

Classification
Physics Abstracts
67.40 — 64.70S — 05.30

LES PREMIERS TERMES DE L'ÉNERGIE LIBRE DANS LE MODÈLE DE FEYNMAN POUR LA TRANSITION λ

M. GAUDIN

CEN Saclay, B.P. n° 2, 91190 Gif sur Yvette, France

(Reçu le 6 mars 1978, accepté le 28 mars 1978)

Résumé. — Les cinq premiers termes du développement de l'énergie libre dans le modèle de Feynman pour la transition λ de l'hélium 4 sont calculés exactement.

Abstract. — The first five terms of the free-energy expansion in Feynman's model for the λ -transition in helium 4 are given exactly.

1. La fonction de partition d'un système de N atomes d'hélium 4, de masse m , à la température inverse β , peut être représentée par l'intégrale fonctionnelle suivante :

$$Q_{\text{exact}} = \frac{1}{N!} \sum_{\mathbf{P} \in \pi_N} \int_{x_i(\beta) = x_{\mathbf{P}_i}(0)} \mathcal{D}x_1 \mathcal{D}x_2 \dots \mathcal{D}x_N \exp \left\{ \int_0^\beta \left(-\frac{m}{2\hbar} \sum_i \left(\frac{dx_i}{du} \right)^2 - \sum_{i < j} V(x_i(u) - x_j(u)) \right) du \right\}. \quad (1)$$

Dans le but de comprendre la nature de la transition λ , Feynman [1] procède à une triple simplification de la somme sur les trajectoires (1) :

a) Pour tenir compte de l'effet du potentiel mutuel entre atomes, la position de ceux-ci est restreinte aux sites d'un réseau périodique cubique de forme et de volume donnés (par exemple un cube $N = L^3$). En effet, le cœur dur a pour effet de maintenir les distances entre atomes voisins dans des limites étroites. La densité détermine d'ailleurs la longueur a de la maille du réseau $a^3 = \rho^{-1}$, puisque l'on a un atome par site.

b) Le *propagateur* de chaque particule entre 0 et β est approché de façon naturelle par

$$\exp - \int_0^\beta \frac{m}{2\hbar} \left(\frac{dx_i}{du} \right)^2 du \quad \exp - \frac{m'}{2\hbar\beta} (x_i(\beta) - x_i(0))^2 = \exp - \frac{m'}{2\hbar\beta} (x_i - x_{\mathbf{P}_i})^2 \quad (2)$$

où m' désigne une masse effective.

Les deux hypothèses ci-dessus donnent une approximation de Q_{exact} sous forme de la somme symétrique suivante :

$$Q_{\text{appr.}} = \frac{1}{N!} \sum_{\{\mathbf{x}_i\}} \sum_{\mathbf{P}} \prod_{j=1}^N \exp - \frac{m'}{2\hbar\beta} (\mathbf{x}_j - \mathbf{x}_{\mathbf{P}_j})^2. \quad (3)$$

Définissons la matrice $N \times N$ d'éléments

$$f(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = \exp - \frac{m'}{2\hbar\beta} (\mathbf{x} - \mathbf{y})^2. \quad (4)$$

Après la sommation sur les \mathbf{x}_i nécessairement distincts, qui a pour effet de multiplier par $N!$, on reconnaît dans $Q_{\text{appr.}}$ le *permanent* de la matrice f

$$Q_{\text{appr.}} = \left| f(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right|_N. \quad (5)$$

c) Si l'on note que f décroît très vite avec la distance, une troisième simplification consiste à ne retenir dans la matrice (4) que les éléments dominants : la diagonale $f(0) = 1$ et les éléments para-diagonaux correspondant à la propagation de chaque atome d'un site au site voisin. On appelle λ la valeur correspondante de f

$$\lambda = \exp - \frac{m' a^2}{2\hbar\beta}. \quad (6)$$

D'où l'approximation de Feynman, donnant une fonction de partition modèle

$$Q = \left| 1 + \lambda A \right|_N = \left| \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) + \lambda A(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \right|_N \quad (7)$$

dépendant du seul paramètre λ ; les éléments de la matrice A sont

$$A(\mathbf{x} - \mathbf{y}) = 0 \quad \text{si } \mathbf{x} \text{ et } \mathbf{y} \text{ ne sont pas voisins} \\ = 1 \quad \text{si } \mathbf{x} \text{ et } \mathbf{y} \text{ sont voisins.} \quad (8)$$

Si l'on développe le permanent (7) par la méthode de Laplace et qu'on utilise l'écriture cyclique des permutations de π_N , on obtient pour Q le polynôme de degré N en λ

$$Q(\lambda) = 1 + \sum_{n=2}^N C_n \lambda^n \quad (9)$$

où C_n est le nombre d'applications distinctes des systèmes de polygones orientés fermés — ou cycles — ayant un nombre total de côtés égal à n , sur les arêtes du réseau cubique donné, chaque site étant emprunté au plus une fois. A noter que les polygones de longueur 2 n'ont qu'une orientation et que les cycles ont toujours une longueur paire.

2. Ce rappel des hypothèses de Feynman étant fait (on trouvera leur motivation très étayée dans ses articles [3] et ceux de Kikuchi [2]) on s'intéresse à la limite thermodynamique de l'énergie libre par particule

$$\Phi(\lambda) = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log Q(\lambda)}{N}. \quad (10)$$

On notera la majoration qui découle immédiatement de (7)

$$\Phi(\lambda) \leq \log(1 + 2d\lambda) \quad (11)$$

où l'on a appelé d la dimension de l'espace (nombre de coordination $q = 2d$ pour le réseau cubique). La conjecture de Van der Warden [4] pour le permanent des matrices bistochastiques nous donne de plus la borne inférieure

$$\log(1 + 2d\lambda) - 1. \quad (12)$$

Nous avons construit sans difficulté une théorie diagrammatique pour le développement perturbatif d'un permanent et l'avons appliqué au calcul des premiers termes de $\Phi(\lambda)$

$$\frac{\Phi_d(\lambda)}{d} = \lim \frac{\log \left| (1 + \lambda A) \right|}{Nd} = a_1 \lambda^2 + a_2 \frac{\lambda^4}{2} + a_3 \frac{\lambda^6}{3} + \dots + a_n \frac{\lambda^{2n}}{n} + \dots \quad (13)$$

Les a_n sont des entiers. Voici la valeur des premiers coefficients de la série (13) jusqu'à l'ordre λ^{10} , en fonction de la dimension $d = q/2$.

$$\begin{cases} a_1 = 1 \\ a_2 = -(q+1) \\ a_3 = (3q^2 - 9q + 16) \\ a_4 = (5q^3 - 118q^2 + 505q - 613) \\ a_5 = (85q^4 - 1630q^3 + 11975q^2 - \\ \quad - 36015q + 35936). \end{cases} \quad (14)$$

ce qui donne pour les trois premières dimensions

• $d = 3$:

$$\frac{1}{3} \Phi_3(\lambda) = \lambda^2 - 7 \frac{\lambda^4}{2} + 70 \frac{\lambda^6}{3} - 751 \frac{\lambda^8}{4} + 9026 \frac{\lambda^{10}}{5} + \dots \quad (15)$$

• $d = 2$:

$$\frac{1}{2} \Phi_2(\lambda) = \lambda^2 - 5 \frac{\lambda^4}{2} + 28 \frac{\lambda^6}{3} - 161 \frac{\lambda^8}{4} + 916 \frac{\lambda^{10}}{5} + \dots \quad (16)$$

• $d = 1$:

$$\begin{aligned} \Phi_1(\lambda) &= \lambda^2 - 3 \frac{\lambda^4}{2} + 10 \frac{\lambda^6}{3} - 35 \frac{\lambda^8}{4} + 126 \frac{\lambda^{10}}{5} + \dots \\ &= \sum_{p=1}^{\infty} (-)^{p-1} C_{p-1}^{2p-1} \cdot \frac{\lambda^{2p}}{p} \\ &= \log \left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \lambda^2} \right). \end{aligned} \quad (17)$$

Le problème à une dimension, facile à résoudre, fournit un test très sûr de la justesse du calcul des poids et d'une énumération correcte. Par exemple l'évaluation du terme en λ^{10} nécessite plus de 200 diagrammes connexes. Pour $d = 3$, la contribution d'un diagramme est couramment de l'ordre de $10^3 \cdot 10^4$. La somme des 205 contributions est de l'ordre de 10^3 , ce qui donne une idée des effets de compensation.

On remarque que la fonction Φ admet une forme limite lorsque la dimension devient infinie, le produit $\lambda^2 d = x$ restant constant

$$\begin{aligned} \Phi(\lambda) &= x - x^2 + 4x^3 + 10x^4 + 272x^5 + \dots - \\ &\quad - \frac{1}{d} \left(\frac{x^2}{2} + 18 \frac{x^3}{3} + 472 \frac{x^4}{4} + 13040 \frac{x^5}{5} + \dots \right) \\ &\quad + \frac{1}{d^2} \left(16 \frac{x^3}{3} + 1010 \frac{x^4}{4} + 47900 \frac{x^5}{5} + \dots \right) \\ &\quad - \frac{1}{d^3} \left(613 \frac{x^4}{4} + 72030 \frac{x^5}{5} + \dots \right) \\ &\quad + \frac{1}{d^4} \left(35936 \frac{x^5}{5} + \dots \right) + \dots \end{aligned} \quad (18)$$

Donnons enfin une borne inférieure du rayon de convergence de la série (13) pour $\Phi_d(\lambda)$. D'après une formule connue on a :

$$\left| 1 + \lambda A \right| < \frac{1}{\det | 1 - \lambda A |} \quad (19)$$

pourvu que

$$\lambda^{-1} > \text{Sup. Spect. } A = 2d. \quad (20)$$

On a la majoration

$$\Phi_d(\lambda) \leq - \left\langle \log \left(1 - 2\lambda \sum_{j=1}^d \cos \varphi_j \right) \right\rangle \quad (21)$$

où $\langle \rangle$ signifie valeur moyenne sur les angles φ_j avec

$$\Phi_d(\lambda) \text{ converge donc pour } 2\lambda d < 1. \quad (22)$$

La borne (19) donne lieu à une *somme sur les polygones* où la condition de non-intersection est levée. La majorante (21) de l'énergie libre manifeste une transition essentiellement la même que celle d'un système de Bose sans interaction et ne nous apprend pas grand chose sur celle de Φ .

Bien que ce soit probablement le poids des polygones de longueur macroscopique qui soit prépondérant au voisinage de la transition, l'information contenue dans les premiers coefficients de $\Phi(\lambda)$, qui ne font intervenir que des polygones d'ordre 10 tout au plus, a au moins le mérite d'être sûre. Il serait utile de l'exploiter au mieux en construisant les divers approximants de Padé, mais ceci reste entièrement à faire. On pourrait utiliser aussi le comportement à l'infini, sûrement en $\log \lambda$ d'après (11) et (12), en étudiant les approximants $[N, N-1]$ de e^Φ . Pour $d=2$, le résultat de Fisher [5] pour le système de dimères sur réseau quadratique permet de calculer

$$\lim_{N \rightarrow \infty} \frac{\log |A|}{N} = \frac{2g}{\pi} \sim 0,583 \ 12$$

$$g = 1 - \frac{1}{3^2} + \frac{1}{5^2} - \frac{1}{7^2} + \dots$$

On a donc :

$$\Phi_2(\lambda) \underset{\lambda \rightarrow \infty}{\sim} \log \lambda + \frac{2g}{\pi}$$

Comparer 0,58 avec la borne inférieure $\log 4/e = 0,386$ et la borne supérieure 1,38 données par (11) et (12).

On aura noté que les séries (15) et (16) pour les dimensions physiques commencent alternées et ont une allure géométrique, ce qui n'entraîne pas forcément l'absence de singularité physique. Par contre, le développement dans la variable $x = \lambda^2 d$, au voisinage de $d = \infty$, fait intervenir des coefficients de même signe (sauf le second !), mais on ne peut plus rien dire sur le rayon de convergence de la série

$$\lim_{d \rightarrow \infty} \Phi(x)$$

Remerciements. — Je remercie M. L. Mehta qui s'est intéressé à ce calcul et a vérifié les résultats.

Bibliographie

- [1] FEYNMAN, R. P., *Phys. Rev.* **90** (1953) 1116 ; **91** (1953) 1291.
 [2] KIKUCHI, R., *Phys. Rev.* **96** (1954) 563.
 [3] FEYNMAN, R. P., *Statistical Mechanics*. A set of lectures (Benjamin) 1972, Chap. 11.10.
 [4] MARCUS, M. & MINC, H., *A survey of matrix theory and matrix inequalities* (P.W.S.) 1964 (§ 2.11.6 et 5.11.6).
 [5] FISHER, M. E., *Phys. Rev.* **124** (1961) 1664.