\alpha_{1}}(0)V_{\alpha_{2}}(1)V_{\alpha_{3}}(\infty)\right\rangle_{\gamma,\mu}$$

$$= \frac{1}{2} \left(\pi\,\mu\,\ell\left(\frac{\gamma^{2}}{4}\right)\left(\frac{\gamma}{2}\right)^{2-\frac{\gamma^{2}}{2}}\right)^{\frac{2Q-\tilde{\alpha}}{\gamma}} \frac{\Upsilon_{\frac{\gamma}{2}}(0)\Upsilon_{\frac{\gamma}{2}}(\alpha_{1})\Upsilon_{\frac{\gamma}{2}}(\alpha_{2})\Upsilon_{\frac{\gamma}{2}}(\alpha_{3})}{\Upsilon_{\frac{\gamma}{2}}\left(\frac{\tilde{\alpha}}{2}-Q\right)\Upsilon_{\frac{\gamma}{2}}\left(\frac{\tilde{\alpha}}{2}-\alpha_{1}\right)\Upsilon_{\frac{\gamma}{2}}\left(\frac{\tilde{\alpha}}{2}-\alpha_{2}\right)\Upsilon_{\frac{\gamma}{2}}\left(\frac{\tilde{\alpha}}{2}-\alpha_{3}\right)$$
(11)

where $\bar{\alpha} = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3$, $\ell(z) = \frac{\Gamma(z)}{\Gamma(1-z)}$ with Γ the standard Gamma function and $\Upsilon_{\frac{\gamma}{2}}(z)$ is Zamolodchikov's special holomorphic function defined as the analytic continuation to \mathbb{C} of the following expression for $0 < \operatorname{Re}(z) < Q$

$$\ln \Upsilon_{\frac{\gamma}{2}}(z) = \int_0^\infty \left(\left(\frac{Q}{2} - z\right)^2 e^{-t} - \frac{\left(\sinh\left(\left(\frac{Q}{2} - z\right)\frac{t}{2}\right)\right)^2}{\sinh\left(\frac{t\gamma}{4}\right)\sinh\left(\frac{t}{\gamma}\right)} \right) \frac{dt}{t}.$$
 (12)

The bootstrap formalism then states that higher correlation functions ($n \ge 4$) can be recovered from these 3 point structure constants (which can be meromorphically continued to complex values of the parameters $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$). Of special interest is the case n = 4 in which case the bootstrap formula reads

$$\left\langle V_{\alpha_{1}}(0)V_{\alpha_{2}}(z)V_{\alpha_{3}}(1)V_{\alpha_{4}}(\infty)\right\rangle_{\gamma,\mu} := \frac{1}{8\pi} \int_{0}^{\infty} \left\langle V_{\alpha_{1}}(0)V_{\alpha_{2}}(1)V_{Q-iP}(\infty)\right\rangle_{\gamma,\mu} \left\langle V_{Q-iP}(0)V_{\alpha_{3}}(1)V_{\alpha_{4}}(\infty)\right\rangle_{\gamma,\mu} |z|^{2\left(\Delta_{Q+iP}-\Delta_{\alpha_{1}}-\Delta_{\alpha_{2}}\right)} |\mathscr{F}_{P}(z)|^{2} dP$$
(13)

where \mathscr{F}_P are holomorphic functions in *z* called (spherical) *conformal blocks* and have strong representation theoretical content. The conformal blocks are universal in the sense that they only depend on the conformal weights $\Delta_{\alpha_i} = \frac{\alpha_i}{2}(Q - \frac{\alpha_i}{2})$ and the central charge of Liouville theory $c_L = 1 + 6Q^2$.

4. Perspectives

Following the work [1], the present authors initiated with A. Kupiainen a program whose goal is to show that the probabilistic construction of [1] on the Riemann sphere coincides with the bootstrap construction used in physics. At first sight, the two approaches seem very distant, as one is based on exact probabilistic expressions involving Gaussian multiplicative chaos and the other one is based on representation theory. In order to unify both perspectives, the present authors developed with A. Kupiainen a mapping between probability theory and representation theory of the Virasoro algebra. This has led to a proof of the DOZZ formula [14, 15] and a proof of the conformal bootstrap [16] on the Riemann sphere.

As mentioned briefly in the introduction, Liouville theory is expected to be equivalent to a specific 4d gauge theory called $\mathcal{N} = 2$ SUSY Yang–Mills: this is the celebrated AGT conjecture [3]. Essentially, this conjecture states that the conformal blocks of Liouville theory equal the Nekrasov partition functions (which appear as building blocks of $\mathcal{N} = 2$ SUSY Yang–Mills) for certain values of the parameters. The proof of this conjecture on all Riemann surfaces remains open at the level of mathematics though a version of this conjecture on the torus is a consequence of recent works by Maulik–Okounkov [17] and Schiffman–Vasserot [18] (in these works the conformal blocks are seen as formal power series in the moduli parameters and convergence issues are not adressed). Following the recent probabilistic constructions of Liouville field theory on all Riemann surfaces [1, 4], one can hope to show a strong version of this conjecture on any Riemann surface. As an exciting output of this program, Ghosal–Remy–Sun–Sun [19] discovered a

probabilistic expression involving Gaussian multiplicative chaos for the (toric) conformal blocks which play a similar role on the torus to the (spherical) conformal blocks mentioned in the previous paragraph. In particular, the work [19] establishes convergence of toric conformal blocks. A generalization of their formulas to other surfaces would be a magnificent achievement.

Another challenging perspective is to investigate the links with geometric flows and "stochastic uniformization". Recall that one of the greatest achievements of the past century was to characterize metrics with constant curvature on a given Riemannian manifold (\mathcal{M} , g) via a vast research program led by Emile Picard, Felix Klein or Henri Poincaré. In the eighties, Richard Hamilton brought his own perspective on the topic by introducing a dynamic on metrics, called the Ricci flow (here on compact surfaces)

$$\partial_t g_{ij} = -2R_{ij}(g) + R_{\text{avr}}(g)g_{ij} \tag{14}$$

where g is a time dependent metric on \mathcal{M} , $R_{ij}(g)$ stands for the Ricci tensor and $R_{avr}(g)$ the mean curvature. As time t goes to ∞ , g converges towards the constant curvature metric. Dubédat and Shen [20] have recently introduced the stochastic version of this flow, called the stochastic Ricci flow, which consists in adding an isotropic white noise in the space of metrics to the right-hand side of (14). They have shown that Liouville theory is an invariant masure for this flow. This opens new perspectives related not only to a rigorous quantization of gravity in two dimensions but also to connections between Gaussian multiplicative chaos, random geometry and uniformization of 2d surfaces.

References

- F. David, A. Kupiainen, R. Rhodes, V. Vargas, "Liouville quantum gravity on the Riemann sphere", *Commun. Math. Phys.* 342 (2016), no. 3, p. 869-907.
- [2] A. M. Polyakov, "Quantum geometry of bosonic strings", Phys. Lett., B 103 (1981), no. 3, p. 207-210.
- [3] L. F. Alday, D. Gaiotto, Y. Tachikawa, "Liouville correlation functions from four-dimensional gauge theories", *Lett. Math. Phys.* 91 (2010), no. 2, p. 167-197.
- [4] C. Guillarmou, R. Rhodes, V. Vargas, "Polyakov's formulation of 2d bosonic string theory", Publ. Math., Inst. Hautes Étud. Sci. 130 (2019), p. 111-185.
- [5] V. G. Knizhnik, A. M. Polyakov, A. B. Zamolodchikov, "Fractal structure of 2D-quantum gravity", Modern Phys. Lett. A 3 (1988), no. 8, p. 819-826.
- [6] C. Garban, "Quantum gravity and the KPZ formula [after Duplantier-Sheffield]", in Séminaire Bourbaki. Vol. 2011/2012. Exposés 1043–1058, Astérisque, vol. 352, Société Mathématique de France, 2013, p. 315-354.
- [7] B. Duplantier, J. Miller, S. Sheffield, "Liouville quantum gravity as a mating of trees", https://arxiv.org/abs/1409.7055, 2014.
- [8] J.-P. Kahane, "Sur le chaos multiplicatif", Ann. Sci. Math. Québec 9 (1985), no. 2, p. 105-150.
- [9] R. Rhodes, V. Vargas, "Gaussian multiplicative chaos and applications: a review", Probab. Surv. 11 (2014), p. 315-392.
- [10] Y. V. Fyodorov, J.-P. Bouchaud, "Freezing and extreme-value statistics in a random energy model with logarithmically correlated potential", J. Phys. 41 (2008), no. 37, article no. 372001 (12 pages).
- [11] A. A. Belavin, A. M. Polyakov, A. B. Zamolodchikov, "Infinite conformal symmetry in two-dimensional quantum field theory", *Nuclear Phys.* 241 (1984), no. 2, p. 333-380.
- [12] H. Dorn, H.-J. Otto, "Two- and three-point functions in Liouville theory", Nuclear Phys. 429 (1994), no. 2, p. 375-388.
- [13] A. B. Zamolodchikov, A. B. Zamolodchikov, "Conformal bootstrap in Liouville field theory", Nuclear Phys. 477 (1996), no. 2, p. 577-605.
- [14] A. Kupiainen, R. Rhodes, V. Vargas, "Integrability of Liouville theory: proof of the DOZZ formula", *Ann. Math.* **191** (2020), no. 1, p. 81-166.
- [15] A. Kupiainen, R. Rhodes, V. Vargas, "The DOZZ formula from the path integral", *J. High Energy Phys.* **2018** (2018), no. 5, article no. 94 (24 pages).
- [16] C. Guillarmou, A. Kupiainen, R. Rhodes, V. Vargas, "Conformal bootstrap in Liouville Theory", https://arxiv.org/abs/ 2005.11530, 2005.
- [17] D. Maulik, A. Okounkov, Quantum groups and quantum cohomology, Astérisque, vol. 408, Société Mathématique de France, 2019.
- [18] O. Schiffmann, E. Vasserot, "Cherednik algebras, W-algebras and the equivariant cohomology of the moduli space of instantons on A²", Publ. Math., Inst. Hautes Étud. Sci. 118 (2013), p. 213-342.
- [19] P. Ghosal, G. Remy, X. Sun, Y. Sun, "Probabilistic conformal blocks for Liouville CFT on the torus", https://arxiv.org/ abs/2003.03802, 2020.
- [20] J. Dubédat, H. Shen, "Stochastic Ricci Flow on Compact Surfaces", https://arxiv.org/abs/1904.10909, 2019.



Prizes of the French Academy of Sciences 2019 (continued) / Prix 2019 de l'Académie des sciences (suite)

Marche au hasard d'une quasi-particule massive dans le gaz de phonons d'un superfluide à très basse température

Random walk of a massive quasiparticle in the phonon gas of an ultralow temperature superfluid

Yvan Castin^a

^{*a*} Laboratoire Kastler Brossel, ENS-Université PSL, CNRS, Université de la Sorbonne et Collège de France, 24 rue Lhomond, 75231 Paris, France *Courriel*: yvan.castin@lkb.ens.fr

Résumé. Nous considérons en dimension 3 un superfluide homogène de très basse température T présentant deux types d'excitations, (i) des phonons acoustiques sans bande interdite de relation de dispersion linéaire à faible nombre d'onde, et (ii) des quasi-particules γ à bande interdite de relation de dispersion quadratique (massive) au voisinage de ses extréma. Des travaux récents [Nicolis et Penco (2018), Castin, Sinatra et Kurkjian (2017, 2019)], prolongeant l'étude historique de Landau et Khalatnikov sur l'interaction phononroton dans l'hélium 4 liquide, ont déterminé explicitement l'amplitude de diffusion d'un phonon thermique sur une quasi-particule γ au repos à l'ordre dominant en température. Nous généralisons ce calcul au cas d'une quasi-particule γ de vitesse de groupe subsonique arbitraire, avec une construction rigoureuse de la matrice S entre états asymptotiques exacts, tenant compte de l'interaction incessante phonon-phonon et phonon- γ , qui habille le phonon et la quasi-particule γ incidents ou émergents de phonons virtuels; ceci apporte un éclairage physique nouveau sur les diagrammes de Feynman de la diffusion phonon- γ . Dans tout le domaine de l'espace des paramètres (nombre d'onde k, force des interactions, etc) où la quasi-particule γ est énergétiquement stable vis-à-vis de l'émission de phonons de vecteurs d'onde arbitraires, nous pouvons dès lors caractériser le mouvement erratique qu'elle effectue dans le superfluide à la suite de ses collisions incessantes avec les phonons thermiques, au travers (a) de la force moyenne subie F(k) et (b) des coefficients de diffusion en impulsion longitudinal $D_{/\!/}(k)$ et transverse $D_{\perp}(k)$ intervenant dans une équation de Fokker-Planck puis, aux temps longs où la quasi¹ particule s'est thermalisée, (c) du coefficient de diffusion spatiale \mathscr{D}^{spa} , indépendant de k. À l'endroit k_0 d'un extrémum de la relation de dispersion, où la vitesse de groupe de la quasi-particule s'annule, F(k) varie linéairement en vitesse avec un coefficient de frottement visqueux isotrope α que nous calculons; si $k_0 = 0$, la diffusion en impulsion est elle aussi isotrope et $F(k_0) = 0$; si $k_0 > 0$, elle ne l'est pas $(D_{\parallel}(k_0) \neq D_{\perp}(k_0))$, et $F(k_0)$ est non nul mais sous-dominant par rapport à α d'un ordre en température. La fonction de corrélation temporelle de la vitesse, dont l'intégrale donne \mathscr{D}^{spa} , distingue aussi entre ces deux cas (k_0 est cette fois l'endroit du minimum) : si $k_0 = 0$, elle décroît exponentiellement, avec le taux d'amortissement visqueux attendu de la vitesse moyenne; si $k_0 > 0$, elle est bimodale et admet une seconde composante, d'amplitude plus faible par un facteur $\propto T$, mais de taux d'amortissement plus faible dans le même rapport (c'est le taux de thermalisation de la direction de la vitesse), ceci compensant

cela. Nous caractérisons aussi analytiquement le comportement de la force et de la diffusion en impulsion au voisinage de tout bord sonique du domaine de stabilité où la vitesse de la quasi-particule tend vers la vitesse du son dans le superfluide. Les expressions générales données dans ce travail sont censément exactes à l'ordre dominant en température (ordre T^8 pour F(k), ordre T^9 pour $D_{f/}(k)$, $D_{\perp}(k)$ et $F(k_0)$, ordre T^{-7} pour \mathscr{D}^{spa}). Elles supposent cependant une connaissance exacte de la relation de dispersion de la quasi-particule γ et de l'équation d'état du superfluide à température nulle. Nous les illustrons donc dans l'approximation BCS, après calcul du domaine de stabilité, pour une quasi-particule γ fermionique (un fermion non apparié) dans un superfluide de fermions de spin 1/2 non polarisé, système réalisable avec des atomes froids dans des pièges à fond plat; ce domaine présente d'ailleurs une intéressante ligne d'instabilité subsonique du premier ordre, inobservée, où la quasi-particule se déstabilise par émission de phonons de vecteurs d'onde non infinitésimaux, en plus de la ligne d'instabilité sonique attendue issue du critère de Landau. En passant, nous réfutons la thèse de Lerch, Bartosch et Kopietz (2008), selon laquelle il n'existerait pas de quasi-particule fermionique dans un tel superfluide.

Abstract. We consider in dimension 3 a homogeneous superfluid at very low temperature T having two types of excitations, (i) gapless acoustic phonons with a linear dispersion relation at low wave number, and (ii) gapped γ quasiparticles with a quadratic (massive) dispersion relation in the vicinity of its extrema. Recent works [Nicolis and Penco (2018), Castin, Sinatra and Kurkjian (2017, 2019)], extending the historical study by Landau and Khalatnikov on the phonon-roton interaction in liquid helium 4, have explicitly determined the scattering amplitude of a thermal phonon on a γ quasiparticle at rest to leading order in temperature. We generalize this calculation to the case of a γ quasiparticle of arbitrary subsonic group velocity, with a rigorous construction of the S matrix between exact asymptotic states, taking into account the unceasing phononphonon and phonon- γ interaction, which dresses the incoming and emerging phonon and γ quasiparticle by virtual phonons; this sheds new light on the Feynman diagrams of phonon- γ scattering. In the whole domain of the parameter space (wave number k, interaction strength, etc.) where the γ quasiparticle is energetically stable with respect to the emission of phonons of arbitrary wavevector, we can therefore characterize the erratic motion it performs in the superfluid due to its unceasing collisions with thermal phonons, through (a) the mean force F(k) and (b) longitudinal and transverse momentum diffusion coefficients $D_{\parallel}(k)$ and $D_{\perp}(k)$ coming into play in a Fokker–Planck equation, then, at long times when the quasiparticle has thermalized, (c) the spatial diffusion coefficient \mathscr{D}^{spa} , independent of k. At the location k_0 of an extremum of the dispersion relation, where the group velocity of the quasiparticle vanishes, F(k) varies linearly with velocity with an isotropic viscous friction coefficient α that we calculate; if $k_0 = 0$, the momentum diffusion is also isotropic and $F(k_0) = 0$; if $k_0 > 0$, it is not $(D_{//}(k_0) \neq D_{\perp}(k_0))$, and $F(k_0)$ is non-zero but subleading with respect to α by one order in temperature. The velocity time correlation function, whose integral gives \mathscr{D}^{spa} , also distinguishes between these two cases (k_0 is now the location of the minimum): if $k_0 = 0$, it decreases exponentially, with the expected viscous damping rate of the mean velocity; if $k_0 > 0$, it is bimodal and has a second component, with an amplitude lower by a factor $\propto T$, but with a lower damping rate in the same ratio (it is the thermalization rate of the velocity direction); this balances that. We also characterize analytically the behavior of the force and of the momentum diffusion in the vicinity of any sonic edge of the stability domain where the quasiparticle speed tends to the speed of sound in the superfluid. The general expressions given in this work are supposedly exact to leading order in temperature (order T^8 for F(k), order T^9 for $D_{\#}(k)$, $D_{\perp}(k)$ and $F(k_0)$, order T^{-7} for \mathscr{D}^{spa}). They however require an exact knowledge of the dispersion relation of the γ quasiparticle and of the equation of state of the superfluid at zero temperature. We therefore illustrate them in the BCS approximation, after calculating the stability domain, for a fermionic γ quasiparticle (an unpaired fermion) in a superfluid of unpolarized spin 1/2 fermions, a system that can be realised with cold atoms in flat bottom traps; this domain also exhibits an interesting, unobserved first order subsonic instability line where the quasi-particle is destabilized by emission of phonons of finite wave vectors, in addition to the expected sonic instability line resulting from Landau's criterion. By the way, we refute the thesis of Lerch, Bartosch and Kopietz (2008), stating that there would be no fermionic quasiparticle in such a superfluid.

Mots-clés. Gaz de fermions, Condensat de paires, Modes collectifs, Diffusion phonon–roton, Paire brisée, Atomes froids, Théorie BCS.

Keywords. Fermi gases, Pair condensate, Collective modes, Phonon–roton scattering, Broken pair, Ultracold atoms, BCS theory.

Available online 18th December 2020

1. Position du problème et système modèle considéré

Certains superfluides tridimensionnels spatialement homogènes présentent à température arbitrairement basse deux types d'excitations. Le premier type correspond à une branche d'excitation acoustique, de pulsation propre ω_q tendant linéairement vers zéro avec le nombre d'onde q,

$$\omega_q \mathop{=}_{q \to 0} cq \left[1 + \frac{\gamma_\phi}{8} \left(\frac{\hbar q}{mc} \right)^2 + O(q^4 \ln q) \right] \tag{1}$$

où *c* est la vitesse du son à température nulle, *m* la masse d'une particule du superfluide et γ_{ϕ} une courbure adimensionnée; cette branche est toujours présente dans un superfluide siège d'interactions à courte portée, et les quanta associés sont des quasi-particules bosoniques, les phonons, ici notés ϕ . On rappelle la relation hydrodynamique exacte $mc^2 = \rho d\mu/d\rho$ où μ est le potentiel chimique et ρ la densité dans l'état fondamental. Le second type d'excitations n'est pas garanti : il correspond à des quasi-particules, appelées ici γ pour abréger, présentant une bande d'énergie interdite $\Delta_* > 0$ et un comportement de particule massive, c'est-à-dire avec une relation de dispersion parabolique au voisinage du minimum :

$$\epsilon_k = \sum_{k \to k_0} \Delta_* + \frac{\hbar^2 (k - k_0)^2}{2m_*} + \frac{\hbar^2 (k - k_0)^3 b}{3m_*} + O(k - k_0)^4$$
(2)

La masse effective m_* est strictement positive, mais la position k_0 du minimum dans l'espace des nombres d'onde peut être strictement positive ou nulle selon les cas; le coefficient *b* a la dimension d'une longueur et est *a priori* non nul seulement si $k_0 > 0$. Les excitations des deux types sont couplées entre elles, au sens où une quasi-particule γ peut absorber ou émettre des phonons, par exemple.

À température nulle, une quasi-particule γ de nombre d'onde k assez proche de k_0 , donc d'énergie assez proche de Δ_* , a une vitesse de groupe suffisamment faible, en particulier inférieure à la vitesse du son, et ne peut émettre de phonons sans violer la conservation de l'énergieimpulsion selon un argument assez classique dû à Landau, du moins s'il y a également conservation du nombre total de quasi-particules γ , comme c'est le cas pour une impureté, c'est-à-dire un atome d'une autre espèce dans le superfluide, ou de la parité de ce nombre total, comme c'est le cas pour une excitation élémentaire fermionique du superfluide (un contre-exemple connu à l'argument purement cinématique de Landau est celui du biroton dans l'hélium 4, dont la relation de dispersion est de la forme (2) avec $k_0 = 0$ et qui peut se désintégrer en phonons [1,2]). La quasi-particule est alors stable et avance dans le fluide de manière balistique, sans amortissement.

À une température *T* non nulle mais arbitrairement basse, la branche d'excitation acoustique est peuplée thermiquement, si bien qu'un gaz de phonons à l'équilibre coexiste avec le superfluide. La quasi-particule γ présente, qui était stable à température nulle, subit désormais des collisions aléatoires avec les phonons et décrit une marche au hasard dans l'espace des impulsions $\hbar \mathbf{k}$. Dans la limite quasi-classique où la largeur Δk de la distribution en nombre d'onde de γ est assez grande, de manière que la longueur de cohérence $1/\Delta k$ de γ soit beaucoup plus faible que la longueur d'onde typique des phonons thermiques,

$$\frac{1}{\Delta k} \ll \frac{\hbar c}{k_B T} \tag{3}$$

on peut caractériser cette marche au hasard par une force moyenne $\mathbf{F}(\mathbf{k})$ et une matrice de diffusion en impulsion $\underline{\underline{D}}(\mathbf{k})$ intervenant dans une équation de Fokker–Planck. La quasi-particule γ effectue également une marche au hasard dans l'espace des positions, un mouvement brownien, que l'on caractérise aux temps longs par un coefficient de diffusion spatiale \mathcal{D}^{spa} . L'objectif du présent travail est de calculer la force et la diffusion à l'ordre dominant en température, pour toute valeur du nombre d'onde k où la quasi-particule γ est stable à température nulle. Il faut pour cela déterminer l'amplitude de diffusion d'un phonon sur la quasi-particule γ à l'ordre dominant en le nombre d'onde q du phonon pour une vitesse subsonique quelconque de γ , ce qui, à notre connaissance, n'a pas été fait dans la littérature; les références [3, 4] se limitent ainsi aux faibles vitesses, comme en témoigne l'action rotonique (30) de la référence [3] limitée aux deux premiers termes de notre développement (2).

Plusieurs systèmes présentent les deux types d'excitations requis. Dans le cas d'un système bosonique, on pense immédiatement à l'hélium 4 liquide superfluide, dont l'unique branche d'excitation comporte à la fois un départ linéaire acoustique à nombre d'onde nul et un minimum relatif quadratique à un nombre d'onde k_0 non nul; la quasi-particule massive γ associée au minimum est un roton selon la terminologie consacrée. Bien qu'il n'y ait pas de loi de conservation de leur nombre, les rotons de nombre d'onde k proche de k_0 sont stables vis-à-vis de l'émission de phonons de vecteurs d'onde arbitraires [3]. Dans le cas d'un système fermionique, viennent à l'esprit les gaz d'atomes froids à deux états de spin ↑ et ↓ : dans le gaz non polarisé, c'est-àdire avec exactement le même nombre de fermions dans chaque état de spin, à suffisamment basse température, les fermions se regroupent par paires liées 11 sous l'effet des interactions attractives entre atomes de spins opposés, ces paires forment un condensat et un superfluide avec une branche d'excitation acoustique. Une excitation par brisure de paire créerait deux fragments, chacun étant une quasi-particule fermionique γ de bande interdite Δ_* la demi-énergie de liaison de la paire et de relation de dispersion parabolique au voisinage du minimum. Pour avoir une seule quasi-particule γ présente, il suffit d'ajouter au gaz non polarisé un unique fermion \uparrow ou \downarrow , qui restera non apparié et formera la quasi-particule souhaitée.¹ Le cas homogène spatialement est réalisable dans une boîte de potentiel à fond plat [5-8].

Pour fixer les idées, nous ferons des calculs *explicites* du domaine de stabilité de γ à T = 0, puis de la force et de la diffusion qu'elle subit à T > 0, seulement dans le cas d'un gaz d'atomes froids fermioniques, en utilisant faute de mieux la théorie BCS, pour une force des interactions quelconque puisque la longueur de diffusion a entre \uparrow et \downarrow est ajustable à volonté par résonance de Feshbach [9–14]. Il nous semble alors que la marche au hasard de γ dans l'espace des impulsions ou des positions est accessible expérimentalement, puisqu'on peut séparer l'atome fermionique non apparié des fermions appariés pour le manipuler et l'imager, en transformant ceux-ci en molécules dimères fortement liées par rampe de Feshbach rapide vers la limite CBE (condensat de Bose–Einstein) $a \rightarrow 0^+$ [15]. Afin de rendre la discussion moins abstraite, décrivons un possible protocole expérimental dans ses grandes lignes :

- Dans un piège à fond plat, on prépare à très basse température un gaz d'atomes froids fermioniques très faiblement polarisé, avec un peu plus de fermions dans l'état de spin ↑ que dans l'état ↓; les N_↑ - N_↓ fermions non appariés donnent naissance à autant de quasi-particules γ dans le gaz en interaction. Cette idée a été mise en œuvre au MIT [16]. À ce stade, les quasi-particules γ ont une distribution en impulsion ∝ exp[-ħ²(k - k₀)²/2m_{*} k_BT] et une distribution en position uniforme.
- 2. Par une rampe de Feshbach lente sur le champ magnétique, on modifie la longueur de diffusion *a* entre atomes adiabatiquement, sans mettre le gaz hors d'équilibre thermique. On peut ainsi changer à volonté la position $k_0 = 0$ ou $k_0 > 0$ du minimum de ϵ_k , de manière réversible. Chaque fois que l'on veut agir sur les quasi-particules γ pour manipuler leur distribution en impulsion ou en position par un champ électromagnétique (laser, radiofréquence) *sans affecter les paires liées*, ou simplement pour imager ces distributions [15], on effectue une rampe de Feshbach rapide (seul l'état interne des paires

¹À température non nulle, il existe une fraction non nulle de paires liées brisées thermiquement, mais c'est un $O(T^{\nu} \exp(-\Delta_* / k_B T))$ ($\nu = 1/2$ si $k_0 > 0$, $\nu = 3/2$ si $k_0 = 0$) que nous négligeons dans la suite.

liées suit, le gaz n'a pas le temps de se thermaliser) vers une longueur de diffusion très faible et positive a_{action} ; à cette valeur, les paires liées existent sous forme de dimères fortement liés de fréquence de résonance avec le champ électromagnétique très différente de celle des atomes non appariés, ce qui permet l'action sélective souhaitée, comme il a été fait à l'ENS [17]; si nécessaire, on effectue une rampe de Feshbach rapide pour revenir à la longueur de diffusion initiale.

- 3. Pour observer la diffusion en position (Section 4, équation (83)), il faut initialement filtrer spatialement les quasi-particules γ , par exemple en envoyant un champ pousseur ou videur d'état interne masqué par un disque opaque, ce qui élimine les quasi-particules en dehors d'un cylindre (comme au point 2 pour ne pas perturber les paires liées); on filtre de même selon une direction orthogonale, pour laisser intacte une boule de quasi-particules γ dans l'espace des positions, dont on peut ensuite mesurer l'étalement au cours du temps (comme au point 2).
- 4. Pour accéder à la force moyenne et à la diffusion en impulsion (Section 4, équation (50)) au vecteur d'onde \mathbf{k}_{cible} , on prépare les quasi-particules γ avec une distribution en impulsion étroite hors d'équilibre autour de $\mathbf{k} = \mathbf{k}_{cible}$, puis on mesure en fonction du temps la moyenne de \mathbf{k} et ses variances et covariances. La distribution étroite résulte, par exemple, d'un transfert Raman de $\mathbf{k} \simeq \mathbf{0}$ à $\mathbf{k} \simeq \mathbf{k}_{cible}$ des quasi-particules dans la phase intermédiaire $a = a_{action}$ du point 2, où l'on s'est arrangé pour avoir une distribution centrée sur l'impulsion nulle par passage adiabatique préalable dans un régime $k_0 = 0$.

Ceci permettrait, sinon de mesurer, du moins de contraindre l'amplitude de diffusion \mathscr{A} entre phonons et quasi-particule γ , dont **F**, \underline{D} et \mathscr{D}^{spa} dépendent. Il y a pour cela une forte motivation : l'expression exacte de cette amplitude à l'ordre dominant en q ne fait pas encore l'unanimité, les références [3] et [4] restant en désaccord, même si l'on tient compte comme dans l'erratum [18] de l'interaction entre phonons omise dans [4], et les expériences n'ont à notre connaissance pas encore tranché [19]. Nous en profiterons pour rendre plus convaincant et plus solide le calcul de \mathscr{A} à partir du hamiltonien effectif de basse énergie de la référence [4].

2. Domaine de stabilité dans l'espace des impulsions de la quasi-particule γ à T = 0

Considérons une quasi-particule γ de vecteur d'onde initial **k** dans le superfluide à température nulle, donc en l'absence initiale de phonons ou autres excitations, et étudions la stabilité de cette quasi-particule vis-à-vis de l'émission d'excitations dans le superfluide. Dans cette partie, à but illustratif, nous supposons que le nombre de quasi-particules γ est conservé, sauf en fin de section où il est conservé modulo 2, et nous utilisons des relations de dispersion de type champ moyen pour la quasi-particule γ et les phonons (en l'occurrence, la théorie BCS et la RPA d'Anderson), à valeurs réelles.

Émission de phonons. Tout d'abord, la quasi-particule γ peut émettre un nombre *a priori* quelconque $n \ge 1$ de phonons de vecteurs d'onde \mathbf{q}_i , $1 \le i \le n$, en reculant pour conserver la quantité de mouvement. Le changement d'énergie correspondant vaut

$$\Delta E = \epsilon_{\mathbf{k} - \sum_{i=1}^{n} \mathbf{q}_{i}} + \left(\sum_{i=1}^{n} \hbar \omega_{\mathbf{q}_{i}}\right) - \epsilon_{\mathbf{k}}$$
(4)

où l'on note indifféremment $\omega_{\mathbf{q}}$ ou ω_q la relation de dispersion en pulsation des phonons et $\epsilon_{\mathbf{k}}$ ou ϵ_k la relation de dispersion en énergie de la quasi-particule γ . Lorsque les \mathbf{q}_i décrivent le domaine d'existence D^* de la branche acoustique, et que *n* décrit \mathbb{N}^* , l'énergie $\epsilon_{\mathbf{k}} + \Delta E$ de l'état final décrit un continuum d'énergie. Il y a donc deux cas possibles : (i) ΔE est toujours positif,

l'énergie $\epsilon_{\mathbf{k}}$ se trouve au bord inférieur du continuum,² l'état initial $|\gamma : \mathbf{k}\rangle$ de la quasi-particule reste un état discret et γ est *stable* au vecteur d'onde \mathbf{k} considéré; (ii) ΔE n'est pas toujours positif, l'énergie initiale $\epsilon_{\mathbf{k}}$ de la quasi-particule se trouve à l'intérieur du continuum d'énergie, l'émission résonnante de phonons (avec $\Delta E = 0$) est possible, l'état initial $|\gamma : \mathbf{k}\rangle$ se dilue dans le continuum et donne naissance à une résonance d'énergie complexe, et la quasi-particule γ est *instable* au vecteur d'onde \mathbf{k} considéré.

Pour trancher entre les deux cas, il faut déterminer le bord inférieur $\epsilon_{\mathbf{k}} + \Delta E_{inf}(\mathbf{k})$ du continuum, en minimisant ΔE sur le nombre et les vecteurs d'onde des phonons émis. Cette minimisation peut être effectuée en deux temps : à vecteur d'onde total des phonons émis fixé, $\mathbf{Q} = \sum_{i=1}^{n} \mathbf{q}_i$, on minimise l'énergie pour obtenir une relation de dispersion acoustique effective³

$$\hbar\omega_{\rm eff}(\mathbf{Q}) = \min_{n \in \mathbb{N}^*} \min_{\{(\mathbf{q}_i)_{1 \le i \le n} \in D^n | \sum_{i=1}^n \mathbf{q}_i = \mathbf{Q}\}} \sum_{i=1}^n \hbar\omega_{\mathbf{q}_i}$$
(5)

puis on minimise sur **Q** :

$$\Delta E_{\inf}(\mathbf{k}) = \min_{\mathbf{Q}} \Delta E(\mathbf{Q}) \quad \text{avec} \quad \Delta E(\mathbf{Q}) \equiv \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} + \hbar \omega_{\text{eff}}(\mathbf{Q}) \tag{6}$$

Si $\Delta E_{inf}(\mathbf{k}) < 0$, la quasi-particule γ est instable au vecteur d'onde \mathbf{k} , sinon elle est stable. Il est instructif d'effectuer une étude locale à faible nombre d'onde total émis Q: du comportement (1) et des remarques simplificatrices qui suivent, nous tirons $\omega_{eff}(\mathbf{Q}) = cQ + O(Q^3)$ ce qui conduit au développement

$$\Delta E(\mathbf{Q}) = \hbar c Q (1 - |v_k/c|) + \frac{1}{2} Q^2 \frac{d^2 \epsilon_k}{dk^2} + O(Q^3)$$
(7)

où la direction de **Q**, choisie pour minimiser l'énergie, est celle de **k** si la vitesse de groupe $v_k = d\epsilon_k/\hbar dk$ de la quasi-particule γ est positive, et celle de $-\mathbf{k}$ sinon. Ceci fournit un premier scénario d'instabilité possible, bien connu : si la quasi-particule γ est supersonique ($|v_k| > c$), elle peut se freiner en émettant des phonons de nombre d'onde arbitrairement faible. Si le passage d'un intervalle de k où γ est stable à un intervalle de k où γ est instable se fait selon ce scénario, c'est-à-dire par franchissement de la vitesse du son en le nombre critique k_c , $\Delta E_{inf}(k)$ varie quadratiquement au voisinage de k_c du côté instable, suivant la loi déduite de l'équation (7) :⁴

$$\Delta E_{\inf}(k) = \frac{1}{k \to k_c} - \frac{1}{2} \left. \frac{\mathrm{d}^2 \epsilon_k}{\mathrm{d}k^2} \right|_{k=k_c} (k-k_c)^2 + O(k-k_c)^3 \tag{8}$$

Pour la cohérence interne de ce scénario, il faut que la dérivée seconde de ϵ_k soit positive en $k = k_c :$ on a $|v_{k_c}| = c$ et $\Delta E(k = k_c, \mathbf{Q})$ doit atteindre son minimum en Q = 0; dans le cas contraire, le passage à $\Delta E_{inf}(k) < 0$ aurait eu lieu avant le seuil sonique. Nous avons donc affaire ici à une déstabilisation du second ordre, voir la Figure 1a. Un deuxième scénario d'instabilité possible est que la vitesse de groupe reste subsonique mais que $\Delta E(\mathbf{Q})$ admette un minimum absolu strictement négatif en $\mathbf{Q}_0(\mathbf{k}) \neq \mathbf{0}$: la quasi-particule γ réduit son énergie en émettant des phonons d'impulsion totale nécessairement non infinitésimale. Lorsque k passe de la zone stable à la zone instable, la position du minimum de $\Delta E(\mathbf{Q})$ saute alors de manière discontinue de la valeur nulle

²Pour le voir, il suffit de faire tendre les \mathbf{q}_i vers zéro dans ΔE .

³Comme le domaine d'existence D^* ne contient pas le vecteur d'onde nul, il faut en principe prendre la borne inférieure sur les \mathbf{q}_i . On se ramène à la prise d'un minimum en ajoutant le vecteur nul non physique à D^* , $D = D^* \cup \{\mathbf{0}\}$, et en prolongeant $\omega_{\mathbf{q}}$ par continuité, $\omega_{\mathbf{q}=\mathbf{0}} = 0$.

⁴La notation allégée $\Delta E_{inf}(k)$ tire parti de l'invariance par rotation de $\Delta E_{inf}(\mathbf{k})$. Tout près de k_c , du côté supersonique, l'approximation quadratique (7) atteint son minimum en $Q_0(k) = (|v_k|/c - 1)\hbar c/(d^2\epsilon_k/dk^2)$, et ce minimum vaut $\Delta E_{inf}(k) = -[\hbar c(1 - |v_k|/c)]^2/(2d^2\epsilon_k/dk^2)$. Il reste à linéariser la vitesse de groupe au voisinage de $k = k_c$, $\hbar v_k \approx \pm \hbar c + (d^2\epsilon_k/dk^2)|_{k=k_c}(k-k_c)$, pour obtenir (8).



FIGURE 1. Les différents scénarios de déstabilisation d'une quasi-particule massive γ de nombre d'onde k par émission de phonons dans un superfluide lorsque le nombre total de γ est conservé et que les relations de dispersion sont à valeurs réelles (comme celles des théories de champ moyen). (a) La vitesse de groupe v_k de la quasi-particule passe de subsonique à supersonique lorsque k croise k_c (par exemple de gauche à droite); le changement d'énergie $\Delta E(\mathbf{Q})$ à l'émission d'une quantité de mouvement phononique totale $\hbar \mathbf{Q}$ fixée (voir l'équation (6)) est minimal en $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$ pour $k < k_c$ et en $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0(\mathbf{k}) \neq \mathbf{0}$ pour $k > k_c$, où le module $Q_0(k)$ tend linéairement vers zéro lorsque $k \rightarrow k_c^+$, comme en (a1); le minimum absolu $\Delta E_{inf}(k)$ du changement d'énergie s'écarte de zéro quadratiquement près de k_c et la déstabilisation est du second ordre, comme en (a2). (b) La vitesse de groupe v_k reste subsonique lorsque k croise k_c , mais le minimum de $\Delta E(\mathbf{Q})$ en $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0(\mathbf{k}) \neq \mathbf{0}$, qui n'était que relatif pour $k < k_c$, devient absolu (et strictement négatif) pour $k > k_c$, comme en (b1); $\Delta E_{inf}(k)$ s'écarte de zéro linéairement et la déstabilisation est du premier ordre, comme en (b2). En (a1) et (b1), la figure est tracée dans l'espace des Q selon la direction de **k** ou -**k**, suivant que la vitesse de groupe de γ après émission $v_{|\mathbf{k}-\mathbf{Q}_0(\mathbf{k})|}$ est > 0 ou < 0 (c'est la direction du minimiseur $\mathbf{Q}_0(\mathbf{k})$ si $Q_0(k) > 0$, voir la note 6, et celle choisie dans l'équation (7) sinon).

à la valeur $\mathbf{Q}_0(\mathbf{k})$ non nulle en $k = k_c$, $\Delta E_{inf}(k)$ varie linéairement au voisinage de k_c du côté instable⁵ et la déstabilisation est du premier ordre, voir la Figure 1b.⁶

Déterminons explicitement la carte de stabilité d'une quasi-particule γ dans un gaz de fermions condensé par paires, à l'aide de la théorie approchée BCS. La relation de dispersion de la quasi-particule γ est alors donnée par

$$\epsilon_k = \left[\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} - \mu \right)^2 + \Delta^2 \right]^{1/2} \tag{9}$$

où *m* est la masse d'un fermion, μ est le potentiel chimique du gaz et $\Delta > 0$ son paramètre d'ordre. Si $\mu > 0$, le minimum de ϵ_k est atteint en $k_0 = (2m\mu)^{1/2}/\hbar > 0$, vaut $\Delta_* = \Delta$ et conduit à une masse effective $m_* = m\Delta/2\mu$. Si en revanche $\mu < 0$, le minimum de ϵ_k est atteint en $k_0 = 0$,

⁵En supposant $\mathbf{Q}_0(\mathbf{k})$ colinéaire à \mathbf{k} (voir la note 6), on dérive $\Delta E_{\inf}(k) = \Delta E(k, Q_0(k))$ par rapport à k (avec des notations évidentes) et on utilise le fait que $\partial_Q \Delta E = 0$ en $Q = Q_0(k)$ pour obtenir $\Delta \Delta E_{\inf}(k)/dk = \partial_k \Delta E(k, Q_0(k))$ de limite *a priori* non nulle en $k = k_c$ (si les vitesses de groupe de γ diffèrent avant et après l'émission phononique).

⁶Par isotropie, seule la première contribution à $\Delta E(\mathbf{Q})$ dans l'équation (6) dépend du cosinus *u* de l'angle entre **k** et **Q**. Pour k > 0 et $Q = Q_0(k) > 0$ fixés et *u* décrivant [-1,1], deux cas se présentent. (i) $\Delta E(\mathbf{Q})$ est minimal au bord u = 1 ou u = -1 ($\mathbf{Q}_0(\mathbf{k})$ et **k** sont colinéaires) : sa dérivée par rapport à *u* n'est pas nécessairement nulle au minimum, mais doit être respectivement négative ou positive; or, $d\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}}/du = (-\hbar kQ/|\mathbf{k}-\mathbf{Q}|)v_{|\mathbf{k}-\mathbf{Q}|}$ d'où le signe de la vitesse de groupe finale de la quasi-particule énoncé dans la légende de la Figure 1. (ii) $\Delta E(\mathbf{Q})$ est minimal en $u_0 \in]-1,1[$ (**k** et $\mathbf{Q}_0(\mathbf{k})$ ne sont pas colinéaires); alors $d\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}}/du$ est nul au minimum et on se trouve dans le cas particulier $v_{|\mathbf{k}-\mathbf{Q}_0(\mathbf{k})| = 0$; en exprimant de plus l'annulation de la différentielle première $\Delta E(\mathbf{Q})$ par rapport à \mathbf{Q} en $\mathbf{Q}_0(\mathbf{k})$, on trouve que la vitesse de groupe phononique doit s'annuler aussi, $d\omega_{\text{eff}}(\mathbf{Q}_0(\mathbf{k}))/dQ = 0$; la positivité de la différentielle seconde requiert que ϵ_K et $\omega_{\text{eff}}(\mathbf{Q})$ présentent un minimum en $K = |\mathbf{k} - \mathbf{Q}_0(\mathbf{k})|$ et $\mathbf{Q} = \mathbf{Q}_0(\mathbf{k})$.

vaut $\Delta_* = (\Delta^2 + \mu^2)^{1/2}$ et conduit à la masse effective $m_* = m\Delta_*/|\mu|$. La relation de dispersion des phonons se déduit de la RPA d'Anderson ou, ce qui revient au même, de la théorie BCS dépendant du temps linéarisée autour de la solution stationnaire. Elle a été étudiée en détail dans les références [20–22]. Disons simplement qu'elle a un domaine d'existence *D* invariant par rotation de la forme compacte connexe $q \le q_{sup}$ pour une longueur de diffusion a < 0 (soit $0 < \Delta/\mu < 1,162$ d'après la théorie BCS), de la forme à deux composantes connexes $q \le q_{sup}$ et $q \ge q_{inf} > q_{sup}$ pour 1,162 $< \Delta/\mu < 1,729$, et donné par \mathbb{R}^3 tout entier pour $\Delta/\mu > 1,729$ ou $\mu < 0$. Le calcul de $\hbar \omega_{eff}(\mathbf{Q})$ par minimisation numérique de l'énergie sur le nombre de phonons *n* et leurs vecteurs d'onde \mathbf{q}_i à vecteur d'onde total \mathbf{Q} fixé, comme dans l'équation (5), est facilité par les remarques suivantes :⁷

- (a) si *D* est connexe, on peut imposer sans rien perdre sur l'énergie que tous les q_i sont colinéaires à Q et de même sens, comme nous le faisons dans la suite de ces remarques. Il reste à minimiser sur *n* et les nombres d'onde q_i.
- (b) si ω_q est concave sur l'intervalle $[q_a, q_b]$, et que deux nombres d'onde d'essai q_i et q_j se trouvent dans cet intervalle, on abaisse l'énergie à Q fixé en les écartant symétriquement de leur moyenne $(q_i + q_j)/2$ jusqu'à ce que l'un des deux atteigne q_a ou q_b . S'il y avait $s \ge 2$ nombres d'essai dans l'intervalle, on se ramène ainsi à une configuration avec s_a nombres d'onde en q_a , s_b en q_b et zéro ou un dans l'intérieur de l'intervalle.
- (c) si ω_q est convexe sur l'intervalle $[q_a, q_b]$, et que deux nombres d'onde d'essai q_i et q_j se trouvent dans cet intervalle, on abaisse l'énergie à Q fixé en les faisant converger symétriquement vers leur valeur moyenne $(q_i + q_j)/2$. S'il y a plus de deux nombres d'essai dans l'intervalle, on les fait tous coalescer en leur valeur moyenne.
- (d) si de plus $q_a = 0$, on abaisse l'énergie à Q fixé en remplaçant le nombre d'onde d'essai coalescé Q_{coa} par un nombre divergent S de phonons de nombres d'onde égaux infinité-simaux Q_{coa}/S , ce qui permet de linéariser la relation de dispersion en q = 0 et conduit à l'énergie coalescée $\hbar c Q_{coa}$.

Donnons un premier exemple de réduction du problème dans le cas $1,221 < \Delta/\mu < 1,710$, en nous limitant à la composante connexe basse du domaine d'existence *D*, la boule de centre **0** de rayon q_{sup} , où la branche acoustique présente deux points d'inflexion q_a et q_b [21] : ω_q est convexe sur l'intervalle [0, q_a], concave sur [q_a, q_b] et à nouveau convexe sur [q_b, q_{sup}]. On peut donc paramétrer l'énergie des phonons dans cette boule comme suit,

$$\hbar\omega_{\rm eff}(Q) = \hbar c Q_1 + \hbar \omega_{q_2} + n_3 \hbar \omega_{q_3} \quad \text{ou} \quad \hbar c Q_1 + n_3 \hbar \omega_{q_3} \tag{10}$$

avec la contrainte $Q = Q_1 + q_2 + n_3 q_3$ ou $Q = Q_1 + n_3 q_3$, Q_1 positif quelconque, $q_2 \in]q_a, q_b[, n_3 \in \mathbb{N}$ et $q_3 \in [q_b, q_{sup}]$. On peut simplifier encore en notant qu'il ne peut y avoir de phonon q_2 que si $Q_1 = 0.^8$ Il reste à minimiser numériquement $\hbar c Q_1 + n_3 \hbar \omega_{q_3}$ ou $\hbar \omega_{q_2} + n_3 \hbar \omega_{q_3}$ par rapport

⁷En voici de brèves justifications, sachant que ω_q est une fonction positive croissante de q. (a) : si $D = B(\mathbf{0}, q_{sup})$ et P projette orthogonalement sur \mathbf{Q} , alors (i) D est stable par l'action de P, (ii) la substitution $\mathbf{q}_i \rightarrow P\mathbf{q}_i$ ne change pas le vecteur d'onde total et n'augmente pas l'énergie; on peut donc se limiter à \mathbf{q}_i colinéaire à \mathbf{Q} . Si \mathbf{q}_i et \mathbf{q}_j sont colinéaires mais de sens opposés, avec $q_i \ge q_j$, on abaisse l'énergie à vecteur d'onde total fixé (sans sortir de D) par la substitution $(\mathbf{q}_i, \mathbf{q}_j) \rightarrow (\mathbf{q}_i + \mathbf{q}_j, \mathbf{0})$; on peut donc se limiter à des \mathbf{q}_i colinéaires à \mathbf{Q} et de même sens. (b), (c) : si $q_i < q_j$ se trouvent dans un intervalle de concavité (convexité) de ω_q , et que l'on pose $Q_{ij} = q_i + q_j$, la fonction $q \mapsto \omega_q + \omega_{Q_{ij}-q}$ est de dérivée positive (négative) en $q = q_i < Q_{ij}/2$, car la dérivée de ω_q est décroissante (croissante), donc on abaisse l'énergie en réduisant (augmentant) q_i à Q_{ij} fixé.

⁸Si $Q_1 > 0$ en présence d'un phonon q_2 , effectuons la variation $(Q_1, q_2) \rightarrow (Q_1 + \eta, q_2 - \eta)$ où η est infinitésimal de signe quelconque. Le changement d'énergie correspondant dans (10) est $\delta E = \hbar [c - v(q_2)]\eta + (1/2)\hbar [dv(q_2)/dq]\eta^2 + O(\eta^3)$, où $v(q) = d\omega_q/dq$ est la vitesse de groupe des phonons. δE doit toujours être positif puisqu'on s'écarte du minimum d'énergie. Le coefficient de η doit donc être nul, ce qui n'est pas exclu *a priori*; celui de η^2 doit être positif, ce qu'interdit la concavité stricte de la branche acoustique en q_2 . Si $Q_1 = 0$, η est nécessairement positif et ce raisonnement impose seulement $v(q_2) \leq c$.



FIGURE 2. Carte de stabilité d'une quasi-particule fermionique γ dans un gaz non polarisé de fermions condensé par paires à température nulle, dans le plan (nombre d'onde k de γ , force des interactions), prédite par la théorie BCS. (a) Cas d'un potentiel chimique $\mu > 0$. (b) Cas d'un potentiel chimique $\mu < 0$. (c) Agrandissement du cas (a) autour du point critique S, après recentrage sur S ($\delta k = k - k_{\rm S}$ et $\delta \Delta = \Delta - \Delta_{\rm S}$ avec $k_{\rm S} \simeq 0,731 k_{\mu}$ et $\Delta_{\rm S} \simeq 0,408 \mu$); en trait plein, les résultats de (a) [la ligne verte est en réalité une interpolation des points (les cercles) réellement calculés, qui correspondent aux valeurs de Δ/μ de la référence [22] pour lesquelles la relation de dispersion $q \mapsto \omega_{\mathbf{q}}$ de la RPA a été déterminée numériquement], en pointillé les départs quadratiques (13) avec $A \simeq 1, 121 k_{\mu}^{-1}, B \simeq 14, 178 \mu k_{\mu}^{-3}, C \simeq 5, 929 \mu k_{\mu}^{-3}$. En rouge : lignes soniques $v_k = \pm c$ de déstabilisation du second ordre (déstabilisation par émission de phonons de nombres d'onde infinitésimaux), où v_k est la vitesse de groupe de γ et c la vitesse du son. En vert : ligne de déstabilisation du premier ordre (déstabilisation par émission de phonons à nombre d'onde total non infinitésimal). En noir : lignes de déstabilisation par brisure d'une paire liée $\uparrow\downarrow$ [on prend (n = 0, s = 1) dans l'équation (16); pour $\mu > 0$ et $k < 3k_0$, ce sont les lignes d'annulation du minorant dans l'équation (17)]. En tireté : lignes de déstabilisation déjà mentionnées mais se trouvant en dessous d'autres lignes de déstabilisation et ne changeant donc pas la carte de stabilité. k est en unités de $k_{\mu} = (2m|\mu|)^{1/2}/\hbar$ (pour $\mu > 0$, c'est aussi le nombre d'onde k_0 minimisant l'énergie ϵ_k de la quasi-particule γ ; pour $\mu < 0$, $k_0 = 0$). La force des interactions est repérée par $\Delta/|\mu|$, où $\Delta > 0$ est le paramètre d'ordre du gaz de fermions.

aux paramètres indépendants restants. Donnons deux autres exemples : dans le cas $\Delta > 1,729\mu$ ou $\mu < 0$, la branche acoustique existe et est convexe sur tout \mathbb{R}^+ , si bien que $\hbar \omega_{\text{eff}}(Q) = \hbar cQ$; dans le cas $0 < \Delta/\mu < 0,869$, la branche acoustique est concave sur tout son domaine d'existence $q \in [0, q_{\text{sup}}]$, si bien que $\hbar \omega_{\text{eff}}(Q) = \hbar \omega_{Q-nq_{\text{sup}}} + n\hbar \omega_{q_{\text{sup}}}$ où *n* est la partie entière de Q/q_{sup} . En pratique, même dans l'approximation de la RPA, il n'y pas d'expression analytique connue de ω_q . Or, pour l'étude de stabilité de γ , nous avons en général besoin de connaître la branche acoustique sur tout son domaine d'existence, pas seulement à faible *q*; nous réutilisons donc les résultats numériques sur ω_q obtenus dans la référence [22].

La carte de stabilité obtenue dans le plan (nombre d'onde, force des interactions) dans le cas $\mu > 0$ est représentée sur la Figure 2a. Le domaine de stabilité est limité inférieurement à droite de $k = k_0$ par la ligne de déstabilisation sonique positive $v_k = c$, asymptotiquement parabolique,⁹ à gauche de $k = k_0$ d'abord par la ligne de déstabilisation du premier ordre CS puis par la ligne de déstabilisation sonique négative SA (sur laquelle $v_k = -c$). La partie ascendante BS de cette ligne sonique, en tireté sur la figure, est masquée par l'instabilité à Q non infinitésimal et n'a donc pas de signification physique. On aura noté que la relation de dispersion (9) admet

⁹Pour $\mu > 0$, on trouve $\Delta/\mu \sim y(k/k_0)^2$ si $k/k_0 \rightarrow +\infty$ à $v_k/c = 1$ fixé. Ici $y \simeq 1,828$ est la solution positive de $y(1+y^2) = 2\Delta/mc^2|_{\mu=0} = 3(Y+1/Y)$ avec $Y = \pi^2/[2\Gamma^4(3/4)]$.

un maximum parabolique en k = 0 (ici $\mu > 0$) : la quasi-particule massive correspondante est parfois appelée *maxon*. La théorie BCS prédit donc que le maxon est stable pour des interactions assez fortes, $\Delta/\mu > (\Delta/\mu)_{\rm C} \simeq 0,35$. Dans la limite opposée d'une interaction faible, le domaine de stabilité se réduit à l'intervalle étroit centré sur k_0 et de mi-largeur $m\Delta/\sqrt{2}\hbar^2 k_0$. Le cas $\mu < 0$, représentée sur la Figure 2b, est plus pauvre : le domaine de stabilité est simplement limité à droite par la ligne sonique positive, donnée par $\hbar k/m = c$ dans la limite CBE (soit une pente 4 à l'origine sur la Figure 2b dans la théorie BCS) et par $\Delta = y\hbar^2 k^2/2m$ dans la limite $\mu = 0^-$ (soit une loi asymptotique parabolique sur la Figure 2b), avec le même coefficient *y* que dans la note 9.

Une étude des lignes de déstabilisation au voisinage du point sommital S de la Figure 2a peut être effectuée analytiquement. Considérons par commodité la relation de dispersion (9) comme une fonction $\epsilon(k, \Delta)$ de k et Δ à longueur de diffusion a fixée; de même, la branche acoustique est vue comme une fonction $\omega(q, \Delta)$. Sur la ligne sonique SA (SB), la dérivée seconde $\partial_k^2 \epsilon$ est positive (négative), comme le montre la discussion après l'équation (8), et s'annule par continuité au point sommital. Les coordonnées (k_S, Δ_S) de S dans le plan (k, Δ) se déduisent donc du système

$$\partial_k \varepsilon_k |_{\mathbf{S}} = -\hbar c |_{\mathbf{S}} \quad \text{et} \quad \partial_k^2 \varepsilon_k |_{\mathbf{S}} = 0$$
(11)

Près du point critique S, on trouve que $\delta k \equiv k - k_{\rm S}$ et le minimiseur $Q_0(k)$ sont des infiniment petits du premier ordre, alors que $\delta \Delta \equiv \Delta - \Delta_{\rm S}$ est un infiniment petit du second ordre. Il suffit alors de développer $\Delta E(\mathbf{Q})$ à l'ordre trois, en utilisant le fait que \mathbf{Q} , infiniment petit du premier ordre, est antiparallèle à \mathbf{k} comme il est dit après l'équation (7), et que $\omega_{\rm eff}(\mathbf{Q}) = \omega(Q, \Delta)$ dans le cas concave ($\Delta < 0, 869\mu$) à faible Q ($Q < q_{\rm sup}$),

$$\Delta E(\mathbf{Q}) \stackrel{=}{_{Q \to 0}} Q \left[A\delta\Delta + \frac{1}{2}B(\delta k)^2 \right] + \frac{1}{2}Q^2 B\delta k + \frac{1}{3}Q^3 C + O(Q^4)$$

$$\text{avec} \begin{cases} A = \partial_k \partial_\Delta \epsilon|_{\mathrm{S}} + \hbar \partial_\Delta c|_{\mathrm{S}} > 0\\ B = \partial_k^3 \epsilon|_{\mathrm{S}} > 0\\ C = \frac{1}{2}B + \frac{3}{8}\hbar c\gamma_{\phi} \left(\frac{\hbar}{mc}\right)^2|_{\mathrm{S}} > 0 \end{cases}$$
(12)

où l'absence de termes infiniment petits du premier ou du second ordre résulte du système (11), le coefficient γ_{ϕ} est celui de l'équation (1) et les signes sont prédits par la théorie BCS. On obtient alors le départ quadratique des lignes SC et BSA du point S comme sur la Figure 2c :¹⁰

$$\delta\Delta \sum_{\delta \vec{k} \to 0^{-}}^{\text{SC}} \frac{(3B - 8C)B}{16AC} (\delta k)^2, \quad \delta\Delta \sum_{\delta \vec{k} \to 0}^{\text{BSA}} - \frac{B}{2A} (\delta k)^2$$
(13)

Bien qu'intéressants, tous ces résultats sur la déstabilisation de γ par couplage aux phonons sont approchés, rappelons-le. Ils reposent sur la relation de dispersion (9) de la quasi-particule, issue de la théorie BCS d'ordre zéro, qui ignore justement le couplage de γ aux phonons; or, l'effet de ce couplage sur ϵ_k est *a priori* loin d'être négligeable au voisinage d'une instabilité de γ , en particulier subsonique du premier ordre, comme le montre la référence [23]. Dans ce contexte, une vérification expérimentale dans un gaz d'atomes froids fermioniques, à notre connaissance jamais effectuée, serait la bienvenue.

¹⁰Écrivons le second membre de (12) sous la forme $\Delta E = c_1 Q + c_2 Q^2 / 2 + c_3 Q^3 / 3$. Sur la ligne de déstabilisation sonique, on a simplement $c_1 = 0$. Sur la ligne de déstabilisation du premier ordre, il existe Q_c tel que $\Delta E(Q_c) = d\Delta E(Q_c)/dQ = 0$, comme le suggère la Figure 1b1, c'est-à-dire que le discriminant du polynôme de degré 3 en Q s'annule, $(c_1c_2/2)^2 - (4/3)c_3c_1^3 = 0$; on trouve $Q_c = -3c_2/4c_3$, qui doit être >0, ce qui impose $\delta k < 0$.

Poids spectral non nul. Pour que γ soit véritablement une quasi-particule stable au vecteur d'onde **k**, il ne suffit pas que son énergie $\epsilon_{\mathbf{k}}$ soit au bord inférieur du continuum d'énergie auquel elle est couplée par émission de phonons. Il faut aussi qu'elle soit une quasi-particule, c'est-àdire qu'elle ait un poids spectral non nul. Mathématiquement, ceci signifie que son propagateur retardé, considéré comme une fonction de l'énergie complexe *z*, a un résidu *Z* non nul en l'énergie propre $z = \epsilon_{\mathbf{k}}$. À l'ordre dominant en le couplage $\hat{V}_{\phi\gamma}$ entre γ et les phonons ϕ , le propagateur est donné par le diagramme à une boucle de la Figure 3a :

$$\langle \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} | \frac{1}{z - \hat{H}} | \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle \stackrel{\text{une boucle}}{=} \frac{1}{z - \epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)} - \int_{q < \Lambda} \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3} \frac{|\langle \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}, \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} - \mathbf{q} | \mathcal{V}_{\boldsymbol{\phi} \boldsymbol{\gamma}} | \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle|^2}{z - (\hbar \omega_{\mathbf{q}}^{(0)} + \epsilon_{\mathbf{k} - \mathbf{q}}^{(0)})}}$$
(14)

Le hamiltonien complet \hat{H} et l'opérateur potentiel d'interaction $\hat{V}_{\phi\gamma}$ sont donnés par l'équation (20) de la section suivante et par leurs éléments de matrice volumiques dans l'Annexe A, dans une théorie effective de basse énergie en principe exacte dans la limite des faibles nombres d'onde phononiques [24]. $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)}$ et $\hbar\omega_{\mathbf{q}}^{(0)}$ sont les énergies nues des excitations et Λ est une coupure ultraviolette sur le nombre d'onde des phonons. En dérivant le dénominateur de (14) par rapport à *z*, et en remplaçant à l'ordre dominant les quantités nues par leur valeur effective, on obtient le résidu

$$Z_{\mathbf{k}} \stackrel{\text{une boucle}}{=} \frac{1}{1 + \int_{q < \Lambda} \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3} \frac{|\langle \phi; \mathbf{q}, \gamma; \mathbf{k} - \mathbf{q} | \mathcal{V}_{\phi\gamma} | \gamma; \mathbf{k} \rangle|^2}{|\epsilon_{\mathbf{k}} - (\hbar\omega_{\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}-\alpha})|^2}}$$
(15)

Dans cette expression, au dénominateur de l'intégrande, la différence d'énergie ne peut s'annuler pour $\mathbf{q} \neq \mathbf{0}$, par stabilité supposée de la quasi-particule γ ; elle tend linérairement vers zéro lorsque $q \rightarrow 0$. Au numérateur de l'intégrande, l'élément de matrice de $\hat{V}_{\phi\gamma}$ tend vers zéro comme $q^{1/2}$, voir les équations (A.5) et (A.7) de l'Annexe A. C'est une propriété robuste : elle traduit simplement le fait que γ se couple directement aux fluctuations quantiques de densité du superfluide, qui sont d'amplitude volumique $(\hbar \rho q/2mc)^{1/2}$ dans le mode de phonon de vecteur d'onde \mathbf{q} (ρ est la densité moyenne), comme le prédit l'hydrodynamique quantique [24]. L'intégrale dans (15) est donc convergente. Ainsi, à l'ordre considéré, dans un gaz superfluide de fermions en dimension 3, la théorie effective de Landau et Khalatnikov exclut toute suppression du poids spectral de la quasi-particule fermionique par singularité infrarouge, quelle que soit la valeur de la longueur de diffusion *a* ou de la force des interactions.¹¹ Ceci contredit directement et, nous semble-t-il, réfute les conclusions de la référence [25], qui s'appuie sur un calcul lui aussi à une boucle, mais dans un modèle microscopique.¹²

Pour être complet, donnons brièvement les prédictions du résultat perturbatif (15) sur le comportement du résidu au voisinage du seuil d'instabilité $k = k_c$ de la quasi-particule γ (du côté stable). Dans le cas de l'instabilité sonique ($|v_{k_c}|/c = 1$), il faut désormais développer la différence d'énergie au dénominateur de l'intégrande autour de $\mathbf{q} = \mathbf{0}$ un cran plus loin, au second ordre en q;¹³ aucune divergence infrarouge n'apparaît dans l'intégrale même pour $k = k_c$,

¹¹Par exemple, même dans la limite CBE $k_{\rm F}a \rightarrow 0^+$ et pour $k \rightarrow 0$, l'équation (15) prédit une correction finie $1 - Z_{\bf k} \approx mc\Lambda^2/\hbar\rho$.

¹²Même si les auteurs ne le disent pas explicitement, leur approche prédit une divergence $\propto q^{-1/2}$ de l'élément de matrice du couplage $\phi - \gamma$, comme le montre l'intégration explicite de leurs équations (9) et (10) sur la fréquence de Matsubara, c'est-à-dire sur la composante énergie de leur quadrivecteur *P*. L'intégrale dans notre équation (15) présenterait effectivement, dans ce cas, une divergence infrarouge logarithmique.

¹³On prend au dénominateur $\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} \simeq \hbar cq\{1 - ue_k + (q/2k)[(1 - u^2)e_k + u^2e_{kk}]\}$, en anticipant sur les notations (41). Si $e_k \to \pm 1$, l'intégrale sur $u = \cos(\mathbf{k}, \mathbf{q})$ est dominée par $u \simeq \pm 1$ et l'on peut approximer u^2 par 1, $1 - u^2$ par $2(1 \mp u)$, et le facteur $(u + e_\rho)^2$ au numérateur par $(1 \pm e_\rho)^2$.



FIGURE 3. Diagrammes utiles issus de l'interaction entre quasi-particule γ (ligne droite ou courbe) et phonons (ligne ondulée). (a) Contribution à une boucle au propagateur de la quasi-particule γ , voir l'équation (14). (b) Contributions à l'amplitude de diffusion $|\phi : \mathbf{q}, \gamma : \mathbf{k} \rightarrow |\phi : \mathbf{q}', \gamma : \mathbf{k}' \rangle$ d'un phonon sur la quasi-particule γ à l'ordre dominant en température $(q, q' = O(T) \rightarrow 0, \mathbf{k}$ fixé); la numérotation de (b1) à (b5) correspond, dans cet ordre, aux termes \mathcal{T}_1 à \mathcal{T}_5 de l'équation (23). (c) Exemples de diagrammes infinis d'ordre trois en l'interaction dans la série perturbative de l'amplitude de diffusion (23) entre états nus; comme le montre un calcul explicite, ils n'apparaissent pas dans l'amplitude de diffusion (31) entre états asymptotiques exacts.

le poids spectral n'est pas supprimé mais présente seulement, en fonction de *k*, une singularité en $(1 - |v_k|/c) \ln(1 - |v_k|/c)$. Dans le cas de l'instabilité subsonique (déstabilisation du premier ordre), en la supposant due, pour rester dans le cadre de l'approximation (15), à l'émission d'un seul phonon de vecteur d'onde $\mathbf{Q}_0(\mathbf{k}) \neq \mathbf{0}$ dans la partie linéaire de la branche acoustique (cas $\omega_{\text{eff}}(\mathbf{Q}_0) = \omega_{\mathbf{Q}_0} \simeq cQ_0$), l'intégrale est maintenant dominée par les vecteurs d'onde \mathbf{q} proches de $\mathbf{Q}_0(\mathbf{k}) \neq \mathbf{0}$, où la différence d'énergie s'annule au seuil de l'instabilité (voir la Figure 1b1); en développant au dénominateur la différence d'énergie au second ordre en $\mathbf{q} - \mathbf{Q}_0(\mathbf{k})$ autour de $\mathbf{Q}_0(\mathbf{k})$,¹⁴ et en approximant le numérateur de l'intégrande par sa valeur $\propto Q_0(k)$ en $\mathbf{q} = \mathbf{Q}_0(\mathbf{k})$, on trouve cette fois-ci qu'il y a une suppression du poids spectral de la quasi-particule au seuil de l'instabilité : lorsque $k \rightarrow k_c$, la valeur de l'intégrale diverge comme $|\Delta E(\mathbf{Q}_0(\mathbf{k})|)|^{-1/2}$ et le résidu $Z_{\mathbf{k}}$ tend vers zéro comme $|\Delta E(\mathbf{Q}_0(\mathbf{k}))|^{1/2}$. Ces prédictions, sous cette forme, sont en accord avec l'étude plus avancée, non perturbative, de la référence [23] sur la fonction de Green d'une excitation élémentaire près de son seuil d'instabilité dans un gaz de bosons (même si cette référence met l'accent sur la relation de dispersion de l'excitation, pas sur son poids spectral).¹⁵

¹⁴Dans le cas général, $\mathbf{Q}_0(\mathbf{k})$ et \mathbf{k} sont colinéaires, voir la note 6. On prend alors $\epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}} - \epsilon_{\mathbf{k}} \simeq C_k + A_k[1 - (\hat{\mathbf{Q}}_{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{Q}}_0(\mathbf{k}))^2](\delta q)^2 + B_k(\hat{\delta}\mathbf{q} \cdot \hat{\mathbf{Q}}_0(\mathbf{k}))^2(\delta q)^2$ avec $\delta \mathbf{q} = \mathbf{q} - \mathbf{Q}_0(\mathbf{k})$, $\hat{\mathbf{Q}} = \mathbf{Q}/Q$ la direction du vecteur \mathbf{Q} , $A_k = (1/2K)(d\epsilon_k/dk)|_{k=K} + (1/2Q_0(k))\hbar(d\omega_q/dq)|_{q=Q_0(k)}$, $B_k = (1/2)(d^2\epsilon_k/dk^2)|_{k=K} + (1/2)\hbar(d^2\omega_q/dq^2)|_{q=Q_0(k)}$, $C_k = \Delta E(\mathbf{Q}_0(\mathbf{k}))$ et $K = |\mathbf{k} - \mathbf{Q}_0(\mathbf{k})|$. Alors que A_k et B_k ont une limite finie >0 lorsque $k \to k_c$, C_k tend linéairement vers zéro.

¹⁵En y regardant de plus près dans le cas subsonique, $\Delta E(\mathbf{Q}_0(\mathbf{k}))$ tend vers zéro comme $|k - k_c|$ pour une relation de dispersion ϵ_k préexistant au couplage aux phonons (comme celle de champ moyen (9)) et comme $(k - k_c)^2$ pour la relation de dispersion vraie de la référence [23] (qui tient compte de manière autocohérente du couplage aux phonons).

Émission de paires brisées. Notre discussion de stabilité précédente ne tient compte que de l'émission de phonons. Dans un gaz de fermions appariés, elle néglige le fait que la quasiparticule fermionique γ initiale puisse, par collision avec des paires liées, en briser une ou plusieurs, disons un nombre *s*, si elle possède une énergie suffisante. Dans ce cas, l'état final contient *n* phonons et 2*s*+1 quasi-particules fermioniques, en incluant la quasi-particule initiale qui a reculé, et l'expression (4) du changement d'énergie doit être généralisée comme suit :

$$\Delta E = \epsilon_{\mathbf{k} - \sum_{j=1}^{2s} \mathbf{k}_j - \sum_{i=1}^{n} \mathbf{q}_i} + \left(\sum_{j=1}^{2s} \epsilon_{\mathbf{k}_j}\right) + \left(\sum_{i=1}^{n} \hbar \omega_{\mathbf{q}_i}\right) - \epsilon_{\mathbf{k}}$$
(16)

Montrons cependant que l'émission de paires brisées ne change pas la carte de stabilité BCS de la Figure 2. Supposons en effet que $s \ge 1$. Comme $\epsilon_k \ge \Delta_*$ et $\hbar \omega_q \ge 0$ pour tous les vecteurs d'onde, nous disposons de la minoration

$$\Delta E^{(s\neq 0)} \ge 3\Delta_* - \epsilon_{\mathbf{k}} \tag{17}$$

Il ne peut donc y avoir instabilité par émission de paires brisées que si $\epsilon_{\mathbf{k}} > 3\Delta_*$. On vérifie cependant que, dans le cadre de la théorie BCS, la zone $\epsilon_{\mathbf{k}} > 3\Delta_*$ est incluse strictement dans la zone instable par émission de phonons.¹⁶ Pour être complet, nous calculons et représentons en tireté noir sur la Figure 2 la ligne de déstabilisation par émission d'une paire brisée (s = 1 et n = 0 dans l'équation (16)); elle se réduit sur la Figure 2a ($\mu > 0$) à $\epsilon_{\mathbf{k}} = 3\Delta$ car k est < $3k_0$, et sur la Figure 2b ($\mu < 0$) à $\epsilon_{\mathbf{k}} = 3\epsilon_{\mathbf{k}/3}$ car $k \rightarrow \epsilon_{\mathbf{k}}$ est croissante convexe.

3. Amplitude de diffusion de la quasi-particule γ sur un phonon de basse énergie

Dans le problème qui nous intéresse, la quasi-particule γ , à un vecteur d'onde initial **k** assurant sa stabilité à température nulle au sens de la Section 2, est plongée dans le gaz de phonons du superfluide à la température non nulle mais très basse *T*, en particulier $k_B T \ll mc^2, \Delta_*$. La quasi-particule γ ne peut absorber des phonons en conservant l'énergie-impulsion, puisque sa vitesse de groupe v_k est subsonique. Pour le voir, il suffit de développer la variation d'énergie après absorption de *n* phonons de vecteurs d'onde \mathbf{q}_i au premier ordre en les $q_i = O(k_B T/\hbar c)$:

$$\Delta E_{\text{abs}} = \epsilon_{\mathbf{k}+\sum_{i=1}^{n} \mathbf{q}_{i}} - \left(\epsilon_{\mathbf{k}} + \sum_{i=1}^{n} \hbar \omega_{\mathbf{q}_{i}}\right) \sim -\sum_{i=1}^{n} \hbar c q_{i} \left(1 - \frac{v_{k}}{c} \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{q}}_{i}\right) < 0$$
(18)

où l'on a introduit les directions des vecteurs d'onde $\hat{\mathbf{k}} = \mathbf{k}/k$ et $\hat{\mathbf{q}}_i = \mathbf{q}_i/q_i$. En revanche, rien n'empêche que la quasi-particule γ *diffuse* des phonons, c'est-à-dire en absorbe et réémette un certain nombre non nul. À basse température, le processus dominant est la diffusion d'un phonon,

$$|\gamma:\mathbf{k},\phi:\mathbf{q}\rangle \rightarrow |\gamma:\mathbf{k}',\phi:\mathbf{q}'\rangle \quad \text{avec} \quad \mathbf{k}'=\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}' \text{ et } \mathbf{q}' \neq \mathbf{q}$$
 (19)

¹⁶Pour $\mu > 0$, on vérifie d'abord sur la Figure 2a que la ligne $\epsilon_{\mathbf{k}} = 3\Delta$, c'est-à-dire $\Delta = |\hbar^2 k^2 / 2m - \mu| / \sqrt{8}$, est en dessous des lignes d'instabilité CSA et $v_k = c$ [le seul cas d'incertitude est la limite $k/k_{\mu} \rightarrow 0$, où la ligne tiretée semble rejoindre la ligne verte en $\Delta/\mu = 1/\sqrt{8}$; la chaîne d'inégalités $\Delta E_{inf}^{s=0}(k) \le \Delta + \hbar \omega_{|k-k_0|} - \epsilon_k \le 3\Delta - \epsilon_k \le \Delta E^{(s\neq 0)}$ permet de conclure, la première inégalité venant du choix n = 1 et $\mathbf{q}_1 = (1 - k_0/k)\mathbf{k}$ dans l'équation (4), la seconde de $\hbar \omega_{\mathbf{q}} \le 2\Delta$ sur tout le domaine d'existence de la branche acoustique [20, 22] et la troisième de l'équation (17)]. Puis on le vérifie hors du cadre de la figure, en utilisant en particulier l'équivalent donné dans la note 9. Pour $\mu < 0$, on vérifie numériquement que $v_k > c$ sur la ligne $\epsilon_{\mathbf{k}} = 3(\Delta^2 + \mu^2)^{1/2}$, ce qui est évident dans la limite CBE $\mu \to -\infty$, et dans la limite $\mu \to 0^-$ compte tenu de la même note 9.

dont il faut maintenant calculer l'amplitude de probabilité sur la couche d'énergie dans la limite $q, q' \rightarrow 0.^{17}$

Le hamiltonien. Pour cela, nous partons du hamiltonien effectif \hat{H} de basse énergie obtenu par l'hydrodynamique quantique pour la partie phononique et par une approximation d'homogénéité locale, valable dans la limite quasi-classique (3), pour le couplage entre phonons et quasiparticule γ , dans le volume de quantification avec conditions aux limites périodiques $[0, L]^3$ dont on fera tendre la taille vers l'infini [3, 4, 24, 26]:

$$\hat{H} = \hat{H}_{0} + \hat{V} \quad \text{avec} \quad \begin{cases} \hat{H}_{0} = E_{0} + \sum_{\mathbf{q}\neq\mathbf{0}}^{q<\Lambda} \hbar \omega_{\mathbf{q}}^{(0)} \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}} + \sum_{\mathbf{k}} \epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}} \\ \hat{V} = \hat{V}_{\phi\phi} + \hat{V}_{\phi\gamma} \quad \text{et} \quad \hat{V}_{\phi\gamma} = \hat{H}_{3}^{\phi\gamma} + \hat{H}_{4}^{\phi\gamma} \end{cases}$$
(20)

Contentons-nous ici d'en décrire qualitativement les différentes contributions, puisque leurs expressions explicites sont données ailleurs (en particulier dans l'Annexe A) :

- Le hamiltonien sans interaction \hat{H}_0 est quadratique en les opérateurs de création et d'annihilation $\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ et $\hat{b}_{\mathbf{q}}$ d'un phonon de vecteur d'onde \mathbf{q} , $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^{\dagger}$ et $\hat{\gamma}_{\mathbf{k}}$ d'une quasi-particule γ de vecteur d'onde \mathbf{k} , opérateurs obéissant aux habituelles relations de commutation bosoniques pour les phonons, et d'anticommutation fermioniques pour la quasi-particule γ d'un superfluide de fermions, par exemple $[\hat{b}_{\mathbf{q}}, \hat{b}_{\mathbf{q}'}^{\dagger}] = \delta_{\mathbf{q},\mathbf{q}'}$. Il fait intervenir les énergies propres nues $\hbar \omega_{\mathbf{q}}^{(0)}$ et $\epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)}$ des quasi-particules, qui seront déplacées par l'effet des interactions pour donner les énergies propres vraies ou effectives $\hbar \omega_{\mathbf{q}}$ et $\epsilon_{\mathbf{k}}$. Il comporte une coupure Λ sur le nombre d'onde des phonons empêchant une divergence ultraviolette de ces déplacements d'énergie; c'est inévitable dans une théorie effective de basse énergie, qui ne sait pas décrire l'effet des interactions aux grands nombres d'onde. Le choix de la coupure le plus simple ici est $\Lambda = Ak_BT/\hbar c$, avec une constante $A \gg 1$; une fois l'amplitude de diffusion $\phi - \gamma$ calculée à l'ordre dominant en température, on peut faire tendre A vers $+\infty$ sans déclencher de divergence, comme nous le verrons.
- Le hamiltonien d'interaction \hat{V} se compose de l'opérateur d'interaction entre phonons, noté $\hat{V}_{\phi\phi}$, et de l'opérateur d'interaction entre phonons et quasi-particule γ , noté $\hat{V}_{\phi\gamma}$. Nous omettons ici l'opérateur d'interaction $\hat{V}_{\gamma\gamma}$ entre quasi-particules γ , puisqu'il y en a une seule dans le système.¹⁸
- L'interaction entre phonons résulte à l'ordre dominant de processus à 3 corps, de type $\hat{b}^{\dagger}\hat{b}^{\dagger}\hat{b}$ (décroissance à la Beliaev d'un phonon en deux phonons) ou $\hat{b}^{\dagger}\hat{b}\hat{b}$ (recombinaison à la Landau de deux phonons en un), qui peuvent être résonnants (conserver l'énergieimpulsion) si la branche acoustique est de départ convexe, ou encore de type $\hat{b}^{\dagger}\hat{b}^{\dagger}\hat{b}^{\dagger}$ ou $\hat{b}\hat{b}\hat{b}$, jamais résonnants. Paradoxalement, les interactions $\hat{b}^{\dagger}\hat{b}\hat{b}$ et $\hat{b}^{\dagger}\hat{b}^{\dagger}\hat{b}$ entre phonons contribuent à l'amplitude de diffusion ϕ - γ à l'ordre dominant [3]; leur omission malheureuse dans la référence [4] a fait l'objet de la rectification [18]. Aux ordres sousdominants, $\hat{V}_{\phi\phi}$ comporte des processus à 4 corps [24, 26], à 5 corps [28, 29], etc, que

¹⁷On peut se demander pourquoi γ ne pourrait pas diffuser un phonon incident de vecteur d'onde infinitésimal **q** dans un mode de vecteur d'onde non infinitésimal **q**'. Cependant, si tel était le cas, **q**' aurait une limite **q**'_0 non nulle lorsque **q** \rightarrow **0** et le processus $|\gamma: \mathbf{k} \rangle \rightarrow |\gamma: \mathbf{k} - \mathbf{q}'_0, \phi: \mathbf{q}'_0 \rangle$ conserverait l'énergie, en contradiction avec l'hypothèse de stabilité de la quasi-particule γ .

¹⁸Dans une théorie microscopique du gaz de fermions, il en irait autrement, l'interaction effective $\phi - \gamma$ apparaissant comme un sous-diagramme d'une interaction $\gamma - \gamma$ ne conservant pas le nombre total de quasi-particules γ (si ce n'est modulo 2) [27].

l'hydrodynamique quantique permet en principe de décrire,¹⁹ mais qui ne jouent pas de rôle dans notre problème.

- L'interaction de la quasi-particule γ avec les phonons consiste à l'ordre dominant en un processus d'absorption $\hat{b}\hat{\gamma}^{\dagger}\hat{\gamma}$ ou d'émission $\hat{b}^{\dagger}\hat{\gamma}^{\dagger}\hat{\gamma}$ d'un phonon; ces termes étant cubiques en les opérateurs de création et d'annihilation, nous les rangeons dans $\hat{H}_{3}^{\phi\gamma}$. À l'ordre sous-dominant, elle comporte la diffusion directe d'un phonon $\hat{b}^{\dagger}\hat{b}\hat{\gamma}^{\dagger}\hat{\gamma}$, l'absorption directe de 2 phonons (absorption double) $\hat{b}\hat{b}\hat{\gamma}^{\dagger}\hat{\gamma}$ et le processus inverse d'émission double $\hat{b}^{\dagger}\hat{b}^{\dagger}\hat{\gamma}^{\dagger}\hat{\gamma}$, contributions quartiques toutes rangées dans $\hat{H}_{4}^{\phi\gamma}$. Il ne sera pas utile ici d'aller au-delà, ce que l'approche de la référence [4] telle quelle ne permettrait d'ailleurs pas de faire (voir notre note 19).
- Les éléments de matrice de $\hat{V}_{\phi\phi}$ dans l'hydrodynamique quantique ne dépendent que de l'équation d'état du gaz à température nulle, c'est-à-dire du potentiel chimique $\mu(\rho)$ considéré comme une fonction de la densité ρ dans l'état fondamental, et de ses dérivées par rapport à ρ à longueur de diffusion a entre atomes fixée.²⁰ Les éléments de matrice de $\hat{V}_{\phi\gamma}$ déduits de l'homogénéité locale dépendent de la relation de dispersion de la quasiparticule γ et de ses dérivées première et seconde par rapport à ρ à vecteur d'onde **k** et longueur de diffusion a fixés.

La matrice *S* habituelle. Calculons l'amplitude de diffusion $\phi - \gamma$ comme l'amplitude de probabilité de transition entre l'état initial $|i\rangle = |\gamma : \mathbf{k}, \phi : \mathbf{q}\rangle$ et l'état final $|f\rangle = |\gamma : \mathbf{k}', \phi : \mathbf{q}'\rangle$ comme dans l'équation (19), par la méthode de la matrice *S* (Section B_{III}.1 de la référence [33]), c'est-à-dire dans la limite d'un temps d'évolution infini. Les états asymptotiques étant pris comme des états propres de \hat{H}_0 , la transition n'est autorisée que si elle conserve l'énergie correspondante, c'est-àdire la somme des énergies nues :

$$E_{i}^{(0)} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)} + \hbar\omega_{\mathbf{q}}^{(0)} = E_{f}^{(0)} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}'}^{(0)} + \hbar\omega_{\mathbf{q}'}^{(0)}$$
(21)

L'amplitude de transition est donnée alors par l'élément de matrice de l'opérateur $\hat{T}(z)$ entre $|i\rangle$ et $|f\rangle$ sur la couche d'énergie, c'est-à-dire pour $z = E_i^{(0)} + i\eta$, $\eta \to 0^+$:

$$A_{\rm fi}^{(0)} = \langle \mathbf{f} | \hat{V} + \hat{V} \frac{1}{E_{\rm i}^{(0)} + i\eta - \hat{H}} \hat{V} | \mathbf{i} \rangle \tag{22}$$

À l'ordre dominant à basse température $(q, q' = O(T) \rightarrow 0$ à k fixé), une analyse générale de la série perturbative en \hat{V} du résultat (22), exposée dans l'Annexe A et sur laquelle nous reviendrons, suggère que l'on puisse se limiter à l'ordre deux en \hat{V} , c'est-à-dire remplacer \hat{H} par \hat{H}_0 au dénominateur de l'équation (22). On élimine ensuite les contributions sous-dominantes restantes, comme l'explique l'Annexe A, pour obtenir :

$$A_{\text{fi}}^{(0)} \underset{T \to 0}{\sim} \mathcal{T}_1 + \mathcal{T}_2 + \mathcal{T}_3 + \mathcal{T}_4 + \mathcal{T}_5$$

$$\tag{23}$$

avec

$$\mathcal{T}_{1} = L^{-3} \langle \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}', \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' | \mathcal{H}_{4}^{\phi \gamma} | \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}, \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle$$
(24)

$$\mathcal{T}_{2} = L^{-3} \frac{\langle \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}', \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' | \mathcal{H}_{3}^{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\gamma}} | \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} + \mathbf{q} \rangle \langle \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} + \mathbf{q} | \mathcal{H}_{3}^{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\gamma}} | \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}, \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle}{\hbar \omega_{\mathbf{q}}^{(0)} + \epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)} - \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(0)}}$$
(25)

¹⁹Il faudrait alors, pour être cohérent, tenir compte de corrections dites « du gradient » dans les termes d'ordre inférieur, au sens par exemple des références [30, 31], comme il est fait dans la Section V.D de la référence [26].

²⁰Tant que l'on ne s'est pas affranchi de la coupure Λ , il faut prendre l'équation d'état nue dans les éléments de matrice [32].

$$\mathcal{T}_{3} = L^{-3} \frac{\langle \gamma : \mathbf{k}' | \mathcal{H}_{3}^{\phi\gamma} | \phi : \mathbf{q}, \gamma : \mathbf{k} - \mathbf{q}' \rangle \langle \phi : \mathbf{q}', \gamma : \mathbf{k} - \mathbf{q}' | \mathcal{H}_{3}^{\phi\gamma} | \gamma : \mathbf{k} \rangle}{\varepsilon_{\mathbf{k}}^{(0)} - \hbar \omega_{\mathbf{q}'}^{(0)} - \varepsilon_{\mathbf{k} - \mathbf{q}'}^{(0)}}$$
(26)

$$\mathcal{T}_{4} = L^{-3} \frac{\langle \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' | \mathcal{H}_{3}^{\phi \gamma} | \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q} - \mathbf{q}', \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle \langle \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}', \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q} - \mathbf{q}' | \mathcal{V}_{\phi \phi} | \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q} \rangle}{\hbar \omega_{\mathbf{q}}^{(0)} - \hbar \omega_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'}^{(0)} - \hbar \omega_{\mathbf{q}'}^{(0)}}$$
(27)

$$\mathcal{T}_{5} = L^{-3} \frac{\langle \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}' | \mathcal{V}_{\phi\phi} | \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}' - \mathbf{q}, \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q} \rangle \langle \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}' - \mathbf{q}, \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' | \mathcal{H}_{3}^{\phi\gamma} | \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle}{\epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)} - \epsilon_{\mathbf{k}'}^{(0)} - \hbar \omega_{\mathbf{q}'-\mathbf{q}}^{(0)}}$$
(28)

Les termes successifs au second membre de (23) sont représentés par les diagrammes (b1) à (b5) de la Figure 3, et les éléments de matrice volumiques au numérateur sont donnés par les équations (A.4), (A.5) et (A.6) de l'Annexe A, parfois à une conjugaison hermitienne près; dans le dernier terme, on a utilisé le fait que $\mathbf{k}-\mathbf{k}' = \mathbf{q}'-\mathbf{q}$. Les énergies propres nues diffèrent des énergies effectives par des termes en $O(T^3)$ comme le montre la théorie des perturbations ordinaire;²¹ or, à l'ordre dominant pour $A_{\rm fi}$, qui est d'ordre un en T, il suffit de développer les numérateurs et les dénominateurs du deuxième et du troisième terme de (23) jusqu'à l'ordre relatif sous-dominant T c'est-à-dire jusqu'à l'ordre T^2 , le reste pouvant être écrit directement à l'ordre dominant.²² On peut donc remplacer les énergies nues par les énergies effectives dans les dénominateurs d'énergie et les éléments de matrice de (23), ainsi que dans la conservation de l'énergie (21), ce qui redonne exactement l'expression (3) de la référence [18].

Notre calcul par matrice *S* n'est cependant pas pleinement convaincant. L'analyse générale de l'Annexe A mentionnée plus haut passe sous silence l'existence, aux ordres en \hat{V} supérieurs ou égaux à trois, de diagrammes infinis (et non pas divergents). Dans ces diagrammes, l'un des dénominateurs d'énergie, donnant la différence entre $E_i^{(0)} = E_f^{(0)}$ et l'énergie de l'état intermédiaire, vaut exactement zéro, et pas sur un ensemble de mesure nulle.²³ Ce phénomène se produit chaque fois que l'état intermédiaire repasse par l'état initial |i> ou passe de manière anticipée par l'état final |f>. Des exemples en sont donnés sur la Figure 3c, à l'ordre trois en \hat{V} . De plus, comme nous le verrons, dans la limite d'une vitesse de groupe nulle $v_k \rightarrow 0$, notre amplitude de diffusion (23) n'est même pas en accord avec celle de la référence [3], ce qui nous incite à un surcroît de rigueur.

États asymptotiques exacts. L'apparition catastrophique de termes infinis dans la série perturbative de l'amplitude (22) est un phénomène connu en théorie quantique des champs et n'a rien de surprenant. En effet, l'expression de la matrice *S* à l'origine des relations (21), (22) provient de la mécanique quantique ordinaire, où le nombre total de particules est une quantité conservée, comme dans la collision de deux atomes.

Ici, en revanche, le hamiltonien \hat{H} conserve le nombre de quasi-particules γ , mais pas le nombre de phonons. La quasi-particule γ ne cesse en fait jamais d'interagir avec le champ

²¹Le déplacement d'énergie $\delta \epsilon_{\mathbf{k}}$ d'une quasi-particule γ seule ou $\hbar \delta \omega_{\mathbf{q}}$ d'un phonon seul est non nul à partir de l'ordre 2 en \hat{V} . À cet ordre, il se déduit donc d'un diagramme à une boucle comme sur la Figure 3a. De l'équation (14), nous tirons $\delta \epsilon_{\mathbf{k}} \simeq \int_{q < \Lambda} (d^3 q / (2\pi)^3) ((|\langle \phi; \mathbf{q}, \gamma; \mathbf{k} - \mathbf{q} | \mathcal{T}_{\phi\gamma} | \gamma; \mathbf{k} \rangle|^2) / (\epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)} + i\eta - (\hbar \omega_{\mathbf{q}}^{(0)} + \epsilon_{\mathbf{k} - \mathbf{q}}^{(0)}));$ le numérateur et le dénominateur de l'intégrande sont d'ordre T, comme la coupure Λ , donc $\delta \epsilon_{\mathbf{k}}$ est d'ordre T^3 . De même, $\hbar \delta \omega_{\mathbf{q}} \simeq \int_{q < \Lambda} (d^3 q' / (2\pi)^3) ((|\langle \phi; \mathbf{q}', \phi; \mathbf{q} - \mathbf{q}' | \mathcal{T}_{\phi\phi} | \phi; \mathbf{q} \rangle|^2 / 2) / (\hbar \omega_{\mathbf{q}}^{(0)} + i\eta - (\hbar \omega_{\mathbf{q}'}^{(0)} + \hbar \omega_{\mathbf{q} - \mathbf{q}'}^{(0)}));$ le numérateur est $\approx qq' |\mathbf{q} - \mathbf{q}'|$ et le dénominateur se développe grâce à l'équation (1) en gardant le terme de courbure au voisinage de l'angle nul entre \mathbf{q}' et \mathbf{q} , ce qui donne Re $\hbar \omega_{\mathbf{q}} \approx T^5 \ln T$ et, si $\gamma_{\phi} > 0$, une partie imaginaire non nulle Im $\hbar \omega_{\mathbf{q}}^{(0)} \approx T^5$.

 $^{^{22}}$ En effet, les contributions du deuxième et du troisième terme se compensent exactement à leur ordre dominant T^0 , alors que celles des trois autres termes sont immédiatement d'ordre T.

²³Si le dénominateur d'énergie s'annulait à l'intérieur d'une intégrale sur le vecteur d'onde d'un phonon interne, le décalage imaginaire pur infinitésimal +i η de $E_i^{(0)}$ donnerait une intégrale finie au sens des distributions.

phononique, même aux instants infiniment antérieurs ou infiniment ultérieurs à sa collision avec le phonon incident, en émettant et réabsorbant des phonons virtuels ou captifs, que la conservation de l'énergie-impulsion empêche de partir à l'infini. Les bons états asymptotiques de la quasi-particule γ à considérer dans la théorie de la diffusion sont donc ses états stationnaires vrais $||\gamma : \mathbf{k}\rangle$ et $||\gamma : \mathbf{k}'\rangle$ d'énergies propres $\epsilon_{\mathbf{k}}$ et $\epsilon_{\mathbf{k}'}$, habillés de phonons captifs, plutôt que les états nus $|\gamma : \mathbf{k}\rangle = \hat{\gamma}^{\dagger}_{\mathbf{k}}|$ vide \rangle et $|\gamma : \mathbf{k}'\rangle = \hat{\gamma}^{\dagger}_{\mathbf{k}'}|$ vide \rangle non stationnaires.²⁴ De même, le phonon incident $|\phi: \mathbf{q}\rangle$ ou émergent $|\phi: \mathbf{q}'\rangle$ ne cesse jamais d'interagir avec le champ phononique; il peut se désintégrer virtuellement en deux phonons, qui peuvent continuer à se désintégrer en paires de phonons ou au contraire se recombiner pour redonner le phonon initial, etc. Ces processus sont non résonnants, et les phonons créés sont virtuels si la branche acoustique est de départ concave $[\gamma_{\phi} < 0 \text{ dans l'équation (1)}]$; on construit ainsi, comme dans la note 24, les états stationnaires vrais $\|\phi:\mathbf{q}\rangle$ et $\|\phi:\mathbf{q}'\rangle$, d'énergies propres $\hbar\omega_{\mathbf{q}}$ et $\hbar\omega_{\mathbf{q}'}$, habillés de phonons captifs et à utiliser comme bons états asymptotiques. Le cas convexe est d'une autre nature, puisque $|\phi: \mathbf{q}\rangle$ et $|\phi: \mathbf{q}'\rangle$ sont instables et peuvent se désintégrer réellement en phonons partant à l'infini; comme il est montré dans l'Annexe A, nous sommes sauvé par la lenteur (taux $\approx q^5$) de cette décroissance. ce qui permet formellement de l'ignorer dans le calcul de l'amplitude de diffusion $\phi - \gamma$ à l'ordre dominant.

Il faut donc reprendre la construction de la matrice *S* en utilisant comme états initial et final les états asymptotiques exacts²⁵

$$\|\mathbf{i}\rangle = \hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \|\boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}\rangle \quad \text{et} \quad \|\mathbf{f}\rangle = \hat{B}_{\mathbf{q}'}^{\dagger} \|\boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}'\rangle \tag{29}$$

où $\hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ est l'opérateur de création d'un phonon habillé $\|\phi:\mathbf{q}\rangle$ de vecteur d'onde \mathbf{q} .²⁶ À la limite d'un temps d'évolution infini, la transition se produit sur la couche d'énergie exacte (plutôt que nue)

$$E_{\mathbf{i}} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}} + \hbar\omega_{\mathbf{q}} = E_{\mathbf{f}} \equiv \epsilon_{\mathbf{k}'} + \hbar\omega_{\mathbf{q}'} \tag{30}$$

²⁴Pour donner une définition précise de $\|\gamma:\mathbf{k}\rangle$, considérons le sous-espace $\mathscr{E}_{\mathbf{k}}$ engendré par action répétée du hamiltonien d'interaction \hat{V} sur le vecteur $|\gamma:\mathbf{k}\rangle$, c'est-à-dire sur une quasi-particule γ nue en présence du vide de phonons. $\mathscr{E}_{\mathbf{k}}$ est ainsi la superposition d'états à nombre et vecteurs d'onde quelconques de phonons, en présence d'une quasi-particule γ nue ayant reculé. Il est stable sous l'action du hamiltonien complet \hat{H} . Sous la condition de stabilité acoustique énoncée après l'équation (6), on s'attend à ce que \hat{H} admette dans $\mathscr{E}_{\mathbf{k}}$ un seul niveau d'énergie discret $\varepsilon_{\mathbf{k}}$, associé à l'état fondamental $\|\gamma:\mathbf{k}\rangle$, et situé au bord inférieur d'un continuum d'énergies propres. $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ est le pôle du propagateur exact au premier membre de l'équation (14); le résidu associé donne le poids de la quasi-particule nue dans la quasi-particule habillée, $Z_{\mathbf{k}} = |\langle \gamma: \mathbf{k}| \|\gamma: \mathbf{k} \rangle|^2$, et doit être >0.

²⁵Contrairement au cas de la diffusion résonnante d'un photon par un atome à deux niveaux initialement dans l'état fondamental, dont la série perturbative présente un dénominateur d'énergie nul chaque fois que l'atome passe dans l'état excité en présence du vide de rayonnement [33], on ne peut pas guérir la matrice *S* naïve (22) en renormalisant par exemple le propagateur de la quasi-particule γ incidente par resommation des diagrammes à *n* boucles disjointes (bulles) dont la Figure 3c1 représente le cas n = 1 (la boucle en question est celle de la Figure 3a). Le développement en bulles à l'énergie complexe *z* fait apparaître une série géométrique de raison $\Delta \epsilon_{\mathbf{k}}(z - \hbar \omega_{\mathbf{q}}^{(0)})/(z - E_i^{(0)})$ où $\Delta \epsilon_{\mathbf{k}}(z)$ est la fonction déplacement d'énergie propre de γ à l'ordre deux en $\hat{V}_{\phi\gamma}$ (pour $L = +\infty$, c'est l'intégrale au dénominateur de (14)). La resommation des bulles dans l'état initial $|\gamma: \mathbf{k}\rangle$ transforme donc l'amplitude du diagramme de la Figure 3b1 en $((z - E_i^{(0)})/(z - E_i^{(0)}) - \Delta \epsilon_{\mathbf{k}}(z - \hbar \omega_{\mathbf{q}}^{(0)}))L^{-3} \langle \phi: \mathbf{q}', \gamma: \mathbf{k}'| \mathcal{H}_4^{\phi \phi}| \phi: \mathbf{q}, \gamma: \mathbf{k}\rangle$, ce qui donne zéro si l'on fait tendre *z* vers $E_i^{(0)}$ comme le prescrit l'équation (22), ou l'infini si l'on fait tendre heuristiquement *z* vers E_i écrit à l'ordre deux en $\hat{V}_{\phi\gamma}$. Une resommation des bulles sur la couche d'énergie à la fois dans l'état final et dans l'état final de γ conduit à la même conclusion.

²⁶Pour simplifier, nous limitons ici le hamiltonien d'interaction entre phonons $\hat{V}_{\phi\phi}$ aux termes de Beliaev $\hat{b}^{\dagger}\hat{b}^{\dagger}\hat{b}$ et de Landau $\hat{b}^{\dagger}\hat{b}\hat{b}$, comme dans l'équation (A.1), si bien que le vide de phonons est stationnaire. Ce ne serait pas le cas si l'on gardait les termes non résonnants $\hat{b}^{\dagger}\hat{b}^{\dagger}\hat{b}^{\dagger}$ et $\hat{b}\hat{b}\hat{b}$; il faudrait alors construire un vide habillé ||vide⟩ sur lequel faire agir $\hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ et $\hat{B}_{\mathbf{q}'}^{\dagger}$.

avec l'amplitude de probabilité

$$A_{\mathrm{fi}} = \langle \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' \| \hat{B}_{\mathbf{q}'}([\hat{V}_{\phi\gamma}, \hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}] + \hat{\Delta}_{\mathbf{q}}^{\dagger}) \| \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle + \langle \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' \| ([\hat{B}_{\mathbf{q}'}, \hat{V}_{\phi\gamma}] + \hat{\Delta}_{\mathbf{q}'}) \frac{1}{E_{\mathrm{i}} + \mathrm{i}\eta - \hat{H}} ([\hat{V}_{\phi\gamma}, \hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}] + \hat{\Delta}_{\mathbf{q}}^{\dagger}) \| \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle$$

$$(31)$$

Il nous a fallu introduire l'opérateur

$$\hat{\Delta}_{\mathbf{Q}}^{\dagger} \equiv [\hat{H}_{\phi\phi}, \hat{B}_{\mathbf{Q}}^{\dagger}] - \hbar \omega_{\mathbf{Q}} \hat{B}_{\mathbf{Q}}^{\dagger} \quad \text{avec} \quad \hat{H}_{\phi\phi} = \sum_{\mathbf{q}\neq\mathbf{0}}^{q<\Lambda} \hbar \omega_{\mathbf{q}}^{(0)} \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}} + \hat{V}_{\phi\phi}$$
(32)

Ici $\hat{H}_{\phi\phi}$ est la partie purement phononique du hamiltonien complet \hat{H} et le facteur $\omega_{\mathbf{Q}}$ est bien la pulsation propre exacte, pas la pulsation nue. Contrairement aux apparences, $\hat{\Delta}_{\mathbf{Q}}^{\dagger}$ n'est pas nul, même si son action sur le vide de phonons donne zéro, $\hat{\Delta}_{\mathbf{Q}}^{\dagger}$ |vide $\rangle = 0$ (voir cependant la note 26). Le calcul conduisant à l'expression (31), détaillé dans l'Annexe A, reprend celui de la diffusion photon-atome dans les Sections B_{III}.2 et B_{III}.3 de la référence [33], et le généralise en habillant l'état asymptotique du photon (autant dire, du phonon) et pas seulement celui de l'atome (autant dire, de la quasi-particule γ). Il est facile de se convaincre que la série perturbative de l'expression (31) ne comporte plus de diagrammes infinis. Comme les parties habillées des états asymptotiques diluent les parties nues dans un continuum, elles ne peuvent conduire à un risque de dénominateur nul (sauf sur un ensemble de mesure nulle) et l'on peut, pour comprendre ce qui se passe, se focaliser sur la contribution à $A_{\rm fi}$ des parties nues $|\phi:\mathbf{q}\rangle$ et $|\phi:\mathbf{q}'\rangle$, $|\gamma:\mathbf{k}\rangle$ et $|\gamma:\mathbf{k}'\rangle$:

$$A_{\rm fi}|_{\rm nues}^{\rm parties} = (Z_{\mathbf{k}} Z_{\mathbf{k}'} \mathcal{Z}_{\mathbf{q}} \mathcal{Z}_{\mathbf{q}'})^{1/2} \left[\langle \gamma : \mathbf{k}' | \hat{b}_{\mathbf{q}'} [\hat{V}_{\phi\gamma}, \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}] | \gamma : \mathbf{k} \rangle + \langle \gamma : \mathbf{k}' | [\hat{b}_{\mathbf{q}'}, \hat{V}_{\phi\gamma}] \frac{1}{E_i + \mathrm{i}\eta - \hat{H}} [\hat{V}_{\phi\gamma}, \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}] | \gamma : \mathbf{k} \rangle \right]$$

$$(33)$$

où les résidus de quasi-particule $Z_{\mathbf{k}}$, $Z_{\mathbf{k}'}$, $\mathcal{Z}_{\mathbf{q}}$ et $\mathcal{Z}_{\mathbf{q}'}$ sont les poids des états nus dans les états habillés, si bien que $\hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}|_{\text{nue}}^{\text{partie}} = \mathcal{Z}_{\mathbf{q}}^{1/2} \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ par exemple. La présence de commutateurs dans l'équation (33) force l'absorption du phonon incident \mathbf{q} comme premier événement et l'émission du phonon \mathbf{q}' comme dernier événement. En effet, seuls les termes de $\hat{V}_{\phi\gamma}$ contenant au moins un facteur $\hat{b}_{\mathbf{q}}$ ($\hat{b}_{\mathbf{q}'}^{\dagger}$) peuvent donner une contribution non nulle au commutateur avec $\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ ($\hat{b}_{\mathbf{q}'}$). Mais, l'absorption du phonon \mathbf{q} efface la mémoire de l'état initial, et avant émission du phonon \mathbf{q}' , on n'a pas connaissance de l'état final, donc (i) si l'on remplace $E_{\mathbf{i}}$ par $E_{\mathbf{i}}^{(0)}$ dans (33), on ne peut pas avoir de dénominateurs d'énergie nuls dans la série perturbative (sauf à l'intérieur d'une intégrale sur un vecteur d'onde de phonon interne), et (ii) si l'on garde la valeur de $E_{\mathbf{i}}$ dans (33), on ne peut pas avoir de petits dénominateurs (de l'ordre de l'écart $O(\hat{V}^2)$ entre les énergies propres nues et exactes) qui invalideraient notre développement perturbatif.

Analysons maintenant le résultat (31) à l'ordre dominant. L'analyse générale de l'Annexe A, qui nous à conduit à limiter (22) à l'ordre deux en \hat{V} , peut lui être appliquée. Comme chaque contribution à $A_{\rm fi}$ est au moins d'ordre un en \hat{V} , il suffit de déterminer l'habillage de la quasiparticule γ et du phonon incident ou émergent au premier ordre de la théorie des perturbations :

$$\|\boldsymbol{\gamma}:\mathbf{k}\rangle = |\boldsymbol{\gamma}:\mathbf{k}\rangle + \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{Q}\neq\mathbf{0}} \frac{\langle \boldsymbol{\phi}:\mathbf{Q},\boldsymbol{\gamma}:\mathbf{k}-\mathbf{Q}|\mathcal{H}_{3}^{\boldsymbol{\theta}\boldsymbol{\gamma}}|\boldsymbol{\gamma}:\mathbf{k}\rangle}{\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}}^{(0)} + i\boldsymbol{\eta} - (\boldsymbol{\epsilon}_{\mathbf{k}-\mathbf{Q}}^{(0)} + \hbar\boldsymbol{\omega}_{\mathbf{Q}}^{(0)})} |\boldsymbol{\phi}:\mathbf{Q},\boldsymbol{\gamma}:\mathbf{k}-\mathbf{Q}\rangle + \cdots$$
(34)

$$\hat{B}_{\mathbf{Q}}^{\dagger} = \hat{b}_{\mathbf{Q}}^{\dagger} + \frac{1}{2L^{3/2}} \sum_{\mathbf{Q}' \neq \mathbf{0}, \neq \mathbf{Q}} \frac{\langle \boldsymbol{\phi} : \mathbf{Q}', \boldsymbol{\phi} : \mathbf{Q} - \mathbf{Q}' | \mathcal{V}_{\phi\phi} | \boldsymbol{\phi} : \mathbf{Q} \rangle}{\hbar \omega_{\mathbf{Q}}^{(0)} + i\eta - (\hbar \omega_{\mathbf{Q}'}^{(0)} + \hbar \omega_{\mathbf{Q}-\mathbf{Q}'}^{(0)})} \hat{b}_{\mathbf{Q}'}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{Q}-\mathbf{Q}'}^{\dagger} + \cdots$$
(35)

Dans l'écriture (34), nous avons immédiatement négligé la correction due à $\hat{H}_4^{\phi\gamma}$, c'est-à-dire à l'émission double de phonons par γ , que ses éléments de matrice d'un ordre plus élevé en

température et la mise en jeu d'une somme double sur les vecteurs d'onde des phonons rendent négligeable devant l'émission simple. De l'expression (35), nous tirons que l'opérateur $\hat{\Delta}_{\mathbf{Q}}^{\dagger}$ est d'ordre un en \hat{V} (tout comme le commutateur de $\hat{B}_{\mathbf{Q}}$ ou $\hat{B}_{\mathbf{Q}}^{\dagger}$ avec $\hat{V}_{\phi\gamma}$), et que son action sur l'état asymptotique exact $\|\gamma: \mathbf{k}\rangle$ est d'ordre deux,

$$\hat{\Delta}_{\mathbf{0}}^{\dagger} \| \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle = O(\hat{V}^2) \tag{36}$$

En effet, l'action sur la partie nue de la quasi-particule γ donne zéro, $\hat{\Delta}_{\mathbf{Q}}^{\dagger} | \gamma : \mathbf{k} \rangle = 0$, puisque $\hat{\Delta}_{\mathbf{Q}}^{\dagger}$ est purement phononique et donne zéro sur le vide de phonons. Dans la seconde contribution à (31), celle contenant la résolvante de \hat{H} , nous pouvons alors négliger directement tout habillage des phonons et de la quasi-particule γ , c'est-à-dire négliger $\hat{\Delta}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ et $\hat{\Delta}_{\mathbf{q}'}$, remplacer les opérateurs habillés $\hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ et $\hat{B}_{\mathbf{q}'}$ par les opérateurs nus $\hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$ et $\hat{b}_{\mathbf{q}'}$, les états habillés $\|\gamma : \mathbf{k}\rangle$ et $\langle \gamma : \mathbf{k}' \|$ par les états nus $|\gamma : \mathbf{k}\rangle$ et $\langle \gamma : \mathbf{k}' \|$ par les états nus $|\gamma : \mathbf{k}\rangle$ et $\langle \gamma : \mathbf{k}' \|$ par les états nus $|\gamma : \mathbf{k}\rangle$ et $\langle \gamma : \mathbf{k}' \|$ par les états nus $|\gamma : \mathbf{k}\rangle$ et $\langle \gamma : \mathbf{k}' \|$ par les états nus $|\gamma : \mathbf{k}\rangle$ et $\langle \gamma : \mathbf{k}' \|$ par les états nus $|\gamma : \mathbf{k}\rangle$ et $\langle \gamma : \mathbf{k}' \|$ par les états nus $|\gamma : \mathbf{k}\rangle$ et $\langle \gamma : \mathbf{k}' \|$ par les états nus retrouvons ainsi exactement la contribution \mathcal{T}_2 de la théorie naïve (23), c'est-à-dire le diagramme absorption-émission non croisé de la Figure 3b2. Dans la première contribution à (31), nous effectuons un développement au second ordre pour obtenir des expressions directement interprétables :

lère contribution à (31) =
$$\langle \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' | \hat{b}_{\mathbf{q}'} [\hat{V}_{\phi \gamma}, \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}] | \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle$$

+ $\langle \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' | \hat{b}_{\mathbf{q}'} [\hat{H}_{3}^{\phi \gamma}, \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}] \| \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle^{(1)} + {}^{(1)} \langle \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' \| \hat{b}_{\mathbf{q}'} [\hat{H}_{3}^{\phi \gamma}, \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}] | \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle$
+ $\langle \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' | \hat{B}_{\mathbf{q}'}^{(1)} [\hat{H}_{3}^{\phi \gamma}, \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}] | \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle + \langle \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' | \hat{b}_{\mathbf{q}'} [\hat{H}_{3}^{\phi \gamma}, \hat{B}_{\mathbf{q}}^{(1)\dagger}] | \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle$
+ $\langle \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' | \hat{b}_{\mathbf{q}'} \hat{\Delta}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \| \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle^{(1)} + \cdots$ (37)

où $\hat{B}_{\mathbf{Q}}^{(1)\dagger}$ est le premier écart, ou écart d'ordre un, entre l'opérateur de création d'un phonon habillé $\hat{B}_{\mathbf{Q}}^{\dagger}$ et d'un phonon nu $\hat{b}_{\mathbf{Q}}^{\dagger}$, et $\|\gamma:\mathbf{k}\rangle^{(1)}$ est le premier écart, ou écart d'ordre un, entre l'état habillé $\|\gamma:\mathbf{k}\rangle$ et l'état nu $|\gamma:\mathbf{k}\rangle$ de la quasi-particule γ . Le premier terme de (37) ne contient aucun habillage, et redonne exactement le diagramme de diffusion directe \mathcal{T}_1 de la théorie naïve (23), représenté sur la Figure 3b1, puisque la composante $\hat{H}_3^{\phi\gamma}$ de $\hat{V}_{\phi\gamma}$ donne zéro au contraire de $\hat{H}_4^{\phi\gamma}$. Le deuxième terme de (37) tient compte de l'habillage de la quasi-particule γ dans l'état initial et redonne la contribution \mathcal{T}_3 de la théorie naïve, c'est-à-dire le diagramme croisé de la Figure 3b3; on l'interprète physiquement en disant que le phonon émis \mathbf{q}' était un phonon virtuel de la quasi-particule γ que l'arrivée du phonon \mathbf{q} a rendu réel, en lui permettant de partir à l'infini sans violer la conservation de l'énergie-impulsion. Le troisième terme de (37) est nul puisque le commutateur mis en jeu est scalaire vis-à-vis des variables phononiques, ce qui permet à $\hat{b}_{\mathbf{q}'}$ d'agir à droite sur le vide de phonons pour donner zéro. Pour la même raison, au remplacement près de $\hat{b}_{\mathbf{q}'}$ par $\hat{B}_{\mathbf{q}'}^{(1)}$, le quatrième terme de (37) est nul. Le cinquième terme de (37) redonne \mathcal{T}_4 , représenté par le diagramme de la Figure 3b4 : il correspond à l'absorption par la quasi-particule γ d'un phonon appartenant à une paire de phonons virtuels habillant le phonon incident, l'autre phonon de la paire étant alors déconfiné et partant à l'infini. Enfin, le sixième terme de (37) redonne \mathcal{T}_5 , représenté par le diagramme de la Figure 3b5 : il résulte de la diffusion du phonon incident sur un phonon du halo habillant la quasi-particule γ .²⁷

²⁷Pour mener à bien ces calculs, on a besoin seulement, en ce qui concerne l'habillage des phonons, des propriétés (36) et $\langle \phi : \mathbf{q}' | \hat{B}_{\mathbf{q}}^{(1)\dagger} | \phi : \mathbf{q}' - \mathbf{q} \rangle = 0$ et de l'expression de $\hat{B}_{\mathbf{q}}^{(1)\dagger} | \text{vide} \rangle$. On peut alors faire comme si $\hat{B}_{\mathbf{q}}^{(1)\dagger} = \hat{Q} G_0^{\phi} (\hbar \omega_{\mathbf{q}}^{(0)} + i\eta) \hat{V}_{\phi\phi} \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$, par restriction au sous-espace à $n \leq 1$ phonon. Ici \hat{Q} est le projecteur orthogonal sur l'espace à un phonon et $G_0^{\phi}(z) = (z - \hat{H}_0^{\phi\phi})^{-1}$ est la résolvante du hamiltonien des phonons seuls sans interaction. On donne aussi $\hat{\Delta}^{(1)\dagger} = L^{-3/2} \sum_{\mathbf{q}'} \langle \phi : \mathbf{q}, \phi : \mathbf{q}' - \mathbf{q} | \mathcal{V}_{\phi\phi} | \phi : \mathbf{q}' \rangle \hat{b}_{\mathbf{q}'}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}'-\mathbf{q}}$.

À l'ordre dominant à basse température, $q, q' = O(T), T \rightarrow 0$, il y a donc accord parfait entre l'amplitude de diffusion phonon- γ (22) prédite par la théorie de la mécanique quantique ordinaire et celle (31) de la théorie des champs à états asymptotiques exacts, les deux conduisant à l'expression (23), qui reproduit celle de la référence [18] après remplacement (légitime à cet ordre, comme nous l'avons vu) des énergies propres nues par les énergies propres effectives. Par conséquent, notre désaccord avec l'amplitude de diffusion de la référence [3] pour une quasiparticule γ de vitesse de groupe v_k nulle, soulevé par la référence [18] et en contradiction avec la note 8 hâtive de cette même référence [3], persiste et reste inexpliqué.

Résultat final à l'ordre q. Notre calcul de l'amplitude de diffusion $\phi - \gamma$ s'appuie sur le hamiltonien effectif « hydrodynamique » de basse énergie (20) et n'est valable qu'à l'ordre dominant en q. Il est donc inutile de garder une dépendance à tous les ordres en q dans les dénominateurs d'énergie et dans les éléments de matrice au numérateur des différents termes de l'expression (23). Nous passons alors à la limite $q \rightarrow$ à vecteur d'onde \mathbf{k} de la quasi-particule γ fixé, sans supposer (comme l'ont fait les références [3, 4]) que sa vitesse v_k tend vers zéro; un calcul un peu long mais sans difficulté particulière donne ainsi sur la couche d'énergie le résultat à notre connaissance original :²⁸

$$\mathscr{A}_{\mathrm{fi}} = \mathscr{A}(\gamma : \mathbf{k}, \phi : \mathbf{q} \to \gamma : \mathbf{k}', \phi : \mathbf{q}') \overset{\mathrm{kfixe}}{q \to 0} \frac{\hbar c q}{\rho} \left(\frac{1 - u e_k}{1 - u' e_k}\right)^{1/2} R_k(u, u', w) \quad \mathrm{avec} \quad q' \overset{\mathrm{kfixe}}{=} \frac{1 - u e_k}{1 - u' e_k} q + O(q^2)$$

$$(38)$$

Nous avons dû introduire quelques notations : l'amplitude de transition volumique $\mathcal{A}_{fi} = L^3 \overline{A}_{fi}$ (c'est-à-dire pour un volume de quantification unité), les cosinus des angles entre les trois vecteurs **q**, **q**' et **k** (de directions $\hat{\mathbf{q}} = \mathbf{q}/q$, etc),

$$u = \hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{k}}, \quad u' = \hat{\mathbf{q}}' \cdot \hat{\mathbf{k}}, \quad w = \hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{q}}'$$
(39)

l'expression sans dimension fonction symétrique de u et u', appelée amplitude de diffusion réduite,

$$R_{k}(u,u',w) = \frac{\hbar k}{2mc} \left\{ e_{x} - we_{\rho} - e_{k}(1+e_{k}e_{\rho})(u-u')^{2} \frac{w + \frac{1+\lambda}{2}}{(1-ue_{k})(1-u'e_{k})(1-w)} + \frac{(u+e_{\rho})(u'+e_{\rho})[e_{k}(w-uu') + uu'e_{kk}] + (u+e_{\rho})(1-u'e_{k})(w+ue_{\rho k}) + (u'+e_{\rho})(1-ue_{k})(w+u'e_{\rho k})}{(1-ue_{k})(1-u'e_{k})} \right\}$$

$$(40)$$

et les paramètres physiques sans dimension tirés du potentiel chimique $\mu(\rho)$ du superfluide à température nulle, de la relation de dispersion $\epsilon_k(\rho)$ de la quasi-particule γ et de leurs dérivées

²⁸La lourdeur du calcul vient du fait que les termes \mathcal{T}_2 et \mathcal{T}_3 sont d'ordre q^0 et se compensent dans la somme (23) à l'ordre dominant, ce qui oblige à développer leur numérateur et leur dénominateur jusqu'à l'ordre sous-dominant, c'est-à-dire avec une erreur relative $O(q^2)$ et absolue $O(q^3)$ [4]. On aboutit à une simplification notable par un paramétrage plus symétrique des vecteurs d'onde entrants et sortants, en développant l'amplitude $\mathcal{A}(\gamma : \mathbf{k} - ((\mathbf{q} - \mathbf{q}')/2), \phi : \mathbf{q} \to \gamma : \mathbf{k} + ((\mathbf{q} - \mathbf{q}')/2), \phi : \mathbf{q}')$ à \mathbf{k} fixé, qui reste équivalente à l'amplitude originelle à l'ordre q. On peut ainsi se ramener à des expressions à développer paires ou impaires en \mathbf{q} ou \mathbf{q}' , par exemple au dénominateur d'énergie $\hbar \omega_{\mathbf{q}} + \epsilon_{\mathbf{k}+((\mathbf{q}'-\mathbf{q})/2)} - \epsilon_{\mathbf{k}+((\mathbf{q}'+\mathbf{q})/2)}$ de \mathcal{T}_2 , ce qui annule automatiquement l'ordre impair ou pair. En particulier, l'expression de q' en fonction de q sur la couche d'énergie donnée dans l'équation (38) présente maintenant, telle quelle, l'erreur sous-sous-dominante $O(q^3)$ requise. Il faut aussi penser à remplacer $\epsilon_{\mathbf{k}_i} - \epsilon_{\mathbf{k}_f}$ par $\hbar \omega_{\mathbf{q}'} - \hbar \omega_{\mathbf{q}}$ au dénominateur de \mathcal{T}_5 . On remarque alors qu'à l'ordre dominant, l'on passe de \mathcal{T}_4 à \mathcal{T}_5 en changeant $|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|$ en $-|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|$; à cet ordre, $\mathcal{T}_4 + \mathcal{T}_5$ est en fait une fraction rationnelle en $|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|^2$, ce qui permet de faire disparaître la racine carrée contenue dans $|\mathbf{q} - \mathbf{q}'|$.

par rapport au nombre d'onde k de la quasi-particule ou à la densité ρ du superfluide (à potentiel d'interaction fixé entre les atomes de masse m du superfluide) :

$$e_{k} = \frac{\nu_{k}}{c} = \frac{1}{\hbar c} \frac{\partial \epsilon_{k}}{\partial k} \quad e_{\rho} = \frac{\rho}{\hbar k c} \frac{\partial \epsilon_{k}}{\partial \rho} \quad e_{\rho\rho} = \frac{\rho^{2}}{\hbar k c} \frac{\partial^{2} \epsilon_{k}}{\partial \rho^{2}} \quad \lambda = \frac{\rho d^{2} \mu / d\rho^{2}}{d\mu / d\rho} = 2 \frac{d \ln c}{d \ln \rho} - 1$$

$$e_{kk} = \frac{k}{c} \frac{\partial \nu_{k}}{\partial k} = \frac{k}{\hbar c} \frac{\partial^{2} \epsilon_{k}}{\partial k^{2}} \quad e_{\rho k} = \frac{\rho}{c} \frac{\partial \nu_{k}}{\partial \rho} = \frac{\rho}{\hbar c} \frac{\partial^{2} \epsilon_{k}}{\partial \rho \partial k} \quad e_{x} = e_{\rho\rho} - \lambda e_{\rho}$$
(41)

Nous avons relié la quantité λ , un peu à part car seule à ne pas dépendre du nombre d'onde k, au paramètre de Grüneisen dln $c/d\ln\rho$ au moyen de la relation hydrodynamique exacte sur la vitesse du son, $mc^2 = \rho d\mu/d\rho$. La quantité $e_{\rho\rho}$ n'est qu'un intermédiaire de calcul et ne contribue à l'amplitude de diffusion qu'au travers de e_x ; elle n'apparaîtra guère dans la suite. Contrairement aux apparences, la fonction R_k donc l'amplitude de diffusion n'ont pas de divergence en w = 1, compte tenu de l'inégalité $(u - u')^2 = [\hat{\mathbf{k}} \cdot (\hat{\mathbf{q}} - \hat{\mathbf{q}}')]^2 = 2(1 - w)$. À partir de l'expression (38), il est aisé de vérifier que notre amplitude de diffusion obéit bien à l'ordre dominant en q au principe de microréversibilité sur la couche d'énergie

$$\mathscr{A}(\gamma:\mathbf{k},\phi:\mathbf{q}\to\gamma:\mathbf{k}',\phi:\mathbf{q}') = \mathscr{A}(\gamma:\mathbf{k}',\phi:\mathbf{q}'\to\gamma:\mathbf{k},\phi:\mathbf{q})$$
(42)

compte tenu du lien entre q et q' qui y existe et de l'invariance de la fonction R_k sous l'échange de u et u'.

À vitesse nulle. La fonction R_k se simplifie beaucoup dans la limite d'une quasi-particule γ de vitesse de groupe nulle. Le calcul est simple : on utilise le développement (2) de la relation de dispersion de γ au voisinage d'un extrémum à l'ordre deux pour calculer le comportement des quantités (41) dans cette limite. Il faut tenir compte du fait que les coefficients Δ_* , k_0 et m_* dans l'équation (2) dépendent de la densité ρ , et séparer les cas $k_0(\rho) > 0$ et $k_0(\rho) \equiv 0$. (i) Si $k_0(\rho) > 0$, seul le coefficient e_k a priori tend vers zéro lorsque k tend vers k_0 ; les limites des autres coefficients sont repérées par un tilde :

$$e_{k} \overset{k_{0}>0}{\underset{k\to k_{0}}{\longrightarrow}} \frac{\hbar(k-k_{0})}{m_{*}c} \quad e_{\rho} \overset{k_{0}>0}{\underset{k\to k_{0}}{\longrightarrow}} \tilde{e}_{\rho} = \frac{\rho}{\hbar c k_{0}} \frac{\mathrm{d}\Delta_{*}}{\mathrm{d}\rho} \quad e_{x} \overset{k_{0}>0}{\underset{k\to k_{0}}{\longrightarrow}} \tilde{e}_{x} = \frac{\rho^{2}}{\hbar c k_{0}} \left[\frac{\mathrm{d}^{2}\Delta_{*}}{\mathrm{d}\rho^{2}} - \frac{\mathrm{d}^{2}\mu/\mathrm{d}\rho^{2}}{\mathrm{d}\mu/\mathrm{d}\rho} \frac{\mathrm{d}\Delta_{*}}{\mathrm{d}\rho} + \frac{\hbar^{2}}{m_{*}} \left(\frac{\mathrm{d}k_{0}}{\mathrm{d}\rho} \right)^{2} \right]$$
$$e_{kk} \overset{k_{0}>0}{\underset{k\to k_{0}}{\longrightarrow}} \tilde{e}_{kk} = \frac{\hbar k_{0}}{m_{*}c} \quad e_{\rho k} \overset{k_{0}>0}{\underset{k\to k_{0}}{\longrightarrow}} \tilde{e}_{\rho k} = -\frac{\rho\hbar}{m_{*}c} \frac{\mathrm{d}k_{0}}{\mathrm{d}\rho} \tag{43}$$

et l'on obtient l'amplitude de diffusion réduite en $k = k_0$ en accord avec la référence [18] mais pas avec [3] :

$$R_{k}(u,u',w) \xrightarrow[k\tok_{0}]{} \frac{\hbar k_{0}}{2mc} \left[(u+u'+\tilde{e}_{\rho})w+\tilde{e}_{x}+\tilde{e}_{\rho k}u(u+\tilde{e}_{\rho})+\tilde{e}_{\rho k}u'(u'+\tilde{e}_{\rho})+\tilde{e}_{kk}uu'(u+\tilde{e}_{\rho})(u'+\tilde{e}_{\rho}) \right]$$

$$(44)$$

Dans le problème du gaz de fermions qui nous intéresse, ceci correspond à un potentiel chimique μ strictement positif dans la relation de dispersion BCS (9), considérée au voisinage de son minimum. (ii) Si $k_0(\rho) \equiv 0$, les coefficients e_k , e_{kk} et $e_{\rho k}$ tendent linéairement vers zéro lorsque $k \rightarrow k_0$, et les autres divergent comme 1/k, avec des coefficients repérés par un accent tchèque dont il faut garder trace :

$$e_{k} \overset{k_{0}\equiv0}{\underset{k\to0}{\approx}} \frac{\hbar k}{m_{*}c} \quad \frac{\hbar k}{mc} e_{\rho} \overset{k_{0}\equiv0}{\underset{k\to0}{\Rightarrow}} \check{e}_{\rho} = \frac{\rho}{mc^{2}} \frac{\mathrm{d}\Delta_{*}}{\mathrm{d}\rho} \quad \frac{\hbar k}{mc} e_{x} \overset{k_{0}\equiv0}{\underset{k\to0}{\approx}} \check{e}_{x} = \frac{\rho^{2}}{mc^{2}} \left(\frac{\mathrm{d}^{2}\Delta_{*}}{\mathrm{d}\rho^{2}} - \frac{\mathrm{d}^{2}\mu/\mathrm{d}\rho^{2}}{\mathrm{d}\mu/\mathrm{d}\rho} \frac{\mathrm{d}\Delta_{*}}{\mathrm{d}\rho} \right)$$

$$e_{kk} \overset{k_{0}\equiv0}{\underset{k\to0}{\approx}} \frac{\hbar k}{m_{*}c} \quad e_{\rho k} \overset{k_{0}\equiv0}{\underset{k\to0}{\approx}} - \frac{\hbar k\rho}{m_{*}^{2}c} \frac{\mathrm{d}m_{*}}{\mathrm{d}\rho}$$

$$(45)$$

pour écrire le résultat final, qui corrige une affirmation hâtive de la référence [4] :²⁹

$$R_{k}(u, u', w) \xrightarrow[k \to k_{0}]{k \to k_{0}} \frac{1}{2} \left[\check{e}_{x} + w \check{e}_{\rho} \left(1 + \frac{m}{m_{*}} \check{e}_{\rho} \right) \right]$$

$$\tag{46}$$

Dans notre problème fermionique, ce cas correspond à un potentiel chimique μ strictement négatif dans la relation de dispersion BCS (9) considérée au voisinage de son minimum, ou encore à un potentiel chimique μ strictement positif dans cette même relation, considérée cette fois au voisinage de son maximum relatif en k = 0; cette seconde situation, de masse effective $m_* < 0$, est celle du *maxon*, dont on a vu sur la Figure 2a qu'il est stable d'après la théorie BCS dans un régime d'interaction assez forte.

Diffusion à 4 phonons. Pour terminer cette section, soulignons que le résultat central (38) est très général. Il s'applique quelle que soit la statistique quantique de la quasi-particule γ ou sa relation de dispersion isotrope ϵ_k . En particulier, comme le souligne la référence [3], il doit décrire la diffusion d'un phonon mou (de vecteur d'onde q infinitésimal) sur un phonon dur (de vecteur d'onde fixé **k**, en particulier $k \gg q$), avec production d'un phonon mou **q**' et d'un phonon dur \mathbf{k}' . Ce problème à quatre phonons a été étudié dans le contexte de l'hélium 4 superfluide, et l'amplitude de diffusion correspondante peut être calculée de manière exacte avec l'hydrodynamique quantique dans la limite $\hbar k \ll mc$ où $\epsilon_k \sim \hbar ck$ [24]. Dans ce cas, seule la quantité e_{kk} tend vers zéro; e_k tend vers un (limite sonique), e_ρ et $e_{\rho k}$ tendent vers $(1 + \lambda)/2$, $e_{\rho\rho}$ tend vers $(\rho^2/c) d^2 c/d\rho^2$, et notre amplitude de diffusion (38) reproduit effectivement celle de l'équation (111) de la référence [26] appliquée à la relation de dispersion linéaire $\omega_q = cq$, ce qui constitue un bon test. Le problème à quatre phonons peut aussi être étudié dans un gaz de bosons en interaction faible avec la méthode de Bogolioubov, qui permet de s'affranchir de la contrainte $\hbar k \ll mc$. À l'endroit d'un minimum rotonique ($k \to k_0 > 0$), la référence [34] a ainsi pu tester avec succès le résultat de la référence [18], c'est-à-dire in fine (44), dans une situation où il diffère de celui de la référence [3]. Nous avons étendu cette vérification à un nombre d'onde k quelconque et trouvons une amplitude de diffusion réduite en accord parfait avec notre prédiction générale (40).³⁰

²⁹La référence [4] pensait à tort déduire le cas $k \to k_0 \equiv 0$ du cas $k \to k_0 > 0$ en faisant tendre k_0 vers zéro dans son équation (10), donc dans notre équation (44), voir la phrase après cette équation (10). En réalité, pour obtenir l'équivalent (44), on a fait tendre e_k vers zéro à e_{kk} fixé, alors que $e_{kk} \sim e_k \to 0$ dans la limite $k \to k_0 \equiv 0$. Du coup, la compensation des deux termes uu' dans la sous-expression $e_k(w - uu') + uu'e_{kk}$ entre crochets dans (40) ne peut pas être prise en compte (la sous-expression est $\sim e_k w$ et non pas $\sim uu'e_{kk}$ si $k \to k_0 \equiv 0$); or, cette sous-expression est affectée d'un poids divergent et donne une contribution non nulle au résultat final (46). Signalons que la note 42 étend (46) à l'ordre un en k.

 $^{^{30}}$ Dans les notations de la référence [26], l'amplitude de transition volumique $\mathscr{A}_{\mathrm{fi}}$ s'écrit $(4mc^2/
ho)\mathscr{A}^{2 \mapsto 2,\mathrm{eff}}$ $(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3, \mathbf{q}_4)$ où la masse d'un boson m est aussi notée $m_{\rm B}$ et les $(\mathbf{q}_i)_{1 \le i \le 4}$ sont les vecteurs d'onde des bosons incidents et émergents. Instruit par la note 28, nous posons $\mathbf{q}_1 = \mathbf{q}$, $\mathbf{q}_2 = \mathbf{k} + (\mathbf{q}' - \mathbf{q})/2$, $\mathbf{q}_3 = \mathbf{q}'$, $\mathbf{q}_4 = \mathbf{k} + (\mathbf{q} - \mathbf{q}')/2$. L'équation (105) de [26] donne l'amplitude effective $\mathcal{A}^{2 \leftrightarrow 2, \text{eff}}$ sur la couche d'énergie ($\epsilon_{q_2} - \epsilon_{q_4}$ a été remplacé par $\epsilon_{q_3} - \epsilon_{q_1}$ dans les dénominateurs d'énergie) en fonction des amplitudes des processus élémentaires (équations (E18-E20) de [26] dans la théorie de Bogolioubov); il reste à la développer à l'ordre un en $q \rightarrow 0$ à vecteur d'onde **k** et directions $\hat{\mathbf{q}}$ et $\hat{\mathbf{q}}'$ fixés, à l'aide d'un logiciel de calcul formel. Indiquons quelques astuces simplificatrices : (i) on se place dans un système d'unités tel que $\hbar = m = c = 1$, (ii) le spectre de Bogolioubov ϵ_0 fait naturellement apparaître la transformée de Fourier \tilde{V}_Q du potentiel d'interaction entre bosons ($V(\mathbf{r})$ est arbitraire, isotrope, à courte portée), $\epsilon_Q = [E_Q(E_Q + 2\rho \tilde{V}_Q)]^{1/2}$ avec $E_Q = \hbar^2 Q^2 / 2m$, mais il vaut mieux éliminer \tilde{V}_Q au profit de ϵ_Q comme suit, $\tilde{V}_Q = (\epsilon_Q^2 - E_Q^2)/2\rho E_Q$, (iii) pour les phonons mous, on peut remplacer ϵ_Q par son développement limité (1) d'ordre 3 en $\hat{Q} = 0$, et pour les phonons durs, on peut remplacer ϵ_Q par son développement limité d'ordre 3 en Q = k, $\epsilon_Q \simeq \sum_{n=0}^{3} e_n(k) (Q-k)^n / n!$ (en effet, les numérateurs et les dénominateurs de $\mathscr{A}^{2 \leftrightarrow 2, \text{eff}}$ doivent être développés à l'ordre sous-sous-dominant, puisque les diagrammes les plus divergents sont d'ordre q^{-1}), (iv) si l'on introduit les vecteurs d'onde internes $\mathbf{q}_0 = \mathbf{k} + (\mathbf{q} + \mathbf{q}')/2$, $\mathbf{q}_5 = \mathbf{q} - \mathbf{q}'$, $\mathbf{q}_6 = \mathbf{k} - (\mathbf{q} + \mathbf{q}')/2$, $\mathscr{A}^{2 \leftrightarrow 2, \text{eff}}$ ne dépend que des modules des $(\mathbf{q}_i)_{0 \le i \le 6}$, (v) on pose provisoirement $q' = \eta q$ et on développe les q_i des phonons durs (indices *j* pairs) à $\eta > 0$ fixé à l'ordre q^3

4. Caractériser la marche au hasard : force moyenne, diffusion en impulsion, diffusion en position

Notre quasi-particule γ est désormais immergée dans le gaz thermique de phonons du superfluide de température T arbitrairement basse; par interaction incessante avec les phonons, elle subit une dynamique stochastique dans l'espace des impulsions et des positions, que nous allons maintenant décrire.

Équation maîtresse. La quasi-particule γ est préparée initialement dans un état de vecteur d'onde k stable au sens de la Section 2, en particulier avec une vitesse de groupe v_k subsonique. Elle ne peut donc émettre des phonons, ce serait un processus endoénergétique. Pour la même raison, elle ne peut en absorber, ce serait un processus exoénergétique, voir l'équation (18). Reste donc, à l'ordre dominant en température, le processus de diffusion d'un phonon de vecteur d'onde q étudié dans la Section 3. Écrivons une équation maîtresse sur la distribution en vecteur d'onde $\Pi(\mathbf{k}, t)$ de la quasi-particule γ , en comptant négativement les processus de départ $(\mathbf{k}) + (\mathbf{q}) \rightarrow (\mathbf{k}') + (\mathbf{q}') du mode |\gamma : \mathbf{k}\rangle$ et positivement les processus d'alimentation $(\mathbf{k}') + (\mathbf{q}') \rightarrow (\mathbf{k}) + (\mathbf{q})$ de ce mode, somme étant prise à k fixé sur tous les vecteurs d'onde distincts \mathbf{q} et \mathbf{q}' des phonons et le vecteur d'onde \mathbf{k}' s'en déduisant par conservation de la quantité de mouvement :

$$\frac{\partial}{\partial t}\Pi(\mathbf{k},t) = -\frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \mathscr{A}(\gamma:\mathbf{k},\phi:\mathbf{q}\to\gamma:\mathbf{k}',\phi:\mathbf{q}') \right|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}}+\hbar\omega_{\mathbf{q}}-\epsilon_{\mathbf{k}'}-\hbar\omega_{\mathbf{q}'}) \bar{n}_{\mathbf{q}}(1+\bar{n}_{\mathbf{q}'})\Pi(\mathbf{k},t) + \frac{1}{L^6} \sum_{\mathbf{q},\mathbf{q}'} \frac{2\pi}{\hbar} \left| \mathscr{A}(\gamma:\mathbf{k}',\phi:\mathbf{q}'\to\gamma:\mathbf{k},\phi:\mathbf{q}) \right|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}'}+\hbar\omega_{\mathbf{q}'}-\epsilon_{\mathbf{k}}-\hbar\omega_{\mathbf{q}}) \bar{n}_{\mathbf{q}'}(1+\bar{n}_{\mathbf{q}})\Pi(\mathbf{k}',t) \right|$$
(47)

Pour calculer le taux des processus, nous avons utilisé la règle d'or de Fermi, dont on reconnaît le facteur $2\pi/\hbar$ et la distribution de Dirac traduisant la conservation de l'énergie (30), en incluant les facteurs d'amplification bosoniques accompagnant l'absorption (facteur \bar{n}) ou l'émission (facteur $1 + \bar{n}$) d'un phonon dans un mode de nombre d'occupation moyen thermique $\bar{n}_{\mathbf{q}} = [\exp(\beta\hbar\omega_{\mathbf{q}}) - 1]^{-1}$, où $\beta = 1/k_B T$.³¹ Rappelons que la règle d'or traite implicitement le processus de diffusion dans l'approximation de Born. On ne peut donc l'appliquer directement au hamiltonien d'interaction \hat{V} , en l'occurrence à sa composante $\hat{H}_4^{\phi\gamma}$ dans l'équation (20), ce qui reviendrait à ne tenir compte que du diagramme de diffusion directe de la Figure 3b1. On l'applique plutôt à un hamiltonien d'interaction effectif \hat{W} de même forme que la partie en $\hat{b}_{\mathbf{q}'}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}}$ de $\hat{H}_4^{\phi\gamma}$ dans l'équation (A.3) mais avec des éléments de matrice volumiques donnés directement

⁽sans utiliser la valeur de η imposée par la conservation de l'énergie, qu'il faudrait en principe déterminer à l'ordre q^2). De manière remarquable, on trouve alors que les termes de $\mathscr{A}^{2 \leftrightarrow 2, \text{eff}}$ d'ordre q^{-1} et q^0 s'annulent pour tout η ; dans le terme d'ordre q, on peut finalement remplacer η par sa valeur à l'ordre 0, $\eta^{(0)} = (1 - ue_1)/(1 - u'e_1)$. Pour comparer le résultat à (40), il reste à calculer les coefficients (41) pour l'équation d'état de champ moyen $\mu = \rho \bar{V}_0 = mc^2$ et la relation de dispersion de Bogolioubov : $e_k = e_1$, $e_\rho = (e_0^2 - E_k^2)/2ke_0$, $e_{\rho\rho} = -(e_0^2 - E_k^2)^2/4ke_0^3$, $\lambda = 0$, $e_{kk} = ke_2$, $e_{\rho k} = [e_1 + (E_k/e_0)^2(e_1 - 4e_0/k)]/2$ et $e_x = e_{\rho\rho}$.

³¹Nous avons pris ici une loi de Bose de potentiel chimique nul car le nombre total de phonons N_{ϕ} n'est pas une constante du mouvement de la dynamique purement phononique. Quand la branche acoustique est de départ convexe, les processus collisionnels dominants conservant l'énergie-impulsion sont ceux de Beliaev–Landau à trois phonons, de taux d'ordre T^5 ; ils ne conservent effectivement pas N_{ϕ} et l'affaire est entendue. Dans le cas concave, les processus collisionnels dominants sont ceux à quatre phonons $\phi\phi \rightarrow \phi\phi$ de Landau–Khalatnikov, de taux d'ordre T^7 , et il faut invoquer des processus sous-dominants (à cinq phonons de taux d'ordre T^{11} [28, 29] ou à trois phonons par non-conservation de l'énergie entre états instables, de taux d'ordre T^9 [35]) pour faire varier N_{ϕ} ; le gaz de phonons pourrait alors présenter un état de pseudo-équilibre thermique de potentiel chimique $\mu_{\phi} < 0$ pendant une durée d'ordre intermédiaire entre T^{-7} et T^{-9} ou T^{-11} .

pour $\mathbf{q} \neq \mathbf{q}'$ par l'amplitude de transition volumique vraie $\mathscr{A}(\gamma : \mathbf{k}, \phi : \mathbf{q} \rightarrow \gamma : \mathbf{k}', \phi : \mathbf{q}')$.³² \hat{W} est un opérateur hermitien, compte tenu de la microréversibilité (42); par construction, il conduit dans l'approximation de Born à l'amplitude de diffusion $\phi - \gamma$ désirée. La même microréversibilité et la relation $1 + \bar{n} = \exp(\beta \hbar \omega) \bar{n}$ permettent de vérifier que $\Pi_{st}(\mathbf{k}) \propto \exp(-\beta \epsilon_{\mathbf{k}})$ est solution stationnaire exacte de l'équation maîtresse (47) : la quasi-particule γ est bien thermalisée par le gaz de phonons aux temps longs.

Équation de Fokker–Planck. Dans ce travail, nous supposons toujours que la distribution en nombre d'onde de la quasi-particule γ a une largeur Δk beaucoup plus grande que celle des phonons thermiques, comme dans l'équation (3). Cette condition est d'ailleurs automatiquement satisfaite lorsque γ est à l'équilibre thermique (à suffisamment basse température), la relation de dispersion parabolique (2) de γ imposant à $\Pi_{st}(\mathbf{k})$ une largeur $\propto T^{1/2}$ beaucoup plus grande que celle $\propto T$ typique d'une relation de dispersion linéaire (1). Dans le régime (3), la quasi-particule γ subit à chaque diffusion un changement de vecteur d'onde $\delta \mathbf{k} = \pm (\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ très faible devant Δk et l'équation aux différences finies (47) peut être simplifiée en une équation aux dérivées partielles par développement au second ordre en $\delta \mathbf{k}/\Delta k \approx T^{1/2}$. Pour ce faire, nous introduisons le flux de probabilité partant de \mathbf{k} par diffusion $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{q}'$ (une fonctionnelle de Π) :

$$\Phi_t(\mathbf{k}|\mathbf{q},\mathbf{q}') \equiv \frac{2\pi}{\hbar} \left| \mathscr{A}(\gamma:\mathbf{k},\phi:\mathbf{q}\to\gamma:\mathbf{k}',\phi:\mathbf{q}') \right|^2 \delta(\epsilon_{\mathbf{k}}+\hbar\omega_{\mathbf{q}}-\epsilon_{\mathbf{k}'}-\hbar\omega_{\mathbf{q}'}) \bar{n}_{\mathbf{q}}(1+\bar{n}_{\mathbf{q}'}) \Pi(\mathbf{k},t)$$
(48)

et, par simple échange des variables muettes \mathbf{q} et \mathbf{q}' dans son terme d'alimentation puis passage à la limite thermodynamique, nous récrivons l'équation maîtresse (47) comme suit :

$$\frac{\partial}{\partial t}\Pi(\mathbf{k},t) = \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3} \int_{\mathbb{R}^3} \frac{\mathrm{d}^3 q'}{(2\pi)^3} \left[\Phi_t(\mathbf{k} + \mathbf{q}' - \mathbf{q} | \mathbf{q}, \mathbf{q}') - \Phi_t(\mathbf{k} | \mathbf{q}, \mathbf{q}') \right]$$
(49)

Cette forme rend évidente la conservation de la probabilité totale $\int d^3 k \Pi(\mathbf{k}, t)/(2\pi)^3$, égale à un, et conduit, à l'ordre deux en $\mathbf{q} - \mathbf{q}'$, à l'équation de Fokker–Planck tridimensionnelle

$$\frac{\partial}{\partial t}\Pi(\mathbf{k},t) = -\frac{1}{\hbar}\sum_{i=x,y,z}\frac{\partial}{\partial k_i}[F_i(\mathbf{k})\Pi(\mathbf{k},t)] + \frac{1}{\hbar^2}\sum_{i=x,y,z}\sum_{j=x,y,z}\frac{\partial^2}{\partial k_i\partial k_j}[D_{ij}(\mathbf{k})\Pi(\mathbf{k},t)]$$
(50)

avec les coefficients de la force moyenne $F(\mathbf{k})$ et de la matrice de diffusion en impulsion $\underline{\underline{D}}(\mathbf{k})$ dans la base cartésienne,

$$F_{i}(\mathbf{k}) = \int \frac{d^{3}q \, d^{3}q'}{(2\pi)^{6}} \hbar(q_{i} - q_{i}') \frac{\Phi_{t}(\mathbf{k}|\mathbf{q},\mathbf{q}')}{\Pi(\mathbf{k},t)} \quad \text{et} \quad D_{ij}(\mathbf{k}) = \int \frac{d^{3}q \, d^{3}q'}{(2\pi)^{6}} \frac{1}{2} \hbar^{2}(q_{i} - q_{i}')(q_{j} - q_{j}') \frac{\Phi_{t}(\mathbf{k}|\mathbf{q},\mathbf{q}')}{\Pi(\mathbf{k},t)}$$
(51)

indépendants de $\Pi(\mathbf{k}, t)$ et du temps. Sous cette forme, la matrice $\underline{\underline{D}}(\mathbf{k})$ est visiblement symétrique réelle positive.

Force et diffusion en impulsion à l'ordre dominant en *T***.** Comme la quasi-particule γ de vecteur d'onde **k** évolue dans un milieu homogène et isotrope, la force moyenne et la diffusion en impulsion qu'elle subit doivent être invariantes par rotation d'axe la direction $\hat{\mathbf{k}}$ du vecteur d'onde. Elles donc sont caractérisées par des fonctions du seul nombre d'onde *k*, à savoir la composante longitudinale *F*(*k*) de la force, le coefficient de diffusion en impulsion longitudinal $D_{\parallel}(k)$ et transverse $D_{\perp}(k)$:

³²L'approche plus puissante de l'équation pilote dans l'approximation de Born–Markov [33] prédirait de plus un effet réactif du réservoir de phonons sur la quasi-particule γ, à savoir un changement de sa relation de dispersion dépendant de la température, en particulier sous l'effet des termes diagonaux $\mathbf{q} = \mathbf{q}'$ et des termes hors couche d'énergie de \hat{W} , non donnés ici. On peut supposer dans la suite que $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ est cette relation de dispersion modifiée, sans que cela affecte l'amplitude de diffusion réduite $R_k(u, u', w)$ à l'ordre dominant en température.

Yvan Castin

$$F_i(\mathbf{k}) = \frac{k_i}{k} F(k) \quad \text{et} \quad D_{ij}(\mathbf{k}) = \frac{k_i k_j}{k^2} D_{/\!/}(k) + \left(\delta_{ij} - \frac{k_i k_j}{k^2}\right) D_{\perp}(k)$$
(52)

À l'ordre dominant, nous pouvons aisément sortir la dépendance en température de ces coefficients en exprimant les vecteurs d'onde des phonons en unités de $k_B T/\hbar c$ dans les intégrales sextuples de l'équation (51) et en utilisant l'équivalent (38) de \mathcal{A} pour obtenir les lois de puissance (le facteur numérique $\pi^5/15$ est de pure commodité)

$$F(k) \underset{k_BT/mc^2 \to 0}{\sim} \frac{\pi^5}{15} \frac{\hbar c}{\rho^2} \left(\frac{k_BT}{\hbar c}\right)^8 \mathscr{F}(k) \quad \text{et} \quad D_{\perp, //}(k) \underset{k_BT/mc^2 \to 0}{\sim} \frac{\pi^5}{15} \frac{\hbar^2 c}{\rho^2} \left(\frac{k_BT}{\hbar c}\right)^9 \mathscr{D}_{\perp, //}(k) \tag{53}$$

Les fonctions restantes $\mathscr{F}(k)$ et $\mathscr{D}_{\perp, //}(k)$ sont sans dimension. Pour les calculer, passons en coordonnées sphériques d'axe polaire $\hat{\mathbf{k}}$ sur les variables d'intégration \mathbf{q} et \mathbf{q}' . Les distributions de Dirac de conservation de l'énergie permettent d'intégrer facilement sur le module q', *in fine* relié à q par (38). L'intégrale sur le module q des contributions linéaires en les nombres d'occupation fait sortir la fonction ζ de Riemann; celle des contributions quadratiques fait sortir des fonctions moins étudiées (s est un entier >2, x un réel >0) :

$$\Phi_{s}(x) = \int_{0}^{+\infty} \frac{\mathrm{d}Q \, Q^{s}}{(\mathrm{e}^{Q\sqrt{x}} - 1)(\mathrm{e}^{Q/\sqrt{x}} - 1)} = \sum_{m=1}^{\infty} \sum_{n=1}^{+\infty} \frac{s!}{(m\sqrt{x} + n/\sqrt{x})^{s+1}} = \Phi_{s}(1/x)$$
(54)

L'invariance de l'intégrande par rotation conjointe de **q** et **q**' autour de **k** permet de se ramener à une intégrale sur un seul angle azimutal, l'angle relatif $\varphi = \phi - \phi'$. Dans la force, une contribution difficile faisant intervenir la fonction Φ_7 se révèle être une fonction antisymétrique des cosinus u et u' des angles polaires, d'intégrale nulle donc.³³ Une telle simplification ne se produit pas dans la diffusion en impulsion. Il reste avec les notations (39), (40), (41) :³⁴

$$\mathscr{F}(k) = \int_{-1}^{1} \mathrm{d}u \int_{-1}^{1} \mathrm{d}u'(u-u') \frac{(1-ue_k)^3}{(1-u'e_k)^5} \int_{0}^{2\pi} \frac{\mathrm{d}\varphi}{2\pi} [R_k(u,u',w)]^2$$
(55)

$$\begin{pmatrix} \mathscr{D}_{/\!/}(k) \\ \mathscr{D}_{\perp}(k) \end{pmatrix} = \frac{15}{16\pi^8} \int_{-1}^1 \mathrm{d}u \int_{-1}^1 \mathrm{d}u' \left[\frac{(1-ue_k)^3}{(1-u'e_k)^6} 8! \zeta(9) + \frac{\Phi_8 \left(\frac{1-ue_k}{1-u'e_k} \right)}{[(1-ue_k)(1-u'e_k)]^{3/2}} \right] \\ \times \int_{0}^{2\pi} \frac{\mathrm{d}\varphi}{2\pi} [R_k(u,u',w)]^2 \begin{pmatrix} (u'-u)^2 \\ (u'-u)^2 \frac{e_k^2 - 1}{2} + (1-w)(1-ue_k)(1-u'e_k) \end{pmatrix}$$
(56)

L'intégration triple dans (55) peut être effectuée analytiquement;³⁵ la force moyenne admet ainsi une expression explicite en les paramètres (41), combinaison de fonctions rationnelles et d'un logarithme, malheureusement trop longue pour être écrite ici. Les coefficients de diffusion en impulsion doivent être évalués numériquement. Dans l'approximation BCS, où la relation de dispersion ϵ_k et l'équation d'état à température nulle ont une forme analytique explicite (voir notre équation (9) et la référence [36]),³⁶ nous représentons sur la Figure 4 la dépendance en nombre d'onde de la force et des coefficients de diffusion pour différents régimes d'interaction.

³³À un facteur près, il s'agit de $(u - u') \Phi_7((1 - ue_k)/(1 - u'e_k))/[(1 - ue_k)(1 - u'e_k)]$.

³⁴En particulier, $w = uu' + [(1 - u^2)(1 - u'^2)]^{1/2} \cos \varphi$.

³⁵Les seules intégrales un peu difficiles sont $\int_0^{2\pi} d\varphi/(1-w) = 2\pi/|u-u'|$ et $\int_0^{2\pi} d\varphi/(1-w)^2 = 2\pi(1-uu')/|u-u'|^3$ où *w* est écrit comme dans la note 34.

³⁶Nous avons rendu plus compactes les expressions de la référence [36] en utilisant les propriétés des intégrales elliptiques E(ix) = |1 + ix|E(x/|1 + ix|) et K(ix) = K(x/|1 + ix|)/|1 + ix| valables pour tout $x \in \mathbb{R}$. En posant $\mu/\Delta = \operatorname{sh} \tau$, il vient alors $-\pi/2a = (2m\Delta/\hbar^2)^{1/2}I_1$ et $\rho = (2m\Delta/\hbar^2)^{3/2}I_2/(2\pi^2)$ avec $I_1 = (2e^{-\tau})^{1/2}[e^{\tau}\operatorname{ch} \tau K(ie^{\tau}) - E(ie^{\tau})]$ et $I_2 = (2e^{-\tau}/9)^{1/2}[\operatorname{sh} \tau E(ie^{\tau}) + \operatorname{ch} \tau K(ie^{\tau})]$. Par ailleurs, $e_k = (\hbar k/mc)(\xi_k/\epsilon_k)$, $e_{kk} = (\hbar k/mc)(\xi_k^3 + \Delta^2(3\xi_k + 2\mu))/\epsilon_k^3$, $e_{\rho k} = -(\hbar k/mc)\Delta(\xi_k\rho\Delta' + \Delta\rho\mu')/\epsilon_k^3$, $e_{\rho} = (\Delta\rho\Delta' - \xi_k\rho\mu')/(\hbar ck\epsilon_k)$, $e_{\rho\rho} = [(\Delta\rho\mu' + \xi_k\rho\Delta')^2 + \epsilon_k^2(\Delta\rho^2\Delta'' - \xi_k\rho^2\mu'')]/(\hbar ck\epsilon_k^3)$. On a noté avec un prime la dérivation par rapport à la densité ρ à longueur de diffusion *a* fixée et on a posé $\xi_k = \hbar^2 k^2/(2m) - \mu$.



FIGURE 4. Force moyenne \mathcal{F} (en noir) (rangée supérieure) et coefficients de diffusion en impulsion longitudinal $\mathscr{D}_{\mathbb{A}}$ (en noir) et transverse \mathscr{D}_{\perp} (en rouge) (rangée inférieure), après extraction de l'ordre dominant en température et adimensionnement comme dans l'équation (53), pour une quasi-particule γ fermionique dans un gaz non polarisé de fermions condensé par paires à très basse température, en fonction du nombre d'onde k de la quasi-particule. On a déduit les coefficients (41) de l'équation d'état du gaz (voir la note 36) et de la relation de dispersion (9) de γ dans l'approximation BCS, puis on a intégré numériquement les équations (55), (56). Dans la zone de raccordement CBE-BCS : (a) du côté CBE $1/k_F a = 1$ ($\mu/\epsilon_F \simeq -0.801$, $\Delta/\epsilon_F \simeq 1.332$), (b) à la limite unitaire $1/k_F a = 0$ $(\mu/\epsilon_{\rm F} \simeq 0,591, \Delta/\epsilon_{\rm F} \simeq 0,686)$, (c) du côté BCS $1/k_{\rm F}a = -1$ $(\mu/\epsilon_{\rm F} \simeq 0,954, \Delta/\epsilon_{\rm F} \simeq 0,208)$. Tireté vertical : position k_0 du minimum de la relation de dispersion. Tireté oblique ou horizontal : prédictions analytiques (62), (63), (64), (65), (67) et approximation linéaire $e_k \simeq$ $\hbar(k-k_0)/m_*$ dans l'équation (62); en (b1), le point d'annulation de \mathscr{F} n'est pas un point d'inflexion. $k_{\rm F} = (3\pi^2 \rho)^{1/3}$ est le nombre d'onde de Fermi du gaz, $\epsilon_{\rm F} = \hbar^2 k_{\rm F}^2 / 2m$ son énergie de Fermi, ρ sa densité uniforme, μ son potentiel chimique et $\Delta > 0$ son paramètre d'ordre à température nulle, a la longueur de diffusion dans l'onde s entre fermions de masse m de spins opposés. Dans la limite BCS (d) $k_{\rm F}a \rightarrow 0-$, comportements limites universels déduits de l'équation (57) après multiplication de la force, de la diffusion et de l'écart de k à k_0 par des puissances bien choisies de Δ , en trait plein [la loi limite pour \mathscr{F} est explicite, voir l'équation (58), celle pour $\mathscr{D}_{/\!\!/}$ ou \mathscr{D}_{\perp} requiert une intégration numérique] ; tiretés obliques ou horizontaux : comme dans (a), (b) et (c) mais pour $\Delta/\epsilon_{\rm F} \rightarrow 0$; courbes en pointillé pour la diffusion : approximations quadratiques (58); cercles : $1/k_F a = -3 (\Delta/\epsilon_F \simeq 9,72 \times 10^{-3})$ tirés numériquement des équations (55), (56).

Dans la limite dite BCS $k_{\rm F}a \rightarrow 0^-$, où l'approximation BCS est la plus quantitative, des résultats simples peuvent être obtenus, en faisant tendre $\Delta/\epsilon_{\rm F}$ vers zéro à $\kappa = \hbar^2 k_0 (k - k_0)/m\Delta$ fixé. La vitesse du son devient proportionnelle à la vitesse de Fermi, $c \sim \hbar k_{\rm F}/m\sqrt{3}$, le nombre d'onde du minimum de la relation de dispersion se confond avec le nombre d'onde de Fermi $k_0 \sim k_{\rm F}$, la quasi-particule γ est subsonique et stable tant que $|\kappa| < 1/\sqrt{2}$ et l'amplitude de diffusion réduite $\phi - \gamma$, dominée par $\mathcal{T}_1 + \mathcal{T}_2 + \mathcal{T}_3$ dans l'expression (23) (les diagrammes omis dans la référence [4] deviennent négligeables), prend la forme très simple indépendante de w:³⁷

$$R_k(u, u', w) \underset{\kappa_F a \to 0^-}{\overset{\kappa \text{ fixé}}{\longrightarrow}} \frac{3\epsilon_F / \Delta}{(1 + \kappa^2)^{3/2}} \frac{(u^2 - 1/3)(u'^2 - 1/3)}{(1 - ue_k)(1 - u'e_k)} \quad \text{avec} \quad e_k \sim \frac{\sqrt{3\kappa}}{(1 + \kappa^2)^{1/2}} \tag{57}$$

³⁷Pour être complet, donnons $e_{\rho} \sim -e_k/3$, $\lambda \rightarrow -1/3$, $e_{kk} \sim (2\sqrt{3}\epsilon_F/\Delta)(1+\kappa^2)^{-3/2}$, $e_{\rho k} \sim -e_{kk}/3$, $e_{\rho \rho} \sim e_{kk}/9$.

Il devient alors raisonnable de donner l'expression analytique de la force et un développement des coefficients de diffusion en impulsion à faible vitesse :³⁸

$$\mathscr{F}(k) \sim -\frac{512}{14\,175} \frac{(\epsilon_{\rm F}/\Delta)^2}{(1+\kappa^2)^3} \frac{e_k(1+3e_k^2)(33+47e_k^2)}{(1-e_k^2)^6} \quad \text{et}$$

$$\binom{\mathscr{D}_{/\!/}(k)}{\mathscr{D}_{\perp}(k)} \sim \left(\frac{\epsilon_{\rm F}}{\Delta}\right)^2 \left(\frac{\frac{5632}{4725} + \left(\frac{159\,232}{4725} + \frac{94\,208\,\pi^2}{14\,553}\right)\kappa^2 + O(\kappa^4)}{\frac{512}{945} + \left(\frac{61\,952}{11\,025} + \frac{38912\pi^2}{43\,659}\right)\kappa^2 + O(\kappa^4)}\right) \tag{58}$$

Forces de Langevin. L'équation de Fokker–Planck (50) est une équation déterministe portant sur la distribution de probabilité du vecteur d'onde **k** de la quasi-particule γ . Il est cependant plus parlant physiquement, en particulier quand la notion de corrélation temporelle entre en jeu, d'utiliser la reformulation stochastique qu'en a donné Langevin [37], en termes d'une marche au hasard du vecteur d'onde **k** dans l'espace de Fourier :

$$\hbar \,\mathrm{d}\mathbf{k} = \mathbf{F}(\mathbf{k})\,\mathrm{d}t + \left[2\,\mathrm{d}t\,\underline{D}(\mathbf{k})\right]^{1/2}\boldsymbol{\eta} \tag{59}$$

Nous utilisons ici les règles de calcul d'Ito : on tire entre les instants t et t + dt un vecteur aléatoire gaussien η , réel, de moyenne nulle, de matrice de covariance identité, $\langle \eta_i \eta_j \rangle = \delta_{ij}$, statistiquement indépendant des vecteurs η tirés aux autres temps. Ceci montre en particulier que $\mathbf{F}(\mathbf{k})$ est bien la force moyenne, puisque $d\langle \hbar \mathbf{k} \rangle/dt = \langle \mathbf{F}(\mathbf{k}) \rangle$. La méthode habituelle de la fonction test³⁹ permet de retrouver immédiatement l'équation (50) à partir de (59). L'invariance par rotation ayant conduit aux formes (52) incite à transformer (59) en équations stochastiques sur le module k et la direction $\hat{\mathbf{k}}$ du vecteur d'onde :

$$\hbar \,\mathrm{d}k = F(k) \,\mathrm{d}t + \frac{2D_{\perp}(k)}{\hbar k} \,\mathrm{d}t + \left[2 \,\mathrm{d}t D_{/\!/}(k)\right]^{1/2} \eta_{/\!/} \tag{60}$$

$$\mathbf{d}\hat{\mathbf{k}} = -\frac{2D_{\perp}(k)}{\hbar^2 k^2} \, \mathbf{d}t \, \hat{\mathbf{k}} + \frac{\left[2 \, \mathbf{d}t D_{\perp}(k)\right]^{1/2}}{\hbar k} \, \boldsymbol{\eta}_{\perp} \tag{61}$$

où η_{\parallel} et η_{\perp} sont les composantes du vecteur η parallèle et orthogonale à **k**. Ceci donne un sens physique à $D_{\perp}(k)/(\hbar k)^2$, celui d'un coefficient de diffusion de la direction de **k** sur la sphère unité.

Près de la vitesse nulle. Soit k_0 un point d'annulation de la vitesse de groupe v_k de la quasiparticule γ , correspondant à un minimum ou à un maximum de la relation de dispersion [masse effective $m_* > 0$ ou < 0 dans le développement (2)]. En ce point, à l'ordre T^8 en température, la force moyenne tend vers zéro linéairement avec v_k , ce qui donne pour la forme réduite (53) :

$$\mathscr{F}(k) \underset{k \to k_0}{\sim} -\alpha e_k \quad \text{avec} \quad \alpha = \int_{-1}^1 \mathrm{d}u \int_{-1}^1 \mathrm{d}u' 4(u-u')^2 \int_0^{2\pi} \frac{\mathrm{d}\varphi}{2\pi} \left[\lim_{k \to k_0} R_k(u,u',w) \right]^2 \ge 0 \tag{62}$$

³⁸Dans la limite (57), on peut aussi ramener la contribution de Φ_8 dans (56) à une intégrale simple au prix de l'introduction des fonctions de Bose ou polylogarithmes $g_s(z) = \sum_{n \ge 1} z^n / n^s$ (le reste, calculable analytiquement, est une fraction rationnelle en e_k): en posant $f_s(u) \equiv g_s(\exp(-Q(1-e_ku)))/(Qe_k)^s$, il vient $\int_{-1}^{1} du du'(u^2 - 1/3)^2(u'^2 - 1/3)^2(u' - u)^2 \Phi_8((1-ue_k)/(1-u'e_k))/[(1-ue_k)(1-u'e_k)]^{7/2} = 2 \int_{0}^{+\infty} dQ Q^8 [A_0(Q)A_2(Q) - A_1(Q)^2]$ avec $A_0(Q) = [120e_k f_6(u) + 24(1 - 5e_ku)f_5(u) + 8(7e_k - 3u)f_4(u) + (16/3)(2 - 3e_ku)f_3(u) + (4/9)(7e_k - 6u)f_2(u) + (4/9)(1 - e_ku)f_1(u)]_{-1}^1$, $A_1(Q) = [-720e_k f_7(u) - 120(1 - 6e_ku)f_6(u) + 8(15u - 43e_k)f_5(u) + 8(13e_ku - 7)f_4(u) + (8/9)(18u - 25e_k)f_3(u) + (4/9)(8e_ku - 7)f_2(u) + (4/9)(u - e_k)f_1(u)]]_{-1}^1$ et $A_2(Q) = [5040e_k f_8(u) + 720(1 - 7e_ku)f_7(u) + 40(61e_k - 18u)f_6(u) + 8(43 - 95ue_k)f_5(u) + (8/3)(64e_k - 39u)f_4(u) + (8/9)(25 - 33e_ku)f_3(u) + (4/9)(9e_k - 8u)f_2(u) + (4/9)(1 - e_ku)f_1(u)]_{-1}^1$. De même, dans Tr \underline{D} , $\int_{-1}^{1} du du'(u^2 - 1/3)^2(u'^2 - 1/3)^2[(1 - ue_k)^2 + (1 - u'e_k)^2 - 2uu'(1 - ue_k)(1 - u'e_k)]\Phi_8((1 - ue_k)/(1 - u'e_k))/[(1 - ue_k)(1 - u'e_k)]^{7/2} = 2\int_{0}^{+\infty} dQ Q^8 [B_0(Q)B_2(Q) - B_1(Q)^2]$ avec $B_0(Q) = A_0(Q), B_1(Q) = A_1(Q) - e_k A_2(Q)$ et $B_2(Q) = A_0(Q) - 2e_k A_1(Q) + e_k^2 A_2(Q)$. Ces expressions sont numériquement mal posées pour Q ou $|e_k|$ trop petits, les termes $f_s(u)$ devenant individuellement très grands.

³⁹On exprime de deux manières différentes la variation d'ordre d*t* de l'espérance $\langle f(\mathbf{k}(t)) \rangle$ où *f* est une fonction lisse arbitraire de \mathbb{R}^3 dans \mathbb{R} à décroissance rapide.

La quasi-particule subit alors une force de frottement visqueux, de coefficient de frottement réduit α . Le coefficient de diffusion en impulsion longitudinal à l'ordre T^9 , sous la forme réduite (53), tend tout simplement vers α :

$$\mathscr{D}_{/\!/}(k) \underset{k \to k_0}{\to} \alpha \tag{63}$$

Ceci ressort de l'équation (56), de la valeur $\Phi_8(1) = 8![\zeta(8) - \zeta(9)]$ et de l'expression de α dans (62). L'explication physique en est d'ailleurs très simple dans le cas $m_* > 0$: c'est, sous forme adimensionnée, la relation d'Einstein liant température d'équilibre, coefficient de diffusion en impulsion et coefficient de frottement. Nous l'écrivons plus tard sous forme dimensionnée, voir l'équation (88). Elle est bien connue lorsque $k_0 = 0$, mais elle vaut donc aussi dans le cas plus inhabituel $k_0 > 0$ d'une diffusion en impulsion anisotrope, à condition qu'on l'applique à $\mathcal{D}_{\parallel}(k_0)$. En effet, le coefficient de diffusion transverse réduit a une limite non nulle en $k = k_0$ différente de α si $k_0 > 0$, mais égale à α si $k_0 = 0$ (la matrice \underline{D} devient alors scalaire). Pour écrire des expressions explicites, il faut distinguer ces deux cas. $\overline{Si} k_0 > 0$, on utilise l'expression limite (44) de l'amplitude de diffusion $\phi-\gamma$ réduite; après triple intégration angulaire, il vient

$$\alpha^{k_{0}\geq0} \left(\frac{\hbar k_{0}}{2mc}\right)^{2} \left[\frac{128}{225} + \frac{32}{35}\tilde{e}_{kk}^{2} + \frac{2944}{525}\tilde{e}_{kk}\tilde{e}_{\rho k} + \frac{384}{35}\tilde{e}_{\rho k}^{2} + \left(\frac{64}{15}\tilde{e}_{kk} + \frac{896}{45}\tilde{e}_{\rho k}\right)\tilde{e}_{x} + \frac{32}{3}\tilde{e}_{x}^{2} - \left(\frac{1088}{525}\tilde{e}_{kk} + \frac{128}{15}\tilde{e}_{\rho k} + \frac{64}{9}\tilde{e}_{x}\right)\tilde{e}_{\rho} + \left(\frac{32}{9} - \frac{1216}{525}\tilde{e}_{kk}^{2} - \frac{128}{15}\tilde{e}_{kk}\tilde{e}_{\rho k} + \frac{128}{45}\tilde{e}_{\rho k}^{2} - \frac{64}{9}\tilde{e}_{kk}\tilde{e}_{x}\right)\tilde{e}_{\rho}^{2} + \frac{64}{15}\tilde{e}_{kk}\tilde{e}_{\rho}^{3} + \frac{32}{15}\tilde{e}_{kk}^{2}\tilde{e}_{\rho}^{4} \right]$$
(64)
$$\mathscr{D}_{\perp}(k) \stackrel{k_{0}\geq0}{k \to k_{0}} \left(\frac{\hbar k_{0}}{2mc}\right)^{2} \left[\frac{256}{225} + \frac{32}{175}\tilde{e}_{kk}^{2} + \frac{256}{175}\tilde{e}_{kk}\tilde{e}_{\rho k} + \frac{1408}{315}\tilde{e}_{\rho k}^{2} + \left(\frac{64}{45}\tilde{e}_{kk} + \frac{512}{45}\tilde{e}_{\rho k}\right)\tilde{e}_{x} + \frac{32}{3}\tilde{e}_{x}^{2} - \left(-\frac{64}{105}\tilde{e}_{kk} + \frac{128}{45}\tilde{e}_{\rho k} + \frac{64}{9}\tilde{e}_{x}\right)\tilde{e}_{\rho} + \left(\frac{32}{9} + \frac{128}{175}\tilde{e}_{kk}^{2} + \frac{128}{45}\tilde{e}_{kk}\tilde{e}_{\rho k} + \frac{256}{45}\tilde{e}_{\rho k}^{2}\right)\tilde{e}_{\rho}^{2} + \frac{64}{45}\tilde{e}_{kk}\tilde{e}_{\rho}^{3} + \frac{32}{45}\tilde{e}_{kk}^{2}\tilde{e}_{\rho}^{4} \right]$$
(65)

Comme on le voit sur la forme de Langevin module-direction (60), (61), près de l'extrémum ($e_k \approx \hbar (k - k_0)/m_*c$), le nombre d'onde moyen $\langle k(t) \rangle$ relaxe exponentiellement vers k_0 si $m_* > 0$ ⁴⁰ ou s'en écarte exponentiellement si $m_* < 0$ (α est toujours ≥ 0), et la direction moyenne du vecteur d'onde tend exponentiellement vers zéro, ceci avec des taux

$$\Gamma_k = \frac{\pi^5}{15} \alpha \frac{\hbar}{m_* \rho^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^8 \quad \text{et} \quad \Gamma_{\hat{\mathbf{k}}} = \frac{2\pi^5}{15} \mathscr{D}_\perp(k_0) \frac{c}{\rho^2 k_0^2} \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^9 \tag{66}$$

Si $k_0 \equiv 0$ il faut utiliser plutôt l'expression limite (46) pour obtenir⁴¹

$$\mathscr{D}_{/\!/}(k) \underset{k \to k_0}{\overset{k_0 \equiv 0}{\sim}} \mathscr{D}_{\perp}(k) \underset{k \to k_0}{\overset{k_0 \equiv 0}{\rightarrow}} \alpha \overset{k_0 \equiv 0}{=} \frac{8}{9} \left\{ \left[\check{e}_{\rho} \left(1 + \frac{m}{m_*} \check{e}_{\rho} \right) - \check{e}_x \right]^2 + 2\check{e}_x^2 \right\}$$
(67)

Comme le montre la forme cartésienne (59) de l'équation de Langevin, le vecteur d'onde moyen $\langle \mathbf{k}(t) \rangle$ relaxe alors vers zéro avec un taux $\Gamma_{\mathbf{k}}$ de même expression formelle que Γ_k au voisinage

⁴⁰La valeur stationnaire de $\langle k \rangle$ diffère en général légèrement de $k_0 > 0$. D'une part, ϵ_k contient un petit terme $\propto (k - k_0)^3$, voir l'équation (2), qui gauchit $\Pi_{st}(k)$ et conduit à $\langle k - k_0 \rangle \approx T$; d'autre part, même en l'absence de ce terme cubique, le jacobien tridimensionnel k^2 gauchit la distribution de probabilité $k^2 \Pi_{st}(k)$ du nombre d'onde k et conduit à un écart du même ordre. Au total, $\langle k - k_0 \rangle \underset{T \to 0}{\simeq} (m_* k_B T / \hbar^2 k_0)(2 - k_0 b)$.

⁴¹Pour montrer que $\mathscr{D}_{\perp}(k) - \mathscr{D}_{\parallel}(k) \rightarrow 0$ lorsque $k \rightarrow k_0 \equiv 0$, on applique la remarque de la note 49 à la fonction $f(u, u', w) = g(w)[2(1-w) - 3(u-u')^2]$ où g(w) est quelconque. On a alors bien $\int_{-1}^{1} du \int_{-1}^{1} du' \int_{0}^{2\pi} d\varphi f(u, u', w) = 0$ car $2(1-w) - 3(u-u')^2 = 2(1-\hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{q}}') - 3[\hat{\mathbf{k}} \cdot (\hat{\mathbf{q}} - \hat{\mathbf{q}}')]^2$ est de moyenne nulle sur $\hat{\mathbf{k}}$ à $\hat{\mathbf{q}}$ et $\hat{\mathbf{q}}'$ fixés donc à w fixé.

d'un minimum de la relation de dispersion, ou au contraire s'en écarte exponentiellement avec ce même taux au voisinage d'un maximum. Pour être complet, signalons que, par rapport au cas $k_0 > 0$, on gagne un ordre en précision dans les développements (62), (63), (67), l'écart relatif au terme dominant étant désormais $\approx e_k^2$.⁴²

Dans l'approximation BCS, α et $\mathcal{D}_{\perp}(k_0)$ sont représentés en fonction de la force des interactions sur la Figure 5a. Le cas $k_0 > 0$ correspond au minimum de la relation de dispersion BCS (9) pour un potentiel chimique $\mu > 0$; le cas $k_0 \equiv 0$ correspond soit au minimum de la relation de dispersion BCS pour $\mu < 0$, soit au maxon, c'est-à-dire au maximum relatif de la relation de dispersion, pour $\mu > 0$. On constate que le coefficient de frottement réduit du maxon α_{maxon} rejoint la branche $\mu < 0$ du coefficient de frottement réduit du minimum α_{minon} de manière dérivable en $\mu = 0$, alors que α_{minon} y admet un point anguleux. Lorsque $\mu = 0$, la relation de dispersion de la quasi-particule varie quartiquement à l'endroit k = 0 de son minimum; la relation (62) s'applique, avec une expression analytique simple du coefficient de frottement déduite de l'équation d'état BCS donnée dans la note 36,⁴³

$$\lim_{\mu \to 0} \alpha \stackrel{\text{approx.BCS}}{=} \left\{ 36\pi^4 \left[\frac{1}{\Gamma(1/4)^8} + \frac{1}{24\pi^4 - \Gamma(1/4)^8/4 + 3\Gamma(1/4)^{16}/(512\pi^4)} \right] \right\}^{-1} = 5,269\,833\dots$$
 (68)

mais la vitesse de groupe réduite e_k et donc la force moyenne tendent vers zéro cubiquement avec k; quant à la diffusion en impulsion, elle est isotrope en k = 0, comme le dit l'équation (67). À la limite unitaire, comme on le voit sur la Figure 5a, α_{maxon} s'annule, ce qui nous paraît être un artefact de l'approximation BCS,⁴⁴ et une valeur plus précise de α_{minon} , allant au-delà de BCS, a été ajoutée à partir des valeurs mesurées $k_0 \simeq 0,92k_F$ et $\Delta/\epsilon_F \simeq 0,44$ [16], $\mu \simeq 0,376\epsilon_F$ [14] et de la valeur théorique issue d'un développement dimensionnel en $\epsilon = 4 - d$, $m_*/m = 0,56$ [38]. Dans la limite CBE $k_F a \rightarrow 0^+$, le gaz de fermions se réduit à un condensat de dimères de masse 2m et de longueur de diffusion $a_{dd} \simeq 0,60a$ [39,40], et la quasi-particule γ à un fermion surnuméraire non apparié de masse $m_* = m$, interagissant avec les dimères avec une longueur de diffusion $a_{ad} \simeq 1,18a$ [41–44], d'où la limite exacte (non représentée sur la Figure 5a) :⁴⁵

⁴²On le montre en poussant un cran plus loin le développement (46), $R_k(u, u', w) \stackrel{k_0 \equiv 0}{=} (1/2)(\check{e}_x + f\check{e}_\rho w) + (\hbar k/2mc)(u+u')(wf^2 + \check{e}_\rho\check{e}_{\rho k}) + O(k^2)$ avec $f = 1 + (m/m_*)\check{e}_\rho$ et $\check{e}_{\rho k} = \lim_{k \to 0} (mc/\hbar k)e_{\rho k} = \rho d(m/m_*)/d\rho$, et en utilisant dans les intégrales angulaires sur (u, u', φ) l'imparité de l'intégrande sous la transformation $(u, u', \varphi) \to (-u, -u', \varphi)$, qui préserve w et $(u - u')^2$.

⁴³À longueur de diffusion a > 0 fixée, la limite $\mu \to 0^+$ dans la théorie BCS correspond à $\rho \to \rho_0^+$, avec $\rho_0 a^3 = [\Gamma(1/4)]^8/(1536\pi^4)$; donnons ici seulement les lois d'échelle $k_0 \approx (\rho - \rho_0)^{1/2}$ et $1/m_* \approx \rho - \rho_0$, qui montrent que $(\hbar \rho \, dk_0/d\rho)^2/m_*$ a une limite finie et non nulle.

⁴⁴D'après la théorie BCS, il y aurait à la limite unitaire une compensation dans $R_k(u, u', w)$ jusqu'à l'ordre k lorsque $k \to 0$, $R_k \sim 2\delta^2 k^2 (w + 2uu')/(9|3 + 2i\delta|)$ où $\delta = \Delta/mc^2 =$ cte par invariance d'échelle, si bien que $\mathscr{F}(k) \approx (\hbar k/mc)^5$ et $\mathscr{D}_{/\!/,\perp}(k) \approx (\hbar k/mc)^4$, la matrice de diffusion en impulsion restant non scalaire à cet ordre. Dans une théorie exacte, on aurait $\epsilon_k = mc^2 G((\hbar k/mc)^2)$, où la fonction G est lisse mais inconnue, en supposant que le maxon existe et soit stable. Alors $R_k(u, u', w) \underset{k \to 0}{\overset{1/a=0}{=}} (w/9)G(0)[3 + 4G(0)G'(0)]\{1 + (\hbar k/2mcG(0))(u + u')[3 + 4G(0)G'(0)]\} + O(k^2)$. Dans les notations usuelles, $\check{e}_x = 0$, $G(0) = 3\check{e}_\rho/2 = \Delta_*/mc^2$ et $G'(0) = m/2m_*$ si bien que $G(0)G'(0) = \Delta_*/2m_*c^2$, égal à -3/4 dans la théorie BCS.

⁴⁵En effet, dans la limite CBE, l'état fondamental du gaz a une énergie $E_0 \simeq (N/2)(-\hbar^2/ma^2) + (N/2)(N/2 - 1)g_{dd}/(2L^3)$ et l'état excité par brisure d'un dimère en deux atomes libres de vecteurs d'onde ±k a une énergie $E_1 \simeq (N/2 - 1)(-\hbar^2/ma^2) + (N/2 - 1)(N/2 - 2)g_{dd}/(2L^3) + 2 \times \hbar^2 k^2/2m + 2 \times g_{ad}(N/2 - 1)/L^3$, où $g_{dd} = 4\pi\hbar^2 a_{dd}/m_d$ et $g_{ad} = 2\pi\hbar^2 a_{ad}/m_r$ sont les constantes de couplage dimère-dimère et atome-dimère, $m_r = mm_d/(m + m_d) = 2m/3$ est la masse réduite d'un atome et d'un dimère, N est le nombre total de fermions. On l'aura compris, les atomes fermioniques et les dimères bosoniques étant des particules discernables, il n'y a pas d'effet de groupement Hanbury-Brown et Twiss dans leur énergie de couplage de champ moyen. À la limite thermodynamique, $dE_0/dN \rightarrow \mu$ et $(E_1 - E_0)/2 \rightarrow \epsilon_{\mathbf{k}} \simeq \Delta_* + \hbar^2 k^2/2m_*$. Notons que $\check{e}_x = O(\rho^{1/2})$.

Yvan Castin



FIGURE 5. (a) Coefficient de frottement réduit α et coefficient de diffusion en impulsion transverse réduit $\mathscr{D}_{\perp}(k_0)$ à l'endroit k_0 d'un extrémum de la relation de dispersion ϵ_k , pour une quasi-particule γ fermionique dans un gaz non polarisé de fermions de masse m condensé par paires à très basse température, en fonction de la force des interactions dans le gaz repérée par le rapport de son potentiel chimique μ et de son paramètre d'ordre Δ . Le coefficient de diffusion en impulsion longitudinal réduit $\mathscr{D}_{\parallel}(k_0)$ est identiquement égal à α , voir l'équation (63). Trait plein noir : α à l'endroit du minimum et dans l'approximation BCS ($k_0 = 0$ si $\mu < 0$, $k_0 = (2m\mu)^{1/2}/\hbar$ si $\mu > 0$). Trait plein vert : α à l'endroit du maximum relatif (maxon) et dans l'approximation BCS ($k_0 = 0, \mu > 0$). Trait plein rouge : $\mathcal{D}_{\perp}(k_0)$ dans l'approximation BCS là où $k_0 > 0$ (ailleurs, il se confond avec α); il croise et surpasse le trait noir donc $\mathcal{D}_{\parallel}(k_0)$ autour de $\mu/\Delta = 1, 6$. On a utilisé les équations (64), (65) ou (67) suivant les cas. Tireté vertical vert : limite de stabilité du maxon comme sur la Figure 2a. Symboles : coordonnées plus précises (au-delà de l'approximation BCS) des coefficients α (signe plus noir) et $\mathcal{D}_{\perp}(k_0)$ (croix rouge) à l'endroit du minimum à la limite unitaire ($\mu/\Delta \simeq 0.85$, $\alpha \simeq 13,6, \mathcal{D}_{\perp}(k_0) \simeq 13,2)$. Pointillé horizontal supérieur : valeur de α dans la limite CBE d'après la théorie BCS [~5,8 fois plus faible que la valeur exacte (69) non représentée ici]. Pointillé horizontal inférieur : limite (68) des différentes branches de α et de $\mathcal{D}_{\perp}(k_0)$ en $\mu = 0$ d'après la théorie BCS. Les courbes tiretées dans le régime de couplage faible $\mu/\Delta \gg 1$ sont issues de la relation de dispersion (9) et des formes limites BCS $\Delta \simeq 8e^{-2}\epsilon_F \exp[-\pi/(2k_F|a|)]$, $\mu \simeq \epsilon_{\rm F}$. (b) Coefficient de diffusion spatiale réduit de la quasi-particule γ à l'équilibre dans le gaz de phonons, c'est-à-dire numérateur du dernier membre de l'expression (86). Trait plein noir : approximation BCS. Pointillés horizontaux : sa limite en $\mu/\Delta = 0$ ou $\mu/\Delta = -\infty$. Tireté : sa forme limite en couplage faible [relation de dispersion (9) et formes limites BCS $\Delta \simeq 8e^{-2}\epsilon_{\rm F}\exp[-\pi/(2k_{\rm F}|a|)], \mu \simeq \epsilon_{\rm F}]$. Étoile : estimation plus précise que BCS à la limite unitaire.

$$\begin{cases} \mu = \frac{\hbar^2}{2ma^2} [-1 + \pi\rho a^2 a_{\rm dd} + O(\rho a^3)^{3/2}] \\ \Delta_* = \frac{\hbar^2}{k_{\rm F} a \to 0^+} \frac{\hbar^2}{2ma^2} [1 + \pi\rho a^2 (3a_{\rm ad} - a_{\rm dd}) + O(\rho a^3)^{3/2}] \implies \alpha \xrightarrow{\to} 8 \left(\frac{a_{\rm ad}}{a_{\rm dd}}\right)^2 \left(1 - \frac{3a_{\rm ad}}{a_{\rm dd}}\right)^2 \approx 750 \end{cases}$$
(69)

La théorie BCS en est très loin (elle sous-estime la limite de α d'un facteur \approx 6) car elle évalue fort mal les longueurs de diffusion dimère-dimère et atome-dimère, $a_{dd}^{BCS} = 2a$ et $a_{ad}^{BCS} = 8a/3$.

Force moyenne à vitesse nulle. À l'endroit k_0 du minimum de la relation de dispersion ϵ_k , la vitesse de groupe de la quasi-particule γ est nulle. Si $k_0 = 0$, la force moyenne subie par γ est alors rigoureusement nulle, par invariance par parité. Si $k_0 > 0$, en revanche, la force moyenne subie n'a aucune raison d'être nulle, $F(k_0) \neq 0$. Plus précisément, à basse température, elle s'annule bien à

l'ordre T^8 , comme nous l'avons vu au paragraphe précédent, mais pas à l'ordre T^9 , et l'on peut obtenir son expression exacte à cet ordre sans avoir besoin de connaître l'amplitude de diffusion avec les phonons au-delà de son ordre dominant $\approx T$,

$$F(k_0) \stackrel{k_0 > 0}{T \to 0} \frac{1}{\hbar} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} D_{/\!/}(k_0) + \frac{2}{\hbar k_0} [D_{/\!/}(k_0) - D_{\perp}(k_0)] \\ \stackrel{k_0 > 0}{T \to 0} \frac{\pi^5}{15} \left(\frac{k_B T}{\hbar c}\right)^9 \hbar c \rho^{-2} \left[\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} \mathscr{D}_{/\!/}(k_0) + \frac{2}{k_0} (\mathscr{D}_{/\!/}(k_0) - \mathscr{D}_{\perp}(k_0))\right]$$
(70)

L'ordre T^9 des coefficients de diffusion en impulsion est en effet déjà connu. Il conduit à un troisième membre non nul se déduisant des équations (63), (64), (65) et de l'expression suivante,

$$k_{0} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} \mathscr{D}_{/\!/}(k_{0}) = \left(\frac{\hbar k_{0}}{2mc}\right)^{2} \frac{64}{4725} \left\{ 630c_{1}\tilde{e}_{kk}^{2}\tilde{e}_{\rho}^{4} - 3(228c_{1} - 210c_{2} - 175c_{3} - 81)\tilde{e}_{kk}^{2}\tilde{e}_{\rho}^{2} + 420(\tilde{e}_{\rho} + 7c_{1}\tilde{e}_{kk}^{-1})\tilde{e}_{\rho}^{3}_{k} + 42[3\tilde{e}_{kk}^{3} + 5(3c_{1} + 1)\tilde{e}_{kk}]\tilde{e}_{\rho}^{3} + 3(90c_{1} - 138c_{2} - 105c_{3} + 19)\tilde{e}_{kk}^{2} - 3(102c_{1} - 210c_{2} - 175c_{3} - 47)\tilde{e}_{kk}\tilde{e}_{\rho} - 30[7c_{1}\tilde{e}_{\rho}^{2} - 129c_{1} + 98c_{2} - 33 - 7(6\tilde{e}_{kk} - 5c_{1}\tilde{e}_{kk}^{-1})\tilde{e}_{\rho}]\tilde{e}_{\rho}^{2}_{k} - 3[105(8c_{1} - 2c_{2} + 1)\tilde{e}_{kk}\tilde{e}_{\rho}^{2} - (552c_{1} - 750c_{2} - 490c_{3} + 45)\tilde{e}_{kk} - 7(6\tilde{e}_{kk}^{2} - 60c_{1} + 50c_{2} - 5)\tilde{e}_{\rho}]\tilde{e}_{\rho k} - 105[10c_{1}\tilde{e}_{kk}\tilde{e}_{\rho}^{2} - (6c_{1} - 14c_{2} - 15c_{3} - 3)\tilde{e}_{kk} - 30c_{1}\tilde{e}_{kk}^{-1}\tilde{e}_{\rho k}^{2} - (10\tilde{e}_{kk}\tilde{e}_{\rho} + 28c_{1} - 30c_{2} + 9)\tilde{e}_{\rho k}]\tilde{e}_{k} + 5\lambda[81\tilde{e}_{kk}^{2}\tilde{e}_{\rho}^{2} - 49\tilde{e}_{kk}^{2} + 63\tilde{e}_{kk}\tilde{e}_{\rho} - 294\tilde{e}_{\rho k}^{2} - 63(3\tilde{e}_{kk} + 5\tilde{e}_{\rho k})\tilde{e}_{k} + 3(35\tilde{e}_{kk}\tilde{e}_{\rho}^{2} - 87\tilde{e}_{kk} + 35\tilde{e}_{\rho})\tilde{e}_{\rho k}] + 84 \right\}$$
(71)

qui a été obtenue par dérivation par rapport à k de la première composante de l'identité (56), et fait intervenir les coefficients adimensionnés supplémentaires $c_1 = k_0 b$, $c_2 = \rho m_*^{-1} dm_*/d\rho$ et $c_3 = \rho^2 k_0^{-1} d^2 k_0/d\rho^2$, où la longueur b apparaît à l'ordre $(k - k_0)^3$ dans le développement (2) de ϵ_k .⁴⁶ Dans l'approximation BCS, nous trouvons que l'expression entre crochets dans le troisième membre de l'équation (70) est positive et qu'elle tend vers zéro $(+\infty)$ en unités de $1/k_F$ lorsque $\mu/\Delta \rightarrow 0 (+\infty)$; nous n'avons pas jugé utile de la représenter ici. Une conséquence physiquement parlante des résultats (62), (70) est que, dans le cas $k_0 > 0$, la force moyenne subie par la quasi-particule γ à basse température s'annule un peu à côté de k_0 , à un écart en nombre d'onde $k - k_0$ ou à une vitesse v_k proportionnelle à la température; faut-il le préciser, cet écart n'a pas de relation simple avec la moyenne stationnaire $\langle k - k_0 \rangle$ (voir les notes 40 et 54).

Pour établir l'équation (70), le plus simple est de passer par la solution stationnaire Π_0 de l'équation de Fokker–Planck (50) vue comme une équation de continuité dans l'espace de Fourier. Cette distribution $\Pi_0(k)$, invariante par rotation, s'obtient aisément en exprimant que le courant de probabilité **J**(**k**) qu'elle porte est nul. De l'expression générale de la composante selon Oi, $J_i(\mathbf{k}) = F_i(\mathbf{k})\Pi(\mathbf{k})/\hbar - \sum_j (\partial/\partial k_j)[D_{ij}(\mathbf{k})\Pi(\mathbf{k})]/\hbar^2$, nous tirons après remplacement de $\Pi(\mathbf{k})$ par $\Pi_0(k)$, division par $\Pi_0(k)/\hbar$ et utilisation des formes sphériques (52) :

$$F(k) = \frac{2}{\hbar k} [D_{//}(k) - D_{\perp}(k)] + \frac{1}{\hbar} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} D_{//}(k) + D_{//}(k) \frac{1}{\hbar} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} \ln \Pi_{0}(k)$$
(72)

Nous l'avons dit, $\Pi_{st}(\mathbf{k}) \propto \exp(-\beta \epsilon_{\mathbf{k}})$ est solution stationnaire exacte de l'équation maîtresse. Ce n'est cependant pas une solution stationnaire exacte de l'équation de Fokker–Planck, puisque cette dernière résulte d'un développement tronqué de l'équation maîtresse à basse température.

⁴⁶On calcule d'abord la dérivée des fonctions e_{ρ} , etc, en $k = k_0$: en notant $\tilde{\tilde{e}}_{\rho} = k_0 de_{\rho}(k_0)/dk$, etc, on trouve $\tilde{\tilde{e}}_{\rho} = -\tilde{e}_{\rho} + \tilde{e}_{\rho k}$, $\tilde{\tilde{e}}_k = \tilde{e}_{kk}$, $\tilde{\tilde{e}}_{kk} = (1 + 2c_1)\tilde{e}_{kk}$, $\tilde{\tilde{e}}_{\rho k} = 2c_1\tilde{e}_{\rho k} - c_2\tilde{e}_{kk}$, $\tilde{\tilde{e}}_x = -\tilde{e}_x - (\lambda + 2c_2)\tilde{e}_{\rho k} - c_3\tilde{e}_{kk} + 2c_1\tilde{e}_{\rho k}^2/\tilde{e}_{kk}$; les valeurs \tilde{e}_{ρ} , etc, en $k = k_0$ sont données dans l'équation (43). Puis on développe l'amplitude réduite (40) en k_0 au premier ordre en $k - k_0$. Enfin, on insère le développement obtenu dans la première composante de l'équation (56), que l'on développe de même, et on intègre sur φ , u et u', en utilisant la première intégrale de la note 35.

En estimant l'erreur commise, sachant que $\Pi_0(k)$ a une largeur en k d'ordre $T^{1/2}$ autour de k_0 ,⁴⁷ nous aboutissons à la relation exacte dans la largeur de la distribution :

$$F(k) \stackrel{k-k_0=O(T^{1/2})}{=} \frac{2}{\hbar k} [D_{\parallel}(k) - D_{\perp}(k)] + \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} D_{\parallel}(k) - \beta D_{\parallel}(k) \frac{1}{\hbar} \frac{d}{dk} \epsilon_k + O(T^{9+1/2})$$
(73)

Il suffit de l'appliquer en $k = k_0$, où la dérivée de ϵ_k s'annule, pour trouver le résultat (70).⁴⁸

On peut aussi établir (70) par un calcul assez long, en repartant de l'expression générale (51) de la force moyenne et en la développant à l'ordre T^9 dans le cas particulier $k = k_0$. Il faut exprimer q' en fonction de q à l'aide de la conservation de l'énergie un cran plus loin que dans le calcul de $\mathcal{F}(k)$, $q' = q - \hbar q^2 (u' - u)^2 / (2m_*c) + O(q^3)$, et surtout utiliser une expression exactement microréversible de l'amplitude de diffusion $\phi - \gamma$ sur la couche d'énergie :

$$\mathscr{A}(\gamma:\mathbf{k},\phi:\mathbf{q}\to\gamma:\mathbf{k}',\phi:\mathbf{q}') = \frac{\hbar c}{\rho}(q\,q')^{1/2}R_{\parallel\frac{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}{2}\parallel}\left(\hat{\mathbf{q}}\cdot\frac{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}{\parallel\mathbf{k}+\mathbf{k}'\parallel},\hat{\mathbf{q}}'\cdot\frac{\mathbf{k}+\mathbf{k}'}{\parallel\mathbf{k}+\mathbf{k}'\parallel},\hat{\mathbf{q}}\cdot\hat{\mathbf{q}}'\right)$$
(74)

où $\mathbf{k} + \mathbf{q} = \mathbf{k}' + \mathbf{q}'$ et la fonction $R_k(u, u', w)$ est celle de l'équation (38). En notant $R_{k_0}^2$ et $(d/dk)R_{k_0}^2$ les valeurs de la fonction R_k^2 et de sa dérivée par rapport à k en $k = k_0$, on obtient pour le premier membre de l'équation (70) :

$$F(k_{0}) \stackrel{k_{0}>0}{\sim} \frac{4\pi^{5}}{15} \frac{\hbar c}{\rho^{2} k_{0}} \left(\frac{k_{B} T}{\hbar c}\right)^{9} \int_{-1}^{1} \mathrm{d} u \int_{-1}^{1} \mathrm{d} u' \int_{0}^{2\pi} \frac{\mathrm{d} \varphi}{2\pi} \left[\frac{3\hbar k_{0}}{m_{*} c} u'(u'-u)^{2} R_{k_{0}}^{2} + (u'-u)^{2} k_{0} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d} k} R_{k_{0}}^{2} + (1-w)(u-u') \left(\frac{\partial R_{k_{0}}^{2}}{\partial u} - \frac{\partial R_{k_{0}}^{2}}{\partial u'}\right) - (u-u')^{2} \left(u \frac{\partial R_{k_{0}}^{2}}{\partial u} + u' \frac{\partial R_{k_{0}}^{2}}{\partial u'}\right)\right]$$
(75)

Les différents termes au second membre de (70) se déduisent à l'ordre T^9 de l'expression (56) et de la dérivée par rapport à k de sa première composante, le tout pris en $k = k_0$ ($e_k = 0$). Pour la forme (40) de la fonction R_k , il y a bien accord à l'ordre T^9 entre les deux premiers membres de l'équation (70).⁴⁹ Ce calcul explicite permet de comprendre comment on peut obtenir de manière exacte la force moyenne à l'ordre sous-dominant T^9 sans connaître l'amplitude de diffusion \mathscr{A} à l'ordre sous-dominant T^2 . C'est parce qu'on s'est placé en $k = k_0$: à cet endroit, la contribution

⁴⁷Remarquons en effet que les premiers termes négligés dans l'expression du courant selon *Oi* sont de la forme $(\partial^2/\partial k_j \partial k_j)[E_{ijk}(\mathbf{k})\Pi_0(k)]/\hbar^3$ et $(\partial^3/\partial k_j \partial k_k \partial k_l)[G_{ijkl}(\mathbf{k})\Pi_0(k)]/\hbar^4$, où les tenseurs E_{ijk} et G_{ijkl} sont des moments d'ordre 3 et 4 du changement d'impulsion $\hbar(\mathbf{q} - \mathbf{q}')$ accompagnant la diffusion d'un phonon, alors que *F* et *D* en sont les moments d'ordre 1 et 2, voir l'équation (51). En procédant comme pour la force et la diffusion, on trouve qu'à l'ordre dominant en *T*, $E_{ijk} \propto T^{10} \mathcal{E}_{ijk}$ et $G_{ijkl} \propto T^{11} \mathcal{G}_{ijkl}$, où les fonctions réduites \mathcal{E} et \mathcal{G} , indépendantes de la température, ont une largeur en *k* d'ordre T^0 , \mathcal{E} s'annulant linéairement en $k = k_0$ ($\mathcal{E} \approx e_k$) et \mathcal{G} y ayant une limite finie et non nulle. Alors chaque différentiation de $\Pi_0(k)$ par rapport à **k** sort un facteur $\approx T^{-1/2}$, et le facteur e_k est de l'ordre de $T^{1/2}$ sur la largeur de $\Pi_0(k)$, si bien que $(\partial^2/\partial k_j \partial k_k)[E_{ijk}(\mathbf{k})\Pi_0(k)] \approx T^{-1+10+1/2}\Pi_0$ et $(\partial^3/\partial k_j \partial k_k \partial k_l)[G_{ijkl}(\mathbf{k})\Pi_0(k)] \approx T^{-3/2+11}\Pi_0$ et l'on tombe sur l'équation (73).

⁴⁸En identifiant les termes d'ordre $k - k_0$ puis d'ordre $(k - k_0)^2$ dans la relation (73), on montre qu'il existe un coefficient α déjà introduit et un nouveau coefficient ζ tels que $\mathscr{F}(k) = -(\alpha e_k + \zeta e_k^2 + O(e_k^3))$ et $\mathscr{D}_{/\!/}(k) = \alpha + \zeta e_k + O(e_k^2)$, si bien que $\mathscr{F}(k)/\mathscr{D}_{/\!/}(k) = -e_k + O(e_k^3)$ lorsque $k \to k_0$. On arrive aux mêmes résultats par développement limité des expressions (55), (56) à l'ordre sous-dominant en e_k , en considérant R_k comme une fonction de e_k plutôt que de k. La valeur de ζ se déduit aisément de l'équation (71).

⁴⁹Cette conclusion n'est pas propre à la forme (40) mais repose en définitive sur l'identité $\int_{-1}^{1} du \int_{0}^{1} du' \int_{0}^{2\pi} (d\varphi/2\pi) \{(u-u')[(1-w)(\partial_u - \partial_{u'}) - (u-u')(u\partial_u + u'\partial_{u'})]R_{k_0}^2 - [3(u-u')^2 - 2(1-w)]R_{k_0}^2\} = 0.$ Pour l'établir, on remarque d'abord que $(1/4) \int_{-1}^{1} du' \int_{0}^{2\pi} (d\varphi/2\pi) f(u, u', w) = \langle f(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}', \hat{\mathbf{k}}) \rangle$ où $\langle \cdots \rangle$ est la moyenne prise uniformément sur la sphère unité pour les trois directions $\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}'$ et $\hat{\mathbf{k}}, f$ étant une fonction invariante par rotation ou, ce qui revient au même, une fonction des trois produits scalaires $u = \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{q}}, u' = \hat{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{q}}'$ et $w = \hat{\mathbf{q}} \cdot \hat{\mathbf{q}}'$. Alors si $\hat{\mathbf{k}} \mapsto \mathcal{T}_{\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}'}(\hat{\mathbf{k}})$ est un difféomorphisme de la sphère unité dans la sphère unité dépendant paramétriquement de $(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}')$ et de jacobien $J_{\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}'}(\hat{\mathbf{k}})$, on a $\langle f(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}', \hat{\mathbf{k}}) \rangle = \langle J_{\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}'}(\hat{\mathbf{k}}) f(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}', \mathcal{T}_{\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}'}(\hat{\mathbf{k}}))$. Il reste à applique cette identité à la fonction $f(\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}', \hat{\mathbf{k}}, \hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}')$ et au difféomorphisme $\mathcal{T}_{\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}'}(\hat{\mathbf{k}}) = (\hat{\mathbf{k}} + \eta((\hat{\mathbf{q}} - \hat{\mathbf{q}}')/2))/||\hat{\mathbf{k}} + \eta((\hat{\mathbf{q}} - \hat{\mathbf{q}}')/2)|| = \hat{\mathbf{k}}[1 - \eta(u - u')/2] + \eta(\hat{\mathbf{q}} - \hat{\mathbf{q}}')/2 + O(\eta^2)$ de jacobien $J_{\hat{\mathbf{q}}, \hat{\mathbf{q}}'}(\hat{\mathbf{k}}) = 1 - \eta(u - u') + O(\eta^2)$, où η est infinitésimal.

à F(k) de la première correction à \mathcal{A} s'annule par antisymétrie de l'intégrande sous l'échange de u et u'.

Près de la vitesse du son. À force des interactions fixée entre atomes du superfluide, l'un des bords du domaine de stabilité de la quasi-particule γ dans l'espace des vecteurs d'onde (en rouge sur la Figure 2) correspond au régime sonique d'une vitesse de groupe égale en valeur absolue à la vitesse du son. Or, nos expressions (55), (56) de la force moyenne et de la diffusion en impulsion réduites divergent à la limite sonique $e_k \rightarrow \pm 1$, comme le laissent pressentir les dénominateurs $1 - ue_k$ et $1 - u'e_k$.

Pour le voir sur la force moyenne, nous effectuons dans les intégrales les changements de variables u = 1 - x et $u' = 1 - (1 - e_k)x'$ si $e_k \rightarrow 1^-$, u = x - 1 et $u' = -1 + (1 + e_k)x'$ si $e_k \rightarrow -1^+$, puis nous passons à la limite dans l'intégrande à x, x' fixés, ce qui fait disparaître la dépendance en l'angle azimutal φ , pour obtenir après intégration sur $x' \in \mathbb{R}^+$ (effectuer l'intégration sur x est élémentaire mais ne conduit pas à une expression plus compacte) :⁵⁰

$$\mathscr{F}(k) = \frac{1}{e_k \to 1^-} - \frac{1}{24} \left(\frac{\hbar k}{mc}\right)^2 \frac{(1+e_\rho)^2}{(1-e_k)^6} \int_0^2 \mathrm{d}x \, x^2 \left\{ e_{kk}(1+e_\rho) + \left[e_{\rho k} - \frac{1+\lambda}{2} - (2+e_\rho)e_{kk} \right] x + e_{kk} x^2 \right\}^2 \tag{76}$$

$$\mathscr{F}(k) \approx_{e_k \to -1^+} \frac{1}{24} \left(\frac{\hbar k}{mc}\right)^2 \frac{(1-e_\rho)^2}{(1+e_k)^6} \int_0^2 \mathrm{d}x \, x^2 \left\{ e_{kk}(1-e_\rho) + \left[e_{\rho k} + \frac{1+\lambda}{2} - (2-e_\rho)e_{kk} \right] x + e_{kk} x^2 \right\}^2 \tag{77}$$

La force moyenne est négative dans la limite $e_k \rightarrow 1-$. Or cette limite correspond toujours à la borne supérieure k_{sup} du domaine de stabilité en nombre d'onde de la quasi-particule γ , comme on peut le voir sur la Figure 2. La force subie par la quasi-particule γ près du bord tend donc systématiquement à éloigner son vecteur d'onde **k** de la zone supersonique.⁵¹ Inversement, quand le domaine de stabilité de la quasi-particule γ présente un bord $e_k = -1$, c'est toujours une borne inférieure k_{inf} ; la force moyenne est positive dans la limite $e_k \rightarrow -1^+$ et repousse là aussi la quasiparticule de la zone supersonique. Nous aurions pu cependant tomber sur la conclusion inverse (et physiquement incorrecte) si nous avions ignoré la ligne SC de déstabilisation subsonique (en vert sur la Figure 2c) : pour $\Delta/\mu < (\Delta/\mu)_S$, c'est-à-dire en dessous du point sommital S sur la figure, on aurait alors $e_k = -1$ en un bord *supérieur* du domaine de stabilité, et la force moyenne près du bord rapprocherait **k** de la frontière sonique.

⁵⁰Supposons que $e_k \to 1^-$ pour fixer les idées et décomposons le domaine d'intégration $[-1, 1]^2$ sur les cosinus (u, u') des angles polaires en un grand carré $[-1, 1-e] \times [-1, 1-e]$, un petit carré $[1-e, 1] \times [1-e, 1]$ et deux rectangles très allongés, l'un couché $[-1, 1-e] \times [1-e, 1]$ et l'autre debout $[1-e, 1] \times [-1, 1-e]$ où $0 < e \ll 1$ est fixé lorsque $e_k \to 1^-$, puis tend vers zéro à la fin des calculs. La contribution du grand carré a une limite finie lorsque $e_k \to 1^-$ donc est toujours négligeable. Dans le cas de la force, la contribution du petit carré est $\approx e^3/(1-e_k)^6$ donc petite, celle du rectangle couché $\approx e^0/(1-e_k)^6$ donc dominante, celle du rectangle debout $\approx (1-e_k)^0/e^3$ donc négligeable. Ceci justifie la procédure utilisée dans le texte. Dans le cas de la diffusion, il y a deux types de contributions, celle de même type que dans $\mathscr{F}(k)$ et celle mettant en jeu la fonction Φ_8 . La première se traite comme précédemment. Dans la seconde, on trouve que la contribution dominante provient du petit carré et qu'elle diverge dans $\mathscr{D}_{//}$ comme $(1-e_k)^{-3}$ avec un préfacteur contenant l'intégrale $\int_0^{+\infty} dx \int_0^{+\infty} dx' (x-x')^2 \Phi_8((1+x)/(1+x'))/[(1+x)(1+x')]^{7/2}$, et dans \mathscr{D}_{\perp} comme $(1-e_k)^{-2}$ avec un préfacteur contenant l'intégrale $\int_0^{+\infty} dx \int_0^{+\infty} dx' ([1+x)(1+x'))/[(1+x)(1+x')]^{7/2}$, et dans \mathscr{D}_{\perp} comme $(1-e_k)^{-2}$ avec un préfacteur contenant l'intégrale $\int_0^{+\infty} dx \int_0^{+\infty} dx' [(1+x)(1+x')(x+x') - (x-x')^2] \Phi_8((1+x)/(1+x'))/[(1+x)(1+x')]^{7/2}$ (ceci résulte des changements de variables $u = 1 - x(1-e_k)$ et $u' = 1 - x'(1-e_k)$ et du passage à la limite $e_k \to 1^-$ à x et x' fixés dans l'intégrande); les contributions des rectangles sont négligeables en vertu de la majoration $\Phi_8(x) \leq (8\pi^8/15)x^{-7/2}$ sur \mathbb{R}^{+*} et de l'équivalent $\Phi_8(x) \sim (8\pi^8/15)x^{7/2}$ lorsque $x \to 0^+$, qui montrent aussi que $\Phi_8(x)$ est bornée et que les intégrales en préfacteur sont finies.

⁵¹On arrive à la même conclusion en raisonnant sur le nombre d'onde moyen : d'après l'équation (60), $d\langle \hbar k \rangle/dt = \langle F(k) + 2D_{\perp}(k)/\hbar k \rangle$, mais le terme de diffusion transverse, de même exposant de divergence sonique –6 que le terme de force, est négligeable car sous-dominant en température.

Yvan Castin

Dans le cas de la diffusion en impulsion, on montre d'abord que la contribution de la fonction Φ_8 dans l'expression (56), bien que divergente, est une fraction négligeable dans la limite sonique (voir la note 50), puis on applique au reste la même procédure que pour la force, ce qui donne

$$\begin{pmatrix} \mathscr{D}_{/\!/}(k) \\ \mathscr{D}_{\perp}(k) \end{pmatrix} \overset{\sim}{_{e_{k} \to 1^{-}}} & \frac{225\zeta(9)}{\pi^{8}} \left(\frac{\hbar k}{mc}\right)^{2} (1+e_{\rho})^{2} \binom{6(1-e_{k})^{-7}}{(1-e_{k})^{-6}} \int_{0}^{2} \mathrm{d}xx^{3} \\ & \times \left\{ e_{kk}(1+e_{\rho}) + \left[e_{\rho k} - \frac{1+\lambda}{2} - (2+e_{\rho})e_{kk} \right] x + e_{kk}x^{2} \right\}^{2} \\ \begin{pmatrix} \mathscr{D}_{/\!/}(k) \\ \mathscr{D}_{\perp}(k) \end{pmatrix} \overset{\sim}{_{e_{k} \to -1^{+}}} & \frac{225\zeta(9)}{\pi^{8}} \left(\frac{\hbar k}{mc}\right)^{2} (1-e_{\rho})^{2} \binom{6(1+e_{k})^{-7}}{(1+e_{k})^{-6}} \int_{0}^{2} \mathrm{d}xx^{3} \\ & \times \left\{ e_{kk}(1-e_{\rho}) + \left[e_{\rho k} + \frac{1+\lambda}{2} - (2-e_{\rho})e_{kk} \right] x + e_{kk}x^{2} \right\}^{2} \end{cases}$$
(79)

Le coefficient de diffusion en impulsion longitudinal diverge donc plus rapidement que la force moyenne. Faut-il le préciser, les résultats (76), (77), (78), (79) ne valent que si l'on fait tendre d'abord la température du gaz vers zéro, comme dans l'équation (53), puis la vitesse de la quasiparticule γ vers $\pm c$. Rien n'indique en effet que la divergence se maintienne dans une interversion des limites.

Diffusion spatiale. On se place désormais aux temps suffisamment longs pour que la distribution en vecteur d'onde de la quasi-particule γ ait atteint son équilibre thermique. La direction $\hat{\mathbf{k}}$ du vecteur d'onde est de loi uniforme sur la sphère unité. Le nombre d'onde k de la quasi-particule déviant faiblement de la position du minimum k_0 de la relation de dispersion, $k - k_0 \approx T^{1/2}$, on peut remplacer la force moyenne F(k) à l'ordre T^8 par son approximation linéaire (62) et les coefficients de diffusion en impulsion par leur valeur en k_0 . Il existe cependant un degré de liberté instationnaire dont nous n'avons pas parlé jusqu'à présent, et dont la distribution de probabilité s'étale indéfiniment à la limite thermodynamique. Il s'agit du vecteur position $\mathbf{r}(t)$ de la quasi-particule γ , dont la dérivée temporelle $\mathbf{v}(t)$ n'est autre que la vitesse de groupe de la quasi-particule γ :

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\mathbf{r}(t) \equiv \mathbf{v}(t) = \frac{1}{\hbar} \frac{\mathrm{d}\epsilon_k}{\mathrm{d}k} \hat{\mathbf{k}}$$
(80)

Le changement du vecteur position entre 0 et *t* est donné par l'intégrale du vecteur vitesse entre ces deux instants; sa variance est donc donnée par une intégrale double temporelle de la fonction de corrélation de la vitesse à deux temps. À l'équilibre, cette fonction de corrélation matricielle C_{ij} ne dépend que de la différence des temps. Nous posons donc en toute généralité (sans tenir compte du fait que les vitesses moyennes $\langle v_i \rangle$ et $\langle v_j \rangle$ sont évidemment nulles par isotropie de l'équilibre) :

$$C_{ij}(\tau) = \langle v_i(\tau) v_j(0) \rangle - \langle v_i \rangle \langle v_j \rangle \tag{81}$$

La covariance des déplacements de la quasi-particule γ pendant *t* selon les directions *i* et *j* vaut alors⁵²

$$\operatorname{Cov}(r_i(t) - r_i(0), r_j(t) - r_j(0)) = \int_0^t d\tau (t - \tau) [C_{ij}(\tau) + C_{ji}(\tau)]$$
(82)

Comme nous allons le voir en distinguant les cas $k_0 \equiv 0$ et $k_0 > 0$, nous trouvons que la matrice des corrélations de la vitesse, scalaire à cause de l'invariance par rotation, décroît

⁵²On est confronté à $I_{ij}(t) = \int_0^t d\tau \int_0^t d\tau' f_{ij}(|\tau-\tau'|) \operatorname{avec} f_{ij}(|\tau-\tau'|) = [C_{ij}(\tau-\tau')+C_{ji}(\tau-\tau')]/2$; en effet, $C_{ji}(\tau-\tau') = C_{ij}(\tau'-\tau) = C_{ij}(\tau'-\tau) + C_{ji}(\tau-\tau') = C_{ij}(\tau-\tau') = C_{ij}(\tau-\tau)$ même dans un traitement quantique du mouvement, car v_i et v_j sont des opérateurs hermitiens (d'où $C_{ij}^*(\tau) = C_{ji}(-\tau)$) commutant avec l'opérateur densité stationnaire de γ (d'où $C_{ij}(\tau) \in \mathbb{R}$). On a alors successivement $I_{ij}(t) = 2\int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' f_{ij}(\tau-\tau') = 2\int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' f_{ij}(\tau') = 2\int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' f_{ij}(\tau') = 2\int_0^t d\tau \int_0^\tau d\tau' f_{ij}(\tau)$. On a posé $\tau' = \tau - \tau''$ dans l'intégrale intérieure, puis on a intégré par parties sur τ .
rapidement (exponentiellement) en temps. Aussi la position de la quasi-particule γ subit-elle toujours asymptotiquement en temps un étalement diffusif isotrope, la variance du déplacement pendant *t* ayant une divergence linéaire indépendante de la direction de vecteur unitaire **n** considérée :

$$\operatorname{Var}\left(\left[\mathbf{r}(t) - \mathbf{r}(0)\right] \cdot \mathbf{n}\right) \underset{t \to +\infty}{\sim} 2\mathscr{D}^{\operatorname{spa}}t \quad \operatorname{avec} \quad \mathscr{D}^{\operatorname{spa}} = \int_{0}^{+\infty} \mathrm{d}\tau C_{zz}(\tau) \tag{83}$$

En d'autres termes, aux temps beaucoup plus longs que le temps de corrélation de la vitesse, la quasi-particule γ effectue dans l'espace des positions un mouvement brownien de coefficient de diffusion spatiale \mathscr{D}^{spa} , qu'il nous faut calculer à l'ordre dominant en température. Pour cela, comme nous allons le voir, nous pouvons nous limiter dans $C_{zz}(\tau)$, si $k_0 \equiv 0$, à une seule contribution exponentielle, d'amplitude $\approx T$ et de taux de décroissance Γ_k donné par l'équation (66) :

$$C_{ij}(\tau) \stackrel{k_0 \equiv 0}{\simeq} \delta_{ij} \frac{k_B T}{m_*} \mathrm{e}^{-\Gamma_k |\tau|} \tag{84}$$

La loi asymptotique (83) vaut alors pour $\Gamma_k t \gg 1$. Si $k_0 > 0$, en revanche, il faut garder *deux* contributions dans $C_{zz}(\tau)$, l'une d'amplitude $\approx T$ et de taux Γ_k , qui provient de la décorrélation plus rapide de la variable nombre d'onde k, et l'autre d'amplitude $\approx T^2$ et de taux $\Gamma_{\hat{\mathbf{k}}}$ donné par l'équation (66), qui provient de la décorrélation plus lente des variables angulaires $\hat{\mathbf{k}}$:

$$C_{ij}(\tau) \stackrel{k_0 > 0}{\simeq} \delta_{ij} \frac{k_B T}{3m_*} \left[e^{-\Gamma_k |\tau|} + \frac{4m_* k_B T}{\hbar^2 k_0^2} e^{-\Gamma_{\hat{\mathbf{k}}} |\tau|} \right]$$
(85)

Cette seconde contribution est initialement plus faible que la première par un facteur $\approx T$ mais elle décroît plus lentement par un facteur $\approx T$, donc contribue en définitive au coefficient de diffusion spatiale au même ordre en T que la première contribution; la loi asymptotique (83) ne vaut alors que pour $\Gamma_{\hat{\mathbf{k}}} t \gg 1$. Regroupons les deux cas dans une expression synthétique du coefficient de diffusion spatiale :

$$\mathscr{D}^{\text{spa}} \underset{T \to 0}{\sim} \frac{k_B T}{3m_* \Gamma_k} \left[1 + \frac{2D_{/\!/}(k_0)}{D_{\perp}(k_0)} \right] \underset{T \to 0}{\sim} \frac{1}{3} (k_B T)^2 \left[\frac{1}{D_{/\!/}(k_0)} + \frac{2}{D_{\perp}(k_0)} \right] \underset{T \to 0}{\sim} \frac{\hbar}{m} \frac{\frac{1}{3} \left[\frac{1}{\mathscr{D}_{/\!/}(k_0)} + \frac{2}{\mathscr{D}_{\perp}(k_0)} \right]}{\frac{\pi^5}{15} \left(\frac{mc}{\hbar \rho^{1/3}} \right)^6 \left(\frac{k_B T}{mc^2} \right)^7} \right]$$
(86)

en utilisant la relation d'Einstein (63) puis les équivalents (53). On rappelle que $\mathcal{D}_{/\!/}(k_0)$ coïncide avec le coefficient de frottement réduit α , toujours défini par l'équation (62) et d'expression explicite (67) pour $k_0 \equiv 0$, (64) pour $k_0 > 0$. De même, $\mathcal{D}_{\perp}(k_0)$, que l'on peut toujours déduire de la limite en $k = k_0$ de l'équation (56), vaut α si $k_0 \equiv 0$ et admet l'expression explicite (65) sinon. Le coefficient de diffusion spatiale (86) est représenté sur la Figure 5b sous forme adimensionnée dans l'approximation BCS, en fonction de la force des interactions au sein du gaz de fermions. Remarquons qu'il est continu à la transition entre les cas $k_0 \equiv 0$ et $k_0 > 0$ [$\mu = 0$ dans la relation de dispersion BCS (9)] mais y présente un point anguleux.

Exposons brièvement les calculs conduisant aux équations (84), (85). Commençons par le cas $k_0 \equiv 0$, abondamment traité dans la littérature. Des approximations à l'ordre dominant $\mathbf{v} \simeq \hbar \mathbf{k}/m_*$, $\mathbf{F}(\mathbf{k}) \simeq -\Gamma_k \hbar \mathbf{k}$, $\underline{D}(\mathbf{k}) \simeq \underline{D}(\mathbf{0}) = D_{/\!/}(0)$ Id et $\Pi_{\rm st}(\mathbf{k}) \propto \exp(-\beta \hbar^2 k^2/2m_*)$, et de l'équation de Langevin cartésienne (59), nous tirons la valeur initiale et l'équation d'évolution de la fonction de corrélation de la vitesse :

$$C_{ij}(0) \simeq \delta_{ij} \frac{k_B T}{m_*} \quad \text{et} \quad \mathrm{d}C_{ij}(\tau) \underset{\tau>0}{=} \langle \mathrm{d}\nu_i(\tau)\nu_j(0) \rangle \simeq -\Gamma_k \mathrm{d}\tau C_{ij}(\tau) \tag{87}$$

dont l'intégration jointe à la relation $C_{ij}(-\tau) = C_{ji}(\tau)$ conduit à l'expression (84) si le coefficient α est celui de l'équation (67) et, après report dans l'expression (83) de \mathcal{D}^{spa} , au résultat annoncé (86) avec $\mathcal{D}_{/\!/}(k_0) = \mathcal{D}_{\perp}(k_0) = \alpha$.

Le cas $k_0 > 0$ est plus inhabituel. Pour construire un modèle minimal, nous prenons cette fois $\mathbf{v} = \hbar[(k - k_0)/m_*]\hat{\mathbf{k}}, D_{/\!/,\perp}(k) \equiv D_{/\!/,\perp}(k_0)$ et une distribution stationnaire $\Pi_0(k) \propto \exp[-\beta\hbar^2(k - k_0)^2/2m_*]$ (la direction $\hat{\mathbf{k}}$ de \mathbf{k} a une distribution uniforme sur la sphère unité).⁵³ La relation (72) nous oblige alors à inclure dans la force moyenne non seulement le terme de frottement visqueux attendu, mais aussi la contribution à vitesse nulle sous-dominante en température, qui prend une forme plus simple ici car on néglige la dépendance en k de $D_{/\!/}$:

$$F(k) = -\hbar\Gamma(k - k_0) + \frac{2}{\hbar k_0} [D_{//}(k_0) - D_{\perp}(k_0)] \quad \text{avec} \quad \Gamma \equiv \frac{D_{//}(k_0)}{m_* k_B T} \underset{T \to 0}{\sim} \Gamma_k$$
(88)

En insérant ces éléments du modèle dans les équations stochastiques en module et direction (60), (61), et en remplaçant comme dans (88) le nombre d'onde k par k_0 dans les dénominateurs, nous obtenons la formulation de Langevin minimale⁵⁴

$$\hbar \,\mathrm{d}k = -\Gamma \,\mathrm{d}t \,\hbar (k - k_0) + \frac{2D_{/\!/}(k_0)}{\hbar k_0} \,\mathrm{d}t + \left[2 \,\mathrm{d}t D_{/\!/}(k_0)\right]^{1/2} \eta_{/\!/} \tag{89}$$

$$d\hat{\mathbf{k}} = -\Gamma_{\perp} dt \,\hat{\mathbf{k}} + (\Gamma_{\perp} dt)^{1/2} \boldsymbol{\eta}_{\perp} \quad \text{avec} \quad \Gamma_{\perp} \equiv \frac{2D_{\perp}(k_0)}{\hbar^2 k_0^2} \underset{T \to 0}{\sim} \Gamma_{\hat{\mathbf{k}}}$$
(90)

La variation correspondante de la vitesse selon Oi,

$$dv_{i} = \frac{\hbar \hat{k}_{i}}{m_{*}} dk + \frac{\hbar (k - k_{0})}{m_{*}} d\hat{k}_{i} + \frac{\hbar}{m_{*}} dk d\hat{k}_{i} = -(\Gamma + \Gamma_{\perp}) dt v_{i} + \frac{2\Gamma dt k_{B} T}{\hbar k_{0}} \hat{k}_{i} + bruit$$
(91)

ne conduit plus comme dans la relation (87) à une équation fermée sur la fonction de corrélation de la vitesse, mais la couple à une fonction de corrélation mixte direction-vitesse $\tilde{C}_{ij}(\tau) = \langle \hat{k}_i(\tau) v_j(0) \rangle$, d'où le système différentiel à $\tau \ge 0$:

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau} \begin{pmatrix} C_{ij}(\tau) \\ \tilde{C}_{ij}(\tau) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -(\Gamma + \Gamma_{\perp}) & \frac{2k_B T}{\hbar k_0} \Gamma \\ 0 & -\Gamma_{\perp} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_{ij}(\tau) \\ \tilde{C}_{ij}(\tau) \end{pmatrix}$$
(92)

De l'annulation à l'équilibre des moyennes des variations $d(k-k_0)$ et $d[(k-k_0)^2]$, et de la relation d'isotropie $\langle \hat{k}_i \hat{k}_j \rangle = (1/3)\delta_{ij}$, nous tirons les valeurs initiales dans le modèle de Langevin (89), (90), $C_{ij}(0) = \delta_{ij}(k_BT/3m_*)[1 + 4m_*k_BT/(\hbar k_0)^2]$ et $\tilde{C}_{ij}(0) = \delta_{ij}(2k_BT/3\hbar k_0)$. L'intégration du système (92), jointe à la relation $C_{ij}(-\tau) = C_{ji}(\tau)$, donne le résultat annoncé (85) si l'on néglige dans la première exponentielle le taux Γ_{\perp} devant Γ , ce qui est légitime puisque $\Gamma_{\perp}/\Gamma = O(T)$.

⁵³Comme la direction de **k** se thermalise plus lentement que le module d'un ordre en température d'après l'équation (66), il existe, pour un état initial hors d'équilibre, un régime transitoire dans lequel la distribution de *k* a atteint l'équilibre, mais celle de **k** pas encore (**k** n'a pas eu le temps de diffuser sur la sphère unité, le terme constant dans la force (88) n'a pas encore vraiment agi), si bien que $C_{ij}(t) \simeq (k_B T/m_*) \langle \hat{k}_i \hat{k}_j \rangle_0 \exp(-\Gamma_k t)$ où la moyenne $\langle \cdots \rangle_0$ est prise sur la distribution de **k** initiale. Cette forme à une exponentielle ressemble au cas $k_0 \equiv 0$, à un facteur 3 près sur la trace (la dimension effective d_{eff} , c'est-à-dire le nombre de degrés de liberté quadratiques dans la forme approchée de l'énergie ϵ_k près de $k = k_0$, passe de $d_{\text{eff}} = 3$ pour $k_0 \equiv 0$ à $d_{\text{eff}} = 1$ pour $k_0 > 0$). À ces temps intermédiaires $\Gamma_k^{-1} \ll \tau \ll \Gamma_k^{-1}$, la quasi-particule γ effectue un mouvement brownien transitoire de matrice de diffusion spatiale $\mathcal{D}_{ij}^{\text{spa,trans}} = (k_B T/m_*\Gamma_k) \langle \hat{k}_i \hat{k}_j \rangle_0$, peut-être anisotrope mais de trace fixée.

⁵⁴Dans une formulation plus élaborée tenant compte du gauchissement cubique de ε_k et de la note 48, on remplace l'équation (89) par $\hbar dk = -\Gamma dt \hbar (k - \langle k \rangle) + [2 dt D_{/\!/}(k_0)]^{1/2} \eta_{/\!/}$ où la moyenne stationnaire $\langle k \rangle$ est celle de la note 40, en admettant que $m_* v_k = \hbar (k - k_0) + \hbar (k - k_0)^2 b + \cdots \approx \hbar (k - k_0) + bm_* k_B T/\hbar \approx \hbar (k - \langle k \rangle) + 2m_* k_B T/\hbar k_0$ (on a approximé $(k - k_0)^2$ par sa moyenne stationnaire); l'équation (90) reste inchangée. Comme dans la formulation minimale, k(t) et $\hat{\mathbf{k}}(t)$ sont des processus stochastiques indépendants, si bien que $C_{zz}(\tau) \approx \langle v_k(\tau) v_k(0) \rangle \langle \hat{k}_z(\tau) \hat{k}_z(0) \rangle \approx (\hbar/m_*)^2 [\langle (k - \langle k \rangle)^2 \rangle \exp(-\Gamma |\tau|) + (2m_* k_B T/\hbar^2 k_0)^2] (1/3) \exp(-\Gamma_{\perp} |\tau|)$. Ceci redonne le résultat (86). Ceci montre aussi que c'est la « force moyenne effective sur le module » c'est-à-dire la partie déterministe de dk, plutôt que F(k), qui s'annule pour $k - k_0 \approx \langle k - k_0 \rangle$.

Le modèle minimal que nous venons d'utiliser pour $k_0 > 0$, qui néglige la dépendance en nombre d'onde de $D_{/\!/,\perp}(k)$ et les corrections $\approx (k - k_0)^3$ à la relation de dispersion, ne constitue cependant pas une démonstration. Une étude plus solide est effectuée dans l'Annexe B, à l'aide d'un développement contrôlé à basse température. Elle conduit aux mêmes résultats (85), (86). Enfin, ces calculs de la diffusion spatiale ne s'appliquent pas au point de transition entre les cas $k_0 \equiv 0$ et $k_0 > 0$, où la force moyenne est de départ cubique, $F(k) \approx -k^3$. Une étude à part de la zone de transition, exposée dans la même Annexe B, y confirme cependant la validité de l'équivalent à basse température (86).

Annexe A. Compléments sur la diffusion ϕ - γ

Les grandes lignes du calcul de l'amplitude de diffusion d'un phonon de vecteur d'onde **q** sur une quasi-particule γ stable de vecteur d'onde **k** à partir d'un hamiltonien effectif de basse énergie ont été présentées dans la Section 3. Nous donnons ici quelques détails et points de rigueur supplémentaires.

Le hamiltonien. La forme explicite des différentes contributions au hamiltonien (20) est disponible dans la littérature, voir par exemple les références les plus récentes [4, 18]. Nous la rappelons par commodité (et pour corriger une erreur vénielle dans le dernier terme entre crochets de l'équation (4) de [4], écrit à tort comme un hermitien conjugué), en nous limitant dans $\hat{V}_{\phi\phi}$ aux processus à trois phonons de Beliaev et de Landau, seuls utiles ici :

$$\hat{V}_{\phi\phi} = \frac{1}{2L^{3/2}} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3}^{q_1, q_2, q_3 \prec \Lambda} \langle \phi : \mathbf{q}_1, \phi : \mathbf{q}_2 | \mathcal{V}_{\phi\phi} | \phi : \mathbf{q}_3 \rangle (\hat{b}_{\mathbf{q}_1}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}_2}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}_3} + \hat{b}_{\mathbf{q}_3}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}_1} \hat{b}_{\mathbf{q}_2})$$
(A.1)

$$\hat{H}_{3}^{\phi\gamma} = \frac{1}{L^{3/2}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q}}^{q<\Lambda} \langle \phi : \mathbf{q}, \gamma : \mathbf{k} | \mathcal{H}_{3}^{\phi\gamma} | \gamma : \mathbf{k}' \rangle (\hat{\gamma}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{q}} + \hat{b}_{\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}'})$$
(A.2)

$$\hat{H}_{4}^{\phi\gamma} = \frac{1}{L^{3}} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}',\mathbf{q},\mathbf{q}'}^{q,q'<\Lambda} \langle \phi:\mathbf{q}',\gamma:\mathbf{k}'|\mathcal{H}_{4}^{\phi\gamma}|\phi:\mathbf{q},\gamma:\mathbf{k}\rangle \hat{\gamma}_{\mathbf{k}'}^{\dagger} \hat{\gamma}_{\mathbf{k}} \left(\hat{b}_{\mathbf{q}'}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}} + \frac{1}{2} \hat{b}_{\mathbf{q}} \hat{b}_{-\mathbf{q}'} + \frac{1}{2} \hat{b}_{-\mathbf{q}}^{\dagger} \hat{b}_{\mathbf{q}'}^{\dagger}\right)$$
(A.3)

avec les éléments de matrice pour un volume unité entre états à un ou deux phonons, à zéro ou une quasi-particule γ :

$$\langle \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}_1, \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}_2 | \mathcal{V}_{\phi\phi} | \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}_3 \rangle = \delta_{\mathbf{q}_1 + \mathbf{q}_2, \mathbf{q}_3} \frac{mc^2}{\rho^2} \rho_{q_1} \rho_{q_2} \rho_{q_3} \left(\lambda + \frac{\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{q}_2}{q_1 q_2} + \frac{\mathbf{q}_1 \cdot \mathbf{q}_3}{q_1 q_3} + \frac{\mathbf{q}_2 \cdot \mathbf{q}_3}{q_2 q_3} \right)$$
(A.4)

$$\langle \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}, \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} | \mathcal{H}_{3}^{\phi \gamma} | \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' \rangle = \delta_{\mathbf{q} + \mathbf{k}, \mathbf{k}'} \frac{1}{2} \rho_{q} \left[\frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)}}{\partial \rho} + \frac{\partial \epsilon_{\mathbf{k}'}^{(0)}}{\partial \rho} + \frac{\hbar c \mathbf{q}}{\rho q} \cdot (\mathbf{k} + \mathbf{k}') \right]$$
(A.5)

$$\langle \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}', \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' | \mathcal{H}_{4}^{\boldsymbol{\phi}\boldsymbol{\gamma}} | \boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}, \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle = \delta_{\mathbf{q}+\mathbf{k},\mathbf{q}'+\mathbf{k}'} \frac{1}{2} \rho_{q} \rho_{q'} \left(\frac{\partial^{2} \epsilon_{\mathbf{k}}^{(0)}}{\partial \rho^{2}} + \frac{\partial^{2} \epsilon_{\mathbf{k}'}^{(0)}}{\partial \rho^{2}} \right)$$
(A.6)

Pour clarifier les notations, nous convenons que les vecteurs d'onde **q** sont toujours ceux des phonons, et les vecteurs d'onde **k** toujours ceux de la quasi-particule γ . Le paramètre λ est donné par l'équation (41) (voir cependant la note 55). Les deltas de Kronecker assurent la conservation de la quantité de mouvement. On a introduit l'amplitude des fluctuations quantiques de la densité du superfluide dans le mode de phonon de vecteur d'onde **q**,⁵⁵

$$\rho_q = \left(\frac{\hbar \rho q}{2mc}\right)^{1/2} \tag{A.7}$$

⁵⁵En toute rigueur, il faudrait à ce stade utiliser dans ρ_q et dans λ l'équation d'état nue et la vitesse du son nue, qui dépendent de la coupure ultraviolette Λ introduite dans les équations (20) et (A.1), (A.2), (A.3), voir l'annexe B de la référence [32].

pour montrer que les fluctuations de densité gouvernent aussi bien l'interaction entre phonons que l'interaction entre phonons et quasi-particule γ . Dans les expressions (A.5) et (A.6), la dérivation $\partial/\partial\rho$ de la relation de dispersion nue de la quasi-particule γ par rapport à la densité ρ du superfluide est effectuée à vecteur d'onde **k** et potentiel d'interaction entre les atomes du superfluide fixés.

Analyse des ordres > 2 en \hat{V} . Justifions le fait qu'à l'ordre dominant en température $(q, q' = O(T) \rightarrow 0$ à k fixé), on puisse limiter l'amplitude de diffusion (22) à l'ordre deux en \hat{V} . Le terme d'ordre *n* quelconque en \hat{V} est facile à écrire, c'est l'élément de matrice entre $\langle \mathbf{f} | \mathbf{et} | \mathbf{i} \rangle$ du produit de *n* opérateurs \hat{V} entre lesquels on intercale n-1 opérateurs $G_0(z)$ (deux facteurs \hat{V} successifs sont toujours séparés par un seul facteur G_0); ici, $G_0(z) = (z - \hat{H}_0)^{-1}$ est la résolvante du hamiltonien sans interaction et $z = E_{\mathbf{i}}^{(0)} + i\eta$, $\eta \rightarrow 0^+$. Pour comprendre ce qui se passe, commençons par n = 3: la contribution $\langle \mathbf{f} | \hat{V} G_0(z) \hat{V} G_0(z) \hat{V} | \mathbf{i} \rangle$ engendre de nombreux diagrammes après décomposition de \hat{V} en processus élémentaires comme dans l'équation (20), même en tenant compte de l'ordre de grandeur des éléments de matrice (les plus grands sont ceux $\propto q^{1/2}$ de $\hat{H}_3^{\phi\gamma}$) et des changements de parité du nombre de phonons (on ne peut prendre trois fois $\hat{H}_3^{\phi\gamma}$ dans les facteurs \hat{V}) pour éliminer les contributions sous-dominantes ou nulles. Mais dans chaque diagramme apparaît un vecteur d'onde de phonon interne \mathbf{q}'' quelconque, non contraint par la conservation de la quantité de mouvement, et sur lequel il faut donc sommer. En effet, un facteur \hat{V} annihile le phonon incident \mathbf{q} , un facteur \hat{V} (peut-être le même) crée le phonon émergent \mathbf{q}' , donc l'un des trois facteurs \hat{V} crée ou annihile nécessairement un phonon de vecteur d'onde non contraint \mathbf{q}'' . Nous aboutissons ainsi à la majoration très simple

$$\langle \mathbf{f} | VG_0(z) VG_0(z) V | \mathbf{i} \rangle = O\left(\sum_{\mathbf{q}''}^{q'' < \Lambda} \frac{(q q')^{1/2} q''}{\Delta E_1 \Delta E_2}\right) = O(T^2 (q q')^{1/2})$$
(A.8)

puisque (i) chaque dénominateur d'énergie est (à **k** fixé) d'ordre un en les vecteurs d'onde des phonons donc est $\approx \Lambda = O(T)$, (ii) au numérateur, chaque absorption ou émission d'un phonon de nombre d'onde Q est accompagnée d'un facteur $\rho_Q \propto Q^{1/2} = O(T^{1/2})$, et (iii) la sommation sur le vecteur d'onde du phonon interne sort en facteur le volume $\Lambda^3 = O(T^3)$ sous la coupure dans l'espace de Fourier. Dans le cas d'un ordre en \hat{V} impair quelconque n = 2s + 1, la conservation de la parité du nombre de phonons dans la transition $|i\rangle \rightarrow |f\rangle$ impose qu'il y ait non pas 2s + 1 mais au moins 2s + 2 absorptions ou émissions de phonons, donc au moins 2s absorptions ou émissions de phonon émergent \mathbf{q}' (chaque facteur \hat{V} absorbe ou émet au moins un phonon); il faut alors sommer sur au moins s phonons internes de vecteurs d'onde $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_s$. Dans le cas d'un ordre pair n = 2s, il y a pour les mêmes raisons au moins 2s - 2 absorptions ou émissions de phonons autres que \mathbf{q} thonons autres que \mathbf{q} if n = 2s normer sur au moins s - 1 phonons internes $\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_{s-1}$. D'où la majoration de l'ordre n > 2 en \hat{V} ,⁵⁶

$$\langle \mathbf{f} | \hat{V} [G_0(z) \hat{V}]^{n-1} | \mathbf{i} \rangle = \begin{cases} O[(qq')^{1/2} T^{n-1}] & \text{si } n \text{ impair} \\ O[(qq')^{1/2} T^{n-3}] & \text{si } n \text{ pair} \end{cases}$$
(A.9)

Cette majoration vaut pour une valeur générique $\approx T$ de l'énergie complexe z. Dans le cas particulier $z = E_i^{(0)} + i\eta$ qui nous intéresse, certains diagrammes d'ordre n > 2 en \hat{V} comme ceux de la Figure 3c sont en fait infinis et doivent être retirés de l'équation (A.9) pour qu'elle s'applique; ce problème est discuté dans le corps de l'article dans le paragraphe après l'équation (28).

⁵⁶Pour *n* = 2, elle surestimerait le résultat réel O(qq') en ne tenant pas compte de la compensation dans l'expression (23) des contributions \mathcal{T}_2 et \mathcal{T}_3 à leur ordre dominant T^0 .

Analyse de l'ordre 2 en \hat{V} . Il reste à justifier le fait qu'à l'ordre deux en \hat{V} , on puisse garder seulement les contributions (23) ou, si l'on préfère, les diagrammes de la Figure 3b. Chaque contribution quadratique en \hat{V} contient au numérateur le produit de deux éléments de matrice, choisis parmi ceux de $\hat{H}_3^{\phi\gamma} \propto T^{1/2}$, $\hat{H}_4^{\phi\gamma} \propto T$, $\hat{H}_3^{\phi\phi} \sim \hat{H}_5^{\phi\gamma} \propto T^{3/2}$, $\hat{H}_4^{\phi\phi} \sim \hat{H}_6^{\phi\gamma} \propto T^2$, etc (en incluant même le couplage de γ au cube et à la puissance quatrième des fluctuations de densité, et l'interaction à quatre phonons). Elle contient un dénominateur d'énergie linéarisable en les vecteurs d'onde des phonons donc $\propto T$. La contribution ne doit pas être un o(T). On peut donc *a priori* prendre dans les facteurs \hat{V} : (i) deux fois $\hat{H}_3^{\phi\gamma}$ (ce qui donne les termes \mathcal{T}_2 et \mathcal{T}_3 dans (23)), (ii) deux fois $\hat{H}_4^{\phi\gamma}$ (rendu négligeable $\approx (qq')^{1/2}T^3$ par sommation inévitable sur un vecteur d'onde interne), (iii) une fois $\hat{H}_3^{\phi\gamma}$ et une fois $\hat{H}_4^{\phi\phi}$ (ce qui donne les termes \mathcal{T}_4 et \mathcal{T}_5 dans (23)), (v) une fois $\hat{H}_3^{\phi\gamma}$ et une fois $\hat{H}_5^{\phi\gamma}$ (rendu négligeable $\approx (qq')^{1/2}T^3$ par sommation inévitable sur un vecteur d'onde interne).

Matrice *S* **entre états asymptotiques exacts.** Nous suivons la démarche de la référence [33], Section B_{III} .3, en la généralisant au cas où les phonons incident et émergent, et pas seulement la quasi-particule γ , sont habillés de phonons virtuels. Rappelons la définition des éléments de la matrice *S* entre les états asymptotiques exacts (29) :

$$\langle \mathbf{f} \| S \| \mathbf{i} \rangle = \lim_{t \to +\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i} E_{\mathrm{f}} t/2\hbar} \langle \mathbf{f} \| U(t/2, -t/2) \| \mathbf{i} \rangle \mathrm{e}^{\mathrm{i} E_{\mathrm{i}} t/2\hbar} = \lim_{t \to +\infty} \mathrm{e}^{\mathrm{i} (E_{\mathrm{i}} + E_{\mathrm{f}}) t/2\hbar} \int_{+\infty + \mathrm{i}\eta}^{-\infty + \mathrm{i}\eta} \frac{\mathrm{d} z}{2\mathrm{i}\pi} \mathrm{e}^{-\mathrm{i} zt/\hbar} \langle \mathbf{f} \| G(z) \| \mathbf{i} \rangle \tag{A.10}$$

où $\eta \to 0^+$, $E_{i,f}$ sont les énergies exactes (30) pour l'instant pas nécessairement égales, $U(t_f, t_i)$ est l'opérateur d'évolution entre les instants t_i et t_f et $G(z) = (z - \hat{H})^{-1}$ la résolvante du hamiltonien complet \hat{H} . En partant des relations évidentes (la composante purement γ -quasi-particulaire de \hat{H} commute avec l'opérateur purement phononique $\hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$),

$$\hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}(z-\hat{H}) - (z-\hat{H})\hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger} = [\hat{H}, \hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}] = [\hat{V}_{\phi\gamma}, \hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}] + [\hat{H}_{\phi\phi}, \hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}]$$
(A.11)

on introduit l'opérateur (32) avec $\mathbf{Q} = \mathbf{q}$ comme suit pour éliminer le hamiltonien des phonons $\hat{H}_{\phi\phi}$,

$$\hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}(z-\hat{H}-\hbar\omega_{\mathbf{q}}) - (z-\hat{H})\hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger} = [\hat{V}_{\phi\gamma}, \hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}] + \hat{\Delta}_{\mathbf{q}}^{\dagger}$$
(A.12)

on divise par $z - \hat{H}$ à gauche et par $z - \hat{H} - \hbar \omega_q$ à droite, et l'on fait agir sur l'état stationnaire $||\gamma: \mathbf{k}\rangle$ pour obtenir

$$G(z)||\mathbf{i}\rangle = \frac{1}{z - E_{\mathbf{i}}} \left[||\mathbf{i}\rangle + G(z)([\hat{V}_{\phi\gamma}, \hat{B}^{\dagger}_{\mathbf{q}}] + \hat{\Delta}^{\dagger}_{\mathbf{q}})||\gamma : \mathbf{k}\rangle \right] \quad \text{puis}$$

$$\langle \mathbf{f}||G(z) = \frac{1}{z - E_{\mathbf{f}}} \left[\langle \mathbf{f}|| + \langle \gamma : \mathbf{k}' || \left([\hat{B}_{\mathbf{q}'}, \hat{V}_{\phi\gamma}] + \hat{\Delta}_{\mathbf{q}'} \right) G(z) \right]$$
(A.13)

en procédant de même, ou par conjugaison hermitienne et remplacement de $(z^*, \mathbf{q}, \mathbf{k})$ par $(z, \mathbf{q}', \mathbf{k}')$. Il reste à contracter la première identité dans (A.13) à gauche par $\langle f \parallel$ et à utiliser la seconde identité dans (A.13) pour obtenir

$$\langle \mathbf{f} \| G(z) \| \mathbf{i} \rangle = \frac{\langle \mathbf{f} \| \| \mathbf{i} \rangle}{z - E_{\mathbf{i}}} + \frac{\langle \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' \| \hat{B}_{\mathbf{q}'}([\hat{V}_{\phi\gamma}, \hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}] + \hat{\Delta}_{\mathbf{q}}^{\dagger}) \| \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle + \langle \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k}' \| ([\hat{B}_{\mathbf{q}'}, \hat{V}_{\phi\gamma}] + \hat{\Delta}_{\mathbf{q}'}) G(z)([\hat{V}_{\phi\gamma}, \hat{B}_{\mathbf{q}}^{\dagger}] + \hat{\Delta}_{\mathbf{q}}^{\dagger}) \| \boldsymbol{\gamma} : \mathbf{k} \rangle}{(z - E_{\mathbf{i}})(z - E_{\mathbf{f}})}$$
(A.14)

Dans l'espace libre $L \to +\infty$ et aux temps longs, l'intégrale curviligne (A.10) est dominée par le résidu de l'intégrande en les pôles E_i et E_f de l'expression (A.14), sachant que l'élément de matrice

de G(z) au numérateur n'a pas de pôle en ces points [33], et il reste au sens des distributions [33] $\langle f \| S \| i \rangle = \langle f \| \| i \rangle - 2i\pi \delta(E_f - E_i) A_{fi}$ avec l'amplitude de transition cherchée (31) sur la couche d'énergie.

Diffusion d'un phonon instable. Quand la branche acoustique du gaz a un départ convexe $[\gamma_{\phi} > 0 \text{ dans l'équation (1)}]$, le phonon incident **q** est instable et se désintègre avec un taux $\propto q^5$ en une paire de phonons, eux-mêmes instables. Cette cascade de Beliaev rend la théorie de la matrice *S* inapplicable. L'idée salvatrice est alors de se limiter à un temps de diffusion *t* suffisamment long pour assurer une quasi-conservation de l'énergie non perturbée, mais suffisamment court pour éviter la désintégration de Beliaev, en formant des paquets d'onde incidents spatialement localisés par superposition linéaire d'ondes planes de vecteurs d'onde **q** pour le phonon ϕ et **k** pour la quasi-particule γ , avec une distribution en amplitude gaussienne $c(\mathbf{q}, \mathbf{k})$ très piquée autour des valeurs moyennes $\mathbf{q}_0 = q_0 \hat{\mathbf{q}}_0$ et $\mathbf{k}_0 = k_0 \hat{\mathbf{k}}_0$, c'est-à-dire avec des largeurs $\Delta q \ll q_0$ et $\Delta k \ll k_0$ (on omet ici le problème de l'habillage des états asymptotiques et on suppose, comme nous y invite (3), que $\Delta q \ll \Delta k$). Plus précisément, on prend comme état initial dans l'espace libre⁵⁷

$$|\mathbf{\tilde{i}}\rangle_t = \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}_0(-t/2)/\hbar} \int \frac{\mathrm{d}^3 q \,\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^6} c(\mathbf{q}, \mathbf{k}) |\phi: \mathbf{q}, \gamma: \mathbf{k}\rangle \tag{A.15}$$

Comme $c(\mathbf{q}, \mathbf{k})$ est réelle, les paquets dans $|\mathbf{\tilde{i}}\rangle$ seraient localisés dans l'espace des positions autour de l'origine des coordonnées (avec des largeurs $1/\Delta q$ et $1/\Delta k$) si l'on n'avait pas fait reculer le vecteur d'état dans le temps de t/2 par évolution libre; ils sont alors localisés approximativement en $-c\hat{\mathbf{q}}_0 t/2$ et $-v_{k_0}\hat{\mathbf{k}}_0 t/2$, donc bien séparés et « asymptotiquement libres » (sans interaction) si

$$v_{\rm rel} t \gg \frac{1}{\Delta q}$$
 avec $v_{\rm rel} = |c\hat{\mathbf{q}}_0 - v_{k_0}\hat{\mathbf{k}}_0|$ (A.16)

la vitesse relative des deux paquets incidents. On fait évoluer $|\bar{\mathbf{i}}\rangle_t$ pendant une durée t (de l'instant -t/2 à t/2) avec le hamiltonien complet \hat{H} . L'état redevient libre puisque les paquets se sont séparés, leur recouvrement donc leur interaction ne durant qu'un temps $\approx 1/(\Delta q v_{\rm rel})$. Il reste à le projeter pour analyse sur les ondes planes finales $|\mathbf{f}\rangle = |\phi : \mathbf{q}', \gamma : \mathbf{k}'\rangle$ d'énergie $E_{\rm f}^{(0)}$. Après compensation du facteur de phase d'évolution libre de $\langle \mathbf{f} |$, on aboutit à l'amplitude de diffusion effective

$$\begin{split} A_{\rm f\bar{i}}(t) &\equiv \langle \mathbf{f} | \mathrm{e}^{\mathrm{i}\hat{H}_0 t/2\hbar} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\hat{H}t/\hbar} | \bar{\mathbf{i}} \rangle_t \simeq \int \frac{\mathrm{d}^3 q}{(2\pi)^3} c(\mathbf{q}, \mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{q}' - \mathbf{q}) \left\{ \frac{A_{\rm f\bar{i}}(E_{\rm f}^{(0)}) - A_{\rm f\bar{i}}(E_{\rm i}^{(0)})}{E_{\rm f}^{(0)} - E_{\rm i}^{(0)}} \cos \frac{(E_{\rm i}^{(0)} - E_{\rm f}^{(0)})t}{2\hbar} \right. \\ &\left. - \mathrm{i}[A_{\rm f\bar{i}}(E_{\rm f}^{(0)}) + A_{\rm f\bar{i}}(E_{\rm i}^{(0)})] \frac{\sin \frac{(E_{\rm i}^{(0)} - E_{\rm f}^{(0)})t}{2\hbar}}{E_{\rm i}^{(0)} - E_{\rm f}^{(0)}} \right\} \end{split}$$
(A.17)

Pour obtenir l'approximation au troisième membre de l'équation (A.17), nous avons remplacé l'opérateur d'évolution par son expression sous forme d'intégrale curviligne (A.10), utilisé la relation $G(z) = G_0(z) + G_0(z)\hat{T}(z)G_0(z)$ pour faire apparaître la matrice T à l'énergie complexe z, fait l'approximation comme dans la référence [33] de garder dans la formule de Cauchy seulement les résidus de l'intégrande en les pôles $E_i^{(0)}$ et $E_f^{(0)}$ issus des facteurs $G_0(z)$

⁵⁷En l'absence de boîte de quantification, on utilise la condition de normalisation des ondes planes $\langle \mathbf{k} | \mathbf{k'} \rangle = (2\pi)^3 \delta(\mathbf{k} - \mathbf{k'})$.

encadrant $\hat{T}(z)$,⁵⁸ négligé la contribution du terme $G_0(z)$ d'évolution libre sous la condition $|\mathbf{q}' - \mathbf{q}_0| \gg \Delta q$, et enfin posé $A_{\text{fi}}(E) = \langle \mathbf{f} | \hat{T}(E + i\eta) | \mathbf{i} \rangle$ avec l'état $| \mathbf{i} \rangle \equiv |\boldsymbol{\phi} : \mathbf{q}, \gamma : \mathbf{k} = \mathbf{k}' + \mathbf{q}' - \mathbf{q} \rangle$ d'énergie $E_{\mathbf{i}}^{(0)}$ et $\eta \to 0^+$. Les préfacteurs du cosinus et du sinus cardinal sont des fonctions continues et bornées de $E_{\mathbf{i}}^{(0)}$; on peut les remplacer par leur valeur au centre du paquet d'onde $(E_{\mathbf{i}}^{(0)} \simeq \bar{E}_{\mathbf{i}}^{(0)})$ si leur échelle de variation E_{pref} satisfait à la condition (voir la note 59)

$$\frac{\hbar}{t} \gg \frac{\operatorname{Var} E_{i}^{(0)}}{E_{\text{pref}}} \quad \text{avec} \quad E_{\text{pref}} \approx \hbar c q_{0} \quad \text{et} \quad \operatorname{Var} E_{i}^{(0)} \approx (\hbar c \Delta q)^{2}$$
(A.18)

Ici $\bar{E}_i^{(0)}$ et Var $E_i^{(0)}$ sont la moyenne et la variance de $E_i^{(0)} \simeq \hbar c q + \epsilon_{\mathbf{k}=\mathbf{k}'+\mathbf{q}'-\mathbf{q}}$ pour **q** distribué selon la loi gaussienne $c(\mathbf{q}, \mathbf{k}' + \mathbf{q}' - \mathbf{q})$. Dans le calcul de la moyenne du cosinus et du sinus cardinal sur la variable **q**, la même condition (A.18) permet de supposer que $E_i^{(0)}$ aussi suit une loi gaussienne,⁵⁹ auquel cas

$$\left\langle \cos \frac{(E_{\rm i}^{(0)} - E_{\rm f}^{(0)})t}{2\hbar} \right\rangle_{\rm q} = \exp[-t^2 \operatorname{Var} E_{\rm i}^{(0)} / 8\hbar^2] \cos \frac{(\bar{E}_{\rm i}^{(0)} - E_{\rm f}^{(0)})t}{2\hbar}$$
(A.19)

$$\left\langle \frac{\sin\frac{(E_{i}^{(0)} - E_{f}^{(0)})t}{2\hbar}}{E_{i}^{(0)} - E_{f}^{(0)}} \right\rangle_{\mathbf{q}} = \frac{(\pi/2)^{1/2}}{\Delta E_{i}^{(0)}} \exp\left[-\frac{(E_{f}^{(0)} - \bar{E}_{i}^{(0)})^{2}}{2\operatorname{Var}E_{i}^{(0)}}\right] \operatorname{Re}\Phi\left(\frac{\Delta E_{i}^{(0)}t}{2\hbar\sqrt{2}} + i\frac{|E_{f}^{(0)} - \bar{E}_{i}^{(0)}|}{\sqrt{2}\Delta E_{i}^{(0)}}\right)$$
(A.20)

$$\simeq \begin{cases} \frac{(\pi/2)^{1/2}}{\Delta E_{i}^{(0)}} \exp[-(E_{f}^{(0)} - \bar{E}_{i}^{(0)})^{2}/2 \operatorname{Var} E_{i}^{(0)}] & \text{si} |E_{f}^{(0)} - \bar{E}_{i}^{(0)}| < t \operatorname{Var} E_{i}^{(0)}/2\hbar \\ \frac{\sin \frac{(\bar{E}_{i}^{(0)} - E_{f}^{(0)})t}{2\hbar}}{\bar{E}_{i}^{(0)} - E_{f}^{(0)}} \exp[-t^{2} \operatorname{Var} E_{i}^{(0)}/8\hbar^{2}] & \text{sinon} \end{cases}$$
(A.21)

où $\Delta E_i^{(0)}$ est l'écart-type (racine carrée de la variance) et $\Phi(z) = (2/\sqrt{\pi}) \int_0^z du \exp(-u^2)$ est la fonction erreur.⁶⁰ Choisissons par exemple $\Delta q \propto \Delta k \propto q_0^3 \approx T^3$ (ce qui donne une précision suffisante sur q, voir la note 28) et un temps de diffusion $t \propto q_0^{-4}$, et faisons tendre q_0 et la température du gaz vers zéro à k_0 fixé. Alors les conditions (A.16) et (A.18) sont asymptotiquement vérifiées, et tout se passe comme si la matrice *S* était donnée par l'expression

⁵⁸Dans l'approximation d'ordre deux en l'interaction, $\hat{T}(z) \simeq \hat{V} + \hat{V}G_0(z)\hat{V}$, qui suffit ici, il est facile d'inclure la contribution des pôles ϵ_n de $\langle \mathbf{f}|\hat{T}(z)|\mathbf{i}\rangle$, ce qui ajoute entre les accolades de l'équation (A.17) la somme $\sum_{n=1}^{4} (\epsilon_n - E_{\mathbf{i}}^{(0)})^{-1}Z_n \exp[-\mathbf{i}t(\epsilon_n - ((E_{\mathbf{i}}^{(0)} + E_{\mathbf{f}}^{(0)})/2))/\hbar]$, où $\epsilon_1 = \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}}^{(0)} = \epsilon_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}'}^{(0)}, \epsilon_2 = \hbar\omega_{\mathbf{q}}^{(0)} + \hbar\omega_{\mathbf{q}'}^{(0)} + \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}'}^{(0)}, \epsilon_3 = \hbar\omega_{\mathbf{q}'}^{(0)} + \hbar\omega_{\mathbf{q}'+\mathbf{k}-\mathbf{q}'}^{(0)}, \epsilon_3 = \hbar\omega_{\mathbf{q}'}^{(0)} + \epsilon_{\mathbf{k}+\mathbf{q}-\mathbf{q}'}^{(0)}$ (soit les énergies des états intermédiaires des diagrammes b2 à b5 de la Figure 3) et les résidus de $\langle \mathbf{f}|\hat{T}(z)|\mathbf{i}\rangle$ associés Z_n sont des fonctions régulières de $\mathbf{q}, \mathbf{q}', \mathbf{k}'$. Si l'on prend soin d'exclure dans les directions d'observation du phonon émergent un cône autour de la direction $\hat{\mathbf{q}}_0$ du phonon incident, c'est-à-dire d'imposer $|\hat{\mathbf{q}}' \cdot \hat{\mathbf{q}}_0| < \cos\theta_c$ avec $0 < \cos\theta_c < 1$ fixé, pour éviter que le processus de Beliaev dans le terme \mathcal{F}_4 ou celui de Landau dans \mathcal{F}_5 soit résonnant, on trouve toujours que les différences d'énergie $|\epsilon_n - E_{\mathbf{i}}^{(0)}|$ et $|\epsilon_n - E_{\mathbf{i}}^{(0)}|$ sont approximativement supérieures à $\hbar cq$ ou $\hbar cq'$, et l'on a toujours $\hbar cq/2 \lesssim |\epsilon_n - (E_{\mathbf{i}}^{(0)} + E_{\mathbf{f}}^{(0)})/2|$. La contribution des pôles de $\langle \mathbf{f}|\hat{T}(z)|\mathbf{i}\rangle$ est donc une fonction oscillante du temps, que la moyenne sur \mathbf{q} écrase et rend négligeable par un facteur gaussien en temps $\approx \exp[-(c\Delta q t)^2/2]$, tout comme dans l'équation (A.19).

⁵⁹Supposons pour simplifier que la quasi-particule γ est fortement subsonique, $|v_{k'}/c| \ll 1$, et développons le déphasage pendant t en puissances des fluctuations $\delta \mathbf{q} = \mathbf{q} - \mathbf{\tilde{q}}$, $[E_i^{(0)} - \bar{E}_i^{(0)}]t/\hbar \simeq ct \mathbf{\hat{q}}_0 \cdot \delta \mathbf{q} + O[ct(\delta q)^2/q_0]$. Le terme linéaire a une distribution gaussienne; le O est non gaussien mais négligeable sous la condition (A.18). Inversement, si $E_i^{(0)}$ est une variable gaussienne, il est facile d'obtenir la condition (A.18) de variation négligeable des préfacteurs dans (A.17), en supposant que ces derniers varient linéairement avec $E_i^{(0)}$. ⁶⁰On fait apparaître la fonction erreur en utilisant sin $x/x = \int_{-1}^{1} du e^{iux}/2$ et en intervertissant les intégrations sur u et

⁶⁰On fait apparaître la fonction erreur en utilisant sin $x/x = \int_{-1}^{1} du e^{iux}/2$ et en intervertissant les intégrations sur *u* et sur l'énergie. Les formes approchées dans (A.21) découlent du comportement asymptotique de la fonction erreur dans le premier quadrant : si $z = \rho \exp(i\theta)$ et que ρ tend vers $+\infty \ \dot{a} \ \theta$ fixé, alors $\Phi(z) \to 1$ si $\theta \in [0, \pi/4[$ et $\Phi(z) \sim -\exp(-z^2)/(z\sqrt{\pi})$ si $\theta \in]\pi/4, \pi/2[$.

habituelle $\langle \mathbf{f} | S | \mathbf{i} \rangle = \langle \mathbf{f} | \mathbf{i} \rangle - 2\mathbf{i}\pi \langle \mathbf{f} | \hat{T}(E_{\mathbf{i}}^{(0)} + \mathbf{i}\eta) | \mathbf{i} \rangle \delta(E_{\mathbf{f}}^{(0)} - E_{\mathbf{i}}^{(0)})$: c'est évident pour le premier cas de l'équation (A.21), que l'on peut retrouver par la substitution habituelle $\sin(\epsilon t/2\hbar)/\epsilon \rightarrow \pi \delta(\epsilon)$; le second cas de (A.21) et l'équation (A.19) ne correspondent pas à un Dirac de conservation de l'énergie mais ceci importe peu car ils sont exponentiellement supprimés. Comme le temps de diffusion *t* est infiniment plus court que la durée de vie $\approx q_0^{-5}$ des phonons incident et émergent, on peut à juste titre négliger leur instabilité de Beliaev, c'est-à-dire leur émission réelle plutôt que virtuelle de phonons, dans le calcul de l'amplitude de diffusion sur une quasi-particule γ à l'ordre dominant en q.

Diffusion dans la matière. Comme la diffusion du phonon **q** sur la quasi-particule γ se produit en fait dans un gaz thermique de phonons, il semble incorrect, pour les applications de la Section 4, de calculer l'amplitude de diffusion dans le vide et de ne pas tenir compte de l'émission stimulée des phonons internes des diagrammes b4 et b5 de la Figure 3 dans les modes de vecteurs d'onde $\mathbf{q} - \mathbf{q}'$ et $\mathbf{q}' - \mathbf{q}$ déjà peuplés. À première vue, il faudrait donc corriger les deux derniers termes du résultat (23) comme suit :

$$\mathcal{T}_4 \xrightarrow{?} (1 + \bar{n}_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'}) \mathcal{T}_4 \quad \text{et} \quad \mathcal{T}_5 \xrightarrow{?} (1 + \bar{n}_{\mathbf{q}'-\mathbf{q}}) \mathcal{T}_5$$
(A.22)

où les \bar{n} sont les nombres moyens d'occupation des modes. Mais, si les modes $\mathbf{q} - \mathbf{q}' \in \mathbf{q}' - \mathbf{q}$ sont déjà peuplés, il faut tenir compte du fait que des phonons de ces modes peuvent participer transitoirement à la diffusion (ils doivent rester en nombres égaux dans l'état initial et dans l'état final). Ceci introduit deux nouveaux diagrammes. Le premier, d'amplitude $\mathcal{T}'_4 \bar{n}_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'}$, décrit l'absorption d'un phonon $\mathbf{q} - \mathbf{q}'$ par la quasi-particule γ de vecteur d'onde \mathbf{k} (ce qui la fait passer directement dans son état final \mathbf{k}'), puis la désintégration de Beliaev du phonon incident \mathbf{q} en deux phonons $\mathbf{q}' \in \mathbf{q} - \mathbf{q}'$, qui fournit le phonon final attendu et rétablit le mode $\mathbf{q} - \mathbf{q}'$ dans son nombre d'occupation initial. Le second, d'amplitude $\mathcal{T}'_5 \bar{n}_{\mathbf{q}'-\mathbf{q}}$, décrit la fusion de Beliaev du phonon incident \mathbf{q} avec un phonon $\mathbf{q}' - \mathbf{q}$ (ce qui fournit le phonon final \mathbf{q}'), suivie de l'émission d'un phonon $\mathbf{q}' - \mathbf{q}$ par la quasi-particule γ de vecteur d'onde \mathbf{k} , ce qui la fait passer directement dans son état final \mathbf{k}' et repeuple le mode $\mathbf{q}' - \mathbf{q}$ à l'identique. Aucun de ces nouveaux diagrammes n'est connexe, et ce sont les seuls possibles à l'ordre dominant. La bonne correction à appliquer à (23) est donc

$$\mathcal{T}_4 \longrightarrow (1 + \bar{n}_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'})\mathcal{T}_4 + \bar{n}_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'}\mathcal{T}_4' \quad \text{et} \quad \mathcal{T}_5 \longrightarrow (1 + \bar{n}_{\mathbf{q}'-\mathbf{q}})\mathcal{T}_5 + \bar{n}_{\mathbf{q}'-\mathbf{q}}\mathcal{T}_5'$$
(A.23)

Sur l'équation (27)[(28)], on constate que $\mathcal{T}'_4(\mathcal{T}'_5)$ a le même numérateur que $\mathcal{T}_4(\mathcal{T}_5)$, que son dénominateur d'énergie $\epsilon^{(0)}_{\mathbf{k}} + \hbar \omega^{(0)}_{\mathbf{q}-\mathbf{q}'} - \epsilon^{(0)}_{\mathbf{k}'} (\hbar \omega^{(0)}_{\mathbf{q}} + \hbar \omega^{(0)}_{\mathbf{q}'-\mathbf{q}} - \hbar \omega^{(0)}_{\mathbf{q}'})$ est en général sans rapport avec celui de $\mathcal{T}_4(\mathcal{T}_5)$, sauf sur la couche d'énergie (21) où il en est l'exact opposé et où $\mathcal{T}'_4 = -\mathcal{T}_4(\mathcal{T}'_5 = -\mathcal{T}_5)$. Les nombres d'occupation dans la forme corrigée (A.23) se compensent alors exactement,⁶¹ et le résultat (23) établi dans le vide vaut aussi dans la matière.

Annexe B. Calcul de la diffusion spatiale à basse température par le théorème de régression

L'équation (86) donne un équivalent à basse température du coefficient de diffusion spatiale de la quasi-particule γ dans un gaz de phonons. Dans le cas où la relation de dispersion ϵ_k de la quasi-particule atteint son minimum en un nombre d'onde $k_0 > 0$, la justification qu'en fournit le texte principal, à l'aide d'un modèle stochastique de Langevin minimal, n'est pas pleinement convaincante. Nous présentons ici une démonstration basée sur le théorème de régression et

⁶¹Une compensation similaire apparaît dans la référence [26].

sur un développement systématique à basse température de la solution de l'équation de Fokker– Planck correspondante. Nous justifions aussi l'expression (86) dans la zone de transition entre le cas $k_0 \equiv$ et le cas $k_0 > 0$, qui doit faire l'objet d'un traitement à part.

Théorème de régression. La connaissance du coefficient de diffusion spatiale passe par celle de la fonction de corrélation $C_{ij}(\tau)$ des coordonnées du vecteur vitesse dans l'état stationnaire, voir les équations (80), (81), (82), (83). Par isotropie, nous nous limitons au calcul de $C_{zz}(\tau)$, $\tau \ge 0$. Dans le cadre de Fokker–Planck, nous disposons alors du théorème de régression suivant :

$$C_{zz}(\tau) = \int \frac{\mathrm{d}^3 k}{(2\pi)^3} \frac{1}{\hbar} \frac{\mathrm{d}\epsilon_k}{\mathrm{d}k} \hat{k}_z \Pi(\mathbf{k}, \tau)$$
(B.1)

où la distribution $\Pi(\mathbf{k}, \tau)$ a évolué pendant τ selon l'équation de Fokker–Planck (50) à partir de la condition initiale

$$\Pi(\mathbf{k},0) = \frac{1}{\hbar} \frac{\mathrm{d}\epsilon_k}{\mathrm{d}k} \hat{k}_z \Pi_0(k) \tag{B.2}$$

avec $\Pi_0(k)$ la solution stationnaire normalisée, invariante par rotation, de cette même équation (50), et $\hat{k}_z = k_z/k$. Comme $\Pi(\mathbf{k}, \tau)$ est de moment cinétique un, porté par l'axe Oz, nous pouvons poser $\Pi(\mathbf{k}, \tau) = \Pi_1(k, \tau)\hat{k}_z$ et obtenir l'équation du mouvement

$$\frac{\partial}{\partial \tau} \Pi_{1}(k,\tau) = -\frac{2F(k)\Pi_{1}(k,\tau)}{\hbar k} - \frac{1}{\hbar} \frac{\partial}{\partial k} [F(k)\Pi_{1}(k,\tau)] + \frac{1}{\hbar^{2}} \frac{\partial^{2}}{\partial k^{2}} [D_{/\!/}(k)\Pi_{1}(k,\tau)] \\
+ \frac{1}{\hbar^{2}k} \frac{\partial}{\partial k} \{ [4D_{/\!/}(k) - 2D_{\perp}(k)]\Pi_{1}(k,\tau) \} + \frac{1}{\hbar^{2}k^{2}} [2D_{/\!/}(k) - 4D_{\perp}(k)]\Pi_{1}(k,\tau) \quad (B.3)$$

L'équation (72) permettrait d'exprimer $\Pi_0(k)$ en termes de la force moyenne F(k) et des coefficients de diffusion en impulsion $D_{/\!/,\perp}(k)$. Nous trouvons plus éclairant de l'écrire sous la forme $\Pi_0(k) = \exp(-\beta \tilde{\epsilon}_k)/Z$, où Z est un facteur de normalisation, et d'éliminer au contraire la force F(k) au profit de la relation de dispersion effective $\tilde{\epsilon}_k$. Comme nous l'apprend d'ailleurs la comparaison des équations (72), (73), celle-ci est soumise à la contrainte $\tilde{\epsilon}_k - \epsilon_k = O(T^2)$ lorsque $T \to 0$ avec $k - k_0 = O(T^{1/2})$, donc on peut, comme la vraie relation de dispersion ϵ_k , la développer autour de la position \tilde{k}_0 de son minimum (par convention égal à Δ_*), nulle si $k_0 \equiv 0$, dépendant de la température mais très proche de k_0 si $k_0 > 0$, avec des coefficients dépendant eux aussi faiblement de la température :⁶²

$$\tilde{\epsilon}_{k} = \sum_{k \to \tilde{k}_{0}} \Delta_{*} + \frac{\hbar^{2} (k - \tilde{k}_{0})^{2}}{2\tilde{m}_{*}} + \frac{\hbar^{2} (k - \tilde{k}_{0})^{3} \tilde{b}}{3\tilde{m}_{*}} + \frac{\hbar^{2} (k - \tilde{k}_{0})^{4} \tilde{\ell}^{2}}{4\tilde{m}_{*}} + O(k - \tilde{k}_{0})^{5}$$
(B.4)

En d'autres termes, il ne faut pas croire aux prédictions tirées de l'équation de Fokker–Planck (une approximation de l'équation maîtresse (47) dans la limite (3)) si elles dépendent du faible écart entre les masses effectives m_* et \tilde{m}_* , entre les longueurs b et \tilde{b} , entre les nombres d'onde minimiseurs k_0 et \tilde{k}_0 , ou de la longueur $\tilde{\ell}$ ou des coefficients d'ordre supérieur dans le développement (B.4). Effectuons une dernière transformation : l'opérateur sur les fonctions de k défini par le second membre de l'équation (B.3) n'est pas autoadjoint, mais peut l'être rendu par le changement de fonction $\Pi_1(k) = k^{-1} \exp(-\beta \tilde{\epsilon}_k/2) \psi(k)$. Après intégration temporelle formelle,

⁶²Si l'on admet que l'amplitude de diffusion $\phi - \gamma$ (31) possède un développement en puissances entières de q à **k** fixé, alors F(k), $D_{\perp, //}(k)$ et \tilde{e}_k possèdent un développement en puissances entières de T à k fixé, et l'on a $\tilde{k}_0/k_0 = 1 + O(T^2)$, $\tilde{m}_*/m_* = 1 + O(T)$, $\tilde{b}/b = 1 + O(T)$, $\tilde{\ell}/\ell = O(1)$.

nous aboutissons pour $\tau \ge 0$ à la belle écriture (le facteur 3 au dénominateur vient de l'intégration angulaire) :

$$C_{zz}(\tau) = \frac{\langle \psi_{\rm S} | \exp(-\mathcal{H}_{1}\tau) | \psi_{\rm S} \rangle}{3\hbar^{2} \int_{0}^{+\infty} \mathrm{d}k \, k^{2} \mathrm{e}^{-\beta\tilde{\epsilon}_{k}}} = \sum_{n \in \mathbb{N}} \frac{|\langle \psi_{\rm S} | \phi_{n} \rangle|^{2} \mathrm{e}^{-\omega_{n}t}}{3\hbar^{2} \int_{0}^{+\infty} \mathrm{d}k \, k^{2} \mathrm{e}^{-\beta\tilde{\epsilon}_{k}}} \quad \text{avec} \begin{cases} \mathcal{H}_{1} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} \frac{D_{/\!/}(k)}{\hbar^{2}} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}k} + U_{1}(k) \\ \langle k | \psi_{\rm S} \rangle = k \frac{\mathrm{d}\epsilon_{k}}{\mathrm{d}k} \mathrm{e}^{-\beta\tilde{\epsilon}_{k}/2} \end{cases} \end{cases}$$

$$(B.5)$$

Nous avons introduit la décomposition spectrale du hamiltonien fictif \mathcal{H}_1 autoadjoint pour le produit scalaire unidimensionnel $\langle \phi_a | \phi_b \rangle = \int_0^{+\infty} \mathrm{d}k \phi_a^*(k) \phi_b(k)$, l'état propre $|\phi_n\rangle$ de valeur propre ω_n étant normalisé. Le potentiel vaut

$$U_{1}(k) = \frac{1}{\hbar^{2}} \left[\frac{1}{4} D_{/\!/}(k) \left(\beta \frac{d\tilde{e}_{k}}{dk} \right)^{2} - \frac{1}{2} D_{/\!/}(k) \beta \frac{d^{2} \tilde{e}_{k}}{dk^{2}} - \frac{1}{2} \frac{dD_{/\!/}(k)}{dk} \beta \frac{d\tilde{e}_{k}}{dk} - \frac{D_{/\!/}(k)}{k} \beta \frac{d\tilde{e}_{k}}{dk} + \frac{1}{k} \frac{dD_{/\!/}(k)}{dk} + \frac{2D_{\perp}(k)}{k^{2}} \right]$$
(B.6)

Dans le cas $k_0 > 0$. Pour prendre la limite de basse température dans le cas $k_0 > 0$, nous effectuons un changement d'échelle adapté sur le vecteur d'onde et le temps en posant $k - \tilde{k}_0 = xk_*$, $\tau = \tilde{\tau}/\tilde{\Gamma}$, et donc $\mathcal{H}_1 = \tilde{\mathcal{H}}_1\tilde{\Gamma}$, $\omega_n = \bar{\omega}_n\tilde{\Gamma}$ et $\phi_n(k) = k_*^{-1/2}\bar{\phi}_n(x)$, avec le nombre d'onde thermique $k_* = (\tilde{m}_*k_BT)^{1/2}/\hbar$ et le taux $\tilde{\Gamma} = D_{/\!/}(\tilde{k}_0)/(\tilde{m}_*k_BT)$ construit sur le modèle du taux Γ de l'équation (88). Il reste à développer $\tilde{\mathcal{H}}_1$ en puissances de k_* à *x* fixé (*x* décrit \mathbb{R} dans cette limite), puis à traiter les ordres successifs par la théorie des perturbations :

$$\bar{\mathcal{H}}_{1} = -\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} \frac{D_{/\!/}(k_{0} + xk_{*})}{D_{/\!/}(\tilde{k}_{0})} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{\hbar^{2}k_{*}^{2}}{D_{/\!/}(\tilde{k}_{0})} U(\tilde{k}_{0} + xk_{*}) \stackrel{x \operatorname{fix\acute{e}}}{=}_{k_{*} \to 0} \bar{\mathcal{H}}_{1}^{(0)} + \bar{\mathcal{H}}_{1}^{(1)} + \bar{\mathcal{H}}_{1}^{(2)} + \cdots$$
(B.7)

On aura besoin aussi de développer la fonction d'onde source à l'ordre sous-dominant et le dénominateur de $C_{zz}(\tau)$ dans l'équation (B.5) à l'ordre dominant :

$$\langle k | \psi_{\rm S} \rangle \stackrel{x {\rm fix}\acute{e}}{=} \frac{\hbar^2 k_0 k_*}{\tilde{m}_*} e^{-\beta \Delta_*/2} x e^{-x^2/4} \left[1 + x \left(\frac{k_*}{\tilde{k}_0} + k_* \tilde{b} \right) - \frac{1}{6} k_* \tilde{b} x^3 + O(k_*^2) \right],$$

$$\int_0^{+\infty} \mathrm{d}k \, k^2 e^{-\beta \tilde{e}_k} \sum_{k_* \to 0} \tilde{k}_0^2 k_* e^{-\beta \Delta_*} \int_{-\infty}^{+\infty} \mathrm{d}x \, e^{-x^2/2}$$
(B.8)

À l'ordre zéro en k_* , on tombe sur un hamiltonien d'oscillateur harmonique unidimensionnel réduit (masse égale à 1/2, constante de Planck réduite égale à 1, pulsation d'oscillation égale à 1) et de spectre $\bar{\omega}_n^{(0)} = n$:

$$\bar{\mathscr{H}}_{1}^{(0)} = -\frac{\mathrm{d}^{2}}{\mathrm{d}x^{2}} + \frac{1}{4}x^{2} - \frac{1}{2} = \hat{a}^{\dagger}\hat{a} \quad \text{avec} \quad \hat{a} = \frac{1}{2}x + \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \ \hat{a}^{\dagger} = \frac{1}{2}x - \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x}, \ [\hat{a}, \hat{a}^{\dagger}] = 1$$
(B.9)

À l'ordre dominant, la fonction d'onde source est donc proportionnelle à la fonction d'onde $\bar{\phi}_1^{(0)}(x)$ du premier état excité de l'oscillateur harmonique. La contribution des états excités n > 0 dans l'équation (B.5) est ainsi dominée par n = 1 et l'on garde

$$C_{zz}^{n\neq0}(\tau) \stackrel{\bar{\tau}\,\text{fixé}}{\sim} \frac{k_B T}{3\tilde{m}_*} e^{-\bar{\tau}}$$
(B.10)

On justifie ainsi le premier terme entre crochets dans l'équation (85), compte tenu de la note 62. La contribution de n = 0 est plus délicate à obtenir. En effet, le recouvrement de ψ_S avec l'état fondamental $\bar{\phi}_0$ est nul à l'ordre de $\tilde{\mathcal{K}}_1^{(0)}$, comme la pulsation propre ω_0 de l'état fondamental, ce qui conduit à une forme indéterminée 0/0 après intégration de $C_{zz}(\tau)$ sur le temps comme dans l'équation (83). Il faut aller à l'ordre un en k_* pour obtenir un recouvrement non nul,

$$\begin{split} \bar{\mathscr{H}}_{1}^{(1)} &= k_{*} \frac{\frac{\mathrm{d}D}{\mathrm{d}k}(\tilde{k}_{0})}{D_{/\!/}(\tilde{k}_{0})} \left(-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} x \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{1}{4} x^{3} - x \right) + k_{*} \tilde{b} \left(\frac{1}{2} x^{3} - x \right) - \frac{k_{*}}{\tilde{k}_{0}} x \\ &= \left(\frac{k_{*} \frac{\mathrm{d}D}{\mathrm{d}k}(\tilde{k}_{0})}{D_{/\!/}(\tilde{k}_{0})} + \frac{3}{2} k_{*} \tilde{b} \right) (\hat{a}^{\dagger 2} \hat{a} + \hat{a}^{\dagger} \hat{a}^{2}) + \frac{1}{2} k_{*} \tilde{b} (\hat{a}^{\dagger 3} + \hat{a}^{3}) + \left(\frac{1}{2} k_{*} \tilde{b} - \frac{k_{*}}{\tilde{k}_{0}} \right) (\hat{a} + \hat{a}^{\dagger}) \\ &\Longrightarrow |\bar{\phi}_{0}\rangle \underset{k_{*} \to 0}{=} |\bar{\phi}_{0}^{(0)}\rangle - \left(\frac{1}{2} k_{*} \tilde{b} - \frac{k_{*}}{\tilde{k}_{0}} \right) |\bar{\phi}_{1}^{(0)}\rangle - \frac{k_{*} \tilde{b}}{\sqrt{6}} |\bar{\phi}_{3}^{(0)}\rangle + O(k_{*}^{2}) \\ &\Longrightarrow \frac{|\langle \psi_{S} | \phi_{0} \rangle|^{2}}{3\hbar^{2} \int_{0}^{+\infty} \mathrm{d}k \, k^{2} \mathrm{e}^{-\beta \tilde{e}_{k}}} \underset{k_{*} \to 0}{\approx} \frac{k_{B} T}{3 \tilde{m}_{*}} \left(\frac{2k_{*}}{\tilde{k}_{0}} \right)^{2} \end{split}$$
(B.11)

et à l'ordre deux en k_* pour obtenir une pulsation propre non nulle dans l'état fondamental :

$$\begin{split} \bar{\mathscr{H}}_{1}^{(2)} &= \frac{k_{*}^{2} \frac{\mathrm{d}^{2} D_{/\!/}}{\mathrm{d}k^{2}} (\tilde{k}_{0})}{2 D_{/\!/} (\tilde{k}_{0})} \left[-\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} x^{2} \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}x} + \frac{1}{4} x^{4} - \frac{3}{2} x^{2} \right] + \frac{k_{*}^{2} \frac{\mathrm{d} D_{/\!/}}{\mathrm{d}k} (\tilde{k}_{0})}{D_{/\!/} (\tilde{k}_{0})} \left[\frac{\tilde{b}}{2} (x^{4} - 3x^{2}) + \frac{1 - x^{2}}{\tilde{k}_{0}} \right] \\ &+ \frac{1}{4} k_{*}^{2} \tilde{b}^{2} x^{4} + \frac{1}{2} k_{*}^{2} \tilde{\ell}^{2} (x^{4} - 3x^{2}) + \frac{k_{*}^{2}}{\tilde{k}_{0}^{2}} (1 - \tilde{k}_{0} \tilde{b}) x^{2} + \frac{2k_{*}^{2} D_{\perp} (\tilde{k}_{0})}{\tilde{k}_{0}^{2} D_{/\!/} (\tilde{k}_{0})} \\ &\implies \tilde{\omega}_{0} \sum_{k_{*} \to 0} \langle \bar{\phi}_{0}^{(0)} | \tilde{\mathscr{H}}_{1}^{(2)} | \bar{\phi}_{0}^{(0)} \rangle + \sum_{n>0} \frac{|\langle \bar{\phi}_{n}^{(0)} | \tilde{\mathscr{H}}_{1}^{(1)} | \bar{\phi}_{0}^{(0)} \rangle|^{2}}{-n} = \frac{2k_{*}^{2}}{\tilde{k}_{0}^{2}} \frac{D_{\perp} (\tilde{k}_{0})}{D_{/\!/} (\tilde{k}_{0})} \end{split}$$
(B.12)

sachant que $\langle x^2 \rangle = 1$, $\langle x^4 \rangle = 3$ et $\langle (d/dx)x^2(d/dx) \rangle = -3/4$ où la moyenne est prise dans $|\bar{\phi}_0^{(0)}\rangle$. On justifie ainsi le second terme entre crochets dans l'équation (85) et donc, au total, l'équivalent (86) du coefficient de diffusion spatiale.^{63,64}

⁶³Il existe une façon rapide et élégante de retrouver ces résultats. En restreignant l'équation de Fokker–Planck dépendant du temps aux distributions invariantes par rotation, puis en appliquant le même changement de fonction qu'à $\Pi_1(k)$, on fait apparaître le hamiltonien fictif autoadjoint \mathcal{H}_0 . Dans ce secteur isotrope, l'équation de Fokker–Planck admet une solution stationnaire non nulle Π_0 . L'état fondamental $|\psi_0\rangle$ de \mathcal{H}_0 est donc connu, $\psi_0(k) = \mathcal{N}_0 k \exp(-\beta \tilde{\epsilon}_k/2)$ avec $\mathcal{N}_0 = [\int_0^{+\infty} dk \, k^2 \exp(-\beta \tilde{\epsilon}_k)]^{1/2}$, et sa valeur propre est exactement nulle. Or, le calcul le montre, on a simplement $\mathcal{H}_1 = \mathcal{H}_0 + 2D_{\perp}(k)/(\hbar k)^2$, si bien que $\tilde{\mathcal{H}}_1$ diffère de $\tilde{\mathcal{H}}_0$ par un terme du second ordre $2k_*^2 D_{\perp}(\bar{k}_0 + xk_*)/[D_{\parallel}/(\bar{k}_0)(\bar{k}_0 + xk_*)^2]$. L'état fondamental de \mathcal{H}_1 coïncide donc avec $|\psi_0\rangle$ à l'ordre sous-dominant, et l'on a $\langle \psi_S | \psi_0 \rangle \sim \langle \psi_S | \psi_0 \rangle$; au même ordre, on peut remplacer $d\epsilon_k/dk$ par $d\tilde{\epsilon}_k/dk$ dans $\langle k | \psi_S \rangle$. Une simple intégration par parties (il faut intégrer $(d\tilde{\epsilon}_k/dk) \exp(-\beta \tilde{\epsilon}_k)$ et dériver k^2), puis le remplacement des facteurs lentement variables k au numérateur et k^2 au dénominateur par \tilde{k}_0 et \tilde{k}_0^2 , redonnent alors l'équivalent du recouvrement de l'équation (B.11). De même, à l'ordre dominant, la pulsation propre ω_0 de l'état fondamental de \mathcal{H}_1 s'obtient en traitant l'écart de \mathcal{H}_1 à \mathcal{H}_0 au premier ordre de la théorie des perturbations, $\omega_0 \sim \langle \psi_0 | 2D_{\perp}(k)/(\hbar k)^2 | \psi_0 \rangle = \int_0^{+\infty} dk 2D_{\perp}(k) \exp(-\beta \tilde{\epsilon}_k) / \int_0^{+\infty} dk (\hbar k)^2 \exp(-\beta \tilde{\epsilon}_k)$. En approximant les facteurs lentement variables $2D_{\perp}(k)$ et $(\hbar k)^2$ par leur valeur en \tilde{k}_0 , on retrouve l'équivalent de ω_0 donné dans l'équation (B.12).

⁶⁴Nous avons aussi vérifié avec succès la validité à basse température du coefficient de diffusion spatiale prédit par l'approximation de Fokker–Planck en résolvant numériquement l'équation maîtresse (47) avec l'amplitude de diffusion $\phi - \gamma$ microréversible (74) pour le modèle simple $\varepsilon_k = \Delta_* + (\hbar^2/2m_*)[(k^2 - k_0^2)/2k_0]^2$ ($m_* > 0, k_0 > 0$) et $R_k(u, u', w) = (1 - \eta u^2)(1 - \eta u'^2)$, dans lequel $\alpha = (32/1575)(3\eta^2 - 10\eta + 15)(15\eta^2 - 42\eta + 35)$, $\mathcal{D}_{\perp}(k_0) = (32/1575)(3\eta^2 - 10\eta + 15)(3\eta^2 - 14\eta + 35) \neq \alpha$ et (d/dk) $\mathcal{D}_{\parallel}(k_0) = 0$ donc la force moyenne $F(k_0)$ est non nulle à l'ordre T^9 (sauf si $\eta = 0$). L'erreur commise par Fokker–Planck sur \mathcal{D}^{spa} est <10% pour tout $\eta \in [0,3]$ dès que $k_*/k_0 < 1/20$. Le calcul utilise le théorème de régression quantique pour accéder à la fonction de corrélation de la vitesse, que l'on reporte ensuite dans l'expression (83) de \mathcal{D}^{spa} . Dans le secteur de moment cinétique nul, l'équation maîtresse s'écrit $\partial_t \Pi_0(k, t) = -\gamma(k)\Pi_0(k, t) + \int_0^{+\infty} dk' \gamma_0(k' \rightarrow k)\Pi_0(k', t)$; en pratique, on assure la conservation de la probabilité totale en calculant numériquement tous les taux d'alimentation $\gamma_0(k' \rightarrow k)$ puis en déduisant les taux de départ de la relation $\gamma(k) = \int_0^{+\infty} dk' (k'/k)^2 \gamma_0(k \rightarrow k')$. Dans le secteur de moment cinétique un, l'équation maîtresse s'écrit $\partial_t \Pi_1(k, t) = -\gamma(k)\Pi_1(k, t) + \int_0^{+\infty} dk' \gamma_1(k' \rightarrow k)\Pi_1(k', t)$ (les taux de départ sont inchangés). La microréversibilité impose $k^2 \exp(\beta \varepsilon_k) \gamma_n(k' \rightarrow k) = k'^2 \exp(\beta \varepsilon_{k'}) \gamma_n(k \rightarrow k'), n = 0$ ou 1, ce qui permet de se ramener à des opérateurs intégraux à noyaux symétriques (numériquement avantageux) par le changement de fonction $\Pi_n(k) = k^{-1} \exp(-\beta \varepsilon_k/2) \psi_n(k)$. L'expression (B.5) s'applique alors, pourvu que l'on y remplace $\tilde{\varepsilon}_k$ par ε_k et $-\mathcal{H}_1$ par l'opérateur intégral reliant $\partial_t \psi_1$ à ψ_1 .

Entre les cas $k_0 \equiv 0$ **et** $k_0 > 0$. Au point de transition entre ces deux cas, la masse effective m_* est infinie, $1/m_* = 0$, la relation de dispersion ϵ_k varie quartiquement en nombre d'onde au voisinage de son minimum, et aucun des calculs du coefficient de diffusion spatiale présentés jusqu'ici dans ce travail ne s'applique. Pour raccorder les deux cas limites (par exemple lorsque la densité ρ varie), il faut utiliser une approximation de degré 4 pour la relation de dispersion,

$$\epsilon_k \simeq \Delta_0 + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_{\text{eff}}} + \frac{\hbar^2 k^2}{4m} (kl)^2 \tag{B.13}$$

où la longueur *l* est essentiellement constante mais où la variation de la masse effective m_{eff} en k = 0 (à ne pas confondre avec celle m_* à l'endroit du minimum) décrit le passage d'une relation de dispersion atteignant son minimum en k = 0 (cas $1/m_{\text{eff}} > 0$) à une relation de dispersion atteignant son minimum en k = 0 (cas $1/m_{\text{eff}} < 0$). On fait ensuite un grossissement autour du point de transition, en regardant dans l'espace des $1/m_{\text{eff}}$ et des k à des échelles T^{v} telles que les deux derniers termes de l'équation (B.13) soient du même ordre de grandeur $\approx k_B T$. Nous introduisons donc le nombre d'onde adimensionné κ et le paramètre sans dimension δ qui pilote la transition :

$$\kappa = k \left(\frac{\hbar^2 l^2}{m k_B T}\right)^{1/4} \quad \text{et} \quad \delta = \frac{m}{m_{\text{eff}}} \left(\frac{\hbar^2}{m k_B T l^2}\right)^{1/2} \tag{B.14}$$

Il reste à passer à la limite $T \to 0$ à κ et δ fixés. On approxime la force moyenne et les coefficients de diffusion en impulsion par leur ordre dominant au point de transition, c'est-à-dire sous la forme réduite (53) par $\mathscr{F}(k) \simeq -\alpha_0 e_k$ et $\mathscr{D}_{\perp}(k) \simeq \mathscr{D}_{\parallel}(k) \simeq \alpha_0$, où α_0 est le coefficient de frottement réduit à la transition.⁶⁵ Il reste à introduire le temps réduit

$$\theta = t/t_0 \quad \text{avec} \quad t_0 \equiv \frac{\hbar}{mc^2} \frac{15}{\pi^5} \left(\frac{mc^2}{k_B T}\right)^{17/2} \frac{(\hbar \rho^{1/3}/mc)^6}{\alpha_0 mcl/\hbar}$$
(B.15)

pour que la marche au hasard de la quasi-particule γ dans l'espace de Fourier soit décrite par un processus stochastique adimensionné universel à un paramètre δ et de même bruit gaussien que l'équation (59),

$$d\boldsymbol{\kappa} = -d\theta \operatorname{\mathbf{grad}}_{\boldsymbol{\kappa}} \varepsilon(\boldsymbol{\kappa}) + \sqrt{2 \, d\theta} \,\boldsymbol{\eta} \quad \text{avec} \quad \varepsilon(\boldsymbol{\kappa}) = \frac{1}{2} \kappa^2 \delta + \frac{1}{4} \kappa^4 \tag{B.16}$$

Pour en extraire le coefficient de diffusion spatiale au sens de l'équation (83), nous passons par le théorème de régression et l'équation de Fokker–Planck comme au début de cette Annexe B et obtenons (en posant $\varepsilon' = d\varepsilon(\kappa)/d\kappa$)

$$\mathscr{D}^{\operatorname{spa}\delta \underset{T \to 0}{\operatorname{fix}\epsilon}} \frac{\hbar}{m} \frac{\alpha_0^{-1} \Delta^{\operatorname{spa}}(\delta)}{\frac{\pi^5}{15} \left(\frac{mc}{\hbar \rho^{1/3}}\right)^6 \left(\frac{k_B T}{mc^2}\right)^7} \quad \operatorname{avec} \quad \Delta^{\operatorname{spa}}(\delta) = \frac{\langle \mathbf{s} | \hat{h}^{-1} | \mathbf{s} \rangle}{3 \int_0^{+\infty} d\kappa \, \kappa^2 \mathbf{e}^{-\varepsilon(\kappa)}} \quad \text{et} \\ \begin{cases} \hat{h} = -\frac{d^2}{d\kappa^2} + \frac{2}{\kappa^2} + \frac{1}{4} \varepsilon'^2 - \frac{1}{\kappa} \varepsilon' - \frac{1}{2} \varepsilon'' \\ \langle \kappa | \mathbf{s} \rangle = \kappa \varepsilon' \mathbf{e}^{-\varepsilon(\kappa)/2} \end{cases}$$
(B.17)

Nous avons ici intégré formellement sur le temps la fonction de corrélation de la vitesse écrite comme dans l'équation (B.5), ce qui a fait apparaître l'inverse de l'opérateur hamiltonien fictif \hat{h} . Il se trouve que l'on sait déterminer analytiquement l'action de \hat{h}^{-1} sur le vecteur source $|s\rangle$ (c'est facile à vérifier en faisant agir \hat{h} sur le résultat) :

$$\langle \kappa | \hat{h}^{-1} | s \rangle = \kappa^2 e^{-\varepsilon(\kappa)/2} \Longrightarrow \Delta^{\text{spa}}(\delta) = \frac{\int_0^{+\infty} d\kappa \, \kappa^3 \varepsilon' e^{-\varepsilon(\kappa)}}{3 \int_0^{+\infty} d\kappa \, \kappa^2 e^{-\varepsilon(\kappa)}}$$
(B.18)

⁶⁵On vérifie en effet dans l'équation (40) que, pour la relation de dispersion (B.13) et pour une limite finie de $d(m/m_{eff})/d\rho$ à la transition $\delta = 0$, $R_k(u, u', w) \rightarrow (1/2)(\check{e}_{x,0} + w\check{e}_{\rho,0})$ où $\check{e}_{x,0}$ et $\check{e}_{\rho,0}$ sont les valeurs en $\delta = 0$ de \check{e}_x et \check{e}_ρ définis par l'équation (45). C'est bien ce qu'on obtient en prenant $m/m_* = 0$ dans l'équation (46).

Une simple intégration par parties au numérateur de (B.18) conduit alors au résultat remarquable $\Delta^{\text{spa}}(\delta) \equiv 1,^{66}$ en accord parfait avec la prédiction (86), qui vaut donc partout dans la zone de transition entre les cas $k_0 \equiv 0$ et $k_0 > 0$.

Références

- [1] T. J. Greytak, R. L. Woerner, « The two roton bound state », J. Phys. Collog. 33 (1972), nº C1, p. 269.
- [2] L. P. Pitaevskii, I. A. Fomin, « Structure of the bound-state spectrum of two rotons in superfluid helium », *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* **65** (1973), p. 2516.
- [3] A. Nicolis, R. Penco, « Mutual interactions of phonons, rotons and gravity », Phys. Rev. B 97 (2018), article no. 134516.
- [4] Y. Castin, A. Sinatra, H. Kurkjian, « Landau phonon–roton theory revisited for superfluid He-4 and Fermi gases », *Phys. Rev. Lett.* **119** (2017), article no. 260402.
- [5] A. L. Gaunt, T. F. Schmidutz, I. Gotlibovych, R. P. Smith, Z. Hadzibabic, "Bose–Einstein condensation of atoms in a uniform potential", *Phys. Rev. Lett.* 110 (2013), article no. 200406.
- [6] B. Mukherjee, Z. Yan, P. B. Patel, Z. Hadzibabic, T. Yefsah, J. Struck, M. W. Zwierlein, «Homogeneous atomic Fermi gases », *Phys. Rev. Lett.* 118 (2017), article no. 123401.
- [7] K. Hueck, N. Luick, L. Sobirey, J. Siegl, T. Lompe, H. Moritz, "Two-dimensional homogeneous Fermi gases", Phys. Rev. Lett. 120 (2018), article no. 060402.
- [8] P. B. Patel, Z. Yan, B. Mukherjee, R. J. Fletcher, J. Struck, M. W. Zwierlein, «Universal sound diffusion in a strongly interacting Fermi gas », prépublication, arXiv:1909.02555, 2019.
- [9] K. M. O'Hara, S. L. Hemmer, M. E. Gehm, S. R. Granade, J. E. Thomas, «Observation of a strongly interacting degenerate Fermi gas of atoms », *Science* 298 (2002), p. 2179.
- [10] T. Bourdel, J. Cubizolles, L. Khaykovich, K. M. Magalhães, S. J. J. M. F. Kokkelmans, G. V. Shlyapnikov, C. Salomon, « Measurement of the interaction energy near a Feshbach resonance in a ⁶Li Fermi gas », *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003), article no. 020402.
- [11] M. Bartenstein, A. Altmeyer, S. Riedl, S. Jochim, C. Chin, J. H. Denschlag, R. Grimm, « Collective excitations of a degenerate gas at the BEC-BCS crossover », *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004), article no. 203201.
- [12] M. W. Zwierlein, C. A. Stan, C. H. Schunck, S. M. F. Raupach, A. J. Kerman, W. Ketterle, «Condensation of pairs of fermionic atoms near a Feshbach resonance », *Phys. Rev. Lett.* 92 (2004), article no. 120403.
- [13] S. Nascimbène, N. Navon, K. J. Jiang, F. Chevy, C. Salomon, «Exploring the thermodynamics of a universal Fermi gas », *Nature* 463 (2010), p. 1057.
- [14] M. J. H. Ku, A. T. Sommer, L. W. Cheuk, M. W. Zwierlein, « Revealing the superfluid lambda transition in the universal thermodynamics of a unitary Fermi gas », *Science* **335** (2012), p. 563.
- [15] W. Ketterle, « Making, probing and understanding ultracold Fermi gases », in *Ultra-Cold Fermi Gases* (M. Inguscio, W. Ketterle, C. Salomon, éds.), Cours de l'école de physique Enrico Fermi 2006 de Varenne, SIF, Bologne, 2007, Section 2.
- [16] A. Schirotzek, Y.-i. Shin, C. H. Schunck, W. Ketterle, "Determination of the superfluid gap in atomic Fermi gases by quasiparticle spectroscopy", *Phys. Rev. Lett.* **101** (2008), article no. 140403.
- [17] J. Cubizolles, T. Bourdel, S. J. J. M. F. Kokkelmans, G. V. Shlyapnikov, C. Salomon, « Production of long-lived ultracold Li₂ molecules from a Fermi gas », *Phys. Rev. Lett.* **91** (2003), article no. 240401.
- [18] Y. Castin, A. Sinatra, H. Kurkjian, «Erratum : Landau phonon-roton theory revisited for superfluid He-4 and Fermi gases [Phys. Rev. Lett. 119, 260402 (2017)] », Phys. Rev. Lett. 123 (2019), article no. 239904(E).
- [19] B. Fåk, T. Keller, M. E. Zhitomirsky, A. L. Chernyshev, « Roton–phonon interaction in superfluid ⁴He », *Phys. Rev. Lett.* 109 (2012), article no. 155305.
- [20] R. Combescot, M. Y. Kagan, S. Stringari, « Collective mode of homogeneous superfluid Fermi gases in the BEC-BCS crossover », *Phys. Rev. A* 74 (2006), article no. 042717.
- [21] H. Kurkjian, Y. Castin, A. Sinatra, « Concavity of the collective excitation branch of a Fermi gas in the BEC-BCS crossover », *Phys. Rev. A* **93** (2016), article no. 013623.
- [22] Y. Castin, I. Ferrier-Barbut, C. Salomon, « La vitesse critique de Landau d'une particule dans un superfluide de fermions », C. R. Phys. 16 (2015), p. 241.
- [23] L. P. Pitaevskii, "Properties of the spectrum of elementary excitations near the disintegration threshold of the excitations », *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* 36 (1959), p. 1168.
- [24] L. Landau, I. Khalatnikov, «Teoriya vyazkosti Geliya-II», Zh. Eksp. Teor. Fiz. 19 (1949), p. 637, [en anglais dans Collected papers of L. D. Landau, chapitre 69, p. 494–510, édité par D. ter Haar (Pergamon, New York, 1965)].

⁶⁶On l'aura compris, cette conclusion est indépendante de la forme particulière de la relation de dispersion réduite $\varepsilon(\kappa)$.

- [25] N. Lerch, L. Bartosch, P. Kopietz, «Absence of fermionic quasiparticles in the superfluid state of the attractive Fermi gas », *Phys. Rev. Lett.* **100** (2008), article no. 050403.
- [26] H. Kurkjian, Y. Castin, A. Sinatra, «Three-phonon and four-phonon interaction processes in a pair-condensed Fermi gas », Ann. Phys. (Berlin) 529 (2017), article no. 1600352.
- [27] R. Haussmann, M. Punk, W. Zwerger, « Spectral functions and rf response of ultracold fermionic atoms », Phys. Rev. A 80 (2009), article no. 063612.
- [28] I. M. Khalatnikov, « Pogloshcheniye zvuka v gelii II », Zh. Eksp. Teor. Fiz. 20 (1950), p. 243.
- [29] I. M. Khalatnikov, D. M. Chernikova, «Relaxation phenomena in superfluid helium », Zh. Eksp. Teor. Fiz. 49 (1965), p. 1957.
- [30] D. T. Son, M. Wingate, «General coordinate invariance and conformal invariance in nonrelativistic physics : Unitary Fermi gas », Ann. Phys. 321 (2006), p. 197.
- [31] G. Bighin, L. Salasnich, P. A. Marchetti, F. Toigo, "Beliaev damping of the Goldstone mode in atomic Fermi superfluids", Phys. Rev. A 92 (2015), article no. 023638.
- [32] H. Kurkjian, Y. Castin, A. Sinatra, « Brouillage thermique d'un gaz cohérent de fermions », C. R. Phys. 17 (2016), p. 789.
- [33] C. Cohen-Tannoudji, J. Dupont-Roc, G. Grynberg, Processus d'interaction entre photons et atomes, Collection Savoirs Actuels, InterEditions/Editions du CNRS, Paris, 1988.
- [34] Y. Castin, A. Sinatra, H. Kurkjian, «Le couplage de Landau phonon–roton revisité pour l'hélium 4 liquide et étendu aux gaz de fermions superfluides », hal-01570314v3, 2019.
- [35] Y. Castin, « Étalement de la phase et cohérence temporelle d'un gaz de fermions condensé par paires à basse température », C. R. Phys. 20 (2019), p. 540.
- [36] M. Marini, F. Pistolesi, G. C. Strinati, « Evolution from BCS superconductivity to Bose condensation : Analytic results for the crossover in three dimensions », *Eur. Phys. J. B* **1** (1998), p. 151.
- [37] P. Langevin, « Sur la théorie du mouvement brownien », C. R. Acad. Sci. 146 (1908), p. 530.
- [38] Y. Nishida, D. T. Son, « c Expansion for a Fermi gas at infinite scattering length », Phys. Rev. Lett. 97 (2006), article no. 050403.
- [39] D. S. Petrov, C. Salomon, G. V. Shlyapnikov, « Scattering properties of weakly bound dimers of fermionic atoms », *Phys. Rev. A* 71 (2005), article no. 012708.
- [40] I. V. Brodsky, A. V. Klaptsov, M. Y. Kagan, R. Combescot, X. Leyronas, "Bound states of three and four resonantly interacting particles", *Pis'ma v ZhETF* 82 (2005), p. 306, [JETP Lett. 82 (2005), p. 273].
- [41] G. V. Skorniakov, K. A. Ter-Martirosian, «Three-body problem for short range forces. I. Scattering of low energy neutrons by deuterons », *Zh. Eksp. Teor. Phys.* **31** (1957), p. 775, [*Sov. Phys. JETP* **4** (1957), p. 648].
- [42] J. Levinsen, D. S. Petrov, «Atom–dimer and dimer–dimer scattering in fermionic mixtures near a narrow Feshbach resonance », *Eur. Phys. J.* D **65** (2011), p. 67.
- [43] S. Giorgini, L. P. Pitaevskii, S. Stringari, « Theory of ultracold atomic Fermi gases », Rev. Mod. Phys. 80 (2008), p. 1215.
- [44] F. Alzetto, X. Leyronas, « Equation of state of a polarized Fermi gas in the Bose–Einstein-condensate limit », Phys. Rev. A 81 (2010), article no. 043604.

Comptes Rendus

Physique

Objet de la revue

Les *Comptes Rendus Physique* sont une revue électronique évaluée par les pairs de niveau international, qui couvre l'ensemble des domaines de la physique et de l'astrophysique. Ils publient principalement des numéros thématiques, mais également des articles originaux de recherche, des annonces préliminaires, des articles de revue, des mises en perspective historiques, des textes à visée pédagogique ou encore des actes de colloque, sans limite de longueur, en anglais ou en français. Ils proposent également des numéros spéciaux consacrés à certains aspects récents et/ou significatifs de la discipline, dont les auteurs sont choisis parmi les chercheurs les plus actifs sur le sujet et dont la coordination est assurée par des rédacteurs en chef invités.

Les *Comptes Rendus Physique* sont diffusés selon une politique vertueuse de libre accès diamant, gratuit pour les auteurs (pas de frais de publications) comme pour les lecteurs (libre accès immédiat et pérenne).

Directeur de la publication : Étienne Ghys

Rédacteurs en chef: D. Gratias, J. Villain

Comité éditorial : Jacqueline Bloch, Christian Bordé, Hélène Bouchiat, Alexandre Bouzdine, Yves Bréchet, Françoise Combes, Jean Dalibard, Michel Davier, Daniel Estève, Stéphan Fauve, Pierre Fayet, Frédérique de Fornel, Maurice Goldman, Guy Laval, Chaouqi Misbah, Jean-Yves Ollitrault, Nathalie Palanque-Delabrouille

Secrétaire éditorial : Julien Desmarets

À propos de la revue

Toutes les informations concernant la revue, y compris le texte des articles publiés qui est en accès libre intégral, figurent sur le site https://comptes-rendus.academie-sciences.fr/physique/.

Informations à l'attention des auteurs

Pour toute question relative à la soumission des articles, les auteurs peuvent consulter le site https://comptes-rendus.academie-sciences.fr/physique/.

Contact

Académie des sciences 23, quai de Conti, 75006 Paris, France Tél. : (+33) (0)1 44 41 43 72 CR-Physique@academie-sciences.fr



Les articles de cette revue sont mis à disposition sous la licence Creative Commons Attribution 4.0 International (CC-BY 4.0) https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/deed.fr



Physique

Volume 21, nº 6, 2020

Prix 2019 de l'Académie des sciences (suite) **Special issue / Numéro thématique** Prizes of the French Academy of Sciences 2019 (continued) / Prix 2019 de l'Académie des sciences (suite)

Jacques Villain	
Foreword	501-506
Gilles Pijaudier-Cabot Fracture and permeability of concrete and rocks	507-525
Jihed Zghal, Nicolas Moës Analysis of the delayed damage model for three one-dimensional loading scenarii	527-537
Benoît Noetinger Statistical physics and applied geosciences: some results and perspectives	539-560
Rémi Rhodes, Vincent Vargas A probabilistic approach of Liouville field theory	561-568
Yvan Castin Marche au hasard d'une quasi-particule massive dans le gaz de phonons d'un superfluide à très basse température	571-618

1878-1535 (electronic)

DE L'ACADÉMIE DES SCIENCES	Comptes Rendus



