



**HAL**  
open science

# Systemes de particules en interaction : phenomenes a l'equilibre, hors equilibre et approche non perturbative

Dany Davesne

► **To cite this version:**

Dany Davesne. Systemes de particules en interaction : phenomenes a l'equilibre, hors equilibre et approche non perturbative. Physique mathematique [math-ph]. Universite Claude Bernard - Lyon I, 2003. tel-00004366

**HAL Id: tel-00004366**

**<https://theses.hal.science/tel-00004366>**

Submitted on 29 Jan 2004

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinee au depot et a la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publies ou non, emanant des etablissements d'enseignement et de recherche francais ou etrangers, des laboratoires publics ou privs.

N° d'ordre : 42-2003

N° attribué par la bibliothèque : LYCEN T 2003-46

UNIVERSITÉ CLAUDE BERNARD  
Institut de Physique Nucléaire de Lyon

**Habilitation à diriger des recherches**  
**Spécialité : Physique nucléaire théorique**

présentée et soutenue publiquement par D. DAVESNE  
le 20 Novembre 2003

---

# **Systemes de particules en interaction : phénomènes à l'équilibre, hors équilibre et approche non perturbative**

---

Devant la commission d'examen formée de :

Mme. M. ERICSON (présidente)

M. J. AICHELIN (rapporteur)

M. A. MOLINARI (rapporteur)

M. J. WAMBACH (rapporteur)

M. G. CHANFRAY

M. J. MEYER

M. P. SCHUCK



---

# Remerciements

---

Mes premiers remerciements vont bien évidemment aux membres de notre "sous-groupe" et en tout premier lieu à Guy Chanfray non seulement pour tout le travail effectué en commun depuis maintenant de nombreuses (!) années mais également pour le suivi de la réalisation de ce manuscrit. Qu'il trouve ici l'expression de ma plus vive gratitude. Je remercie également Magda Ericson non seulement pour tous les conseils qu'elle me prodigue et toutes les discussions enrichissantes que nous avons mais aussi pour la relecture de cette habilitation. Enfin, j'ai une pensée pour Jean Delorme qui, même à la retraite, continue de prêter une oreille attentive et de fournir des éléments de réponse toujours aussi pertinents et éclairés aux problèmes scientifiques que je lui soumetts.

Je remercie à nouveau Magda Ericson qui a accepté de présider le jury de cette habilitation à diriger des recherches.

Je remercie Jörg Aichelin, Alfredo Molinari et Jochen Wambach d'avoir accepté de rapporter ce travail.

Je remercie Jacques Meyer et Peter Schuck de m'avoir fait l'honneur de participer à mon jury.

Je remercie Alain Chevarier et Henry Chermette pour la relecture de la partie concernant la DFT.

Je remercie également tous les thésards et post-docs pour leur collaboration active : Aziz, Céline, David, Gaelle, Hubert, Micaela, Yi-Jun, et Yoann.

Je remercie ensuite tous mes collègues, et pour la plupart amis, du service de physique théorique de l'I.P.N. Lyon. Même si les uns après les autres, ils partent à la retraite après seulement 37,5 annuités, qu'ils sachent que je ne leur en veux pas le moins du monde et que j'ai apprécié tous les souvenirs forgés en commun au cours de ces dernières années.

Je remercie enfin, dans un tout autre registre, des amis qui me rendent souvent la vie difficile mais que je rembourse régulièrement au centuple (!) : Gérard, Thierry et Nathalie. Je n'oublie pas non plus les valeureux "anciens" : Daniel, Georges, Georgie, Jean-Claude, Philippe et Pierre ainsi que les petits "nouveaux" : Aldo, Micaela, Monique et Sylvain.



---

# Sommaire

---

<b>Introduction</b>	<b>9</b>
<b>I Symétrie chirale : approches phénoménologiques et conséquences expérimentales</b>	<b>11</b>
<b>1 Étude de la restauration de la symétrie chirale</b>	<b>13</b>
1.1 Introduction . . . . .	13
1.2 Restauration de la symétrie chirale : rôle de la densité scalaire de pions . .	14
1.3 Interaction pion-pion à densité finie . . . . .	20
1.4 Conclusion . . . . .	23
Bibliographie . . . . .	26
Publication 1 . . . . .	27
Publication 2 . . . . .	42
Publication 3 . . . . .	50
<b>2 Hydrodynamique et brisure de symétrie</b>	<b>61</b>
2.1 Description hydrodynamique d'un système . . . . .	61
2.2 Hydrodynamique et brisure spontanée de symétrie . . . . .	64
2.3 Hydrodynamique du gaz de pions . . . . .	66
2.3.1 Hydrodynamique sans dissipation . . . . .	66
2.3.2 Hydrodynamique avec dissipation . . . . .	67
2.4 Calcul de la viscosité . . . . .	70
2.5 Application aux collisions d'ions lourds ultra-relativistes . . . . .	72
2.6 Conclusion . . . . .	75
Bibliographie . . . . .	78
Publication 4 . . . . .	79
Publication 5 . . . . .	84
<b>II Systèmes en interaction : approche non perturbative</b>	<b>89</b>
<b>1 Diffusion de l'iode dans le zirconium : approche par des calculs <i>ab initio</i></b>	<b>93</b>
1.1 Problématique générale . . . . .	93
1.2 Théorie de la fonctionnelle de la densité . . . . .	95

1.3	Pseudo-potentiels . . . . .	98
1.4	Résultats pour le Zr . . . . .	99
1.5	Influence de la présence d'oxygène sur le site de fixation de l'iode . . . . .	102
1.6	Synthèse des résultats . . . . .	102
	Bibliographie . . . . .	105
	Publication 6 . . . . .	106
<b>2</b>	<b>Applications de la RPA renormalisée aux théories de bosons</b>	<b>118</b>
2.1	Présentation générale . . . . .	118
2.2	Présentation rapide du formalisme de la RPA et de ses extensions . . . . .	119
2.3	RPA et extensions appliquées à une théorie de champs scalaires $\lambda\phi^4$ . . . . .	122
2.3.1	Potentiel effectif . . . . .	122
2.3.2	Résultats pour la théorie scalaire à 1+1 dimensions . . . . .	122
2.3.3	Résultats dans le cadre de l'approximation de champ moyen . . . . .	123
2.3.4	Résultats dans le cadre de la RPA et de la RPA renormalisée . . . . .	125
2.4	Application de la RPA à l'oscillateur anharmonique à une dimension . . . . .	128
2.4.1	Résultats pour la RPA standard et la RPA renormalisée . . . . .	128
2.4.2	Résultats dans le cadre de la RPA renormalisée étendue . . . . .	130
	Bibliographie . . . . .	134
	Publication 7 . . . . .	135
	Publication 8 . . . . .	151
	<b>Conclusion</b>	<b>160</b>

## Résumé

Différents aspects de la description des systèmes en interaction sont présentés dans ce manuscrit. La première partie est tout d'abord consacrée au problème de la restauration partielle de la symétrie chirale à densité baryonique et/ou température finies ainsi qu'à ses manifestations expérimentales. Nous insisterons principalement sur le rôle important de la densité scalaire de pions et nous présenterons un calcul du condensat de quarks à température et densité finies. Nous montrerons également comment il est possible de prendre en compte simultanément les effets liés à la restauration partielle de la symétrie chirale et la phénoménologie de la physique nucléaire pour déterminer la fonction spectrale du méson sigma, problème important à la fois au niveau théorique et au niveau de l'interprétation de certaines données expérimentales. Ensuite, toujours dans la première partie, nous nous concentrerons sur l'hydrodynamique du gaz de pions produit lors de collisions d'ions lourds ultrarelativistes. Le but est de comprendre comment le phénomène de brisure de symétrie modifie les lois hydrodynamiques et quelle peut en être la conséquence sur les spectres expérimentaux obtenus en collisions d'ions lourds ultra-relativistes. Nous montrerons en particulier que les effets dissipatifs impliquent un refroidissement du gaz de pions plus lent que l'approche du fluide idéal ne pouvait le laisser supposer.

La seconde partie est quant à elle consacrée aux techniques du problème à  $N$  corps que nous avons cherchées à appliquer à différents problèmes. Ainsi, dans un premier temps, nous examinerons, grâce au formalisme de la DFT, la diffusion de l'iode dans le zirconium, projet qui se situe dans le contexte plus général du stockage des déchets nucléaires. Nous montrerons de manière indirecte que le coefficient de diffusion est particulièrement faible, ce qui va dans le sens d'un stockage possible sur une longue période. Enfin, nous terminerons par un exposé sur le formalisme RPA et ses extensions appliqués à la théorie quantique des champs. L'objectif est de développer des méthodes non-perturbatives afin de pouvoir les appliquer à des théories de jauge. Nous montrerons, sur un exemple simple, comment il est possible d'aller au-delà de la RPA standard en incluant notamment des corrélations supplémentaires à deux et trois champs.

**Mots-clés :** Symétrie chirale, hydrodynamique, DFT, RPA, fonctions de Green.



## Abstract

In this work, several aspects concerning interacting systems are examined. The first part is dedicated to the fundamental problem of partial chiral restoration at finite temperature and/or density and to its experimental consequences. We will insist particularly on the scalar density of pionic origin and we will present a theoretical estimate of the quark condensate at both finite temperature and density. We will also show how it is possible to incorporate simultaneously effects originated from partial chiral symmetry restoration and aspects from standard nuclear physics phenomenology in the computation of the sigma meson spectral function. Then, we will focus our attention on hydrodynamics and more precisely on the pion gas produced in ultra-relativistic heavy ion collisions. The aim is to understand how the spontaneous breaking of a symmetry modifies the theory of hydrodynamics itself and to which extent this can be applied to the interpretation of experiments. We will show, in particular, that, when including dissipative effects, the cooling of the pion gas is slower than what is expected from ideal hydrodynamics.

The second part of this work is devoted to the many-body problem. First, we will examine within the Density Functional Theory, the diffusion of iodine atoms in zirconium metal. This study is important in the context of nuclear wastes and we will show that our results are in favour of a possible storage in a dry area for a long time. Finally, we will end this presentation by a part about RPA and its extensions applied to a bosonic quantum field theory. The aim is to develop some non-perturbative approaches that can be applied in the future to gauge theories. Some inherent problems to the bosonic case will be exhibited and partially solved in the context of simple models. In particular, we will show how it is possible to include in a coherent way some correlations (up to four fields) absent in standard RPA.

**Keywords :** Chiral symmetry, hydrodynamics, DFT, RPA, Green's functions.

---

# Introduction générale

---

Ce travail a été effectué au sein du groupe de physique théorique de l'Institut de Physique Nucléaire de Lyon. Ce groupe comprend actuellement douze permanents, deux professeurs émérites et quatre thésards. Les principales thématiques développées sont la phénoménologie du modèle standard, la physique mathématique, le développement de théories microscopiques des noyaux, l'étude du rayonnement de canalisation dans les solides ou encore la matière hadronique. C'est dans ce dernier registre, et plus précisément dans la problématique générale de l'étude de la restauration de la symétrie chirale à température et/ou densité finie que se situe mon travail.

L'étude de la matière hadronique dans des conditions extrêmes de température et de densité telle qu'elle peut être produite par exemple dans les collisions d'ions lourds ultra-relativistes actuellement au CERN et à RHIC ou dans un avenir proche grâce au futur collisionneur LHC, s'avère être un domaine de physique particulièrement riche dans le sens où elle nécessite la connaissance et l'utilisation de techniques développées dans de nombreuses autres disciplines de la physique. Il est par exemple évident que la description de l'évolution de systèmes de hadrons interagissant fortement a largement bénéficié au cours des années passées d'un apport important de la théorie quantique des champs à température finie, de l'hydrodynamique relativiste ou encore du problème à  $N$  corps pour ne citer qu'eux. Ceci est évidemment dû en grande partie au fait que les outils dont on dispose actuellement en physique nucléaire ou physique des particules, à savoir la chromodynamique quantique (QCD), sont "inutilisables" au niveau du monde hadronique.

Un des enjeux essentiels de la physique nucléaire des hautes énergies actuelle est de décrire le diagramme de phase de QCD et donc par exemple de comprendre et caractériser les transitions de phase que subit la matière de quarks et de gluons. Parmi toutes les possibilités qui existent, deux sont particulièrement importantes : le déconfinement et la transition de phase chirale. De nombreuses avancées ont été réalisées dans ce domaine grâce au développement des ordinateurs, *via* la QCD sur réseaux. Mais il existe un autre angle d'attaque qui est l'étude expérimentale de la matière hadronique dont une bonne connaissance peut s'avérer être un outil précieux pour obtenir des informations au moins indirectes sur la QCD. Il est par exemple possible d'interpréter certains spectres expérimentaux comme des effets précurseurs de restauration de symétrie chirale : citons, sans être

exhaustif, les spectres de dileptons au CERN (*via* le mélange axial-vecteur à température finie) ou les spectres obtenus à TRIUMF dans les réactions  $A(\pi, 2\pi)$  (*via* l'évolution des constantes de couplage à densité finie). Dans tous ces cas, que ce soit en tant que particules thermiques prépondérantes (dans un gaz de hadrons chauds) ou comme particules virtuelles (dans les noyaux), les pions jouent évidemment un rôle central.

Pour étudier des systèmes hadroniques en interaction, deux possibilités s'offrent à nous. D'une part, il est possible d'utiliser des théories effectives, par exemple des modèles phénoménologiques qui incorporent l'essentiel des ingrédients physiques (notamment les symétries) au niveau de lagrangiens à partir desquels nous pouvons calculer des quantités observables : c'est le cas au niveau hadronique du modèle "sigma" (linéaire ou non linéaire) ou encore du modèle de Nambu-Jona-Lasinio lorsque les degrés de liberté pertinents sont les quarks. La deuxième possibilité est d'essayer de développer au niveau formel de nouveaux schémas de calcul dans le cadre du problème à  $N$  corps afin d'obtenir des outils mieux adaptés à la description de phénomènes plus compliqués. Même s'il peut paraître à première vue que la deuxième approche est plus éloignée de l'expérience que la première, il ne faut cependant pas perdre de vue que ce travail formel est en réalité motivé par la nature même des problèmes rencontrés (détermination du vide dans la phase chirale brisée, caractérisation de la transition de phase chirale) qui sont, par essence même de nature non-perturbative.

Comme je viens de le mentionner dans le paragraphe précédent, la séparation entre d'une part le calcul de quantités directement observables et d'autre part le développement au niveau formel de techniques non-perturbatives est en réalité artificiel, dans le sens où, quoiqu'il arrive, ces développements formels sont également motivés par des préoccupations expérimentales. Pour des raisons de commodité, j'ai néanmoins utilisé ce découpage dans la présentation de ce manuscrit. Dans une première partie, nous aborderons ainsi les problèmes liés à la phénoménologie de la symétrie chirale et/ou à sa restauration (partielle) notamment à densité finie. Nous nous concentrerons ensuite sur les phénomènes hors équilibre, le but étant de comprendre comment la brisure de la symétrie chirale peut se manifester dans l'évolution et la dissipation d'un système et quelles en sont les conséquences expérimentales possibles. Dans la seconde partie, nous aborderons différents aspects de la problématique générale de la description d'un système de  $N$  particules en interaction. Nous commencerons tout d'abord par le problème de la diffusion de l'iode dans le zirconium, problème important dans le cadre du stockage des déchets nucléaires. Il s'agit là d'un phénomène hors équilibre que l'on traitera dans le cadre de la DFT (Density Functional Theory), qui est une méthode de description d'un système de  $N$  particules en interaction. Cela nous permettra de faire le lien avec le second chapitre, à savoir le développement de théories non-perturbatives. Nous présenterons notamment l'application de la RPA (Random Phase Approximation) et de ses extensions à une théorie de champs relativistes ( $\lambda\Phi^4$ ) et à un modèle de mécanique quantique, l'oscillateur anharmonique.

## Première partie

# Symétrie chirale : approches phénoménologiques et conséquences expérimentales



# Étude de la restauration de la symétrie chirale

Dans ce chapitre, nous allons étudier les mécanismes de restauration partielle de la symétrie chirale à température et/ou densité finies. Nous montrerons en particulier le rôle fondamental joué par la densité scalaire de pions. Après avoir relié cette quantité à la réponse de spin-isospin longitudinale, nous déterminerons l'évolution du condensat de quarks dans le milieu en prenant simultanément en compte l'effet de la température et de la densité. Par ailleurs, partant d'un modèle effectif de quarks, nous calculerons l'amplitude de diffusion pion-pion dans le canal scalaire-isoscalaire. Nous montrerons alors comment il est possible de traiter de manière cohérente les effets liés à la restauration partielle de la symétrie chirale et les effets d'onde  $p$  dans le milieu.

## 1.1 Introduction

Historiquement, la symétrie chirale a été l'un des ingrédients fondamentaux nécessaires pour la compréhension du monde hadronique. Ainsi, des résultats exacts de première importance ont pu être établis et vérifiés dans le domaine des basses énergies (algèbre des courants, théorèmes de pions mous, théorie des perturbations chirales). Actuellement, c'est dans le domaine de la phénoménologie des hadrons que les implications de la symétrie chirale sont également étudiés. Jusqu'à il y a quelques années, grâce aux sondes électromagnétiques et hadroniques, cette phénoménologie a été testée et éprouvée à des énergies inférieures au GeV. Par contre, à l'heure actuelle, avec le développement des accélérateurs, les énergies mises en jeu sont importantes et de la matière dense ( $\simeq 3 - 5\rho_0$ ) et chaude ( $\simeq 150$  MeV) est créée dans toutes les collisions d'ions lourds ultra-relativistes. Il devient par conséquent nécessaire de développer des théories qui permettent de décrire les résultats expérimentaux dans ces domaines et qui fassent le lien avec la phénoménologie à basse énergie.

On est donc naturellement conduit à étudier le comportement de la matière hadronique lorsqu'on la chauffe ou la comprime et les mécanismes de restauration de la symétrie chirale à température et/ou densité finies. Même si toutes les expériences ne se situent pas dans une gamme de température et/ou de densité proches de celles de la transition de phase, elles permettent néanmoins de mettre en évidence certains comportements, certaines spéci-

ficités qui sont différents de ce que l'on observe à basse énergie. On s'intéresse en particulier à l'évolution des condensats, des masses des hadrons, des constantes de couplage ou encore des constantes de désintégration en fonction de la température et de la densité. Le point intéressant est de comprendre les mécanismes qui régissent ces évolutions et dans quelle mesure ils reflètent la restauration partielle de la symétrie chirale. Notre but ne sera donc pas d'analyser la transition en elle-même mais plutôt d'identifier les mécanismes fondamentaux qui permettent de s'en approcher. En ce sens, les expériences seront donc analysées en tant que mises en évidence d'effets précurseurs de restauration de la symétrie. Enfin, ainsi que nous le verrons en détails, un des résultats essentiels que nous nous attacherons à souligner est que les mécanismes de restauration s'appuient en grande partie sur les connaissances accumulées dans le domaine de la physique nucléaire traditionnelle.

La première partie sera consacrée principalement au rôle que joue la densité scalaire de pions dans le phénomène de restauration de la symétrie chirale. Ainsi, nous verrons que cette quantité affecte des observables qui paraissent *a priori* éloignées l'une de l'autre révélant ainsi l'existence d'une unité profonde dans les évolutions en fonction de la température et/ou de la densité. Dans une seconde partie, nous étudierons à partir d'un modèle de quarks effectif (modèle de Nambu-Jona-Lasinio) la modification de l'interaction pion-pion dans le canal scalaire-isoscalaire, problème également directement relié à la problématique de la restauration de la symétrie chirale, ainsi que nous le verrons en détails.

## 1.2 Restauration de la symétrie chirale : rôle de la densité scalaire de pions

Le condensat de quarks  $\langle \bar{q}q \rangle$  joue le rôle de paramètre d'ordre de la symétrie chirale. Sa valeur est non nulle dans le vide, indiquant ainsi que la symétrie est spontanément brisée. On s'attend alors à ce qu'à température et/ou densité finies, sa valeur décroisse en valeur absolue jusqu'à zéro au niveau de la transition de phase. Le premier problème est donc de savoir comment ce paramètre évolue avec  $T$  et/ou  $\rho$ . Ceci est possible grâce à sa relation avec ce que l'on appelle le commutateur sigma défini par :  $\Sigma \equiv \langle \langle H_{BS} \rangle \rangle$ <sup>1</sup> où  $H_{BS}$  est le hamiltonien qui brise explicitement la symétrie chirale. On peut en effet montrer [1, 2], dans le cas où l'interaction est négligeable, que le rapport gouvernant l'évolution du condensat dans le milieu est donné par :

$$\frac{\langle \langle \bar{q}q \rangle \rangle(\rho, T)}{\langle \bar{q}q \rangle} = 1 - \sum_h \frac{\rho_{Sh} \Sigma_h}{f_\pi^2 m_\pi^2} \quad (1.1)$$

où la somme porte sur l'ensemble des hadrons  $h$  d'un gaz et où  $\rho_{Sh}$  ( $\Sigma_h$ ) représente respectivement la densité scalaire (le commutateur sigma) relatif à chaque hadron.

Si l'on se limite par exemple à la dépendance en densité, on a alors :

$$\frac{\langle \langle \bar{q}q \rangle \rangle(\rho)}{\langle \bar{q}q \rangle} = 1 - \frac{\rho \Sigma_N}{f_\pi^2 m_\pi^2} \quad (1.2)$$

---

<sup>1</sup> $\langle \langle \dots \rangle \rangle$  représente la valeur moyenne dans le milieu.

où  $\Sigma_N$  est le commutateur sigma du nucléon. Si l'on prend pour  $\Sigma_N$  la valeur approchée de 45 MeV déduite des données sur la diffusion  $\pi N$ , on trouve que  $\langle\langle\bar{q}q\rangle\rangle(\rho_0)/\langle\bar{q}q\rangle \simeq 0.7$ . Cette valeur est interprétée en disant que la symétrie chirale est restaurée de 30% à densité nucléaire normale. Pour décrire microscopiquement le commutateur sigma  $\Sigma_N$ , on doit considérer un modèle de nucléon. Le modèle privilégié étant celui du "cloudy bag",  $\Sigma_N$  a une double origine : la première, qui contribue pour environ 15 MeV, provient de la densité scalaire des quarks de valence à l'intérieur du nucléon. La seconde, quant à elle, est due au nuage de pions virtuels ( $\Sigma_N^{(\pi)} \simeq 30$  MeV). Elle est reliée à une quantité dont nous allons abondamment parler dans ce qui suit, à savoir la densité scalaire de pions  $\langle\Phi^2\rangle$  :  $\Sigma_N^{(\pi)} = \int d^3\vec{r} m_\pi^2 \langle\Phi^2\rangle$ . Cette densité scalaire est donc responsable d'une grande partie de la restauration de la symétrie chirale à densité finie et c'est elle que nous allons calculer.

Cependant, avant d'aller plus loin, il est utile à ce stade d'illustrer le lien profond entre la densité scalaire de pions et un processus de restauration de la symétrie chirale. Il concerne le mélange axial-vecteur. Plus précisément, Dey *et al.* [3] ont montré qu'à basse température les corrélateurs axial et vectoriel se mélangeaient selon :

$$\Pi_V^{\mu\nu}(q, T) = (1 - \epsilon)\Pi_V^{\mu\nu}(q, T = 0) + \epsilon\Pi_A^{\mu\nu}(q, T = 0) \quad (1.3)$$

$$\Pi_A^{\mu\nu}(q, T) = (1 - \epsilon)\Pi_A^{\mu\nu}(q, T = 0) + \epsilon\Pi_V^{\mu\nu}(q, T = 0) \quad (1.4)$$

$$(1.5)$$

où  $\epsilon = 2\langle\Phi^2\rangle/3f_\pi^2 = T^2/6f_\pi^2$  puisqu'à température non nulle, les pions thermiques donnent une contribution  $\langle\Phi^2\rangle = T^2/4$ . Même si le développement indiqué ci-dessus n'est valable qu'à basse température, il permet néanmoins de comprendre ce qui se passe lorsque le milieu est de plus en plus chaud : en effet, avec l'augmentation de la température, le paramètre "de mélange" axial-vecteur va augmenter jusqu'à atteindre la valeur 1/2. À cette valeur, le mélange est total si bien que la réponse du système à une sonde vectorielle ne se distingue plus de la réponse à une sonde axiale. La symétrie chirale est alors totalement restaurée. Physiquement, un tel mélange est possible parce que le  $\rho$  et le  $a_1$  sont partenaires chiraux. Un  $\rho$  et un  $a_1$  peuvent ainsi se transformer l'un en l'autre par émission ou absorption d'un pion. Une contamination du spectre du  $\rho$  par le  $a_1$ , et par conséquent une restauration partielle de la symétrie chirale, a d'ailleurs été proposée comme interprétation de l'excès de dileptons observé expérimentalement par CERES, HELIOS3 et NA38/NA50 dans la région des masses intermédiaires [1 GeV, 2,5 GeV] (voir [4] pour une revue complète sur le sujet).

Nous sommes en mesure de revenir à présent sur le problème de la restauration à densité finie. Il a été montré [5] que les pions virtuels du nucléon jouent le rôle des pions thermiques. Dans un premier travail, nous allons décrire comment la densité scalaire pionique gouverne l'onde  $s$  de l'interaction  $\pi$ -noyau *via* l'interaction d'un pion externe avec le nuage pionique nucléaire. Nous montrerons ensuite comment la quantité  $\langle\Phi^2\rangle$  peut être reliée à la réponse de spin-isospin longitudinale, permettant ainsi la prise en compte de la phénoménologie bien établie des effets d'onde  $p$ . Tous ces éléments seront traités dans le cadre d'un modèle sigma non linéaire contenant un champ de nucléon  $N$  et un champ de pion  $\vec{\Phi}$ . Le lagrangien



correspondant est :

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{f_\pi^2}{4} \text{tr} \partial_\mu U \partial^\mu U^\dagger + \frac{1}{4} f_\pi^2 m_\pi^2 \text{tr} (U + U^\dagger) + i \bar{N} \gamma^\mu \partial_\mu N - M_N \bar{N} N \\ & + \bar{N} \gamma_\mu \mathcal{V}_c^\mu N + g_A \bar{N} \gamma_\mu \gamma^5 \mathcal{A}_c^\mu N \end{aligned} \quad (1.6)$$

avec

$$\mathcal{V}_c^\mu = \frac{i}{2} (\xi \partial_\mu \xi^\dagger + \xi^\dagger \partial_\mu \xi) \quad \mathcal{A}_c^\mu = \frac{i}{2} (\xi \partial_\mu \xi^\dagger - \xi^\dagger \partial_\mu \xi) \quad (1.7)$$

et où :

$$U = \xi^2 = e^{i\vec{\tau} \cdot \vec{\Phi} / \Phi F(X)}, \quad X^2 = \frac{\Phi^2}{f_\pi^2}, \quad F(X) = X + \alpha X^3 + \alpha' X^5 + \dots \quad (1.8)$$

avec  $F(X)$  qui est la fonction permettant de définir la représentation non-linéaire. Par exemple,  $F = \arcsin X$  ( $\alpha = 1/6$ ) correspond à la représentation PCAC,  $\alpha = -1/12$  à celle de Weinberg et  $F = X$  celle choisie habituellement en théorie des perturbations chirales. Bien évidemment, les résultats correspondant à des observables physiques doivent être indépendants du choix de cette représentation. Nous allons conserver explicitement le paramètre  $\alpha$  afin de vérifier qu'il en est bien ainsi dans nos expressions finales.

Commençons tout d'abord par examiner l'influence de la densité scalaire sur l'onde  $s$  de l'interaction pion-noyau. L'amplitude de diffusion correspondante est représentée sur la figure 1.1.

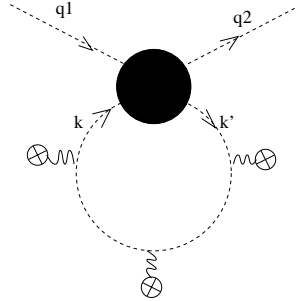


FIG. 1.1 – Diffusion d'un pion sur le nuage pionique d'un nucléon. La cercle en noir représente l'amplitude du diffusion pion-pion incluant les effets de milieu. Les lignes ondulées schématisent les phénomènes d'interaction du noyau (moment absorbé  $\equiv k - k'$ )

Le lagrangien d'interaction pion-pion (à l'ordre à une boucle) peut être extrait de 1.7 :

$$\mathcal{L}_{4\pi} = \frac{1}{f_\pi^2} \left[ -m_\pi^2 \left( \alpha - \frac{1}{24} \right) \Phi^2 \Phi^2 + \left( \alpha - \frac{1}{6} \right) \Phi^2 \partial_\mu \vec{\Phi} \cdot \partial^\mu \vec{\Phi} + \left( 2\alpha + \frac{1}{6} \right) \vec{\Phi} \cdot \partial_\mu \vec{\Phi} \vec{\Phi} \cdot \partial^\mu \vec{\Phi} \right] \quad (1.9)$$

À l'aide de ce lagrangien il est alors possible de calculer l'amplitude  $T$  de la diffusion pion-noyau. Comme indiqué sur la figure 1.1, il faut *a priori* introduire, dans le cas d'un

noyau, deux moments  $k$  et  $k'$ . Dans le cas d'un gros noyau ou d'un "morceau" de matière nucléaire, par contre la différence  $k - k'$  peut être négligée.

Les calculs donnent [6] :

$$T(q_1^2, q_2^2, t) = \frac{V}{2f_\pi^2} \int \frac{id^4k}{(2\pi)^4} (D_R(k) - D_0(k)) (m_\pi^2 - 2t - \beta (q_1^2 - m_\pi^2 + q_2^2 - m_\pi^2)) \quad (1.10)$$

où  $q_1$  et  $q_2$  sont les moments extérieurs (voir figure 1.1),  $\beta = 1 + 10(\alpha - \frac{1}{6})$  et  $D_R$  est le propagateur retardé du pion dans le milieu. D'autre part, pour un volume  $V$  de matière nucléaire <sup>2</sup> contenant  $A$  nucléons ( $\rho \equiv A/V$ ), la contribution du nuage pionique au commutateur sigma pion-noyau par nucléon est :

$$\Sigma_A^{(\pi)} = \frac{1}{A} \langle A | \int d^3\vec{r} \frac{1}{2} m_\pi^2 \Phi^2 | A \rangle = \frac{m_\pi^2}{2\rho} \langle \Phi^2 \rangle = \frac{3m_\pi^2}{2\rho} \int \frac{id^4k}{(2\pi)^4} (D_R(k) - D_0(k)) \quad (1.11)$$

On voit donc, en comparant les équations 1.10 et 1.11, comment la densité scalaire intervient dans l'interaction d'onde  $s$  pion-noyau.

Dans un deuxième travail, nous avons évalué cette densité scalaire qui se relie au propagateur du pion :

$$\langle \Phi^2 \rangle = 3 \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int \frac{id^4k}{(2\pi)^4} e^{ik_0\epsilon} (D_R(k) - D_0(k)) \quad (1.12)$$

et par voie de conséquence au propagateur de polarisation complet  $\Pi_L$  :

$$\langle \Phi^2 \rangle = 3 \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int \frac{id^4k}{(2\pi)^4} e^{ik_0\epsilon} \left( \frac{1}{k_0^2 - \omega_k^2 + i\eta} \right)^2 \Pi_L \quad (1.13)$$

En utilisant alors une relation de dispersion et en effectuant l'intégrale sur le contour, on parvient au résultat final important [6], à savoir que la densité scalaire de pion est directement reliée à la réponse de spin-isospin longitudinale  $R_L$  :

$$\langle \Phi^2 \rangle = \frac{3\rho}{A} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d\omega \left( \frac{1}{2\omega_k^2(\omega + \omega_k)^2} + \frac{1}{2\omega_k^3(\omega + \omega_k)} \right) R_L(\omega, \mathbf{k}) \quad (1.14)$$

Il est alors possible d'inclure la phénoménologie des secteurs  $p - h$ ,  $\Delta - h$ ,  $2p - 2h$ , etc... pour avoir une estimation précise de  $\langle \Phi^2 \rangle$ . C'est ce que nous allons faire maintenant en prenant de plus en compte l'effet de la température.

Les effets de la température, lorsqu'ils sont combinés aux effets de densité, sont de deux ordres : d'une part sur les pions virtuels des noyaux et d'autre part sur les pions du bain thermique ( $\equiv$  excités thermiquement). En première approximation, on peut écrire :

$$\langle \langle \Phi^2 \rangle \rangle(\rho, T) = \langle \Phi^2 \rangle_T(\rho = 0) + \langle \Phi^2 \rangle_\rho(T = 0). \quad (1.15)$$

---

<sup>2</sup>En fait, la différence entre le noyau et la matière nucléaire provient principalement de la distorsion du nuage pionique entourant le nucléon du fait de la présence des autres nucléons. L'effet de cette distorsion a déjà été pris en compte dans [7]. La conclusion est que le secteur du nucléon ne contribue pas de manière significative (les corrélations tensorielles compensant presque exactement l'effet du blocage de Pauli) mais que le secteur du delta provoque une augmentation d'environ 5 MeV du commutateur sigma.

ce qui revient, par exemple, à ignorer que le pion est plus facilement excitable à densité finie (dans la matière nucléaire, le pion devient une quasi-particule d'énergie inférieure à celle du pion libre) ou encore, pour le deuxième terme, à considérer que la température n'a aucun effet sur la densité pionique dans le milieu. Dans une approche réaliste, il apparaît donc qu'il est nécessaire de tenir compte de l'influence mutuelle de la densité et de la température pour le calcul de la quantité  $\langle \Phi^2 \rangle$ .

Considérons tout d'abord le cas de la matière nucléaire à température nulle. Dans ce cas, les fonctions réponses peuvent être calculées en résolvant les équations RPA (approximation des anneaux en réalité) pour la polarisation :  $\Pi = \Pi^0 + \Pi^0 \mathcal{V} \Pi$ .  $\Pi^0$  est la polarisation à l'ordre zéro calculée dans [8].  $\mathcal{V}$  représente l'interaction particule-trou à laquelle on ajoute la répulsion à courte portée *via* un paramètre de Landau-Migdal  $g'$  :

$$\mathcal{V} = \frac{v^2(Q^2)}{\vec{q}^2} \left( \frac{\vec{q}^2}{Q^2 - m_\pi^2} + g' \right). \quad (1.16)$$

Les valeurs de  $g'$ , qui diffèrent suivant les différents canaux, sont extraites empiriquement de données expérimentales. Ainsi, des expériences sur les résonances géantes de Gamow-Teller nous donnent  $g'_{NN} \simeq 0.7$  et  $g'_{N\Delta} \simeq 0.5$  tandis des résultats de diffusion sur les atomes mésiques impliquent  $g_{\Delta\Delta}$  de l'ordre de 0.5 également.

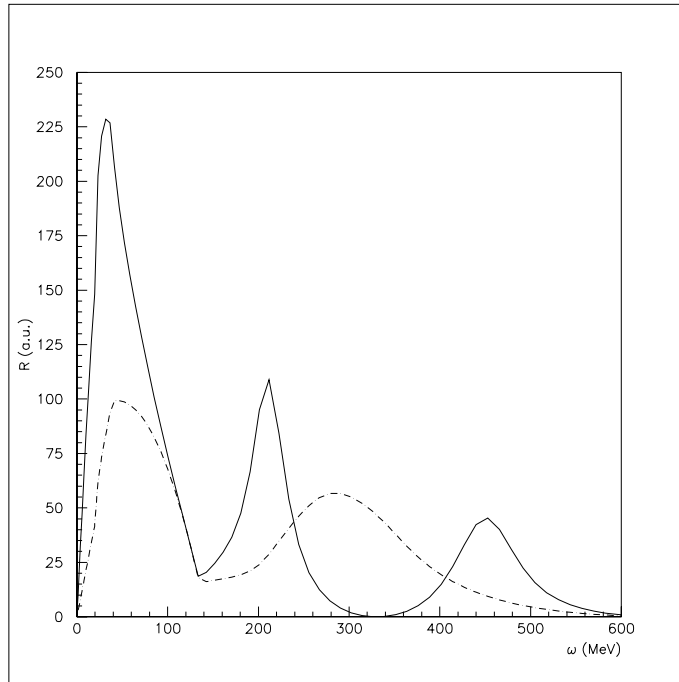


FIG. 1.2 – Réponse par nucléon à densité nucléaire normale en fonction de l'énergie pour  $q = 300$  MeV. Les lignes en "points-tirets" et continue représentent respectivement la réponse à l'ordre zéro et la réponse RPA.

À l'aide de ces valeurs, nous avons calculé puis représenté (figure 1.2) les réponses nue et resommée pour une valeur du moment  $q = 300$  MeV et pour  $\rho = \rho_0$ . La ligne tiretée (réponse nue) présente deux pics, un premier à basse énergie ( $\omega \simeq 50$  MeV) et un second à plus haute énergie ( $\omega \simeq 300$  MeV) correspondant respectivement au canal  $Nh$  et au canal  $\Delta h$ . Une fois resommée (ligne pleine), la réponse présente un accroissement notable du pic à basse énergie dû au caractère attractif de l'interaction  $p - h$  ainsi qu'un dédoublement du pic à haute énergie. Ce dernier élément illustre le fait que dans le milieu le pion et le  $\Delta$  deviennent des excitations collectives, des quasi-particules, possédant chacune leur propre structure.

À température finie, il faut remplacer les distributions de Heavyside pour les fermions par des distributions de Fermi-Dirac. Sans entrer plus dans les détails, (pour plus de précisions, voir [9]), il est cependant relativement facile de comprendre le résultat obtenu, représenté figure 1.3 : en effet, au fur et à mesure que la température augmente (ligne tiretée :  $T = 0$  ; ligne pleine :  $T = 50$  MeV ; ligne pleine épaisse :  $T = 150$  MeV) les pics à basse énergie diminuent en intensité et augmentent en largeur de telle sorte que la structure initiale disparaît. Cela implique bien évidemment également, par intégration sur  $\omega$  et  $q$ , une réduction du commutateur sigma quand  $T$  augmente.

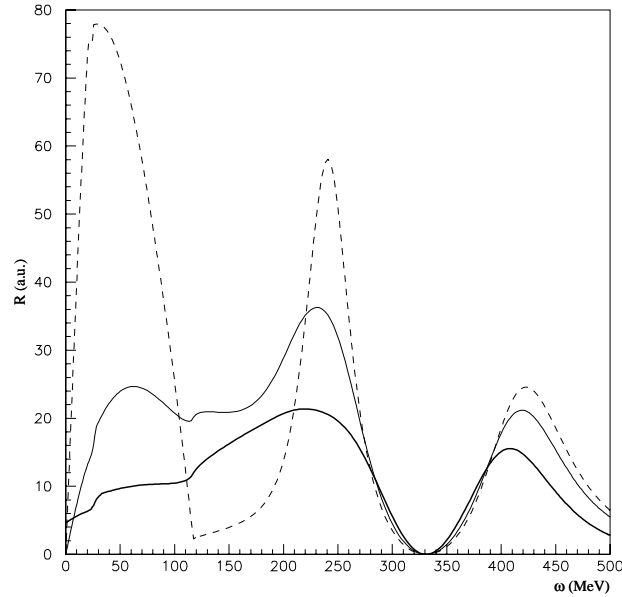


FIG. 1.3 – Réponse à une densité  $\rho = \rho_0/2$  en fonction de l'énergie pour un moment  $q = 300$  MeV pour trois températures différentes :  $T = 0$  (ligne tiretée),  $T = 50$  MeV (ligne continue),  $T = 150$  MeV (ligne continue épaisse).

Comme indiqué au début du paragraphe, les effets de la température se manifestent non seulement au niveau des pions virtuels du nuage nucléonique mais également au niveau

des pions thermiquement excités dans le milieu. Cette dernière contribution à la densité scalaire s'écrit [9] :

$$\frac{\langle \Phi^2 \rangle_T}{2f_\pi^2} = \frac{3}{2f_\pi^2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d\omega n(\omega) \left( -\frac{2}{\pi} \right) \text{Im} D(\omega, \vec{q}) \quad (1.17)$$

L'énergie  $\omega$  des quasi-pions étant inférieure à l'énergie des pions libres, le facteur  $n(\omega)$  va donc impliquer une augmentation de  $\langle \Phi^2 \rangle_T$  avec la température. Le résultat final apparaît sur la figure 1.4. Les deux effets antagonistes décrits précédemment entrent en compétition et sont responsables de la forme parabolique observée (ronds noirs). Par ailleurs, afin de quantifier l'influence mutuelle de la température et de la densité, nous avons également représenté (cercles blancs) l'approximation correspondant à la formule 1.15. La conclusion est que les écarts, suivant les domaines de température et de densité considérés, sont souvent négligeables et dans le pire des cas, d'environ 15%.

Nous avons donc vu dans ce paragraphe le rôle de la densité scalaire de pions dans le processus de restauration partielle de la symétrie chirale à température et densité finies. Nous allons maintenant nous concentrer sur un autre aspect du problème de la restauration de la symétrie, suscité par les expériences de la collaboration CHAOS qui a obtenu des résultats *a priori* surprenants en observant des réactions  $A(\pi, 2\pi)$ . Le problème central est dans ce cas de déterminer l'influence du milieu nucléaire sur l'interaction pion-pion (et plus précisément dans le canal scalaire-isoscalaire). Ainsi que nous allons le voir, les travaux réalisés ont conduit au fait que les données pouvaient être interprétées comme des manifestations expérimentales de restauration progressive de la symétrie chirale.

### 1.3 Interaction pion-pion à densité finie

L'étude de la modification de l'interaction pion-pion à densité finie dans le canal scalaire-isoscalaire est importante à plus d'un titre. Tout d'abord, elle est intimement reliée au problème de la saturation de la matière nucléaire puisqu'une part importante de l'interaction nucléon-nucléon est due à l'échange de deux pions corrélés. Par ailleurs, ainsi que nous l'avons déjà mentionné, cette étude s'inscrit dans le cadre général de la restauration de la symétrie chirale qui doit se produire à densité finie. Cependant, avant de parvenir à une restauration complète, c'est-à-dire à un état dans lequel les partenaires chiraux vont être dégénérés, nous allons assister à une restauration progressive de la symétrie. Cela va se traduire par un adoucissement du mode collectif scalaire-isoscalaire, c'est-à-dire du méson sigma. La fonction spectrale de celui-ci doit donc augmenter de manière significative au niveau de l'énergie de seuil du canal de désintégration en deux pions. Ce phénomène traduit en fait l'apparition de fluctuations du condensat de quarks près de la transition de phase [10].

Les premiers effets de milieu à avoir été proposés correspondent à la modification du propagateur à deux pions et de l'interaction pion-pion. L'origine de cette modification provenait de l'adoucissement de la relation de dispersion des pions *via* le couplage d'onde  $p$  aux états  $p - h$  et  $\Delta - h$ . Ces modes pioniques collectifs impliquaient en effet une

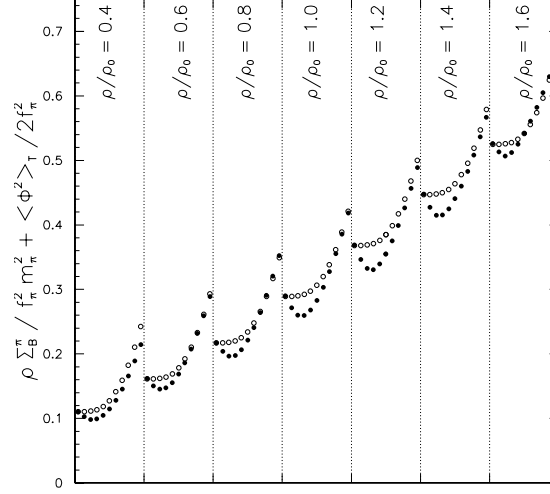


FIG. 1.4 – Somme des deux contributions (nuage de pions virtuels et pions thermiques (ronds noirs) et approximation d’addition simple des deux effets (Eq. (1.15)). À chaque colonne correspond une densité. Cette densité augmente de  $0.4\rho_0$  à  $1.6\rho_0$  en allant de gauche à droite. Dans chaque colonne, les points correspondent à des températures qui vont de  $0.05m_{\pi}$  à gauche jusqu’à  $1.05m_{\pi}$  à droite par pas de  $0.10m_{\pi}$ .

accumulation de force au niveau du seuil à deux pions dans le canal scalaire-isoscalaire [11]. Cette nouvelle répartition de la force a permis de fournir une explication [12], au moins partielle, des données  $\pi - 2\pi$  sur plusieurs noyaux obtenues par la collaboration CHAOS à TRIUMF [13], le processus physique sous-jacent étant représenté sur la figure 1.5. Même si ces résultats ont pu être légèrement remis en cause en prenant en compte les effets d’absorption de pions [14], il n’en reste pas moins que les effets directement liés à la restauration partielle de la symétrie chirale, qui impliquaient une diminution de la masse du sigma, devaient être inclus simultanément avec les effets d’onde  $p$  afin de parvenir à un meilleur accord avec les données expérimentales. Une première tentative pour combiner les deux effets est présentée dans la référence [15] : il s’agissait alors d’introduire dans le modèle sigma linéaire une diminution de la masse du sigma *via* une loi d’échelle dite de Brown et Rho. Le résultat était que les deux effets combinés augmentaient considérablement la force au seuil (facteur quatre). Dans ce paragraphe, nous allons présenter une autre approche, permettant de prendre en compte également les deux effets, à partir du modèle de Nambu-Jona-Lasinio [16]. La stratégie va être de générer dans un premier temps, un potentiel pion-pion, formellement identique à celui du modèle sigma linéaire, à partir du modèle NJL. La différence fondamentale résidera dans le fait que non seulement les paramètres  $m_{\sigma}$ ,  $m_{\pi}$ ,  $f_{\pi}$  dépendent de la densité mais également les couplages  $\sigma\pi\pi$  et  $4\pi$ . Dans un second temps, nous incorporerons la phénoménologie d’onde  $p$  de manière habituelle. Dit autrement, tout

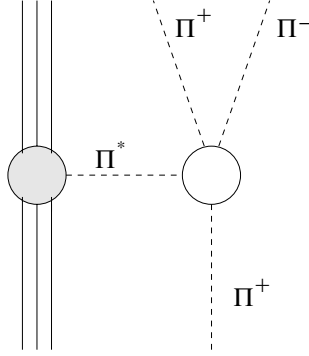


FIG. 1.5 –

ce qui concerne la restauration de la symétrie chirale ( $m_\sigma, m_\pi, f_\pi$ , potentiel  $\pi - \pi$  à basse énergie) sera calculé dans le cadre du modèle NJL tandis que les modes pioniques collectifs, impossibles à décrire dans le même formalisme (les versions les plus simples du modèle NJL n'incluent pas les corrélations à courte portée), seront pris en compte à travers la phénoménologie habituelle.

De manière explicite, on considère la version  $SU(2)$  du modèle NJL :  $\mathcal{L} = \bar{\psi}(i\partial - m)\psi + g[(\bar{\psi}\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\tau_j\psi)^2]$  où  $\psi$  est associé au champ des quarks et  $m$  est la masse nue. À densité finie, l'équation du gap permettant de générer la masse du quark constituant  $M$  s'écrit :

$$M = m + 4N_c N_f g \int_{k_F}^{\Lambda} \frac{k^2 dk}{2\pi^2} \frac{M}{E} \quad (1.18)$$

où  $\Lambda$  est un cut-off tridimensionnel et  $N_c$  ( $N_f$ ) le nombre de couleurs (saveurs). Dans le modèle NJL, les mésons sont construits comme des modes collectifs  $q\bar{q}$  grâce au formalisme de la RPA. Il est alors possible de générer le pion et le sigma et d'ajuster ainsi les trois paramètres du modèle ( $m, \Lambda, g$ ) de manière à reproduire les valeurs dans le vide suivantes :  $f_\pi = 93$  MeV,  $m_\pi = 139$  MeV et  $m_\sigma = 1$  GeV. Ayant construit le pion et le sigma, nous avons ensuite adapté à densité finie la méthode développée dans [17] afin de déterminer les couplages  $\pi\pi\sigma$  et  $4\pi$ . En pratique, nous avons calculé les diagrammes représentés figure 1.6 pour des pions extérieurs sur couche et en faisant l'approximation (justifiée numériquement [16]) que le moment circulant dans la boucle de quarks est nul. Nous sommes alors parvenus aux relations suivantes :  $\lambda_{4\pi} \equiv \lambda = (m_\sigma^2 - m_\pi^2)/2f_\pi^2$  et  $\lambda_{\sigma\pi\pi} = \lambda f_\pi$ , relations formellement équivalentes au modèle sigma linéaire mais avec des valeurs  $m_\sigma, m_\pi, f_\pi$  dépendant de la densité ! Nous avons alors utilisé les résultats du modèle sigma linéaire pour calculer l'amplitude de diffusion pion-pion  $T$  (dans le canal scalaire-isoscalaire) et le propagateur du sigma  $D_\sigma$ . De manière explicite, pour une énergie  $E$  de la paire de pions, nous avons, dans le centre de masse :

$$\langle \mathbf{k}, -\mathbf{k} | T(E) | \mathbf{k}', -\mathbf{k}' \rangle = v(k)v(k') \frac{6\lambda(E^2 - m_\pi^2)}{1 - 3\lambda\Sigma(E)} D_\sigma(E) \quad (1.19)$$

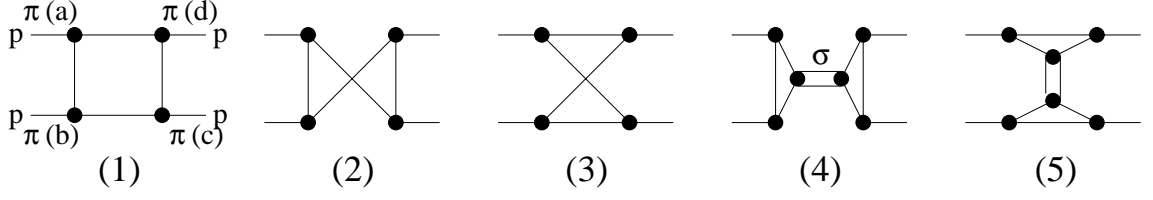


FIG. 1.6 – Diagrammes en boîte et d'échange de méson  $\sigma$  contribuant à la diffusion  $\pi\pi$  (a,b,c et d sont des indices d'isospin).

et

$$D_\sigma(E) = \left( E^2 - m_\sigma^2 - \frac{6\lambda^2 f_\pi^2 \Sigma(E)}{1 - 3\lambda \Sigma(E)} \right)^{-1}. \quad (1.20)$$

Dans ces équations,  $v$  est un facteur de forme nécessaire pour reproduire les déphasages et la longueur de diffusion et  $\Sigma(E)$  est la self-énergie du  $\sigma$ . À ce stade, les effets de restauration de la symétrie chirale sont incorporés dans la modification des masses du pion, du sigma et de  $f_\pi$  tandis que les effets d'onde  $p$  sont pris en compte dans la boucle à deux pions :

$$\Sigma(E) = \int \frac{d\mathbf{q}}{(2\pi)^3} v(q) \int \frac{i dq_0}{2\pi} D_\pi(\mathbf{q}, q_0) D_\pi(-\mathbf{q}, E - q_0). \quad (1.21)$$

Le résultat concernant la fonction spectrale du sigma est représenté figure 1.7. Nous constatons que, déjà à densité normale, le pic au niveau du seuil est trois fois plus important lorsque les effets de restauration de la symétrie chirale sont incorporés (figure de droite) par rapport aux effets d'onde  $p$  seuls (figure de gauche). À une densité de l'ordre de  $0.5\rho_0$ , qui est sans doute proche de la valeur à laquelle se déroule les expériences de la collaboration CHAOS, on assiste à une modification relativement importante de la forme de la fonction spectrale à basse énergie, ce qui va évidemment dans le sens d'une explication possible des données expérimentales.

## 1.4 Conclusion

Dans cette partie nous nous sommes intéressés aux processus de restauration de la symétrie chirale à température et/ou densité finies. Une quantité essentielle pour suivre cette restauration progressive est évidemment le paramètre d'ordre  $\langle \bar{q}q \rangle$ , lui-même relié à la densité scalaire de pions. Cette densité peut se calculer dans un gaz de pions chauds à densité baryonique nulle ou, dans un milieu nucléaire à température nulle, *via* la réponse de spin-isospin longitudinale. Dans le deuxième cas, les pions virtuels du nuage nucléonique remplacent les pions thermiquement excités. En prenant en compte l'influence mutuelle de la température et de la densité dans le calcul de  $\langle \Phi^2 \rangle$ , nous avons alors montré que les effets mis en jeu se compensaient très largement.

Par ailleurs, la restauration de la symétrie chirale implique qu'un mode collectif scalaire-isoscalaire doit être progressivement amolli lorsque la densité augmente pour rejoindre



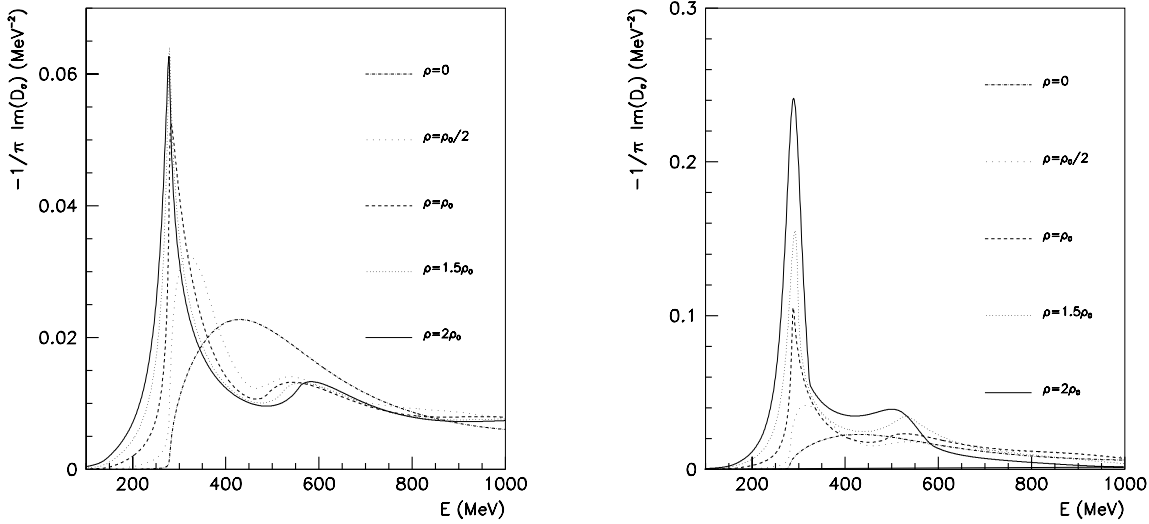


FIG. 1.7 – Fonction spectrale du méson sigma pour différentes densités  $(0, 0.5, 1, 1.5, 2 \rho/\rho_0)$ . À gauche : uniquement les effets d’onde  $p$ . À droite : effets d’onde  $p$  et de restauration de la symétrie chirale.

son partenaire chiral, le pion, à la restauration totale. Ceci se traduit alors par des effets précurseurs pré-critiques dans la distribution de force pion-pion amplifiant ainsi la structure à  $2m_\pi$ . Il s’agit là d’un effet complémentaire au couplage d’onde  $p$  du pion, lié à la physique des pions mous, et que nous avons pu mettre en évidence en partant d’un modèle de quarks, le modèle de Nambu-Jona-Lasinio.

Enfin, terminons cette partie en mentionnant que nous nous sommes limités au cas de  $SU(2)$  mais que des travaux ont été également effectués sur les kaons, permettant ainsi de reproduire des données expérimentales du GSI [18]. Le problème central dans ce cas est de déterminer précisément l’évolution de la masse des particules étranges en fonction de la densité afin de comprendre les sections efficaces expérimentales de productions de kaons en collisions relativistes.

---

## Bibliographie

---

- [1] E. G. Drukarev and E. M. Levin. The qcd sum rules and nuclear matter. 2. *Nucl. Phys.*, A511 :679–700, 1990.
- [2] T. D. Cohen, R. J. Furnstahl, and D. K. Griegel. Quark and gluon condensates in nuclear matter. *Phys. Rev.*, C45 :1881–1893, 1992.
- [3] M. Dey, V. L. Eletsky, and B. L. Ioffe. Mixing of vector and axial mesons at finite temperature : an indication towards chiral symmetry restoration. *Phys. Lett.*, B252 :620–624, 1990.
- [4] R. Rapp and J. Wambach. Chiral symmetry restoration and dileptons in relativistic heavy-ion collisions. *Adv. Nucl. Phys.*, 25 :1, 2000.
- [5] G. Chanfray, J. Delorme, and M. Ericson. Chiral symmetry restoration and parity mixing. *Nucl. Phys.*, A637 :421–432, 1998.
- [6] G. Chanfray and D. Davesne. Pion interaction in nuclear matter and chiral symmetry restoration. *Nucl. Phys.*, A646 :125–138, 1999.
- [7] G. Chanfray and M. Ericson. Quark condensate in the nuclear medium. *Nucl. Phys.*, A556 :427–438, 1993.
- [8] J. Delorme and P. A. M. Guichon. Evidence for the nuclear pionic mode in the (he-3, t) reaction. *Phys. Lett.*, B263 :157–163, 1991.
- [9] G. Chanfray, D. Davesne, J. Delorme, M. Ericson, and J. Marteau. Pion scalar density and chiral symmetry restoration at finite temperature and density. *Eur. Phys. J.*, A8 :283–289, 2000.
- [10] T. Hatsuda, T. Kunihiro, and H. Shimizu. Precursor of chiral symmetry restoration in the nuclear medium. *Phys. Rev. Lett.*, 82 :2840–2843, 1999.
- [11] Z. Aouissat, R. Rapp, G. Chanfray, P. Schuck, and J. Wambach. S wave pi pi correlations in dense nuclear matter. *Nucl. Phys.*, A581 :471–492, 1995.
- [12] P. Schuck et al. In-medium pi pi correlations in the \*sigma-meson\*-channel. 1998.
- [13] F. Bonutti et al. A dependence of the (pi+,pi+ pi+-) reaction near the 2m(pi) threshold. *Phys. Rev. Lett.*, 77 :603–606, 1996.
- [14] M. J. Vicente Vacas and E. Oset. Scalar isoscalar pion pairs in nuclei and the a(pi,pi)x reaction. *Phys. Rev.*, C60 :064621, 1999.
- [15] Z. Aouissat, G. Chanfray, P. Schuck, and J. Wambach. Dropping sigma-meson mass and in-medium s-wave pi pi correlations. 1999.

- [16] D. Davesne, Y. J. Zhang, and G. Chanfray. Medium modification of the pion pion interaction at finite density. *Phys. Rev.*, C62 :024604, 2000.
- [17] E. Quack, P. Zhuang, Yu. Kalinovsky, S. P. Klevansky, and J. Hufner. pi - pi scattering lengths at finite temperature. *Phys. Lett.*, B348 :1–6, 1995.
- [18] W. Cassing, E. L. Bratkovskaya, U. Mosel, S. Teis, and A. Sibirtsev. Kaon versus antikaon production at sis energies. *Nucl. Phys.*, A614 :415–432, 1997.

# Publication 1



ELSEVIER

Nuclear Physics A 646 (1999) 125–138

NUCLEAR  
PHYSICS A

# Pion interaction in nuclear matter and chiral symmetry restoration

Guy Chanfray, Dany Davesne

*IPN-Lyon, 43 Bd. du 11 Novembre 1918, F-69622 Villeurbanne Cédex, France*

Received 6 July 1998; revised 17 November 1998; accepted 18 November 1998

---

## Abstract

This paper is devoted to the interplay between p-wave, s-wave pion–nucleon/nucleus interaction and in-medium pion–pion interaction with special emphasis on the role of the nuclear pionic scalar density driving a large amount of chiral symmetry restoration. In particular we show that the  $\pi NN$  coupling constant and the Goldberger–Treiman relation are preserved in the nuclear medium under certain conditions. We also discuss the related problem of the in-medium pion–pion strength function. © 1999 Elsevier Science B.V.

PACS: 12.39.Fe; 24.85.+p; 25.80.Hp

---

## 1. Introduction

The collective pionic modes originating mainly from the coupling of the pion to delta–hole configuration have raised considerable interest. As proposed in [1] and confirmed by detailed calculations [2,3], the direct experimental evidence of their existence even at peripheral nuclear density is provided by charge exchange reactions [4,5]. These collective modes, sometimes called pisobars, are expected to play a prominent role in highly excited hadronuclear matter produced in relativistic heavy ion collisions. Indeed, it has been predicted [6–8] that they may significantly affect the rho meson mass distribution at large density. As shown in [9,10], they are able to explain an important part of the excess of dilepton production rate in the 500 MeV invariant mass region observed by the CERES [11] and HELIOS [12] collaboration at CERN/SPS. In addition, an important reshaping of the pion–pion interaction in the scalar–isoscalar channel (“sigma” channel), which produces a sizeable accumulation of strength near or even below the two-pion threshold, has been predicted [13]. A detailed discussion of this problem has been given in [14]. In particular, the influence of chiral symmetry constraints, stopping

the sub-threshold invasion of strength due to the coupling of the pion to nucleon–hole states, have been extensively investigated. It was soon realized that this medium effect is of considerable importance for the still open problem of nuclear saturation since an important part of the nucleon–nucleon attraction comes from correlated two-pion exchange and several papers have brought extremely interesting results [15–17]. However, this in-medium modification of the  $NN$  interaction is obviously very sensitive to the precise low mass shape of the in-medium  $\pi\pi$  strength function. In that respect Oset et al. have drawn the attention on vertex corrections on in-medium pion–pion interaction imposed by the standard chiral Lagrangian [18]. It is thus plausible that some strength may appear below the two-pion threshold at finite density.

One of the common features of the problems mentioned above is the interplay between p-wave pion–nucleon/nucleus interaction, s-wave pion–nucleon/nucleus interaction and in-medium pion–pion interaction all being related to the amount of chiral symmetry restoration in the nuclear medium. The aim of this paper is to clarify this important question in a unified scheme based on the standard chiral Lagrangian treating simultaneously pion propagation, pion–pion interaction and chiral symmetry restoration in the nuclear medium. Let us recall that, to first order in density, the evolution of the quark condensate is given by the simple expression

$$\frac{\langle \bar{q}q(\rho) \rangle}{\langle \bar{q}q(0) \rangle} = 1 - \frac{\rho \Sigma_N}{f_\pi^2 m_\pi^2}, \quad (1)$$

where  $\Sigma_N \simeq 45$  MeV is the pion–nucleon sigma commutator. Putting the numbers one finds a 30% restoration at normal nuclear matter density or in the interior of heavy nuclei [19]. This result becomes exact once the pion–nucleon sigma term is replaced by the full pion–nucleus sigma term per nucleon  $\Sigma_A$  [20]. Pions are expected to play a crucial role in the restoration process. For instance the pion cloud gives about 2/3 of the pion–nucleon sigma term [21,22]. In the nuclear medium its contribution to the  $\pi$ –nucleus sigma term  $\Sigma_A^{(\pi)} = m_\pi^2 \langle \Phi^2 \rangle / 2\rho$  is modified by pion exchange effects, slightly accelerating chiral symmetry restoration [20]. It is hardly conceivable that such a large effect driven to a large extent by the pion scalar density  $\langle \Phi^2 \rangle$  does not show up in some well-chosen observables. Indeed it has been demonstrated that this pion scalar density governs the axial vector mixing and the associated quenching of coupling constants such as  $g_A$  and  $f_\pi$  in the nuclear medium [23]. One of the main purposes of this paper is to show other examples of the role of  $\langle \Phi^2 \rangle$  concerning various aspects of the pion interaction in the nuclear medium.

In Section 2 we show how the pion scalar density  $\langle \Phi^2 \rangle$  may a priori renormalize the  $\pi NN$  coupling in the nuclear medium. Starting from the in-medium modified pion–pion interaction, we discuss in Section 3 how this scalar density governs the s-wave  $\pi$ –nucleus interaction through the interaction of the external pion with the nuclear pion cloud; we also give an explicit expression (which slightly differs from Ref. [20]) of the pion–nucleus sigma commutator in terms of the full longitudinal spin–isospin response function. We discuss the consequences on the pion propagator in Section 4, showing in particular that the p-wave  $\pi NN$  coupling constant is actually unmodified in the medium

to one pion loop order. Finally we demonstrate in Section 5 that the presence of the  $3\pi NN$  interaction cannot modify the pion-pion strength function at finite density.

## 2. The chiral Lagrangian

All the results will be derived within a chiral  $SU(2) \times SU(2)$  non-linear Lagrangian with an explicit chiral symmetry breaking piece containing a nucleon field  $N$  and a isovector pion field  $\Phi$  embedded in the  $2 \times 2$  matrix

$$U = \xi^2 = e^{i\tau \cdot \hat{\Phi} F(X)}, \quad X^2 = \frac{\Phi^2}{f_\pi^2}, \quad F(X) = X + \alpha X^3 + \alpha' X^5 + \dots, \quad (2)$$

where  $F(X)$ , which is an odd function of  $X$ , defines the particular non-linear representation. The most usual choices are the PCAC choice ( $F = \arcsin X$ ,  $\alpha = 1/6$ ), the Weinberg choice ( $\alpha = -1/12$ ) and the choice  $F = X$  commonly used in the chiral perturbation expansion. Since the physical observables should not depend on the representation we will not specify it as a consistency check of the results. In the following we will treat the soft pion interaction to one pion loop order and a practical consistency test will be the independence of our results with respect to the parameter  $\alpha$ . The Lagrangian is

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \frac{f_\pi^2}{4} \text{tr} \partial_\mu U \partial^\mu U^\dagger + \frac{1}{4} f_\pi^2 m_\pi^2 \text{tr} (U + U^\dagger) + i \bar{N} \gamma^\mu \partial_\mu N - M_N \bar{N} N \\ & + \bar{N} \gamma_\mu \mathcal{V}_c^\mu N + g_A \bar{N} \gamma_\mu \gamma^5 \mathcal{A}_c^\mu N \end{aligned} \quad (3)$$

with

$$\mathcal{V}_c^\mu = \frac{i}{2} (\xi \partial_\mu \xi^\dagger + \xi^\dagger \partial_\mu \xi), \quad \mathcal{A}_c^\mu = \frac{i}{2} (\xi \partial_\mu \xi^\dagger - \xi^\dagger \partial_\mu \xi). \quad (4)$$

To lowest order the pion-pion interacting Lagrangian is

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{4\pi} = & \frac{1}{f_\pi^2} \left[ -m_\pi^2 \left( \alpha - \frac{1}{24} \right) \Phi^2 \Phi^2 + \left( \alpha - \frac{1}{6} \right) \Phi^2 \partial_\mu \Phi \cdot \partial^\mu \Phi \right. \\ & \left. + \left( 2\alpha + \frac{1}{6} \right) \Phi \cdot \partial_\mu \Phi \Phi \cdot \partial^\mu \Phi \right] \end{aligned} \quad (5)$$

The  $\pi NN$  and the  $3\pi NN$  pieces are

$$\mathcal{L}_{\pi NN} = \frac{g_A}{f_\pi} \bar{N} \gamma^\mu \gamma^5 \frac{\tau}{2} \cdot \partial_\mu \Phi N, \quad (6)$$

$$\mathcal{L}_{3\pi NN} = \frac{g_A}{f_\pi^3} \bar{N} \gamma^\mu \gamma^5 \frac{\tau}{2} \cdot \left[ \left( \alpha - \frac{1}{6} \right) \Phi^2 \partial_\mu \Phi + \left( 2\alpha + \frac{1}{6} \right) \Phi \Phi \cdot \partial_\mu \Phi \right] N. \quad (7)$$

It follows that, to one pion loop order, the in-medium effective  $\pi NN$  Lagrangian becomes

$$\mathcal{L}_{\pi NN}^{\text{eff}} = \frac{g_A}{f_\pi} \left( 1 + \beta \frac{\langle \Phi^2 \rangle}{6f_\pi^2} \right) \bar{N} \gamma^\mu \gamma^5 \frac{\tau}{2} \cdot \partial_\mu \Phi N, \quad \beta = 1 + 10 \left( \alpha - \frac{1}{6} \right). \quad (8)$$

In principle the expectation value of  $\Phi^2$  renormalizing a nucleon vertex does not correspond to its averaged value due to the presence of short-range correlations. This effect has been discussed in a recent paper [23] and found to be moderate because the scalar pion cloud of a given nucleon is mainly outside of the correlation hole. In the following, we disregard this effect of short-range correlations and calculate the pion loop  $\langle \Phi^2 \rangle$  with the in-medium pion propagator including the effect of the p-wave interaction from  $\mathcal{L}_{\pi NN}$ . The retarded pion propagator  $D_R$  and the time-ordered pion propagator  $D_R^{++}$  have the form

$$\begin{aligned} D_R(q) &= (q_0^2 - \omega_q^2 - q^2 \tilde{\Pi}^0(q_0, \mathbf{q}))^{-1}, \\ D_R^{++}(q) &= (1 + f(q_0)) D_R(q) - f(q_0) D_R^*(q), \end{aligned} \quad (9)$$

from which we get

$$\begin{aligned} \langle \Phi^2 \rangle &= 3 \int \frac{id^4 k}{(2\pi)^4} e^{ik_0\eta_+} D_R^{++}(k) \\ &= 3 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int_0^\infty dE \left( -\frac{2E}{\pi} \text{Im} D_R(E, \mathbf{k}) \right) \frac{1 + 2f(E)}{2E}, \end{aligned} \quad (10)$$

where the second form incorporating the thermal factor ( $f(E) = (\exp(\beta E) - 1)^{-1}$ ) can be used at finite temperature if needed. In the previous expressions the contribution of the free space propagator is understood to be always subtracted. In the following we will work most of the time at zero temperature and make no distinction between time-ordered and retarded propagators which coincide for positive frequencies. All the self-energies and related quantities will be expressed in terms of time-ordered propagators as usual. It is nevertheless interesting to remark that most of the formal results will be valid at finite temperature by replacing the energy integral by Matsubara frequencies summation, propagators by Matsubara propagators and finally taking the analytical continuation ( $i\omega_n \rightarrow \omega + i\eta$ ) to obtain the corresponding self-energy. With this Lagrangian, the pion polarizability is  $\tilde{\Pi}^0 = (g_A/2f_\pi)^2 U_N$  where  $U_N$  is nothing but the standard nucleonic Lindhardt function (with an explicit factor 4 for spin-isospin). However, to make contact with the well-established phenomenology of nuclear collective pionic modes, one can incorporate as usual the effect of the delta as well as the screening effect from short-range correlations ( $g'$  parameters); details can be found in many papers, see e.g. Refs. [6,14].

### 3. s-wave pion–nucleus interaction and pion–nucleus sigma commutator

In free space, the  $\pi\pi$  interaction potential in the  $I = 0$  channel can be straightforwardly obtained from  $\mathcal{L}_{4\pi}$



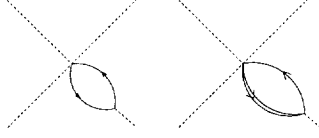


Fig. 1. Vertex correction to the  $\pi\pi$  interaction in the medium through  $p$ - $h$  and  $\Delta$ - $h$  polarization bubbles which may contain the screening effect due to short-range correlation ( $g'$  parameters).

$$\langle q_a q_b | \mathcal{M}_0 | q_c q_d \rangle = \frac{1}{f_\pi^2} \left( m_\pi^2 - 2s + \beta \sum_{i=a}^d (m_\pi^2 - q_i^2) \right), \quad \beta = 1 + 10 \left( \alpha - \frac{1}{6} \right), \tag{11}$$

where  $s = (q_a + q_b)^2 = (q_c + q_d)^2$  is the center of mass energy of the pion pair. For on-shell pions ( $q_i^2 - m_\pi^2 = 0$ ) the  $\alpha$ -dependent piece proportional to the inverse pion propagators disappears as it should. When two pions are soft (i.e.  $q_a = q_c = 0$ ), in the PCAC representation ( $\alpha = 1/6$ ), this amplitude satisfies the soft pion theorem

$$\mathcal{M}_0(s = u = m_\pi^2, t = 0) = \frac{m_\pi^2}{f_\pi^2} = \frac{\Sigma_{\pi\pi}}{f_\pi^2}, \tag{12}$$

where  $\Sigma_{\pi\pi} = m_\pi^2$  is the pion–pion sigma commutator (with non-relativistic normalization for pion states its value is  $m_\pi/2$ ). This result has to be compared with the Weinberg results for on-shell pions at threshold  $\mathcal{M}_0(s = 4m_\pi^2, u = t = 0) = -7m_\pi^2/f_\pi^2$ . The very important practical consequence of these chiral constraints is that the potential, although attractive in the threshold region, has to become repulsive somewhere below, thus preventing the invasion of strength and s-wave pion pair condensation in the nuclear medium [14].

In the medium this pion–pion potential receives vertex corrections depicted in Fig. 1, which can be calculated from  $\mathcal{L}_{\pi NN}$  and  $\mathcal{L}_{3\pi NN}$ . For a zero momentum pion pair ( $\mathbf{P} = 0$ ), the effective  $I = 0$  in-medium pion–pion potential takes the very simple form

$$\langle q_a q_b | \mathcal{M}_0^{\text{eff}} | q_c q_d \rangle = \frac{1}{f_\pi^2} \left[ m_\pi^2 - 2s + \beta \sum_{i=a}^d (m_\pi^2 - q_i^2 + q_i^2 \tilde{\Pi}^0(\omega_i, \mathbf{q}_i)) \right]. \tag{13}$$

Hence, the effect of the vertex corrections depending on the p-wave pion polarizabilities at each pion leg is to make the quasi-potential representation independent (i.e.  $\alpha$ -independent) for on-shell quasi-pions satisfying  $q_i^2 - m_\pi^2 - q_i^2 \tilde{\Pi}^0(\omega_i, \mathbf{q}_i) = 0$ .

The s-wave isoscalar pion scattering amplitude in the medium receives a contribution from the interaction of the external pions with the pion cloud. Although this pion cloud is created by nucleonic sources in the medium, we can first calculate this amplitude by considering the scattering of external pions on the pion loop formally described by the full pion propagator  $D_R$ . To calculate this  $\pi$ -nuclear amplitude, we first consider a finite nucleus. In such a case, momentum conservation is lost and the pion propagator depends on two external momenta  $k$  and  $k'$  (see Fig. 2) instead of only one in nuclear matter. Let us call  $q_1$  and  $q_2$  the momenta of the incoming and outgoing pions. Since

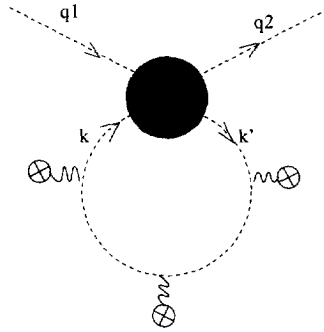


Fig. 2. Pion scattering on the nuclear pion cloud. The black circle represents the in-medium  $\pi$ - $\pi$  scattering amplitude ( $q_1 + k = q_2 + k'$ ). The wiggly lines represent the interaction with the nucleus allowing absorption of the momentum transfer  $k - k'$ .

we are interested in the isoscalar amplitude, both external pions are labeled by the same isospin index  $a$  and let us call  $c$  the isospin index of the virtual pions from the pion cloud. The scattering process is depicted in Fig. 2 where the black circle represents the  $\pi\pi$  interaction with possible medium modifications. One can notice that the momentum conservation implies that  $k' = k + q_1 - q_2$ .

Now, in the limit of a large nucleus or in a piece of nuclear matter with volume  $V$ , one can neglect the  $k - k'$  dependence of the pion propagator which can be considered as absorbed by the nucleus as shown in Fig. 2. Hence the pion propagator depends only on one momentum corresponding to the average momentum  $(k + k')/2$  as, for instance, it is the case in semi-classical approach. Hence we obtain

$$\langle q_1 | T | q_2 \rangle = \frac{V}{2} \int \frac{id^4k}{(2\pi)^4} D_R \left( \frac{k + k'}{2} \right) \sum_c \langle aq_1, ck | \mathcal{M}^{\text{eff}} | aq_2, ck + q_1 - q_2 \rangle. \quad (14)$$

Working out the isospin summation, one finds

$$\begin{aligned} \langle q_1 | T | q_2 \rangle &= \frac{V}{2} \int \frac{id^4k}{(2\pi)^4} D_R \left( \frac{k + k'}{2} \right) \\ &\times \langle q_1, k | \frac{1}{3} \left( \mathcal{M}_0^{\text{eff}} + 3\mathcal{M}_1^{\text{eff}} + 5\mathcal{M}_2^{\text{eff}} \right) | q_2, k + q_1 - q_2 \rangle, \end{aligned} \quad (15)$$

where  $\mathcal{M}_I^{\text{eff}}$  ( $I = 0, 1, 2$ ) is the  $\pi\pi$  scattering amplitude, with possible medium modifications, for pion pairs  $(q_1, k)$ ,  $(q_2, k')$  in the  $s$  channel in given isospin state  $I$ . It is simple matter to show that the particular combination  $(\mathcal{M}_0^{\text{eff}} + 3\mathcal{M}_1^{\text{eff}} + 5\mathcal{M}_2^{\text{eff}})/3$  exactly corresponds to the  $I = 0$  amplitude in the crossed  $t$  channel

$$\begin{aligned} &\langle q_1, k | \frac{1}{3} \left( \mathcal{M}_0^{\text{eff}} + 3\mathcal{M}_1^{\text{eff}} + 5\mathcal{M}_2^{\text{eff}} \right) | q_2, k + q_1 - q_2 \rangle \\ &= \langle q_1, -q_2 | \mathcal{M}_0^{\text{eff}} | k + q_1 - q_2, -k \rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

From Eq. (13) with the  $s$ -variable replaced by  $t = (q_1 - q_2)^2$ , the  $s$ -wave amplitude ( $q_1 = q_2 = 0$ ) takes the form

$$\begin{aligned}
\langle q_1 | T | q_2 \rangle &= T(q_1^2, q_2^2, t) \\
&= \frac{V}{2} \int \frac{id^4 k}{(2\pi)^4} D_R \left( \frac{k+k'}{2} \right) \langle q_1, -q_2 | \mathcal{M}_0^{\text{eff}} | k' = k + q_1 - q_2, -k \rangle \\
&= \frac{V}{2f_\pi^2} \int \frac{id^4 k}{(2\pi)^4} D_R \left( \frac{k+k'}{2} \right) \\
&\quad \times (m_\pi^2 - 2t - \beta(D_R^{-1}(k) + D_R^{-1}(k')) + q_1^2 - m_\pi^2 + q_2^2 - m_\pi^2) \\
&= \frac{V}{2f_\pi^2} \int \frac{id^4 k}{(2\pi)^4} D_R(k) (m_\pi^2 - 2t - \beta(2D_R^{-1}(k) + q_1^2 - m_\pi^2 + q_2^2 - m_\pi^2)),
\end{aligned} \tag{17}$$

where the last equation has been obtained by considering again that the  $k-k'$  dependence of the pion propagator is negligible for a large nucleus. Notice that the above amplitude is a function of  $q_1^2$ ,  $q_2^2$  and the Mandelstam variable  $t$  taken as independent variables allowing us to check the low energy PCAC results (see the discussion just below Eq. (20)). The amplitude on a finite nucleus with density profile  $\rho(\mathbf{R})$  might be obtained semi-classically by taking the above form at density  $\rho(\mathbf{R})$  and replacing the volume  $V$  by an integration over  $\mathbf{R}$ . Hence the above form with volume  $V$  may describe an hypothetical nucleus with square density profile. The contribution of the inverse pion propagator disappears once the vacuum contribution is subtracted. To obtain the genuine  $\pi$ -nucleus amplitude, extrapolated in the off-shell region ( $q_{1,2}^2 \neq m_\pi^2$ ) and/or the unphysical region ( $t \neq 0$ ), we also subtract the vacuum pion propagator  $D_0(k)$ . The nuclear amplitude takes the form

$$\begin{aligned}
T(q_1^2, q_2^2, t) &= \frac{V}{2f_\pi^2} \int \frac{id^4 k}{(2\pi)^4} (D_R(k) - D_0(k)) \\
&\quad \times (m_\pi^2 - 2t - \beta(q_1^2 - m_\pi^2 + q_2^2 - m_\pi^2)).
\end{aligned} \tag{18}$$

Let us consider a piece of nuclear matter with  $A$  nucleons and density  $\rho = A/V$ ; the pion cloud contribution to the pion–nucleus sigma term per nucleon is [20]

$$\Sigma_A^{(\pi)} = \frac{m_\pi^2}{2\rho} \langle \Phi^2 \rangle + \mathcal{O}(\langle \Phi^4 \rangle) = \frac{3m_\pi^2}{2\rho} \int \frac{id^4 k}{(2\pi)^4} (D_R(k) - D_0(k)). \tag{19}$$

Hence, in the PCAC scheme ( $\beta = 1$ ), this pion amplitude (per nucleon) becomes

$$\frac{1}{A} T(q_1^2, q_2^2, t) = \frac{\Sigma_A^{(\pi)}}{f_\pi^2 m_\pi^2} (m_\pi^2 - t + \frac{1}{3}(t - q_1^2 - q_2^2)) \tag{20}$$

and satisfies the PCAC constraints for  $\nu_B = (t - q_1^2 - q_2^2)/4M_N = 0$ . At the soft point, the amplitude obeys the low energy theorem  $T(0, 0, 0) = \Sigma_A/f_\pi^2$ . The well-known change of sign at the Cheng–Dashen point is also obtained,  $T(m_\pi^2, m_\pi^2, 2m_\pi^2) = -\Sigma_A/f_\pi^2$  together with the Adler consistency relation  $T(m_\pi^2, 0, m_\pi^2) = T(0, m_\pi^2, m_\pi^2) = 0$ . One may notice that the amplitude at threshold is one third of the soft pion point. One can recover the nucleon case by simply replacing  $\Sigma_A^{(\pi)}$  by  $\Sigma_N^{(\pi)}$  i.e. in the limit where the  $t$ -dependence

of the  $\pi$ -nucleus sigma commutator is neglected or, in other words, in the limit of point-like nucleons. In this nucleonic case, this gives an isospin symmetric scattering length  $a_0 = -\Sigma_N^{(\pi)}/12\pi f_\pi^2$ ; taking for the pion cloud contribution to the pion-nucleon sigma commutator a value of about 30 MeV (see Refs. [21,22] and the discussion below) one obtains  $a_0 \approx -0.012m_\pi^{-1}$ , which is rather close to the experimental value. However, this agreement is probably accidental since many other effects may contribute to the scattering length. For instance it is well known that the Born term alone gives approximately the experimental value. The valence quark contribution to the sigma term, the delta contribution should be also incorporated. Similarly in the nuclear case, effects of rescattering of the isovector amplitude in presence of Pauli correlations are known to be important. Since s-wave scattering length is not the purpose of this paper we do not elaborate on it, although our approach might be implemented in this direction along the lines of [24].

The important quantity to be evaluated is  $\langle \Phi^2 \rangle / f_\pi^2 = 2\rho \Sigma_A^{(\pi)} / f_\pi^2 m_\pi^2$ . This pion cloud contribution to the nuclear sigma term has already been obtained in [20] with a different method. Here we derive its explicit form using the analytical structure of the pion propagator in Eq. (19). Let us introduce the full longitudinal spin-isospin response function related to the imaginary part of the full pion polarization propagator  $\Pi_L$  according to

$$\begin{aligned} R_L(\omega, \mathbf{k}) &= -\frac{V}{\pi} \text{Im} \Pi_L(\omega, \mathbf{k}) = -\frac{V}{\pi} \text{Im} \left( \mathbf{k}^2 \tilde{\Pi}_0(\omega, \mathbf{k}) \frac{\omega^2 - \omega_k^2}{\omega^2 - \omega_k^2 - \mathbf{k}^2 \tilde{\Pi}_0(\omega, \mathbf{k})} \right) \\ &= \left( \frac{g_{\pi NN}}{2M_N} \right)^2 v^2(\mathbf{k}) \sum_n \left| \langle n | \sum_{i=1}^A \boldsymbol{\sigma}(i) \cdot \mathbf{k} \tau_\alpha(i) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{x}(i)} | 0 \rangle \right|^2 \delta(E_n - \omega), \end{aligned} \quad (21)$$

where  $g_{\pi NN} = M_N g_A / f_\pi$  and  $v(\mathbf{k})$  are the  $\pi NN$  coupling constant and form factor. Once the vacuum contribution is subtracted  $\langle \Phi^2 \rangle$  can be calculated using a dispersion relation for  $\Pi_L$

$$\begin{aligned} \langle \Phi^2 \rangle &= 3 \int \frac{id^4 k}{(2\pi)^4} \left( D_R(k) - D_0(k) \right) = 3 \int \frac{id^4 k}{(2\pi)^4} \left( \frac{1}{k_0^2 - \omega_k^2 + i\eta} \right)^2 \Pi_L(k) \\ &= 3 \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{idk_0}{2\pi} \left( \frac{1}{k_0^2 - \omega_k^2 + i\eta} \right)^2 \int_0^{+\infty} d\omega \left( \frac{-2\omega}{\pi} \right) \frac{\text{Im} \Pi_L(\omega, \mathbf{k})}{k_0^2 - \omega^2 + i\eta}. \end{aligned} \quad (22)$$

Exchanging the order of the  $k_0$  and  $\omega$  integrations and performing a standard contour  $k_0$  integration, we finally obtain for  $\Sigma_A^{(\pi)}$

$$\Sigma_A^{(\pi)} = \frac{3m_\pi^2}{2A} \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \int_0^\infty d\omega \left( \frac{1}{2\omega_k^2(\omega + \omega_k)^2} + \frac{1}{2\omega_k^3(\omega + \omega_k)} \right) R_L(\omega, \mathbf{k}). \quad (23)$$

Taking the zero density limit, we recover the pion cloud contribution to the pion–nucleon sigma term whose explicit form (ignoring the delta width) is

$$\begin{aligned} \Sigma_N^{(\pi)} = & \frac{3m_\pi^2}{2} \int \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \left( \frac{g_{\pi NN}}{2M_N} \right)^2 v^2(\mathbf{k}) \mathbf{k}^2 \left[ \left( \frac{1}{2\omega_k^2(\epsilon_k + \omega_k)^2} + \frac{1}{2\omega_k^3(\epsilon_k + \omega_k)} \right) \right. \\ & \left. + \frac{4}{9} \left( \frac{g_{\pi N\Delta}}{g_{\pi NN}} \right)^2 \left( \frac{1}{2\omega_k^2(\omega_{\Delta k} + \omega_k)^2} + \frac{1}{2\omega_k^3(\omega_{\Delta k} + \omega_k)} \right) \right] \end{aligned} \quad (24)$$

with  $\epsilon_k = k^2/2M_N$  and  $\omega_{\Delta k} = M_\Delta - M_N + k^2/2M_\Delta$ .  $\Sigma_N^{(\pi)}$  has already been evaluated within chiral quark models like the cloudy bag model [21], providing a form factor from the nucleon size and specific value for  $g_{\pi NN}/g_{\pi N\Delta}$ . It has been found to be of the order of 30 MeV with about 10 MeV from the delta sector, the rest (15 MeV) coming from the scalar quark density inside the nucleon. Now, the interesting question is how much the  $\pi$ –nucleus sigma term per nucleon deviates from the  $\pi$ –nucleon one or, said differently, what is the pion exchange contribution? This problem has already been addressed in [20]; let us briefly summarize the conclusion of this work. The nucleon–hole sector contribution can be reasonably calculated within a static approximation, i.e. putting  $\omega = 0$  in the prefactor of Eq. (23); the energy integration yields a two-body spin–isospin ground state matrix element once the free nucleonic part has been subtracted. According to a calculation with correlated wave functions, it turns out that the Pauli blocking effect is almost exactly compensated by the effect of tensor correlations. Hence, the nucleonic sector itself does not contribute to the modification of the sigma term. For the delta sector, the situation is less clear. The occurrence of collective pion–delta states (the so-called pionic branch) shifts part of the strength at lower energy and one can expect an increase of the sigma commutator closely related to the pion excess in nuclei. This expected feature is consistent with a dispersive analysis (following the method established by Fubini and Furlan in the nucleon case [25]) which gives an increase of the sigma term of about 5 MeV. However, the full calculation of Eq. (23) with a realistic longitudinal spin–isospin response function, including  $p$ – $h$ ,  $\Delta$ – $h$  and  $2p$ – $2h$  sectors remains to be done [26].

#### 4. Pion propagator and in-medium pion–nucleon coupling constant

In addition to the usual  $p$ -wave piece, the pion self-energy receives a contribution of the pion loop which contains the effect of the modification of the  $\pi NN$  vertex present in the pion–pion quasi-potential. It reads

$$S(\omega, \mathbf{q}) = \mathbf{q}^2 \tilde{\Pi}_0(\omega, \mathbf{q}) + \frac{\langle \Phi^2 \rangle}{6f_\pi^2} \left[ m_\pi^2 - 2\beta (\omega^2 - \omega_q^2 - \mathbf{q}^2 \tilde{\Pi}_0(\omega, \mathbf{q})) \right]. \quad (25)$$

The full inverse pion propagator with pion loop effect takes the form

$$\tilde{D}^{-1}(\omega, \mathbf{q}) = \omega^2 - \omega_q^2 - S(\omega, \mathbf{q})$$

$$= \left( 1 + \beta \frac{\langle \Phi^2 \rangle}{3f_\pi^2} \right) (\omega^2 - \omega_q^2 - q^2 \tilde{\Pi}_0(\omega, q)) + \frac{\langle \Phi^2 \rangle}{6f_\pi^2} m_\pi^2. \quad (26)$$

As expected from the effective  $\pi NN$  effective Lagrangian of Eq. (8), the p-wave self-energy is modified, in this one pion loop approximation by a factor  $1 + \beta \langle \Phi^2 \rangle / 3f_\pi^2 \approx (1 + \beta \langle \Phi^2 \rangle / 6f_\pi^2)^2$ . However, as we will see just below, a wave-function renormalization will just compensate this effect. To clearly see what is going on, we drop the pure s-wave part of the self-energy and concentrate on the p-wave part. In this case the full pion propagator becomes

$$\tilde{D}(\omega, q) = \gamma D_R(\omega, q) = \frac{(1 + \beta \langle \Phi^2 \rangle / 3f_\pi^2)^{-1}}{\omega^2 - \omega_q^2 - q^2 \tilde{\Pi}_0(\omega, q)}. \quad (27)$$

The effective  $\pi NN$  coupling constant is modified by the vertex correction of (8) and the wave-function renormalization factor  $\sqrt{\gamma}$  which compensate each other to one pion loop order, namely

$$\frac{g_{\pi NN}^*(\rho)}{g_{\pi NN}} = \sqrt{\gamma} \left( 1 + \beta \frac{\langle \Phi^2 \rangle}{6f_\pi^2} \right) = 1 + \mathcal{O}(\langle \Phi^4 \rangle). \quad (28)$$

Hence, to one pion loop, the pion–nucleon coupling constant is unmodified in the nuclear medium. Similarly, if we consider pion exchange between two nucleons the two vertex renormalizations exactly compensate the  $\gamma$  factor of the propagator. Consequently, the effective pion propagator, whose imaginary part is directly related to the full pionic response function, is just the usual  $D_R$  calculated with an irreducible pion self-energy  $\Pi_0$  which is also unmodified by pion loop effects. This result justifies a posteriori all the phenomenological studies of pion–nucleus interaction [27] and charge exchange reaction [1–3]. The occurrence of this  $\gamma$  factor has been previously established in [28] at finite temperature for a hot pion gas for which  $\langle \Phi^2 \rangle = T^2/4$  in the chiral limit. Our result is also valid in this case and one can conclude that the  $\pi NN$  coupling constant is also unmodified to order  $T^2$  as previously stated in [29].

In recent papers [23,28], we established, within the same chiral Lagrangian, that the axial coupling constant  $g_A$  and the pion decay constant  $f_\pi$  are in-medium modified according to

$$\frac{f_\pi^*}{f_\pi} = \frac{g_A^*}{g_A} = 1 - \frac{\langle \Phi^2 \rangle}{3f_\pi^2}. \quad (29)$$

At finite temperature, in a hot pion gas, this quenching effect acting on the axial current is accompanied by the mixing of the vector and axial correlators as demonstrated in [30]. Since  $g_{\pi NN}$  [29] and the nucleon mass [31] are unmodified, we come to the conclusion that the Goldberger–Treiman relation  $M_{NgA} = g_{\pi NN} f_\pi$  is preserved at finite temperature, as already pointed out in [29]. At finite density the quenching of  $g_A$  and  $f_\pi$  is also linked to a mixing effect intimately related to chiral symmetry restoration [23] as already discussed in the Introduction. The novel feature is that the unmodified Goldberger–Treiman relation also holds at finite density in the nuclear

medium since there is no modification of the nucleon mass apart from higher order effects associated to the p-wave dressing of the nucleonic pion cloud. However, we stress that this result is strictly valid with neglect of short-range correlations affecting the nucleon observables  $g_A$  and  $g_{\pi NN}$ . In [23] we have shown that the renormalization of  $g_A$  (which is a pure vertex renormalization) is accounted for by simply replacing the averaged pion scalar density  $\langle\Phi^2\rangle$  by an effective one incorporating the effect of short-range correlation; the net result is a 10% quenching at normal nuclear density. The problem of the effect of short-range correlation on  $g_{\pi NN}$  remains to be clarified.

## 5. Pion–pion scattering in the nuclear medium

We are now in position to study pion–pion scattering both in free space and in the nuclear medium. In particular, we want to investigate to which extent the medium modification of the  $\pi\pi$  interaction, involving the pion polarizability  $\tilde{T}_0$  (Eq. (13)), influences the two-pion strength function.

Let us first consider the free case; the unitarized scattering amplitude in the scalar–isoscalar channel can be obtained as the solution of a Lippmann–Schwinger equation,

$$\begin{aligned} \langle q_a q_b | \mathcal{T}_0 | q_c q_d \rangle &= \langle q_a q_b | \mathcal{M}_0 | q_c q_d \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \int \frac{id^4 k_1}{(2\pi)^4} \langle q_a q_b | \mathcal{M}_0 | k_1 k_2 \rangle D_0(k_1) D_0(k_2) \langle k_1 k_2 | \mathcal{T} | q_c q_d \rangle, \end{aligned}$$

where  $k_2 = P - k_1 = q_a + q_b - k_1$  and  $D_0$  is the free space pion propagator. The potential, defined as the one-pion and two-pion irreducible amplitude, is usually approximated [14,18] by  $\mathcal{M}_0$  given by Eq. (11). This potential contains, together with the on-shell piece, an off-shell piece depending on the four inverse pion propagators. However, as explained in [18], the off-shell terms can always be absorbed in the potential by a proper redefinition of the coupling constants and mass. It follows that the free scattering matrix can be algebraically obtained as

$$\mathcal{T}(s) = \frac{1}{f_\pi^2} (m_\pi^2 - 2s) \left( 1 - \frac{1}{2f_\pi^2} (m_\pi^2 - 2s) \int \frac{d^3 k}{(2\pi)^3} \frac{v^2(k)}{\omega_k} \frac{1}{s - 4\omega_k^2 + i\eta} \right)^{-1}, \quad (30)$$

where  $v(k)$  is a form factor that can be adjusted to fit low energy phase shifts and scattering length. Evidently, an explicit sigma meson and/or a coupling to the  $K\bar{K}$  channel should be introduced to describe the higher energy part [14,18] but this is not the purpose of this paper. The question of interest here is to study the threshold region of this pion–pion amplitude in the nuclear medium. According to the approach of [14], this in-medium scattering matrix is obtained by simply replacing in (30) the free pion propagators by the dressed one containing the p-wave pion polarizability. However, as pointed out in [18], one has to take care of the off-shell piece of the effective in-medium potential (13) which contains a piece proportional to the p-wave polarizability. This

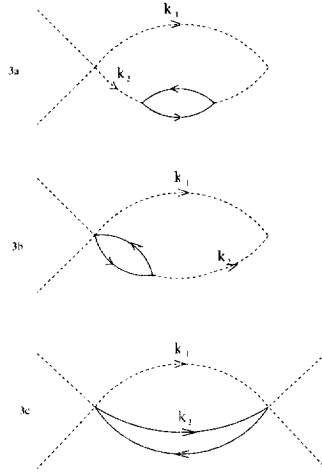


Fig. 3. Medium effects appearing in  $\pi\pi$  rescattering. (a) Dressing of the intermediate pion by the  $p$ -wave polarizability. (b) Vertex correction to the  $\pi\pi$  potential. (c) Contribution of the  $p$ - $h$  and  $\Delta$ - $h$  excitations in the intermediate state.

may yield a contribution to the scattering amplitude, having in the intermediate state one (dressed) pion and one (undressed) particle-hole or delta-hole state (see Fig. 3c). This  $\pi$ - $ph$  configuration would give accumulation of strength below threshold at finite density that is totally surprising since this effect comes from a contribution to the in-medium potential (13) which is manifestly representation dependent. To clarify the matter we will study the first-order contribution to the scattering amplitude ( $V^{\text{eff}} \times 2\pi$  propagator  $\times V^{\text{eff}}$ ) to first order in the polarization propagator  $\tilde{\Pi}_0$ ; the various diagrams depicted in Fig. 3 are the same considered in [18]. As in this paper we consider only the pieces having an imaginary part since we are mainly interested in the  $2\pi$  strength function. The first diagram (Fig. 3a) is the usual one and corresponds to the dressing of the pion but with the potential corrected by the off-shell behavior (Eq. (11))

$$\mathcal{T}^{(a)} = 2 \times \frac{1}{2} \int \frac{id^4k_1}{(2\pi)^4} \left[ V_{\text{on}} - \frac{\beta}{f_\pi^2} D_0^{-1}(k_2) \right]^2 k_2^2 \tilde{\Pi}_0(k_2) D_0^2(k_2) D_0(k_1). \quad (31)$$

The second diagram (Fig. 3b) explicitly incorporates the  $4\pi$  vertex correction involving the polarizability  $\tilde{\Pi}_0$ ,

$$\mathcal{T}^{(b)} = 4 \times \frac{1}{2} \int \frac{id^4k_1}{(2\pi)^4} \left[ V_{\text{on}} - \frac{\beta}{f_\pi^2} D_0^{-1}(k_2) \right] \frac{\beta}{f_\pi^2} k_2^2 \tilde{\Pi}_0(k_2) D_0^2(k_2) D_0(k_1). \quad (32)$$

Finally, there is a diagram (Fig. 3c) with a  $p$ - $h$  bubble in the intermediate state. It gives a contribution (at zero total momentum,  $\mathbf{P} = 0$ )

$$\mathcal{T}^{(c)} = 2 \times \frac{1}{2} \int \frac{id^4k_1}{(2\pi)^4} \left( \frac{\beta}{f_\pi^2} \right)^2 k_2^2 \tilde{\Pi}^0(k_2) D_0(k_1). \quad (33)$$



The various prefactors come from the counting of equivalent diagrams. Summing these three contributions, we see that the representation-dependent piece (i.e. involving  $\beta$ ) disappears as it should,

$$\mathcal{T}^{(a)} + \mathcal{T}^{(b)} + \mathcal{T}^{(c)} = \int \frac{id^4 k_1}{(2\pi)^4} V_{\text{on}}^2 k_2^2 \tilde{\Pi}_0(k_2) D_0^2(k_2) D_0(k_1). \quad (34)$$

Hence we find the “normal” dressing of the pion propagator, demonstrating that this  $\pi$ - $p$  $h$  configuration does not contribute to the strength function. This result can be generalized when the pion propagator is fully dressed by the p-wave pion polarizability. The total second-order scattering amplitude takes the form (for  $P = 0$ )

$$\begin{aligned} \text{Im } \mathcal{T}^{(2)} &= \frac{1}{2} \text{Im} \int \frac{id^4 k_1}{(2\pi)^4} \left\{ \left[ V_{\text{on}} - \frac{\beta}{f_\pi^2} (D_R^{-1}(k_1) + D_R^{-1}(k_2)) \right]^2 D_R(k_1) D_R(k_2) \right. \\ &\quad \left. + \left( \frac{\beta}{f_\pi^2} \right)^2 (k_1^2 \tilde{\Pi}_0(k_1) D_R(k_2) + k_2^2 \tilde{\Pi}_0(k_2) D_R(k_1)) \right\} \\ &= \frac{1}{2} \text{Im} \int \frac{id^4 k_1}{(2\pi)^4} V_{\text{on}}^2 D_R(k_1) D_R(k_2). \end{aligned} \quad (35)$$

Although some more work remains to be done to write a fully unitarized in-medium scattering equation, we come to the conclusion that intermediate states with one quasi-pion and undressed  $p$ - $h$  or  $\Delta$ - $h$  states do not contribute to the strength function. This is not so surprising since only fully dressed states (i.e. exact eigenstates) can appear in the intermediate state of the  $\pi\pi$  scattering series.

## 6. Conclusion

Based on a chiral Lagrangian we have investigated various effects concerning pion interaction in the nuclear medium. We have in particular studied the interplay between p-wave interaction responsible for the existence of collective pionic modes and s-wave  $\pi N$  interaction. We have insisted on the key role played by the in-medium scalar pion density which governs a large amount of chiral symmetry restoration. Starting from an in-medium modified  $\pi\pi$  interaction consistent with the p-wave dressing of the pion, we have obtained an explicit expression of the pion scalar density and the pion cloud contribution to the  $\pi$ -nucleus sigma term. We have shown that, contrary to the axial observables  $f_\pi$  and  $g_A$ , the  $\pi NN$  coupling constant remains unmodified to one pion loop order. As a consequence, the Goldberger–Treiman relation is preserved at finite density, at least in the limit where the effect of short-range correlations is ignored. We have finally demonstrated that the in-medium modification of the  $\pi\pi$  potential cannot give genuine contribution to the two-pion strength function, confirming the validity of the approach developed in [14]. This is particularly important in view of the understanding of the structure observed in the two-pion invariant mass spectrum in  $A(\pi, 2\pi)$  reactions [32].

## Acknowledgements

We thank J. Delorme and M. Ericson for enlightening discussions and a critical reading of the manuscript.

## References

- [1] G. Chanfray and M. Ericson, Phys. Lett. B 141 (1984) 167.
- [2] P. Guichon and J. Delorme, Phys. Lett. B 263 (1991) 157.
- [3] T. Udagawa, S. W. Hong and F. Osterfeld, Phys. Lett. B 245 (1990) 1.
- [4] D. Contardo et al., Phys. Lett. B 168 (1986) 331.
- [5] T. Hennino et al., Phys. Lett. B 283 (1992) 42; B 303 (1993) 236.
- [6] G. Chanfray and P. Schuck, Nucl. Phys. A 545 (1992) 271c; A 555 (1993) 329.
- [7] M. Asakawa, C.M. Ko, P. Levai and X.J. Qiu, Phys. Rev. C 46 (1992) R1159.
- [8] M. Herrmann, B.L. Friman and W. Nörenberg, Nucl. Phys. A 545 (1992) 267c.
- [9] G. Chanfray, R. Rapp and J. Wambach, Phys. Rev. Lett. 76 (1996) 368.
- [10] R. Rapp, G. Chanfray and J. Wambach, Nucl. Phys. A 617 (1997) 472.
- [11] G. Agakichiev et al., Phys. Rev. Lett. 75 (1995) 1272.
- [12] M. Maserà et al., Nucl. Phys. A 590 (1995) 103c.
- [13] G. Chanfray, Z. Aouissat, P. Schuck and W. Nörenberg, Phys. Lett. B 256 (1991) 325.
- [14] Z. Aouissat, R. Rapp, G. Chanfray, P. Schuck and J. Wambach, Nucl. Phys. A 581 (1995) 471.
- [15] J.W. Durso, H.C. Kim and J. Wambach, Phys. Lett. B 298 (1993) 267.
- [16] R. Rapp, J.W. Durso and J. Wambach, Nucl. Phys. A 615 (1997) 501.
- [17] R. Rapp, R. Machleidt, J.W. Durso and G.E. Brown, nucl-th/9706006.
- [18] H.C. Chiang, E. Oset and M.J. Vicente-Vacas, nucl-th/9712047.
- [19] E.G. Drukarev and E.M. Levin, Nucl. Phys. A 511 (1990) 679;  
T.D. Cohen, R.J. Furnstahl and D.K. Griegel, Phys. Rev. C 45 (1992) 1881;  
M. Lutz, S. Klimt and W. Weise, Nucl. Phys. A 542 (1992) 521.
- [20] G. Chanfray and M. Ericson, Nucl. Phys. A 556 (1993) 427.
- [21] I. Jameson, A.W. Thomas and G. Chanfray, J. Phys. G 18 (1992) L159.
- [22] M.C. Birse and J.A. Mc Govern, Phys. Lett. B 292 (1992) 242.
- [23] G. Chanfray, J. Delorme and M. Ericson, Nucl. Phys. A 637 (1998) 421.
- [24] J. Delorme, G. Chanfray and M. Ericson, Nucl. Phys. A 603 (1996) 239.
- [25] S. Fubini and G. Furlan, Ann. of Phys. 48 (1968) 322.
- [26] J. Marteau, G. Chanfray and M. Ericson, work in progress.
- [27] T. Ericson and W. Weise, Pions and Nuclei (Clarendon, Oxford, 1988).
- [28] G. Chanfray, M. Ericson and J. Wambach, Phys. Lett. B 388 (1996) 673.
- [29] V.L. Eletsky and I.I. Kogan, Phys. Rev. D 49 (1994) 3083.
- [30] M. Dey, V.L. Eletsky and B.L. Ioffe, Phys. Rev. D 47 (1993) 3083.
- [31] H. Leutwyler and A.V. Smilga, Nucl. Phys. B 342 (1990) 302.
- [32] F. Bonutti et al., CHAOS Collaboration, Phys. Rev. Lett. 77 (1996) 603;  
Z. Aouissat et al., nucl-th/9806069.

## Publication 2

# Pion scalar density and chiral symmetry restoration at finite temperature and density

 G. Chanfray<sup>1,a</sup>, D. Davesne<sup>1</sup>, J. Delorme<sup>1</sup>, M. Ericson<sup>1,2</sup>, and J. Marteau<sup>1</sup>
<sup>1</sup> Institute de Physique Nucléaire de Lyon, IN2P3-CNRS et Université Cl. Bernard, 43, Bvd. du 11 novembre 1918, F-69622 Villeurbanne Cedex, France

<sup>2</sup> CERN, Theory Division, CH-1211 Geneva 23, Switzerland

 Received: 7 December 1999 / Revised version: 31 March 2000  
 Communicated by W. Weise

**Abstract.** This paper is devoted to the evaluation of the pionic scalar density at finite temperature and baryonic density. We express the latter effect in terms of the nuclear response evaluated in the random phase approximation. We discuss the density and temperature evolution of the pionic density which governs the quark condensate evolution. Numerical evaluations are performed.

**PACS.** 14.40.Aq  $\pi$ , K and  $\eta$  mesons – 24.85.+p Quarks, gluons, and QCD in nuclei and nuclear processes

## 1 Introduction

Pions play a crucial role in chiral symmetry restoration, due to their Goldstone boson character. The amount of restoration is measured by the modification of the order parameter, *i.e.* the quark condensate density, with respect to the vacuum value. In this context the evaluation of the expectation value of the squared pion field, linked to the scalar density of pions  $\rho_S^\pi$  by  $\rho_S^\pi = m_\pi \langle \Phi^2 \rangle$ , is of a great interest. For a single nucleon this quantity governs the total amount of chiral symmetry restoration of pionic origin, according to [1, 2]:

$$\frac{m_\pi^2}{2} \int d^3\mathbf{x} \langle N | \Phi^2(x) | N \rangle = 2m_q \int d^3\mathbf{x} \langle N | \Delta^\pi \bar{q}q(x) | N \rangle = \Sigma_N^\pi = \frac{m_\pi}{2} N_\pi, \quad (1)$$

where  $N_\pi$  is the scalar number of pions in the nucleon cloud,  $\Sigma_N^\pi$  is the part of the nucleon  $\Sigma$  commutator of pionic origin and  $\langle N | \Delta^\pi \bar{q}q(x) | N \rangle$  represents the corresponding modification of the quark condensate with respect to the vacuum value. Similarly, in a uniform nuclear medium of density  $\rho$ , or in a heat bath, the evolution of the quark condensate originating from the pions is linked, to one-pion loop order, to the average value  $\langle \Phi^2 \rangle$  by

$$\frac{\Delta^\pi \langle \bar{q}q(\rho, T) \rangle}{\langle \bar{q}q(0, 0) \rangle} = -\frac{\langle \Phi^2 \rangle}{2f_\pi^2}. \quad (2)$$

The same quantity  $\langle \Phi^2 \rangle$  governs also the quenching factor,  $1 - \langle \Phi^2 \rangle / 3f_\pi^2$ , of coupling constants such as the

nucleonic axial coupling constant  $g_A$  or the pion decay one  $f_\pi$ , originating from pion loops, which is the counterpart of the mixing of axial and vector currents [3, 4]. This type of quenching has to be seen as a manifestation of chiral symmetry restoration and should also apply to the case of  $\rho$ -meson excitation by virtual photons as enters in relativistic heavy-ion collisions. It is therefore interesting to evaluate the quantity  $\langle \Phi^2 \rangle$  in the conditions of such experiments. Now, the fireball which is the source of the dileptons contains, besides thermal pions, a significant residual baryonic background. We have therefore to understand how the pion density evolves at finite values of both temperature and baryonic chemical potential. The first-order approximation for the quantity  $\langle \Phi^2 \rangle$  adds the values for a pure heat bath and for a cold baryonic medium, writing with obvious notations:

$$\langle \Phi^2 \rangle(\rho, T) = \langle \Phi^2 \rangle_T(\rho = 0) + \langle \Phi^2 \rangle_\rho(T = 0). \quad (3)$$

However, this approximation is likely to be crude since the temperature has an effect on the pion density of the nuclear medium and on the other hand the presence of the baryonic background modifies the number of pions thermally excited. As an illustration of the second point, the pion density in the baryonic vacuum is fixed by the Bose-Einstein factor which is  $(e^{\omega_k/T} - 1)^{-1}$  for pions of momentum  $\mathbf{k}$ , with  $\omega_k = \sqrt{\mathbf{k}^2 + m_\pi^2}$ . In the nuclear medium the pion becomes a quasi-particle with a broad width. It can decay for instance into a particle-hole pair which has a smaller energy than the free pion. Its excitation is then favored by the thermal factor. There is therefore a mutual influence between temperature and density that we will investigate.

<sup>a</sup> e-mail: g.chanfray@ipnl.in2p3.fr

$$\begin{aligned}
N_\pi &= m_\pi \int d^3\mathbf{x} \langle N | \Phi^2(\mathbf{x} | N) \rangle = m_\pi 3 \frac{g_{\pi NN}^2}{4M^2} \\
&\times \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \mathbf{q}^2 \left\{ \frac{1}{\omega_q} \left[ \frac{1}{2\omega_q} \frac{1}{(\varepsilon_q + \omega_q)^2} + \frac{1}{2\omega_q^2} \frac{1}{(\varepsilon_q + \omega_q)} \right] v^2(Q^2) + \frac{4}{9} \left( \frac{g_{\pi N\Delta}}{g_{\pi NN}} \right)^2 \right. \\
&\times \left. \int_0^\infty \frac{d\omega}{\omega_q} \left[ \frac{1}{2\omega_q} \frac{1}{(\omega + \omega_q)^2} + \frac{1}{2\omega_q^2} \frac{1}{(\omega + \omega_q)} \right] v^2(Q^2) \left( -\frac{1}{\pi} \text{Im} \frac{1}{\omega - \omega_\Delta + i(\Gamma_\Delta/2)} \right) \right\}. \quad (9)
\end{aligned}$$

The article is organized as follows. In the second section we evaluate the pion density of a nuclear medium at zero temperature. We relate this quantity to the nuclear response to a pion-like excitation. We evaluate this response in the RPA scheme, taking also into account the two particle-two hole(2p-2h) excitations. Within this framework, we study the deviation with respect to the independent nucleon approximation. In the third section we introduce the effect of the temperature through the modification of the nuclear responses. In the fourth section we incorporate the influence of the finite baryonic chemical potential in the heat bath case.

## 2 Pion scalar density in the cold nuclear medium

This quantity was discussed in relation to the quark condensate modification by Chanfray and Ericson [1]. They discussed its deviations with respect to free nucleons, introducing the nuclear response to pion-like excitation, treated in the static case  $M_N \rightarrow \infty$ . The extension to the non-static situation can be performed through the time-ordered graphs of fig. 1 where the cross represents the point at which the pions are created or annihilated. The pion momentum is denoted  $q$  and  $\omega$  is the excitation energy of the nuclear system in the intermediate state. The sum of the four graphs leads to the following expression which has also been derived with a different method in ref. [5]:

$$\begin{aligned}
\langle \Phi^2 \rangle &= \frac{\rho}{A} 3 \frac{g_{\pi NN}^2}{4M_N^2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \frac{1}{2\omega_q^2} \\
&\times \int_0^\infty d\omega \left[ \frac{1}{(\omega + \omega_q)^2} + \frac{1}{\omega_q} \frac{1}{(\omega + \omega_q)} \right] \\
&\times v^2(Q^2) R_L(\omega, \mathbf{q}), \quad (4)
\end{aligned}$$

where  $Q^2 = \omega^2 - \mathbf{q}^2$ ,  $v(Q^2)$  is the form factor of the pion vertex for which we use a monopole form

$$v(Q^2) = \frac{\Lambda^2 - m_\pi^2}{\Lambda^2 - Q^2}. \quad (5)$$

Finally,  $R_L$  represents the spin-isospin longitudinal response function:

$$R_L(\omega, \mathbf{q}) = \sum_n \left| \left\langle n \left| \sum_{i=1}^A \sigma_i \cdot \mathbf{q} \tau_i^a e^{i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}_i} \right| 0 \right\rangle \right|^2 \delta(\omega - E_n). \quad (6)$$

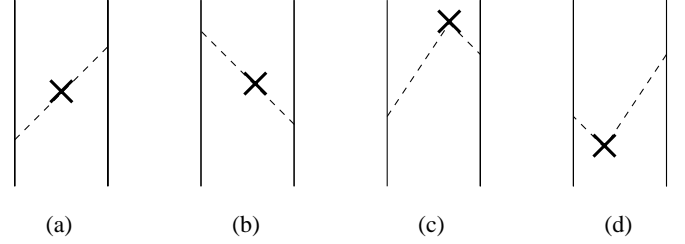


Fig. 1. Time-ordered graphs for pion exchange.

In the actual calculation, we add in the response  $R_L$  the excitation of the delta-resonance with the standard replacement:

$$\sigma_i \cdot \mathbf{q} \tau_i^a \longrightarrow \frac{g_{\pi N\Delta}}{g_{\pi NN}} \mathbf{S}_i^\dagger \cdot \mathbf{q} (T_i^a)^\dagger, \quad (7)$$

where  $\mathbf{S}^\dagger (\mathbf{T}^\dagger)$  is the spin (isospin) transition operator connecting the spin (isospin)  $\frac{1}{2}$  and  $\frac{3}{2}$  states [6]. Note that for a matter of convenience we have incorporated in this operator the ratio of the  $\pi N\Delta$  and  $\pi NN$  coupling constants. We have also assumed the same form factors,  $v(Q^2)$ , at the  $\pi NN$  vertex and at the  $\pi N\Delta$  vertices. Finally we recall the link between the response function and the polarization propagator  $\Pi(\omega, \mathbf{q}, \mathbf{q}')$  which we will use in the following:

$$R(\omega, \mathbf{q}) = -\frac{V}{\pi} \text{Im} \Pi(\omega, \mathbf{q}, \mathbf{q}). \quad (8)$$

We will first discuss the result for the free nucleon.

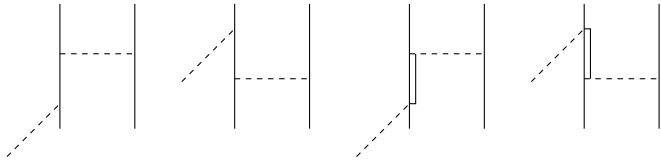
### 2.1 Free nucleon

In the nucleon case, where the response  $R_L$  reduces to a simple expression, eq. (4) provides for the (scalar) pion number  $N_\pi$  in the nucleon cloud:

see equation (9) above

In the above equation we have used the following notations:  $\varepsilon_q = \mathbf{q}^2/2M_N$  and  $\omega_\Delta = M_\Delta - M_N + \mathbf{q}^2/2M_\Delta$ . The energy dependence of the delta width  $\Gamma_\Delta$  is taken from the analysis of the pion-nucleon scattering [6].

Our numerical inputs for the evaluation of  $N_\pi$  are defined as follows. Without form-factor the integrals diverge linearly. The resulting value is then quite sensitive to the cut-off function. We stress, however, that the specific case of the single nucleon is not the purpose of this paper.



**Fig. 2.** Feynman diagrams for the 2p-2h processes. The double line represents the delta-resonance.

It is for us an element of comparison to introduce the nuclear effects. Since we want to restrict the calculation to a region where nuclear effects are reasonably under control, we have limited the integrals to:  $q = 1$  GeV and  $\omega = 1$  GeV. The parameters are chosen so as to obtain a value  $\Sigma_N^\pi = \frac{1}{2}m_\pi N_\pi = 30$  MeV which is well in the accepted range [7–9]. This is achieved with  $\Lambda = 1$  GeV and  $(g_{\pi N\Delta}/g_{\pi NN})^2 = 3.8$ .

## 2.2 Infinite nuclear matter

We now turn to the case of infinite nuclear matter. In order to evaluate the response functions, we use the method of Delorme and Guichon [10] who calculated the zeroth-order response in the local density approximation and then solved exactly the RPA equations. Their zeroth-order response function also includes the 2p-2h excitations. The corresponding Feynman diagrams of such processes are displayed in fig. 2.

They are calculated in two steps. First we single out the contributions which reduce to a medium modification of the  $\Delta$  self-energy, for which the parametrization of ref. [11] is used. This parametrization includes some 3p-3h excitation states as well. For the rest we use the results of Shimizu-Faessler [12] who evaluated the two nucleons p-wave pion absorption at threshold ( $\omega = m_\pi$ ), from which the  $\Delta$  self-energy part, already taken into account, is separated out. As for each the remaining contributions, an energy extrapolation suggested by the many-body diagrammatic interpretation is performed.

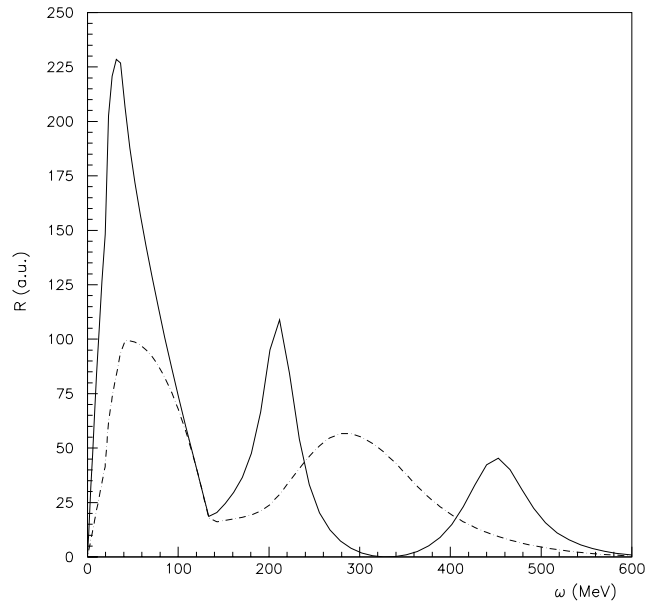
We solve the RPA equations in the ring approximation:  $\Pi = \Pi^0 + \Pi^0 \mathcal{V} \Pi$ . Here  $\mathcal{V}$  is the particle-hole (p-h) interaction with the standard formulation:  $\mathcal{V} = V_\pi + V_{g'}$ , where the second piece is the short-range Landau-Migdal part. More explicitly with our definition of the response,  $\mathcal{V}$  reads

$$\mathcal{V} = \frac{v^2(Q^2)}{q^2} \left( \frac{q^2}{Q^2 - m_\pi^2} + g' \right). \quad (10)$$

The corresponding Landau-Migdal parameters  $g'$  are different in the various channels:  $g'_{NN}$  for the NN sector,  $g'_{\Delta\Delta}$  for the  $\Delta$  one,  $g'_{N\Delta}$  for the mixing of NN and  $\Delta N$  excitations. We adopt the following values:

$$g'_{NN} = 0.7, \quad g'_{N\Delta} = g'_{\Delta\Delta} = 0.5. \quad (11)$$

The results are illustrated on fig. 3 which shows the energy dependence of the zeroth-order and RPA responses, for a fixed value of the momentum  $q = 300$  MeV. The



**Fig. 3.** Response function per nucleon at normal nuclear density as a function of the energy for a fixed momentum  $q = 300$  MeV. The dot-dashed and continuous lines represent, respectively, the zeroth-order and RPA responses.

bare response presents a low-energy peak corresponding to the  $NN^{-1}$  excitation and a high-energy one ( $\Delta N^{-1}$  excitations). The figure displays the RPA enhancement of the low-energy peak, introduced by Alberico *et al.* [13], which arises from the attractive nature of the p-h interaction. It also displays the collective behaviour of the  $\Delta$  excitation with a splitting into two branches.

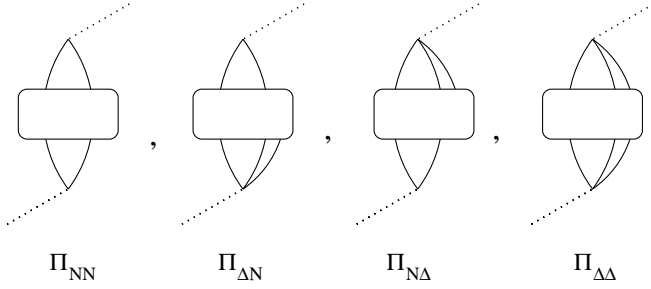
Once the energy and momentum integrations are performed, we find, as in ref. [1], a moderate increase as compared to the free nucleon value, with the values per nucleon at normal nuclear density:

$$\tilde{\Sigma}_N^\pi \equiv \frac{\Sigma_A^\pi}{A} = 38.5 \text{ MeV} \quad \text{and} \quad \frac{N_\pi}{A} = 0.55 \quad (12)$$

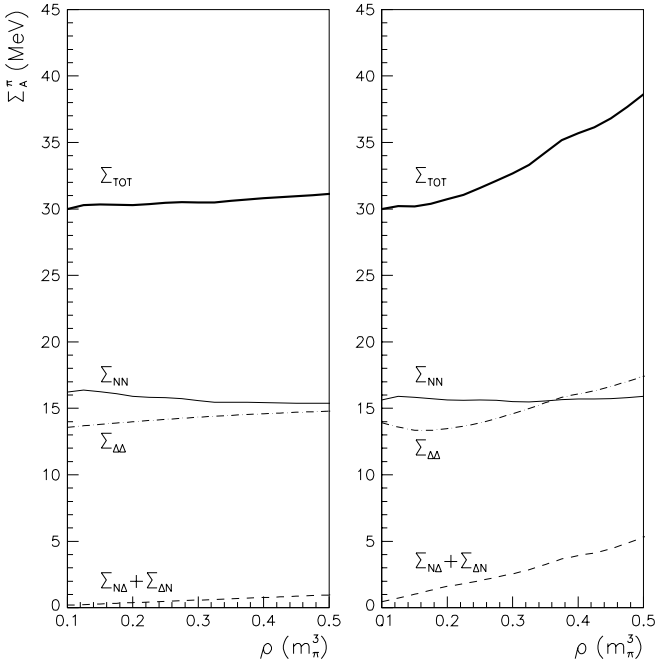
versus 30 MeV and 0.40, respectively, for the free nucleon. The quantity  $\tilde{\Sigma}_N^\pi$  is the (medium modified) effective sigma commutator.

More precisely, we decompose the response function  $\Pi$  (accordingly  $\Sigma^\pi$ ) into four types, depending on the kind of states which are excited at each external vertices: NN,  $N\Delta$ ,  $\Delta N$  and  $\Delta\Delta$  (fig. 4). The density evolution of the different components of the sigma commutator are represented in fig. 5 both without and with RPA. Notice that, in the absence of the RPA, there is already a contribution of the  $N\Delta$  channel at finite density due to the 2p-2h excitations. The overall RPA increase of the sigma commutator mainly comes from that of the  $\Sigma_{N\Delta} + \Sigma_{\Delta N}$  parts. These last quantities embody the mixing of the  $\Delta N^{-1}$  configurations into the  $NN^{-1}$  ones. This is well known to be responsible for the enhancement of the low-energy response (*i.e.* the  $NN^{-1}$  excitations) [14].

$$L_{ab^{-1}}(\omega, \mathbf{q}) = -\frac{N_{S,I}}{4\pi^2} \int k^2 dk d(\cos\theta) \frac{f(\omega_k^b)(1-f(\omega_{k+q}^a))}{\omega - \omega_{k+q}^a + \omega_k^b + \frac{i}{2}\Gamma^a(\omega_k^b + \omega) + \frac{i}{2}\Gamma^b(\omega_{k+q}^a - \omega)} - \frac{f(\omega_k^b)(1-f(\omega_{k+q}^a))}{\omega + \omega_{k+q}^a - \omega_k^b + \frac{i}{2}\Gamma^a(\omega_k^b - \omega) + \frac{i}{2}\Gamma^b(\omega_{k+q}^a + \omega)}, \quad (13)$$



**Fig. 4.** Symbolic representation of the NN,  $\Delta$ N, N $\Delta$  and  $\Delta\Delta$  response functions. The delta-resonance is represented by the double line.



**Fig. 5.** Density evolution of the different components of the effective sigma commutator: left (right) figure is without (with) RPA.

### 3 Inclusion of temperature

#### 3.1 Influence on the virtual pion cloud

We now introduce the temperature, *via* the Matsubara formalism: all the integrals over energy are replaced by an infinite sum over Matsubara frequencies. For the  $NN^{-1}$  sector, the generalized Lindhart function (the imaginary part of which is proportional to the response function) at finite temperature is discussed in textbooks (see, *e.g.*,

ref. [15]). The result is the replacement of the Heaviside functions that characterize the occupation of fermion states at zero temperature by the Fermi-Dirac distributions. We have generalized this procedure to particle with width and applied it to  $\Delta$ - $N^{-1}$ ,  $N$ - $\Delta^{-1}$  and  $\Delta$ - $\Delta^{-1}$  rings. The generalized Lindhart function  $L_{ab^{-1}}$  for a process involving a particle of type (a) and a hole of type (b) is found to be

see equation (13) above

where  $N_{S,I}$  is a constant arising from the summation of spin and isospin and  $\Gamma^{a,b}(\omega)$  represents the width of the particle of type (a,b) for an energy  $\omega$ . The occupation number of hadron species  $a$  is

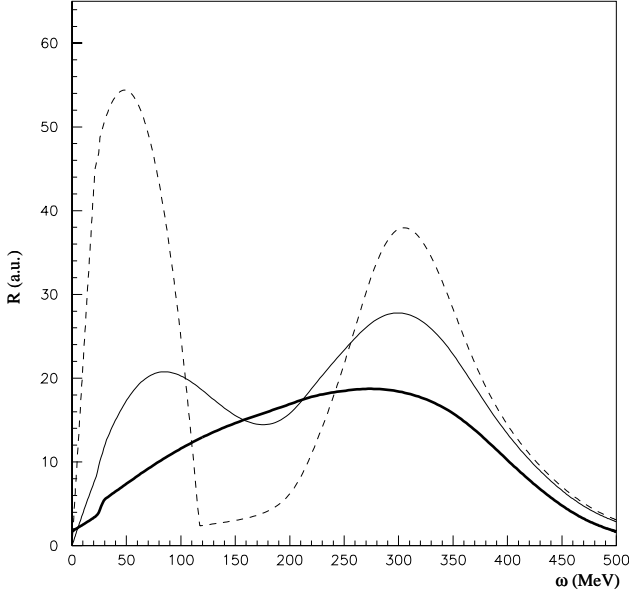
$$f(\omega_k^a) = \frac{1}{\exp((\omega_k^a - \mu)/T) + 1}, \quad (14)$$

where  $\mu$  is the (common) chemical potential for baryons, the value of which fixes the baryonic density  $\rho$  at a given temperature. As implicitly stated before, we limit ourselves to nucleons and deltas, *i.e.*  $\rho = \rho_N + \rho_\Delta$ .

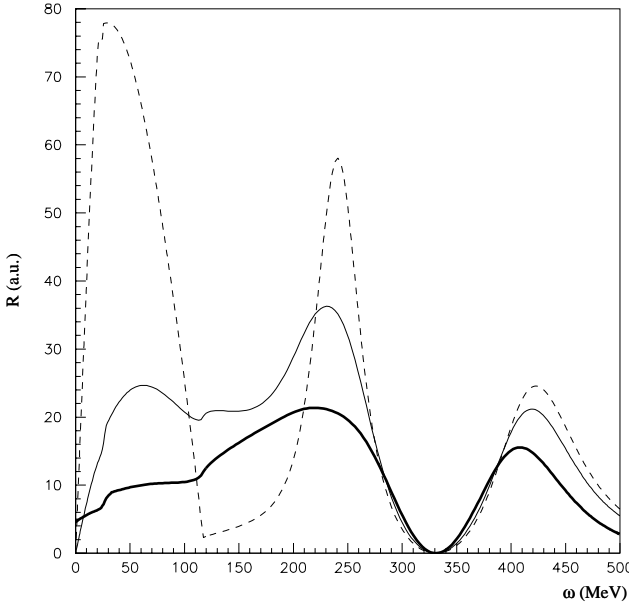
Concerning the  $\Delta$  width, things are somewhat more complicated. In the medium, the pionic decay channel  $\Delta \rightarrow \pi N$  is partly suppressed due to Pauli blocking. At the same time, other channels open, the pion being replaced by 1p-1h, 2p-2h, etc. At normal density and zero temperature the pionic channel remains dominant according to ref. [11]. It represents approximately 75% of the total width ( $\simeq 90$  MeV to be compared with 120 MeV at the resonance energy) and the non-pionic decay channels only the remaining 25%. In view of the difficulties of a full calculation of the temperature effects, we have adopted the simplified following strategy: we have kept the parametrization of ref. [11], derived at  $T = 0$ , for the non-pionic decay channel. We have introduced the temperature effects *via* the Matsubara formalism only for the main pionic part of the width.

Figure 6 displays the temperature evolution of the zeroth-order response function. The dashed line, which represents the  $T = 0$  case, exhibits the  $NN^{-1}$  and  $\Delta N^{-1}$  structures. Increasing temperature tends to wash out more and more these peaks. At the same time an overall suppression effect occurs. Note that the  $\Delta$  branch is less affected by the temperature because of the higher energies involved. In the RPA case (see fig. 7), one observes a similar behavior: an important general decrease and the loss of the lower energy structures.

We now turn to the question of the thermal pions present in the heat bath.



**Fig. 6.** Zeroth-order response at a baryonic density equal to half nuclear matter density ( $\rho = 0.25 m_\pi^3$ ) as a function of energy for a fixed momentum  $q = 300$  MeV for three temperatures. Dashed lines:  $T = 0$ . Thin full line:  $T = 50$  MeV. Thick full line:  $T = 150$  MeV.



**Fig. 7.** Same as before but for the RPA response.

### 3.2 Inclusion of thermal pions

The effects previously discussed concerned only the modification, due to the temperature, of the virtual pion density present in the nuclear medium. At finite temperature, thermally excited pionic modes (quasi-pions) are also present and they give an additional contribution to the pion scalar density. Here for a better illustration we give the result for  $\langle \Phi^2 \rangle / 2f_\pi^2$  which according to eq. (2) governs the amount of chiral symmetry restoration of pionic

origin. We start from the general result given in ref. [5]:

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Phi^2 \rangle}{2f_\pi^2} &= \frac{3}{2f_\pi^2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \\ &\times \int_0^\infty d\omega \left[ (1 + 2n(\omega)) \left( -\frac{1}{\pi} \right) \text{Im} D(\omega, \mathbf{q}) \right. \\ &\quad \left. - \left( -\frac{1}{\pi} \right) \text{Im} D_0(\omega, \mathbf{q}) \right], \end{aligned}$$

where the vacuum contribution has been explicitly subtracted. In the above equation  $n(\omega) = 1/(\exp(\omega/T) - 1)$  is the Bose occupation factor and  $D^{-1}(\omega, \mathbf{q}) = D_0^{-1}(\omega, \mathbf{q}) - (g_{\pi NN}/2M_N)^2 k^2 \Pi$  the inverse quasi-pion propagator. For convenience, we separate the contribution surviving at zero temperature expressible in terms of the full spin-isospin longitudinal response function from the contribution with an explicit thermal factor:

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Phi^2 \rangle}{2f_\pi^2} &= \frac{\rho}{A} \frac{3}{2f_\pi^2} \frac{g_{\pi NN}^2}{4M_N^2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \\ &\times \int_0^\infty d\omega \left( \frac{1}{2\omega_q^2(\omega + \omega_q)^2} + \frac{1}{2\omega_q^3(\omega + \omega_q)} \right) \\ &\times v^2(Q^2) R_L(\omega, \mathbf{q}) + \frac{3}{2f_\pi^2} \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} \\ &\times \int_0^\infty d\omega n(\omega) \left( -\frac{2}{\pi} \right) \text{Im} D(\omega, \mathbf{q}) \\ &\equiv \frac{\rho \tilde{\Sigma}_B^\pi}{f_\pi^2 m_\pi^2} + \frac{\langle \Phi^2 \rangle_T}{2f_\pi^2}. \end{aligned}$$

The second identity defines the quantities  $\tilde{\Sigma}_B^\pi$  and  $\langle \Phi^2 \rangle_T$ , associated, respectively, with the first and second pieces of the r.h.s. of the above equation:  $\tilde{\Sigma}_B^\pi$  represents an effective, temperature-dependent, sigma commutator per baryon, whereas  $\langle \Phi^2 \rangle_T$  is the scalar density of quasi-pions thermally excited.

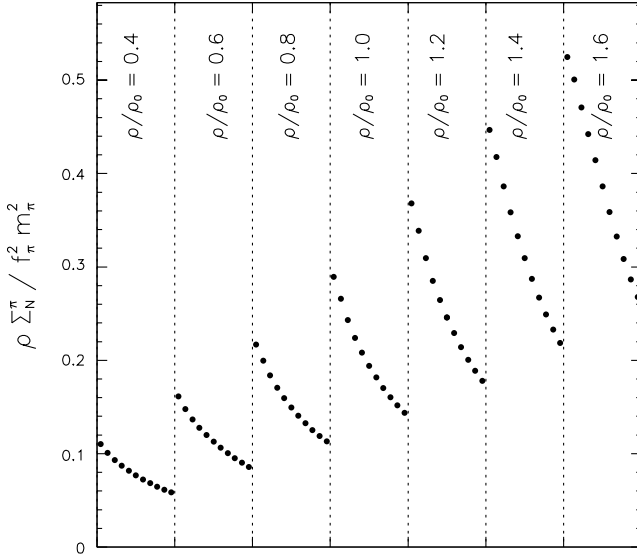
## 4 Results

In order to display the condensate evolution, all the forthcoming figures show its relative decrease, *i.e.* the quantity  $\Phi^2/2f_\pi^2$  according to eq. (2). We stress again that the points of interest are the influence of temperature on the nuclear pionic cloud contribution, the influence of the baryonic density on the thermal pions one and finally how large is the deviation from the additive approximation of eq. (3).

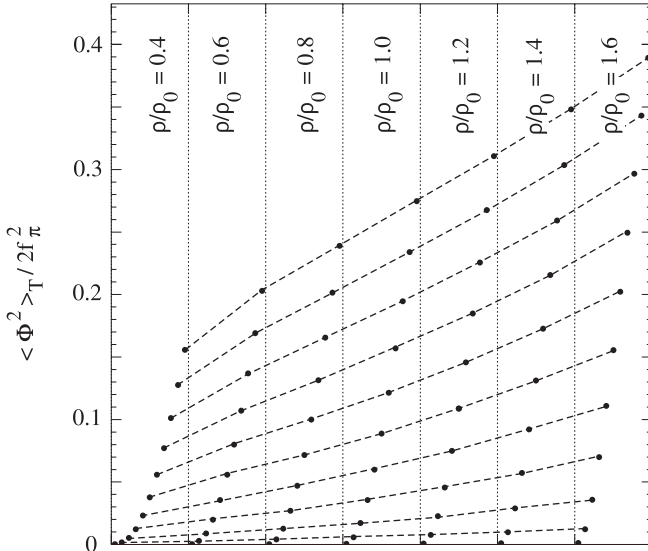
We first present on fig. 8 the contribution of the virtual pion cloud alone (term in  $\tilde{\Sigma}_B^\pi$ ). Each box shows the temperature evolution at fixed baryonic density. It illustrates the suppression effect of the temperature which originates in the quenching of the nuclear response previously mentioned. The increase with baryonic density observed in this figure reflects the obvious fact that the pionic density follows the baryon one.

In fig. 9 we present in the same fashion the condensate decrease due to thermal pions alone (term in  $\langle \Phi^2 \rangle_T/2f_\pi^2$ ).





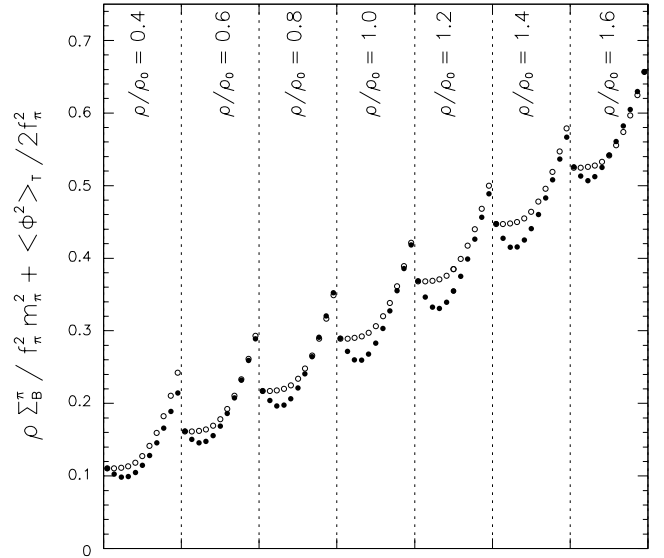
**Fig. 8.** Relative decrease of the condensate coming from the virtual pion cloud part as a function of the density and the temperature. Each box corresponds to a fixed density as indicated. The density increases by steps of  $0.2\rho_0$  from left to right between  $0.4$  and  $1.6\rho_0$ . In each box the points correspond to temperature increases by steps of  $0.10m_\pi$  between  $0.05$  and  $1.05m_\pi$ .



**Fig. 9.** Same as the preceding figure but for the thermal pions. As a guidance in order to display the influence of the density on the thermal pions, points of equal temperature are joined by a dashed line.

The iso-temperature curves show the influence of the baryonic density which pushes down the quasi-pion excitation energy, thus increasing their thermal excitation.

Finally in the last figure (fig. 10) we present the sum of both contributions. The competition between the variations of both terms with respect to the temperature is the source of the observed parabolic-type shape. For comparison, we have plotted in open circles the approximation of



**Fig. 10.** Sum of both contributions of the virtual pion cloud and the thermal pions (black circles). For comparison the open circles represent the additive approximation of eq. (3)

eq. (3) where the effect of the thermal pions at zero density is simply added to that of the pion cloud at zero temperature. This approximation does not display the hollow shape of the exact calculation: it overestimates the latter by at most 15% in the medium part of the temperature range we have considered, the deviation becoming quite small beyond  $T \approx 90$ – $100$  MeV. In this region the decrease of the pionic cloud contribution with temperature (fig. 8) practically compensates the enhancement of the thermal excitations by density effects. The most important conclusion which can be drawn from fig. 10 is that, due to the nuclear pions, the pion scalar density is much larger than in the absence of nuclear effects, already for densities of the order of  $0.6\rho_0$ .

## 5 Conclusion

In conclusion we have studied the evolution of the quark condensate of pionic origin under the simultaneous influence of the baryonic density and temperature. It is related to the scalar pionic density which comes on the one hand from the virtual nuclear pions and on the other hand from the thermally excited ones. We have expressed the first contribution in terms of the nuclear response to a pion-like excitation and evaluated it for the case of nuclear matter in the RPA scheme, first at zero and then at finite temperature. We have shown that the RPA produces a sizeable enhancement ( $\approx 30\%$ ), while instead the temperature washes out the peaks and suppresses the nuclear response, hence decreasing the virtual pion density.

As for the thermally excited pions we have shown that the presence of the baryonic background appreciably enhances their number. The cause has to be found in the lowering of the quasi-pion excitation energies, which favours their thermal excitation. When the densities of both types

of pions are added, the mutual influences which go in opposite directions cancel their effects to a large extent. In the density and temperature domain that we have explored, the additive assumption of eq. (3) which neglects the mutual influence is a good approximation. It deviates from the exact result by no more than 15%, the deviation being maximum around  $T \approx 50$  MeV. At this  $T$  value the additive approximation slightly overestimates the pionic density.

Our study has shown that, even at moderate baryonic density, the virtual nuclear pions are a major component of the overall scalar pion density. As an example, at nuclear matter density, they dominate in the temperature range we have considered, *i.e.* up to at least  $T \approx 150$  MeV. Since the pion is the agent for the mixing of the vector and axial correlators, the consequence of our study is that the existence of a baryonic background, if any, should not be ignored in this mixing.

## References

1. G. Chanfray, M. Ericson, Nucl. Phys. A **556**, 427 (1993).
2. G. Chanfray, M. Ericson, J. Wambach, Phys. Lett. B **388**, 673 (1996).
3. M. Dey, V.L. Eletsky, B.L. Ioffe, Phys. Lett. B **252**, 620 (1990).
4. G. Chanfray, J. Delorme, M. Ericson, Nucl. Phys. A **637**, 421 (1998).
5. G. Chanfray, D. Davesne, Nucl. Phys. A **646**, 125 (1999).
6. T. Ericson, W. Weise, *Pions and Nuclei* (Oxford Science Publications, Clarendon Press, Oxford, 1988).
7. M. Birse, J. Mc Govern, Phys. Lett. B **292**, 242 (1992).
8. I. Jameson, G. Chanfray, A.W. Thomas, J. Phys. G **18**, L159 (1992).
9. G. Chanfray, J. Delorme, M. Ericson, Phys. Lett. B **455**, 39 (1999).
10. J. Delorme, P.A.M. Guichon, Phys. Lett. B **264**, 157 (1991); more details and earlier references can be found in the unpublished report LYCEN 8906 (1989).
11. E. Oset, L.L. Salcedo, D. Strottman, Phys. Lett. B **165**, 13 (1985).
12. K. Shimizu, A. Faessler, Nucl. Phys. A **306**, 311 (1978); **333**, 495 (1980).
13. W.M. Alberico, M. Ericson, A. Molinari, Phys. Lett. B **92**, 153 (1980).
14. M. Ericson, in *Proceedings of the International School Mesons, Isobars, Quarks and Nuclear Excitations, Erice, 1983*, edited by D. Wilkinson (Pergamon Press 1983).
15. A.L. Fetter, J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York 1971).

## Publication 3

## Medium modification of the pion-pion interaction at finite density

D. Davesne, Y. J. Zhang, and G. Chanfray

IPN Lyon, 43 Bd du 11 Novembre 1918, F-69622 Villeurbanne Cedex, France

(Received 4 April 2000; published 18 July 2000)

We discuss medium modifications of the unitarized pion-pion interaction in the nuclear medium. We incorporate both the effects of chiral symmetry restoration and the influence of collective nuclear pionic modes originating from the  $p$ -wave coupling of the pion to delta-hole configurations. We show in particular that the dropping of the sigma-meson mass significantly enhances the low-energy structure created by the in-medium collective pionic modes.

PACS number(s): 21.30.Fe, 21.65.+f

### I. INTRODUCTION

Modifications of hadron properties in nuclear and hot hadronic matter is one of the central subjects of present day nuclear physics. For instance, it has been suggested in [1] that the in-medium pion-pion interaction might be significantly reshaped at density even below normal nuclear matter density. The basic mechanism is linked to the nuclear collective pionic modes, sometimes called pisobars, originating from the  $p$ -wave coupling of the pion to delta-holes states. According to detailed calculations [2,3] these collective modes are able to explain charge exchange data [4,5], despite the peripheral character of these experiments, although some other mechanisms such as broadening of the delta [6] or projectile excitation [7] have been proposed. In addition, other detailed studies show that collective effects are associated mainly with a particular channel such as the coherent pion one [8]. This medium effect yields a softening of the pion dispersion relation and consequently a modification of the two-pion propagator involved in the unitarized  $T$  matrix describing the pion-pion interaction at finite density. Indeed, on the basis of purely phenomenological models [9], an important reshaping of the pion-pion interaction in the scalar-isoscalar channel (sigma channel), producing a sizable accumulation of strength near the two-pion threshold, has been predicted. This problem has been reinvestigated with chiral symmetric models such as linear or nonlinear sigma models [10] with special emphasis on the consistency between chiral symmetry constraints and unitarization. It was soon realized that this medium effect is of considerable importance for the still open problem of nuclear saturation since an important part of the nucleon-nucleon interaction comes from correlated two-pion exchange and several papers have brought extremely interesting results [11–13]. Possible evidence for this reshaping of the  $\pi$ - $\pi$  strength function is provided by the  $\pi$ - $2\pi$  data obtained on various nuclei by the CHAOS Collaboration at TRIUMF [14]. Recent calculations show that the observed marked structure in the  $\pi^+\pi^-$  invariant mass spectrum can be partially explained by this reshaping [15,16]. These last results have been questioned in a recent paper [17] where it is found that pion absorption forces the reaction to occur at lower peripheral density.

However, what was ignored in the previous approaches was the possible medium modification of the basic  $\pi$ - $\pi$  interaction, i.e. the  $\pi$ - $\pi$  potential from the underlying quark

substructure or, in other words, from the in-medium modification of hadronic properties associated with chiral symmetry restoration. This may have considerable consequences since applying by hand in the linear sigma model pion-pion potential a Brown-Rho scaling of the sigma mass yields a significant enhancement of the near-threshold structure in the  $2\pi$  strength function [18]. To go further, it is important to construct an in-medium  $\pi$ - $\pi$  pion-pion potential. This question has already been addressed [19] in the framework of the Nambu–Jona-Lasinio (NJL) model at finite temperature. In this paper we will first use exactly the same scheme but with a straightforward generalization at finite constituent quark density to be identified later with one-third of the baryonic (i.e., nucleonic) density. In particular we will show that, using a slightly different prescription for the loop integrals, the NJL model regenerates the linear sigma model pion-pion Born term amplitude. This result, which is numerically extremely close to the more involved calculational scheme of Ref. [19], can be generalized at finite density and/or temperature provided the values of the pion mass, the sigma mass, and the pion decay constant are replaced by their in-medium values calculated in the NJL model. Using this scheme we are in position to study in a particularly simple way direct observable consequences of both partial chiral symmetry restoration such as the dropping of the sigma meson mass and collective  $p$ -wave pionic modes by looking at the in-medium pion-pion interaction in the scalar-isoscalar channel. This is of utmost importance since, as emphasized recently by Hatsuda *et al.*, the evolution of collective scalar-isoscalar modes, i.e., the sigma meson, may reveal precursor effects associated to chiral symmetry restoration [20].

From this density dependent effective linear sigma model potential implemented with a phenomenological form factor, it is possible to construct a unitarized  $\pi$ - $\pi$  scalar-isoscalar amplitude which both preserves chiral symmetry constraints (Weinberg scattering length in the chiral limit) and reproduces experimental phase shifts. On top of precursor effects of chiral symmetry restoration, the inclusion of medium effects associated with the modification of the pion dispersion relation should be consistently done in the framework of the NJL model by direct coupling to constituent quarks populating the Fermi sea. However, the resulting pion  $p$ -wave polarizability calculated with quark-particles–quark-holes would completely miss the phenomenologically well established strong screening effects from short-range correlations

TABLE I. Physical quantities at  $\rho=0$  in the NJL model for different parameters (I and II) and different schemes of calculations (exact and simplified).

	$f_\pi$ (MeV)	$m_\pi$ (MeV)	$m_\sigma$ (MeV)	$\Lambda$ (MeV)	$m$ (MeV)	$m_0$ (MeV)	$g$ (fm <sup>2</sup> )
I (exact)	93.0	139.0	700.0	620.84	347.49	5.677	0.2247
II (exact)	93.0	139.0	1000.0	573.31	498.85	5.772	0.3303
I (simplified)	93.0	139.0	700.0	624.25	343.03	5.540	0.2207
II (simplified)	93.0	139.0	1000.0	573.60	495.15	5.712	0.3284

( $g'$  parameter). Incorporation of correlation effects in the NJL model obviously requires a much more involved level of sophistication, hence losing the simplicity which is one of its main interests. Furthermore, we will calculate the in-medium two-pion propagator from standard pion-nucleus phenomenology. In other words, the  $p$ -wave pion polarizability will be taken as its nuclear matter expression dominated in the region of interest by the  $\Delta$ -hole piece corrected by screening effects. The underlying philosophy can be summarized by saying that the medium modified soft physics linked to chiral symmetry ( $m_\pi, f_\pi$ , low-energy  $\pi$ - $\pi$  potential) is calculated within the NJL model while  $p$ -wave physics yielding pionic nuclear collective modes is described through standard nuclear phenomenology.

## II. $\pi$ - $\pi$ INTERACTION FROM THE NJL MODEL

To examine the  $\pi$ - $\pi$  interaction at finite density (and finite temperature), we start from the SU(2) version of the well-known NJL model [21]:

$$\mathcal{L} = \bar{\psi}(i\partial - m_0)\psi + g[(\bar{\psi}\psi)^2 + (\bar{\psi}i\gamma_5\tau\psi)^2], \quad (1)$$

where  $g$  is a coupling strength of dimension [mass]<sup>-2</sup>, and  $m_0$  is the current quark mass. To maintain the asymptotic freedom at high energies, we simulate the situation by regarding the coupling constant in Eq. (1) as a momentum dependent one,  $g(p)$ :

$$g(p) = g \prod_{i=1}^4 \theta(\Lambda - |\mathbf{p}_i|), \quad (2)$$

where  $\mathbf{p}_i$ 's are the momenta of quarks and  $\theta$  is the step function. Three parameters, namely,  $g$ ,  $\Lambda$ , and  $m_0$ , are determined to reproduce the pion mass  $m_\pi$ , the pion decay constant  $f_\pi$ , and the mass of the sigma meson  $m_\sigma$ . Here for  $m_\pi$  and  $f_\pi$  we choose the well-accepted values, and for  $m_\sigma$  we select two different empirical values to test the influence of the input data on our final results. In Table I, we list two sets of values for  $m_\pi$ ,  $f_\pi$ , and  $m_\sigma$ , and also  $g$ ,  $\Lambda$ , and  $m_0$  which are fixed, respectively, to give these two sets of values of  $m_\pi$ ,  $f_\pi$ , and  $m_\sigma$ . In the parameter fitting, we follow the formalism in the paper of Hatsuda, and Kunihiro [22], where the three-momentum cutoff was used. With the lowest value of  $m_\sigma=700$  MeV, one has a set of parameters very close to the one of Quack *et al.* [19] used for finite temperature studies. In the following mainly devoted to finite density, we will prefer the second set with  $m_\sigma=1$  GeV for two reasons. On

the one hand, this second set gives a higher density for chiral symmetry restoration (about  $2.6\rho_0$  in place of  $1.5\rho_0$ ), and on the other hand, the values of  $m_\sigma=1$  GeV has been successfully used in previous works to fit the vacuum  $\pi$ - $\pi$  data [10,15].

In Table I, we also include the results with different schemes of calculation, the ‘‘exact’’ one and the ‘‘simplified’’ one. For the ‘‘exact’’ scheme, we just do the same calculation as Quack *et al.* [19] but at finite density, while for the ‘‘simplified’’ one, we neglect the  $q^2$  dependence in all of the integrals (for details see Sec. III) in our calculation, where  $q$  is the external momentum of pion and sigma mesons.

The main purpose of this section is to get the density dependence on the  $\pi$ - $\pi$  scattering length  $a^I$ , which is related to the  $\pi$ - $\pi$  scattering amplitude  $T^I$  at threshold as

$$a^I = -\frac{1}{32\pi m_\pi} \text{Re} T^I, \quad (3)$$

where  $I$  is the total isospin.

To the lowest order in  $1/N_c$  ( $N_c$ , the number of quark colors), the invariant amplitude  $\mathcal{T}_{ab;cd}$  of the  $\pi$ - $\pi$  scattering process ( $a, b$  and  $c, d$  are the isospin indices) is calculated from the box and  $\sigma$ -propagation diagrams shown in Fig. 1 (see Fig. 1 in Ref. [19]). Following the notation of Ref. [19], we have

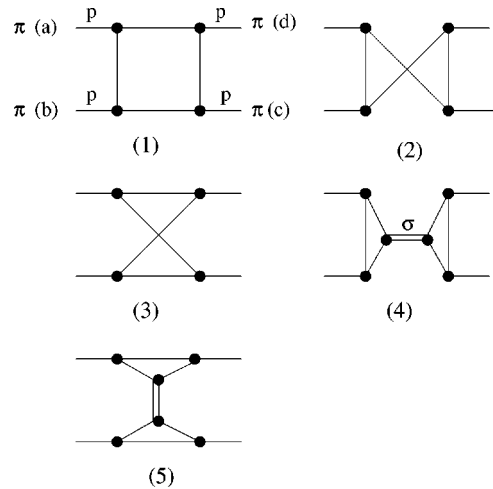


FIG. 1. Box and  $\sigma$ -propagation diagrams for  $\pi$ - $\pi$  scattering (a),(b),(c), and (d) are the isospin indices.

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_{ab;cd} = \langle cp_c ; dp_d | \mathcal{T} | ap_a ; bp_b \rangle = & A(s,t,u) \delta_{ab} \delta_{cd} \\ & + B(s,t,u) \delta_{ac} \delta_{bd} + C(s,t,u) \delta_{ad} \delta_{bc}, \end{aligned} \quad (4)$$

$$\mathcal{T}^2 = 2\mathcal{T}_3 + 2\mathcal{T}_5, \quad (10)$$

where  $s$ ,  $t$ , and  $u$  are the usual Mandelstam variables:  $s = (p_a + p_b)^2$ ,  $t = (p_a - p_c)^2$ , and  $u = (p_a - p_d)^2$ .

Because of the crossing relations, there are three possibilities for the box diagram [23] which, after a direct evaluation, gives

$$\begin{aligned} (\mathcal{T}_1)_{ab;cd} = & -(\delta_{ab}\delta_{cd} + \delta_{ac}\delta_{bd} - \delta_{ad}\delta_{bc}) [4N_c N_f i g_{\pi qq}^4] \\ & \times [I(0) + I(p) - p^2 K(p)], \\ (\mathcal{T}_2)_{ab;cd} = & -(\delta_{ab}\delta_{cd} - \delta_{ac}\delta_{bd} + \delta_{ad}\delta_{bc}) [4N_c N_f i g_{\pi qq}^4] \\ & \times [I(0) + I(p) - p^2 K(p)], \\ (\mathcal{T}_3)_{ab;cd} = & -(-\delta_{ab}\delta_{cd} + \delta_{ac}\delta_{bd} + \delta_{ad}\delta_{bc}) [8N_c N_f i g_{\pi qq}^4] \\ & \times [I(0) + p^4 L(p)/2 - 2p^2 K(p)], \end{aligned} \quad (5)$$

in terms of integrals  $I(0)$ ,  $I(p)$ ,  $K(p)$ , and  $L(p)$  (see the Appendix).

The diagram with intermediate  $\sigma$  propagation shown in Fig. 1 can be simply expressed in terms of its components. By combination, one has

$$\begin{aligned} (\mathcal{T}_4)_{ab;cd} = & -\delta_{ab}\delta_{cd} g_{\pi qq}^4 [\Gamma^{\sigma\pi\pi}(p, -p)]^2 D_\sigma(2p), \\ (\mathcal{T}_5)_{ab;cd} = & -(\delta_{ac}\delta_{bd} + \delta_{ad}\delta_{bc}) g_{\pi qq}^4 [\Gamma^{\sigma\pi\pi}(p, p)]^2 D_\sigma(0), \end{aligned} \quad (6)$$

where

$$\begin{aligned} \Gamma^{\sigma\pi\pi}(p, -p) = & -8N_c N_f m I(p), \\ \Gamma^{\sigma\pi\pi}(p, p) = & -8N_c N_f m [I(0) - p^2 K(p)] \end{aligned} \quad (7)$$

are the  $\sigma$ - $\pi$ - $\pi$  vertex in the  $s$  channel and  $t$  channel, respectively, and

$$D_\sigma(k) = \frac{i}{2N_c N_f [(k^2 - 4m^2)I(k) - m_\pi^2 I(m_\pi)]} \quad (8)$$

is the sigma meson propagator. Similar to Eq. (8), we also have [19,23]

$$g_{\pi qq}^{-4} = -N^2 [I(0) + I(p) - m_\pi^2 K(p)]^2 \quad \text{with } N = N_c N_f. \quad (9)$$

We note here that all above results are evaluated at threshold ( $p_i^2 = p^2 = m_\pi^2 = s/4$ ), and we restrict them, for  $T > 0$ , to the scattering of pions whose c.m. system is at rest in the heat bath [19].

Summing Eqs. (5) and (6) and with the help of projection of the amplitudes on total isospin  $I$ , one finds the  $s$ -wave scattering amplitudes

$$\begin{aligned} \mathcal{T}^0 = & 6\mathcal{T}_1 - \mathcal{T}_3 + 3\mathcal{T}_4 + 2\mathcal{T}_5 \\ \mathcal{T}^1 = & 0, \end{aligned}$$

where the  $\mathcal{T}_i$  are the function in Eqs. (5) and (6) expected of the isospin factors. To get the density dependence on  $\mathcal{T}_i$ , we must calculate the constituent quark mass  $m$  and the pion mass  $m_\pi$  at finite density first.

As in Ref. [22], we get the in-medium constituent quark mass from the gap equation due to the one-loop quark self-energy diagram (Fig. 5 in Ref. [22]). The in-medium pion mass (and also  $\sigma$ -meson mass) is determined from the dispersion relation (in the  $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{0}$  limit) of the meson excitation (which itself is the solution of the Dyson equation in the ring-diagram approximation). For the details of deriving the gap equation for quarks and the dispersion relation for  $\pi$  (and also  $\sigma$ ) meson, one can resort to Refs. [19,22] with a straightforward extension at finite density. Some specific results and integrals are explicitly given in the Appendix. Here we display only the final results evolving with respect to density at zero temperature. One thing to be mentioned here is that there are two different definitions for the coupling between pions and quarks, namely,  $g_{\pi qq}$ : one is from Hatsuda and Kunihiro [22] and the other is from Quack *et al.* [19]. These two  $g_{\pi qq}$  differ from each other only by a term proportional to

$$\beta \int dk \frac{k^2}{E^2} f(E) f(-E) F(E, p),$$

where  $\beta$  is the inverse of the temperature,  $f(E)$  the Fermi-distribution function, and  $F(E, p)$  a rational fraction of  $E$  ( $E = \sqrt{m^2 + \mathbf{k}^2}$ ) and  $p$  (external momentum of pions). It turns out that this term disappears when the temperature goes to zero. So the discrepancy between these two definitions will not give rise to any difference in the parameter fitting which is done only at zero temperature and also in the main part of this paper as we focus our calculation on the cases of finite density but at zero temperature.

The density dependence of constituent quark mass,  $\pi$  mass,  $\sigma$  mass, and  $f_\pi$  is shown in Fig. 2. We find that all these quantities evolve with density almost linearly except in the high density region (say  $\rho > 0.30 \text{ fm}^{-3}$ ) and the trends of these curves are all the same as those evolving with temperature [22]. Here we use two sets of parameters listed in Table I.

We first show that the density dependences of the threshold amplitudes and scattering lengths are very similar to those obtained at finite temperature in [19]. In Fig. 3, we draw the curves of the various pieces of the scattering amplitudes as a function of density (at zero temperature) with both sets of parameters. Again, we see that all the curves evolve linearly with density in the low- and medium-density region. At a certain density  $\rho_d$ , there exists a divergence as at high temperature [19]. Similar behavior also holds in Fig. 4 where the relation between scattering length and density is illustrated. An interesting feature is that one gets a higher value of density  $\rho_d$  with the higher input vacuum  $\sigma$ -meson mass. This divergence occurring in the sigma propagator [19] actually corresponds to the point where the in-medium

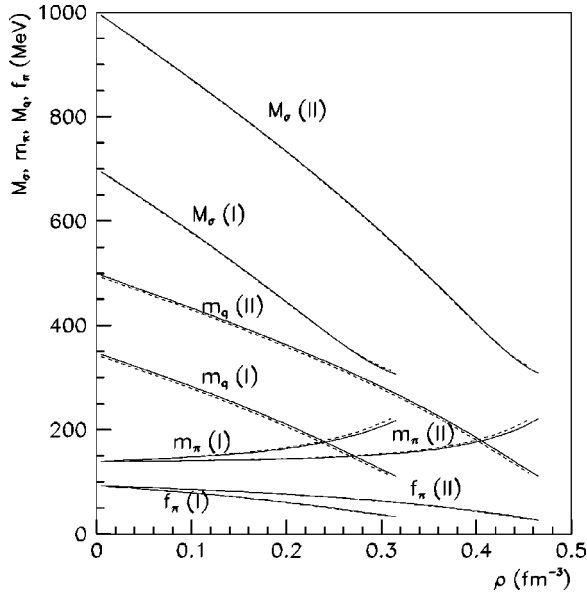


FIG. 2. Constituent quark mass  $m$ , pion mass  $m_\pi$ ,  $\sigma$ -meson mass  $m_\sigma$ , and pion decay constant  $f_\pi$  vs density (at zero temperature) with parameter sets I and II: solid lines for the exact calculation and dashed lines for the simplified calculation.

sigma mass drops to twice the in-medium pion mass. In the second set of parameters the density  $\rho_d$  turns out to be  $\rho_d \sim 2.4\rho_0$ . Once unitarization is done (see Sec. V) this density goes down to about  $\rho_d \sim 2\rho_0$  due to the presence of the two-pion loop in the sigma propagator. We will come to this important point in Sec. V since, as pointed out by Hatsuda *et al.* [20], the vanishing of the real part of the inverse sigma propagator at  $E=2m_\pi$  can be seen as a precursor effect of chiral symmetry restoration. However, the aim of this paper is not primarily to study the phase transition region but the

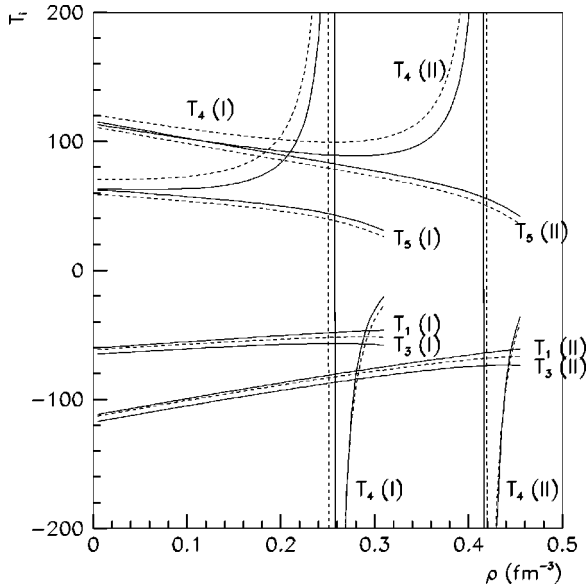


FIG. 3. Scattering amplitudes  $T_i$  vs density (at zero temperature) with parameter sets I and II: solid lines for the exact calculation and dashed lines for the simplified calculation.

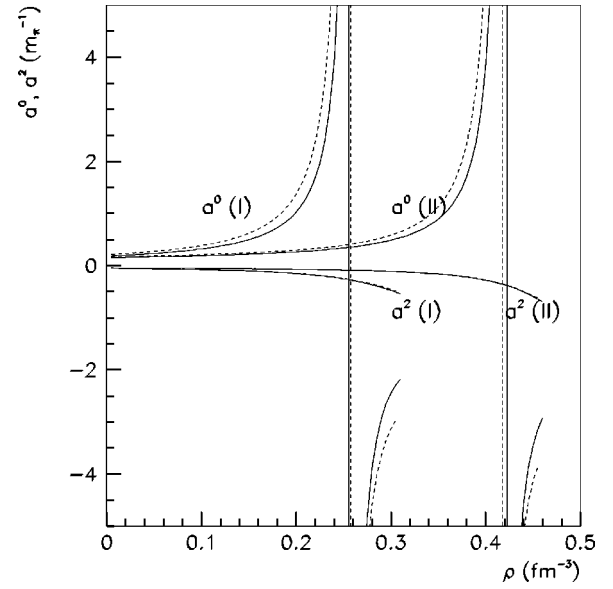


FIG. 4. Scattering lengths  $a^0$  and  $a^2$  vs density (at zero temperature) with parameter sets I and II: solid lines for the exact calculation and dashed lines for the simplified calculation.

moderate density region below nuclear matter density accessible in the  $\pi$ - $2\pi$  experiment. For that purpose, we show in Fig. 5 the low density behavior of the scattering lengths.

### III. SIMPLIFIED SCHEME

Now we turn to the simplified scheme of our calculation, where we neglect the momentum dependence in all of above integrals, i.e.,  $I(p)$ ,  $K(p)$ , and  $L(p)$  (we will state later in this section the reason for such a treatment). But before this simplified processing, we would like to check whether the Weinberg limit is still kept at finite density and finite temperature. First we want to see how these integrals (and then other related quantities) behave in the first order chiral ex-

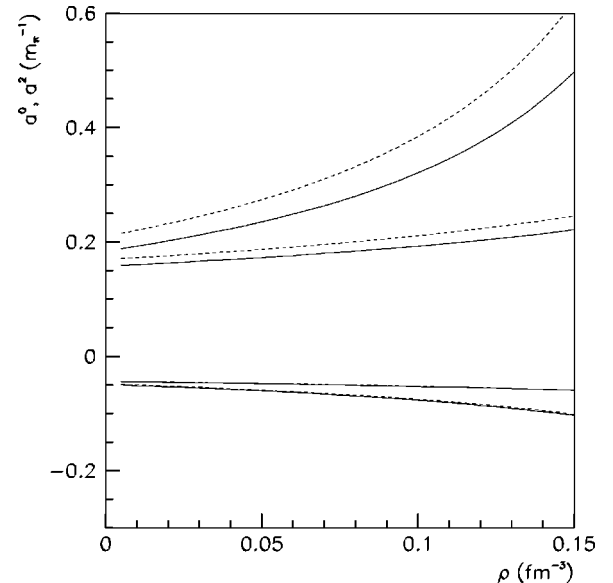


FIG. 5. Same as Fig. 4 but for a moderate range of density.

pansion (expanding to the order of  $m_\pi^2$ ). Keeping in mind that we are always in the three-dimensional cutoff constraint and following the regularization of Ref. [23], we find after straightforward calculation that

$$I(p^2=m_\pi^2)=I(0)-\frac{1}{3}m_\pi^2K(0),$$

$$K(p^2=m_\pi^2)=K(0)-\frac{1}{2}m_\pi^2L(0),$$

$$L(p^2=m_\pi^2)=L(0)-\frac{5}{6}m_\pi^2I_{32}(0), \quad (11)$$

where  $I_{32}(0)$  is shown explicitly in the Appendix. With these expansions, we get, from Eqs. (5)–(9),

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_1 &= \frac{4i}{N\left\{2I(0)-\frac{1}{3}m_\pi^2K(0)-m_\pi^2\left[K(0)-\frac{1}{2}m_\pi^2L(0)\right]\right\}}, \\ \mathcal{T}_2 &= \mathcal{T}_1, \\ \mathcal{T}_3 &= \frac{8i\left\{I(0)+m_\pi^4\left[L(0)-\frac{5}{6}m_\pi^2I_{32}(0)\right]/2-2m_\pi^2\left[K(0)-\frac{1}{3}m_\pi^2L(0)\right]\right\}}{N\left\{2I(0)-\frac{1}{3}m_\pi^2K(0)-m_\pi^2\left[K(0)-\frac{1}{2}m_\pi^2L(0)\right]\right\}}, \\ \mathcal{T}_4 &= \frac{\left\{-8m\left[I(0)-\frac{1}{3}m_\pi^2K(0)\right]\right\}^2}{\left\{2I(0)-\frac{1}{3}m_\pi^2K(0)-m_\pi^2\left[K(0)-\frac{1}{2}m_\pi^2L(0)\right]\right\}^2} \frac{i}{2N\left\{(4m_\pi^2-4m^2)\left[I(0)-\frac{4}{3}m_\pi^2K(0)\right]-m_\pi^2\left[I(0)-\frac{1}{3}m_\pi^2K(0)\right]\right\}}, \\ \mathcal{T}_5 &= \frac{\left\{-8m\left[I(0)-m_\pi^2\left[K(0)-\frac{1}{3}m_\pi^2L(0)\right]\right]\right\}^2}{\left\{2I(0)-\frac{1}{3}m_\pi^2K(0)-m_\pi^2\left[K(0)-\frac{1}{2}m_\pi^2L(0)\right]\right\}^2} \frac{i}{2N\left\{-4m^2I(0)-m_\pi^2\left[I(0)-\frac{1}{3}m_\pi^2K(0)\right]\right\}}. \end{aligned} \quad (12)$$

Keeping to the first order of  $m_\pi^2$  with the help of Eqs. (3) and (10), one finds finally that

$$\begin{aligned} a^0 &= \frac{1}{32\pi m_\pi} \frac{7m_\pi^2}{f_\pi^2}, \\ a^2 &= \frac{1}{32\pi m_\pi} \frac{-2m_\pi^2}{f_\pi^2}, \end{aligned} \quad (13)$$

where  $f_\pi$  is defined as in Ref. [22]. Note there that the functions  $I(0)$ ,  $K(0)$ ,  $L(0)$ , and  $I_{32}(0)$  are the integrals at finite density and finite temperature. We thus recover the Weinberg limit (in the first order chiral expansion) at threshold for finite density and finite temperature.

In the simplified calculation, we neglect the momentum dependence of all above integrals inside the formula for  $\mathcal{T}_i$ , i.e.,  $p^2=m_\pi^2=0$ , except that we keep  $k^2$  in Eq. (8) unchanged as the momentum transfer in the two-pion interaction. Thus one gets

$$\mathcal{T}_1 = \mathcal{T}_2 = \mathcal{T}_3 = \frac{2i}{NI(0)},$$

$$\mathcal{T}_4 = \mathcal{T}_5 = \frac{8im^2}{NI(0)} \frac{1}{k^2 - m_\sigma^2}, \quad (14)$$

where  $m_\sigma^2 = 4m^2 + m_\pi^2$  in the simplified calculation, which can be easily verified from Ref. [22]. Since  $f_\pi^2 = -2iNm^2I(0)$  in the simplified calculation, the above amplitudes can be rewritten as

$$\mathcal{T}_1 = \mathcal{T}_2 = \mathcal{T}_3 = \frac{2i}{NI(0)} = -2\lambda,$$

$$\mathcal{T}_4 = \mathcal{T}_5 = 4\lambda^2 f_\pi^2 \frac{1}{k^2 - m_\sigma^2}, \quad (15)$$

with the  $\sigma\pi\pi$  coupling constant  $\lambda$  defined by  $2\lambda f_\pi^2 = m_\sigma^2 - m_\pi^2$  as in the linear sigma model (see, for instance, Sec. 4 of [10]). In other words, this simplified scheme yields ex-



actly the amplitudes of the linear sigma model but with  $\lambda$ ,  $f_\pi$ ,  $m_\sigma$ , and  $m_\pi$  being functions of density (and temperature). The numerical results for the simplified calculation are also displayed in Figs. 2–4 by dashed lines. We find that these two calculations have not much difference from each other except for the high-density region. So the simplified calculation is a rather good approximation to address in our region of interest the density dependence of  $m$ ,  $m_\pi$ ,  $m_\sigma$ ,  $f_\pi$ , and even the scattering amplitude and scattering length.

#### IV. IN-MEDIUM UNITARIZED $T$ MATRIX

We now incorporate the previous  $\pi$ - $\pi$  amplitudes considered as a irreducible potential into a Lippman-Schwinger (LS) equation to get the unitarized  $T$  matrix in the scalar-isoscalar channel. However, when solving the LS integral equation, the use of the ‘‘exact’’ scheme with its full momentum dependence turns out to be of hopeless complexity. For this reason we prefer to use the potential from the ‘‘simplified scheme’’ which has been shown to be very close to the observables (pion decay constant, masses, scattering lengths) and their density dependences calculated with the ‘‘exact’’ scheme. Hence, the potential will be simply the linear sigma potential. For simplicity we restrict ourselves to an interacting pion pair with zero total momentum. In the scalar-isoscalar channel, the potential reads, with the obvious notations,

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}, -\mathbf{k} | V(E) | \mathbf{k}', -\mathbf{k}' \rangle &= v(k)v(k') \frac{m_\sigma^2 - m_\pi^2}{f_\pi^2} \\ &\times \left( 3 \frac{s - m_\pi^2}{s - m_\sigma^2} + \frac{t - m_\pi^2}{t - m_\sigma^2} + \frac{u - m_\pi^2}{u - m_\sigma^2} \right). \end{aligned} \quad (16)$$

The prescription for the Mandelstam variables to be used in the LS equation are the ones used in Sec. 4 of [10].  $E = \sqrt{s}$  is the energy variable at which the unitarized  $T$  matrix is calculated.  $t$  and  $u$  are chosen according to their on-shell values:

$$t = 2m_\pi^2 - 2\omega_k\omega_{k'} + 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}', \quad u = 2m_\pi^2 - 2\omega_k\omega_{k'} - 2\mathbf{k} \cdot \mathbf{k}'. \quad (17)$$

The form factor  $v(k)$ , which is assumed to simulate the momentum dependence of the vertices, is to be fitted on experimental phase shifts and scattering lengths in the free case. The unitarized  $T$  matrix is the solution of the LS equation:

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{k}, -\mathbf{k} | T(E) | \mathbf{k}', -\mathbf{k}' \rangle &= \langle \mathbf{k}, -\mathbf{k} | V(E) | \mathbf{k}', -\mathbf{k}' \rangle \\ &+ \frac{1}{2} \int \frac{d^3\mathbf{q}}{(2\pi)^3} \langle \mathbf{k}, -\mathbf{k} | V | \mathbf{q}, -\mathbf{q} \rangle \\ &\times G_{2\pi}(E, \mathbf{q}) \langle \mathbf{q}, -\mathbf{q} | V | \mathbf{k}', -\mathbf{k}' \rangle, \end{aligned} \quad (18)$$

where the two-pion propagator in vacuum is [10]

$$G_{2\pi}(E, \mathbf{q}) = \frac{1}{\omega_q} \frac{1}{E^2 - 4\omega_q^2 + i\eta}. \quad (19)$$

Ignoring the  $t$  and  $u$  dependence in the denominators, the potential [Eq. (16)] reduces to a combination of separable potentials. Taking parameter set II ( $m_\sigma = 1$  GeV) implemented with a one-parameter form factor  $v(k) = 1/(1 + k^2/64m_\pi^2)$ , one exactly recovers the potential used in [10]. The phase shifts are correctly reproduced up to 800 MeV and the scattering length,  $a_0 = 0.23m_\pi^{-1}$ , is also in agreement with experimental data. It can be checked that, with such a separable potential, the correction to the scattering length from the unitarization procedure is of higher order in  $m_\pi^2$ , thus preserving the chiral symmetry result (Weinberg scattering length) in the chiral limit.

From the underlying NJL quark model, the above results for the  $T$  matrix, Eqs. (16)–(19), can be generalized at finite density by simply replacing the pion mass, the sigma mass, and the pion decay constant by their in-medium values. With parameter set II, the pion mass does not change very much. Starting from the vacuum value  $m_\pi = 139$  MeV, one finds at half nuclear matter density  $m_\pi(\rho_0/2) = 140.3$  MeV and at saturation density  $m_\pi(\rho_0) = 143$  MeV. The variation of the pion mass is usually expressed in terms of the  $s$ -wave pion optical potential or in term of an effective scattering length  $\Delta m_\pi^2 = 2m_\pi V_{opt} = -4\pi(b_0)_{eff}\rho$ . Here we find  $(b_0)_{eff} \approx -0.01 m_\pi^{-1}$  which coincides with the experimental pion-nucleon scattering length. In reality the pion optical potential is more repulsive due to higher order rescattering effects but still giving a very small modification of the pion mass. Hence, this modification of the pion mass, which simulates  $s$ -wave pion-nucleus interaction, is practically negligible. In other words, the model does not give an unrealistically large shift in the pion mass.

On the contrary, there is a sizable dropping of the sigma mass of 110 MeV at half nuclear matter density and 225 MeV at normal density. Consequently, one finds a significant reshaping of the  $\pi$ - $\pi$  strength function, as we will see in the next section, even at  $\rho = 0.5\rho_0$  which is the typical density reached in  $\pi$ - $2\pi$  experiment [16]. We now come to study the dressing of the pion propagator by its  $p$ -wave coupling in matter. As already stated in the Introduction, the direct use of the standard NJL model for this problem would give totally unrealistic results since there is no repulsion and short-range correlation ( $g'$  parameter). Hence, we turn to a conventional nuclear matter description of the  $p$ -wave self-interaction of the pion on top of the NJL approach for the basic pion-pion potential. The pion propagator has the form

$$D_\pi(\mathbf{k}, \omega) = [\omega^2 - m_\pi^2 - \mathbf{k}^2 - S_\pi(\mathbf{k}, \omega)]^{-1}, \quad (20)$$

where  $S_\pi(\mathbf{k}, \omega)$  is the conventional nuclear matter  $p$ -wave pion self-energy to be specified below. Notice that  $m_\pi$  is the in-medium pion mass calculated in the NJL model. According to the previous discussion, the small  $s$ -wave pion self-energy is partially accounted for but this gives in practice a negligible effect for the in-medium  $\pi$ - $\pi$   $T$  matrix. For this

first work, mixing the effects from the underlying quark structure (modification of  $m_{\sigma,\pi}, f_\pi$ ) with those from pion  $p$ -wave coupling, we use the simplest possible approach. Hence, in the spirit of Ref. [9], we assume that the pion self-energy is dominated by virtual  $\Delta$ - $h$  excitations in the domain of energy of interest, namely,

$$S_\pi(\mathbf{k}, \omega) = k^2 \tilde{\Pi}^0(\mathbf{k}, \omega) = k^2 \Pi^0(\mathbf{k}, \omega) / [1 - g'_{\Delta\Delta} \Pi^0(\mathbf{k}, \omega)]. \quad (21)$$

Here  $g'_{\Delta\Delta} \approx 0.5$  accounts for the short-range screening of the  $\Delta$ - $h$  polarization bubble  $\Pi^0$ . The numerical calculations are performed in the framework of the two-level model already used in Ref. [9]. The main approximation of this model is to neglect the Fermi motion of the nucleons in the  $\Delta$ - $h$  bubble. In addition we first neglect the width of the delta resonance. This last approximation will be relaxed below. The polarization bubble has the form

$$\Pi^0(\mathbf{k}, \omega) = \frac{4}{9} \left( \frac{f_{\pi N\Delta}^*}{m_\pi} \Gamma(k) \right)^2 \rho \left( \frac{1}{\omega - \epsilon_{\Delta k} + i\eta} - \frac{1}{\omega + \epsilon_{\Delta k}} \right), \quad (22)$$

with  $\epsilon_{\Delta k} = \sqrt{k^2 + M_\Delta^2} - M_N$  and  $\Gamma(k)$  is the  $\pi NN$  form factor. It is a simple matter to show that the pion propagator takes the very simple form typical of a two-level model:

$$D_\pi(\mathbf{k}, \omega; \rho) = \frac{Z_1(k, \omega; \rho)}{\omega^2 - \Omega_1^2(k, \omega; \rho) + i\eta} + \frac{Z_2(k, \omega; \rho)}{\omega^2 - \Omega_2^2(k, \omega; \rho) + i\eta}, \quad (23)$$

where the eigenenergies  $\Omega_1, \Omega_2$  and the strength factors  $Z_1, Z_2$  ( $Z_1 + Z_2 = 1$ ) are very simple functions of the density which can be found in Ref. [9]. As explained in detail in this last reference, the pion strength function splits into two collective eigenmodes. Of special interest is the lower branch ( $\Omega_1$ ), sometimes called the pionic branch responsible for the softening of the pion dispersion curve. To calculate the medium modified  $\pi$ - $\pi$   $T$  matrix, we have to solve the LS equation [Eq. (18)] with a modified two-pion propagator according to

$$G_{2\pi}(\mathbf{k}, E) = \int \frac{idk_0}{2\pi} D_\pi(\mathbf{k}, k_0) D_\pi(-\mathbf{k}, E - k_0). \quad (24)$$

In the two-level model, its explicit expression is

$$G_{2\pi}(\mathbf{k}, E) = \sum_{i,j=1}^2 \frac{\Omega_i(k) + \Omega_j(k)}{2\Omega_i(k)\Omega_j(k)} \times \frac{Z_i(k)Z_j(k)}{E^2 - (\Omega_i(k) + \Omega_j(k))^2 + i\eta}. \quad (25)$$

Obviously, in the absence of  $p$ -wave coupling, one recovers Eq. (19). In a more realistic description the main features of the two-level model survive but the modes  $\Omega_{1,2}$  acquire a

width. This can be incorporated through the replacement in the pion propagator [Eq. (23)]:

$$\Omega_j(k) \rightarrow \Omega_j(k) + i \frac{\text{Im} \tilde{\Pi}^0(\mathbf{k}, \Omega_j(k))}{2\Omega_j(k)}, \quad (26)$$

where  $\text{Im} \tilde{\Pi}^0$ , calculated along the line  $j$ , takes into account the delta width, corrected from Pauli blocking, together with extra two-particle-two-hole (2p-2h) contributions which are not reducible to a delta width piece. Details are given in Ref. [24]. The imaginary part of the two-pion propagator is obtained through a spectral representation

$$\text{Im} G_{2\pi}(\mathbf{k}, E) = -\frac{1}{\pi} \int_0^E d\omega \text{Im} D_\pi(\mathbf{k}, E) \text{Im} D_\pi(\mathbf{k}, E - \omega). \quad (27)$$

The real part is calculated with a dispersion relation.

## V. RESULTS

To clearly illustrate the basic physical mechanisms, we present the results for the in medium pion-pion scattering matrix in the simplified calculational scheme discussed in the previous sections, using systematically the second set of parameters with  $m_\sigma = 1$  GeV. First, the treatment of collective  $\pi N\Delta$  configurations entering the two-pion propagator is done in the extended two-level model summarized just above. In addition we use the leading order term of the so-called  $1/N$  expansion of the linear sigma model. In a forthcoming paper we will incorporate the full linear sigma model potential together with a full calculation of the in-medium two-pion propagator. However, we believe that the conclusions concerning the relative weight of collective pionic modes and chiral symmetry restoration will remain valid. The linear sigma model can be seen as a  $O(N+1)$  model with  $N=3$ . It has been shown [25,15] that, to leading order in a  $1/N$  expansion, one gets a consistent symmetry conserving approach fulfilling Ward identities and all chiral symmetry constraints. The corresponding potential is obtained from Eq. (16) by simply keeping the  $s$  channel pole term and dropping the  $u$  and  $t$  sigma propagators. In practice it has the great advantage of making the potential separable. According to [15], we take the potential as

$$\langle \mathbf{k}, -\mathbf{k} | V(E) | \mathbf{k}', -\mathbf{k}' \rangle = 6v(k)v(k')\lambda \frac{E^2 - m_\pi^2}{E^2 - m_\sigma^2} \quad \text{with}$$

$$\lambda = \frac{m_\sigma^2 - m_\pi^2}{2f_\pi^2}, \quad (28)$$

with a phenomenological form factor  $v(k) = g/(1 + k^2/q_d^2)^\alpha$ . It is important to note that the introduction of such a form factor does not destroy in any way the chiral symmetry properties. Taking  $g=0.9$ ,  $\alpha=3$ , and  $q_d=1$  GeV one gets a reasonable fit to experimental phase shifts [15]. With such a separable potential one easily obtains the explicit form of the  $T$  matrix:

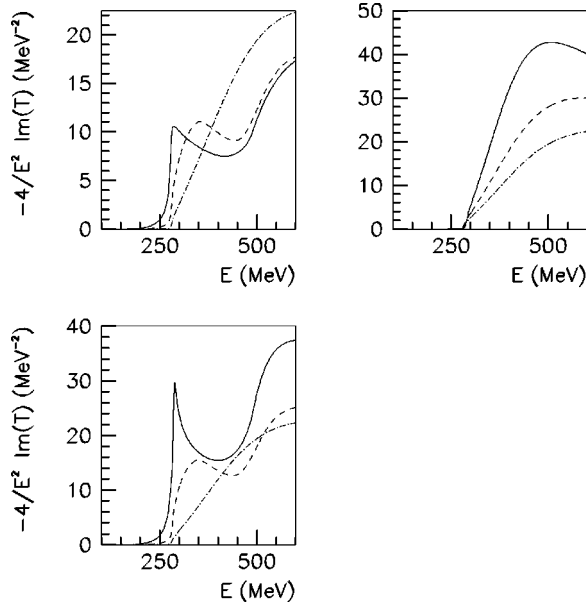


FIG. 6. Strength function for the  $\pi$ - $\pi$  interaction at zero density (dot-dashed curves), half nuclear matter density (dashed curves), and normal nuclear matter density (solid curves). (a) (upper left panel) corresponds to a calculation with coupling to the pionic collective modes, keeping  $m_\sigma$ ,  $m_\pi$ , and  $f_\pi$  at their vacuum values. (b) (upper right panel) incorporates the in-medium modification of  $m_\sigma$ ,  $m_\pi$ , and  $f_\pi$  from the NJL model, ignoring the effect of collective pionic modes. (c) (lower panel) incorporates both effects. We use the parameter set II with  $m_\sigma=1$  GeV.

$$\langle \mathbf{k}, -\mathbf{k} | T(E) | \mathbf{k}', -\mathbf{k}' \rangle = 6v(k)v(k')\lambda \times \frac{E^2 - m_\pi^2}{E^2 - m_\sigma^2 - 3\lambda(E^2 - m_\pi^2)\Sigma(E)}, \quad (29)$$

with  $\Sigma(E)$  given by

$$\Sigma(E) = \int \frac{d^3q}{(2\pi)^3} v^2(q) G_{2\pi}(\mathbf{q}, E). \quad (30)$$

In Fig. 6, we present the results of the calculation for the  $\pi$ - $\pi$  strength function (i.e., the imaginary part of the scattering amplitude) for zero density, half nuclear matter density ( $0.5\rho_0$ ), and normal nuclear matter density ( $\rho_0$ ). We limit ourselves to the low-energy sector ( $E < 600$  MeV) since it corresponds to the domain of validity of the low energy effective theory and to the region experimentally probed for instance in the CHAOS experiment. In Fig. 6(a) we keep the sigma mass, the pion mass, and the pion decay constant at their vacuum values and incorporate the effects of  $p$ -wave  $\pi N\Delta$  collective modes. We recover the well-known structure near the two-pion threshold originating from the softening of the pion dispersion relation and extensively discussed in [1,9,10]. In Fig. 6(b), we disregard the effect of these pionic modes but simply replace in the vacuum  $T$  matrix the sigma mass, the pion mass, and the pion decay constant by their in-medium value. In this way we isolate the effects intimately related to chiral symmetry restoration. We see a

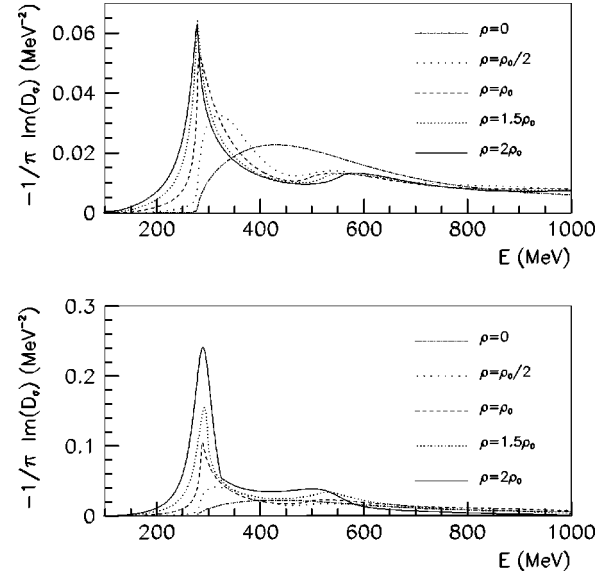


FIG. 7. Spectral function for the sigma meson at various densities. (a) (upper panel) corresponds to a calculation with coupling to the pionic collective modes, keeping  $m_\sigma$ ,  $m_\pi$ , and  $f_\pi$  at their vacuum values. (b) (lower panel) incorporates the in-medium modification of  $m_\sigma$ ,  $m_\pi$ , and  $f_\pi$  from the NJL model on top of collective pionic modes. We use the parameter set II with  $m_\sigma=1$  GeV.

spectacular enhancement of the strength with increasing density which is roughly uniform in the energy domain considered. The origin of this effect is mainly the dropping of the sigma mass. However, it is less pronounced in the density domain typical of ordinary nuclei than in the work of Hatsuda *et al.* [20] for at least two obvious reasons. First, we start with a vacuum sigma mass of 1 GeV (used in our previous works to fit the phase shifts) significantly larger than the values of 550 MeV or 750 MeV used in [20]. Second, the  $\sigma\pi\pi$  coupling constant  $\lambda = m_\sigma^2 - m_\pi^2 / 2f_\pi^2$  slightly decreases at variance with the work of Hatsuda *et al.* where it was density independent. We will come to a more detailed comparison of the two works when discussing the sigma propagator itself. In Fig. 6(c), we include simultaneously the two mechanisms. We recover the typical low energy structure associated with pionic collective modes but significantly reinforced by the effect of chiral symmetry restoration.

To study the evolution with density of scalar-isoscalar modes, it is also very interesting to study the sigma meson spectral function, i.e., the imaginary part of the sigma propagator. It is a simple matter to obtain the explicit form of the sigma meson propagator in this simple model [15]:

$$D_\sigma(E) = \frac{1}{E^2 - m_\sigma^2 - S_\sigma(E)}, \quad (31)$$

with the sigma self-energy given by

$$S_\sigma(E) = \frac{6f_\pi^2\lambda^2\Sigma(E)}{1 - 3\lambda\Sigma(E)}. \quad (32)$$

The results of the calculation are shown in Fig. 7 for the three previous cases: pionic collective modes only [Fig.

6(a)], chiral symmetry restoration only [Fig. 6(b)], and both [Fig. 6(c)]. It is also interesting to compare our results with the calculation of Ref. [18] where chiral symmetry restoration is implemented by only dropping the sigma mass, ignoring the modification of the  $\sigma\pi\pi$  coupling constant. Since we find in this present work that  $\lambda$  is only slightly modified (about 20% lower at  $\rho=\rho_0$ ), it is not surprising that the reinforcement of the low energy enhancement is qualitatively similar in these two works, at least at normal nuclear matter density.

Until now we have considered the density regime accessible in experiments on ordinary nuclei such as the CHAOS experiments. It is, however, extremely interesting to go beyond, although the basic nuclear physics ingredients of the calculation are less under control. We now follow for a while the arguments of [20]. Let us consider the spectral function of the sigma meson:

$$\begin{aligned}\rho_\sigma(E) &= -\frac{1}{\pi}\text{Im}D_\sigma(E) \\ &= -\frac{1}{\pi}\frac{\text{Im}S_\sigma(E)}{[E^2-m_\sigma^2-\text{Re}S_\sigma(E)]^2+[\text{Im}S_\sigma(E)]^2},\end{aligned}\quad (33)$$

where  $m_\sigma$  is as usual the in-medium sigma meson mass obtained here from the NJL model. As in the work of Hatsuda *et al.* [20], this in-medium sigma meson mass has an evolution which follows linearly at low density the scalar condensate. However, the precise law of evolution is different since it comes from a nucleonic tadpole diagram in [20]. Near the two-pion threshold the phase space factor yields to the well-known behavior:

$$\text{Im}D_\sigma \sim \text{Im}S_\sigma \sim (E^2 - 4m_\pi^2)^{1/2}. \quad (34)$$

Before chiral symmetry restoration with complete  $\sigma-\pi$  degeneracy, there must exist a density at which  $\text{Re}D_\sigma^{-1}(E=2m_\pi)=0$  or  $4m_\pi^2 - m_\sigma^2 - S(E=2m_\pi)=0$ . At such a density  $\rho_d$ , ignoring the effect of pionic collective modes, the spectral function behaves as

$$\begin{aligned}\rho_\sigma(E \simeq 2m_\pi) &= -\frac{1}{\pi}\frac{1}{\text{Im}S_\sigma(E \simeq 2m_\pi)} \\ &\sim \theta(E - 2m_\pi)/(E^2 - 4m_\pi^2)^{1/2}.\end{aligned}\quad (35)$$

This implies that there arises a mild integrable singularity just above the two-pion threshold in the medium. With our set of parameters this precursor effect of chiral symmetry restoration occurs at a density slightly larger than  $2\rho_0$  at variance with [20] where this density was found at  $1.25\rho_0$ . In addition when collective pionic modes are included, there is strength below two-pion threshold due to the various sources of width ( $\Delta-h$ ,  $2p-2h$ ). As a consequence, the mathematical singularity disappears. However, a precursor effect still manifests itself through a strong enhancement of the near-threshold structure created by the  $p$ -wave pionic collective modes. This feature is illustrated in Fig. 7 where the influ-

ence of chiral symmetry restoration itself is visible by comparison of Fig. 7(a) and Fig. 7(b).

## VI. CONCLUSION

In this paper we have examined medium effects on the unitarized pion-pion interaction in the scalar-isoscalar channel and the sigma-meson spectral function. The new feature of this work is the simultaneous treatment of chiral symmetry restoration and the nuclear effect associated with the existence of collective pionic modes. Starting from the standard Nambu–Jona-Lasinio model generalized at finite density, we have obtained an in-medium pion-pion potential. In particular, we have shown that the NJL model regenerates the linear sigma model potential but with modified parameters ( $m_\sigma$ ,  $m_\pi$ , and  $f_\pi$ ). This modification of the parameters intimately related to chiral symmetry restoration strongly reinforces the  $\pi\pi$  strength function in the threshold region. Since the NJL model is not adapted to the calculation of collective pionic modes, we have used the standard phenomenological nuclear physics approach. When both effects are incorporated, the low-energy  $\pi\pi$  structure resulting from the existence of nuclear collective modes is significantly enhanced, in particular through the dropping of the sigma mass. This feature is obviously of considerable importance for the understanding of the structure observed by the CHAOS Collaboration in  $\pi-2\pi$  experiments on various nuclei.

## ACKNOWLEDGMENTS

We are indebted to Z. Aouissat, J. Delorme, M. Ericson, J. Marteau, P. Schuck, and J. Wambach for stimulating and enlightening discussions.

## APPENDIX

We list below the various integrals appearing in the text:

$$I(p) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{1}{[k^2 - m^2][(k+p)^2 - m^2]}, \quad (A1)$$

$$K(p) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{1}{[k^2 - m^2]^2[(k+p)^2 - m^2]}, \quad (A2)$$

$$L(p) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{1}{[k^2 - m^2]^2[(k+p)^2 - m^2]^2}, \quad (A3)$$

$$I_{mn}(p) = \int \frac{d^4k}{(2\pi)^4} \frac{1}{[k^2 - m^2]^m[(k+p)^2 - m^2]^n}. \quad (A4)$$

The above equations are strictly valid at  $T=0$ . The explicit expressions at finite temperature are given in [19] and

can be straightforwardly extended at both finite density and temperature. Here we simply quote a few relevant results for numerical calculation at finite density:

$$-iI(p_0) = \int_{k_F}^{\Lambda} \frac{dk}{2\pi^2} \frac{k^2}{E} \frac{-1}{p_0^2 - 4E^2},$$

$$-iK(p_0) = \int_{k_F}^{\Lambda} \frac{dk}{2\pi^2} \frac{-k^2}{4E^3} \left[ \frac{1}{p_0^2 - 4E^2} - \frac{8E^2}{(p_0^2 - 4E^2)^2} \right],$$

$$-iL(p_0) = \int_{k_F}^{\Lambda} \frac{dk}{4\pi^2} \frac{k^2}{4E^3 p_0^2} \left[ \frac{1}{p_0^2 - 4E^2} - \frac{12E^2}{(p_0^2 - 4E^2)^2} - \frac{64E^4}{(p_0^2 - 4E^2)^3} \right], \quad (\text{A5})$$

and the gap equation is

$$M = m + 4N_c N_f g \int_{k_F}^{\Lambda} \frac{k^2 dk}{2\pi^2} \frac{M}{E}. \quad (\text{A6})$$

- 
- [1] P. Schuck, W. Nörenberg, and G. Chanfray, *Z. Phys. A* **330**, 119 (1988).
- [2] P. Guichon and J. Delorme, *Phys. Lett. B* **263**, 157 (1991).
- [3] T. Udagawa, S. W. Hong, and F. Osterfeld, *Phys. Lett. B* **245**, 1 (1990).
- [4] D. Contardo *et al.*, *Phys. Lett.* **168B**, 331 (1986).
- [5] T. Hennino *et al.*, *Phys. Lett. B* **283**, 42 (1992); **303**, 236 (1993).
- [6] H. Esbensen and T. S. H. Lee, *Phys. Rev. C* **32**, 1966 (1985).
- [7] E. Oset, E. Shiino, and H. Toki, *Phys. Lett. B* **224**, 249 (1989).
- [8] P. Fernandez de Cordoba, E. Oset, and M. J. Vicente-Vacas, *Nucl. Phys.* **A592**, 472 (1995).
- [9] G. Chanfray, Z. Aouissat, P. Schuck, and W. Nörenberg, *Phys. Lett. B* **256**, 325 (1991).
- [10] Z. Aouissat, R. Rapp, G. Chanfray, P. Schuck, and J. Wambach, *Nucl. Phys.* **A581**, 471 (1995).
- [11] J. W. Durso, H. C. Kim, and J. Wambach, *Phys. Lett. B* **298**, 267 (1993).
- [12] R. Rapp, J. W. Durso, and J. Wambach, *Nucl. Phys.* **A615**, 501 (1997).
- [13] R. Rapp, R. Machleidt, J. W. Durso, and G. E. Brown, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 1827 (1999).
- [14] F. Bonutti *et al.*, CHAOS Collaboration, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 603 (1996).
- [15] P. Schuck *et al.*, nucl-th/9806069.
- [16] R. Rapp *et al.*, *Phys. Rev. C* **59**, R1237 (1999).
- [17] M. J. Vicente Vacas and E. Oset, *Phys. Rev. C* **60**, 064621 (1999).
- [18] Z. Aouissat, G. Chanfray, P. Schuck, and J. Wambach, nucl-th/9908076.
- [19] E. Quack, P. Zhuang, Y. Kalinovsky, S. P. Klevansky, and J. Hüfner, *Phys. Lett. B* **348**, 1 (1995).
- [20] T. Hatsuda, T. Kunihiro, and H. Shimizu, *Phys. Rev. Lett.* **82**, 2840 (1999); T. Hatsuda and T. Kunihiro, nucl-th/9901020; nucl-th/9902025.
- [21] Y. Nambu and G. Jona-Lasinio, *Phys. Rev.* **122**, 345 (1961); **124**, 246 (1961).
- [22] T. Hatsuda and T. Kunihiro, *Suppl. Prog. Theor. Phys.* **91**, 284 (1987).
- [23] H. J. Schulze, *J. Phys. G* **21**, 185 (1995).
- [24] G. Chanfray and P. Schuck, *Nucl. Phys.* **A555**, 329 (1993).
- [25] Z. Aouissat, P. Schuck, and J. Wambach, *Nucl. Phys.* **A618**, 402 (1997).

# Chapitre 2

## Hydrodynamique et brisure de symétrie

Parmi tous les modes de desexcitation possibles d'un fluide placé dans une situation légèrement hors équilibre, certains, les modes hydrodynamiques possèdent un temps de relaxation qui tend vers l'infini dans la limite des grandes longueurs d'onde. Ces modes jouent un rôle particulier : ce sont eux qui gouvernent le comportement hors équilibre d'un système. Pour un fluide normal, ils sont associés aux quantités conservées. Pour un fluide avec brisure spontanée de symétrie, par contre, ils ne sont pas limités pas à ces seules quantités conservées mais doivent obligatoirement inclure les modes de Goldstone, qui, eux aussi, relaxent lentement dans la limite des grandes longueurs d'onde. Après un bref rappel de l'hydrodynamique d'un fluide normal et d'un fluide présentant une brisure spontanée de symétrie, nous présenterons le cas d'un gaz de pions (brisure de la symétrie chirale  $SU(2)_L \times SU(2)_R$ ). Nous verrons ensuite les conséquences expérimentales de la brisure de la symétrie chirale sur l'évolution d'un gaz de pions tel qu'il peut être produit dans des collisions d'ions lourds ultra-relativistes. Nous terminerons enfin par le calcul d'un coefficient de transport (la viscosité de cisaillement) dans le cadre d'un modèle microscopique.

### 2.1 Description hydrodynamique d'un système

Le comportement d'un système à grand nombre de particules est extrêmement complexe et son traitement à l'échelle microscopique est *a priori* impossible dans le cas général. Cependant, il existe des situations particulières pour lesquelles des théories bien établies existent. C'est notamment le cas pour les systèmes proches de l'équilibre qui sont décrits dans le cadre de l'hydrodynamique.

Plus précisément, l'hydrodynamique est une théorie permettant de décrire un fluide qui se trouve dans le régime hydrodynamique, c'est-à-dire un régime dans lequel les phénomènes sont caractérisés par une échelle de longueur et une échelle de temps bien particulières : il faut en effet que la dimension typique sur laquelle varie une grandeur soit supérieure au libre parcours moyen et que le temps caractéristique pendant lequel varient ces grandeurs soit supérieur au temps entre deux collisions. Il faut donc que l'on puisse, à l'intérieur d'une

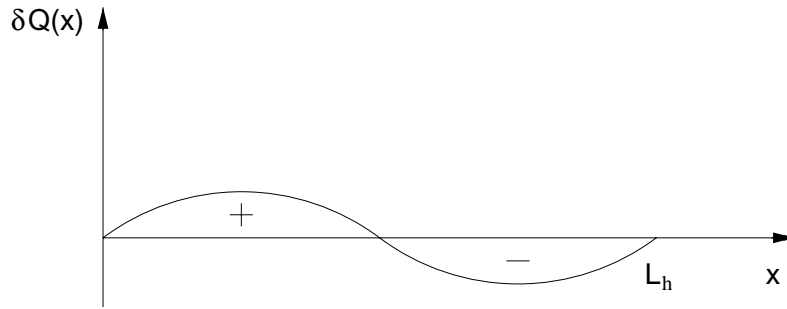


FIG. 2.1 – Faible perturbation sinusoïdale d’une quantité conservée.

cellule (mésoscopique) de fluide, définir des grandeurs d’équilibre local (telles que température, pression, etc...) qui aient un sens c’est-à-dire qu’il faut que le système soit assez grand et assez stable dans le temps pour être effectivement à l’équilibre. Le régime hydrodynamique correspond donc aux excitations de basses fréquences et de grandes longueurs d’onde ; le nombre d’onde  $k$  et la fréquence  $w$  sont alors petits. On supposera donc toujours qu’en chaque point, il existe un équilibre local : le système, qui dans son ensemble est hors équilibre, est décomposé en cellules à l’équilibre thermodynamique [1]. Dans chaque cellule il est donc possible d’appliquer les lois valables à l’équilibre et, à nouveau, les paramètres caractérisant le système (température, pression...) sont donc constants dans une cellule mais varient d’une cellule à l’autre. Partant d’un état fortement hors équilibre, les collisions assurent dans un premier temps la relaxation vers l’équilibre local. Et c’est une fois cet équilibre local atteint que le traitement hydrodynamique du système devient valide.

Imaginons maintenant une perturbation extérieure sur un système dans le régime hydrodynamique. Pour la plupart des perturbations, le processus de relaxation est efficace, c’est-à-dire que le système relaxe vers l’équilibre avec un temps caractéristique très court (les processus collisionnels dans un gaz ont un temps caractéristique  $\tau_c \simeq 10^{-12}s$ ). Cependant, à cause du grand nombre de constituants et des interactions entre ces constituants, il est évident que des phénomènes collectifs peuvent également apparaître. Ainsi si la perturbation concerne une quantité conservée (énergie, impulsion, nombre de particules, etc...) alors le processus de relaxation peut devenir extrêmement lent dans la limite basse fréquence, grande longueur d’onde (limite hydrodynamique). En effet, un excès local en un endroit du système est forcément compensé par un déficit (puisque l’on considère une grandeur conservée) qui peut se trouver à une distance de l’ordre de la taille du système ; le cas simple d’une perturbation sinusoïdale est représenté par la figure 2.1 [2].

Un mode collectif se met alors en place et assure le transport de la quantité excédentaire vers la région déficitaire (sur une distance de l’ordre de  $L_h/2$ ) et le retour à l’équilibre s’effectue en un temps très long. L’origine profonde de la séparation des échelles de temps provient du fait que les inhomogénéités spatiales d’une grandeur conservée ne peuvent pas disparaître localement et donc instantanément. Le processus de relaxation se fait donc uniquement par transport des régions de forte densité vers les régions de faible densité et non par amortissement local, comme pour les autres perturbations.

Par exemple, dans le fluide normal, les grandeurs conservées sont le nombre de particules, l'énergie et la quantité de mouvement. Comme à chacune des quantités conservées dans un système on associe un mode hydrodynamique, cela signifie qu'il existe cinq modes hydrodynamiques pour un fluide normal, c'est-à-dire cinq modes qui relaxent lentement dans la limite basse fréquence, grande longueur d'onde. Plus précisément, on peut montrer que la constante de temps est inversement proportionnelle au carré du nombre d'onde, donc proportionnelle au carré de la longueur caractéristique des inhomogénéités spatiales :

$$\tau_R \propto \frac{1}{k^2} \propto L_h^2 \quad (2.1)$$

Dans la limite  $k \rightarrow 0$ ,  $\tau_R$  devient donc infini : les excès associés aux quantités conservées mettent un temps infini pour disparaître et la durée de vie d'un mode hydrodynamique devient alors infinie.

Le coefficient de proportionnalité de l'équation ci-dessus fait toujours intervenir ce que l'on appelle un coefficient de transport, c'est-à-dire un coefficient phénoménologique qui caractérise au niveau macroscopique ce qui se passe au niveau microscopique pour la dissipation. Plus précisément, les coefficients de transport apparaissent dans des lois phénoménologiques (macroscopiques) qui indiquent comment un système présentant des inhomogénéités va relaxer vers son équilibre global. L'approche est ici purement macroscopique et la détermination des coefficients de transport relève uniquement de l'expérience, si l'on s'affranchit de la mécanique statistique des phénomènes hors équilibre. En effet, du point de vue microscopique, même lorsqu'un système est à l'équilibre, les grandeurs permettant de le décrire fluctuent autour de leur valeur d'équilibre, et ces fluctuations sont caractérisées par des fonctions de corrélation. De plus, que ces écarts aux valeurs d'équilibre soient dus aux fluctuations statistiques ou au contraire à des gradients parce que le système est hors d'équilibre, est de peu d'importance. Dans les deux cas, le mécanisme de relaxation est le même (hypothèse d'Onsager). Il y a donc une relation entre les coefficients de transport et les fonctions de corrélation et il est par conséquent nécessaire, pour calculer les coefficients, de calculer auparavant ces fonctions de corrélation. Pour cela, on dispose du théorème de fluctuation-dissipation (FDT), théorème qui relie la fonction de réponse du système à une perturbation (dont la partie imaginaire est liée à la dissipation), aux fluctuations (fonctions de corrélation).

Il est donc possible d'obtenir les expressions des coefficients de transport en termes de fonction de corrélation (formulation de Kubo). Par exemple, la viscosité de cisaillement peut s'écrire :

$$\eta = \frac{\beta}{20} \lim_{\omega \rightarrow 0} \lim_{k \rightarrow 0} \int d^4x e^{i(\omega t - \vec{k} \cdot \vec{r})} \sum_{ab} \langle \pi_{ab}(x) \pi^{ab}(0) \rangle$$

où  $\pi$  est la partie de trace nulle du tenseur des contraintes :  $\pi_{ab} = \tau_{ab} - \frac{1}{3} \delta_{ab} \tau_l^l$ .

Le traitement de la dissipation par les fluctuations hydrodynamiques permet donc d'exprimer les coefficients de transport, introduits tout d'abord de manière phénoménologique, par les fonctions de corrélations. Ce type de formule est particulièrement important car il permet leur détermination par des modèles microscopiques. C'est d'ailleurs en partant



de la formule de la viscosité présentée ci-dessus et de considérations microscopiques pour l'interaction pion-pion, que nous obtiendrons dans un prochain paragraphe des valeurs numériques.

La généralisation au cas relativiste ne présente aucune difficulté de principe et ne modifie en rien les raisonnements qui ont été déjà présentés. Aussi, nous admettrons [3, 4] que tout ce qui a été dit jusqu'à présent est également vrai dans le domaine relativiste, la seule différence étant, par exemple, pour la formule de la viscosité, le remplacement du tenseur des contraintes par la partie spatiale du tenseur énergie-impulsion. Le véritable changement qui doit être apporté au niveau de la théorie elle-même concerne en réalité les systèmes présentant une brisure spontanée de symétrie, comme nous allons le voir maintenant.

## 2.2 Hydrodynamique et brisure spontanée de symétrie

De manière générale, un système présente une brisure spontanée de symétrie lorsque son état fondamental possède une symétrie de degré inférieur à celui du hamiltonien associé et donc aux équations qui régissent son évolution. Le nombre de degrés de liberté du système est alors augmenté par rapport au cas où la brisure est absente.

Lorsque la brisure spontanée est de plus associée à une symétrie continue, le théorème de Goldstone établit l'existence d'un ou plusieurs modes collectifs de basse fréquence (modes mous), les modes de Goldstone. D'un point de vue physique, les modes de Goldstone sont des excitations immédiatement accessibles à très basse température, au dessus du fondamental. A température finie, on les observe sous forme de modes collectifs, cohérents et à grande durée de vie. En physique nucléaire ou en physique des particules on leur associe généralement des particules, les bosons de Goldstone, de masse nulle.

L'importance capitale des modes de Goldstone en hydrodynamique vient du fait que leur temps de relaxation possède une forme analogue à celle que l'on a pu observer pour les quantités conservées (cf paragraphe précédent). Donc, même si, comme nous allons le voir, l'origine physique profonde d'un tel comportement est complètement différente, il n'en demeure pas moins qu'à la limite basse fréquence ( $\omega \rightarrow 0$ ) et grande longueur d'onde ( $\lambda \rightarrow +\infty$ ), le temps de relaxation caractéristique d'un mode de Goldstone tend vers l'infini.

Afin de comprendre le processus physique à l'origine d'un tel comportement, nous allons prendre l'exemple du ferromagnétisme et donc de spins situés aux noeuds d'un réseau avec une force entre plus proches voisins favorisant l'alignement. Même si cette force agit sur des distances microscopiques, elle parvient, pour une température suffisamment faible, à créer une aimantation moyenne non nulle dans une direction. De manière plus précise, cela signifie que les spins sont orientés en moyenne dans une direction privilégiée. Mais quelle direction ? *A priori*, en l'absence de champ extérieur et si l'on suppose que le réseau n'exerce aucune influence sur l'orientation des spins, cette direction est totalement arbitraire et quelconque. Cela signifie que cela ne coûte absolument aucune énergie de faire tourner, globalement, le système. Et cela signifie par conséquent que cela ne coûte quasiment rien de faire apparaître une fluctuation sinusoïdale transverse de grande lon-

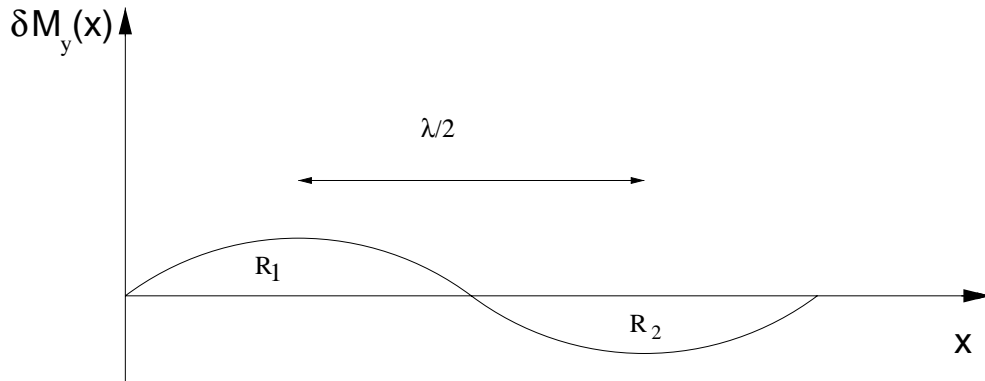


FIG. 2.2 – Représentation d'une fluctuation d'orientation du paramètre d'ordre  $M$  sur la longueur caractéristique  $\lambda$ .

ueur d'onde comme indiquée sur la figure 2.2 (on a choisi la direction  $z$  comme direction privilégiée). Le problème est maintenant de savoir comment et en combien de temps cette fluctuation va disparaître. Dans la région  $R_1$  les spins sont quasiment alignés entre eux. Pas dans la direction  $z$  - mais qu'importe - puisque toutes les directions sont équivalentes du point de vue des interactions microscopiques. Il n'y a donc dans cette région aucune force capable de faire revenir le système dans son état d'équilibre, c'est-à-dire de faire revenir les spins dans la direction  $z$ . En fait, la seule raison qui fait que l'aimantation dans la direction  $y$  va finalement disparaître est que, une demi-longueur d'onde plus loin, la direction d'alignement est différente (région  $R_2$ ). Les spins devront donc, quoiqu'il arrive, tourner pour finalement atteindre l'état d'équilibre global. En ce sens, le processus permettant le retour à l'équilibre nécessite le transport, sur une distance de l'ordre de  $\lambda/2$  de "l'information sur la direction locale d'alignement des spins". évidemment, d'une part, ceci n'est possible que grâce aux corrélations à longue portée et, d'autre part, le temps nécessaire au transport de l'information devient infini dans la limite  $\lambda \rightarrow \infty$ .

Par conséquent, lorsque l'on considère les effets de brisure spontanée de symétrie continue dans le traitement d'un système, le bilan général des modes hydrodynamiques doit inclure non seulement ceux qui sont associés à des grandeurs conservées (cf ??) mais également, comme on vient de le souligner, ceux qui sont associés à la brisure spontanée de symétrie elle-même, du fait de l'existence de corrélations à longue portée. Plus précisément le nombre de modes hydrodynamiques est égal à la somme du nombre de quantités conservées et du nombre de modes de Goldstone issus de la brisure spontanée. Cependant, il est important de remarquer que nous n'avons fait que dénombrer les modes hydrodynamiques en donnant leur origine physique. Les arguments fournis ne nous permettent en aucun cas de prédire la nature de ces modes (convectif ou diffusif). Afin d'accéder à cette information, une étude plus précise des équations est indispensable.

Nous allons maintenant pouvoir décrire le principe de la mise en œuvre de la théorie hydrodynamique d'un gaz de pions. La symétrie spontanément brisée est dans ce cas la symétrie  $SU(2)_L \times SU(2)_R$ .

## 2.3 Hydrodynamique du gaz de pions

Afin de mieux comprendre quelles sont les modifications à apporter à la théorie hydrodynamique elle-même, nous allons, tout au long des deux paragraphes suivants, nous appuyer sur l'exemple de l'He<sup>4</sup> superfluide.

### 2.3.1 Hydrodynamique sans dissipation

A la température  $T_\lambda = 2.18K$ , l'hélium liquide (pouvant être macroscopiquement décrit par les équations du fluide normal) subit une transition de phase vers un état possédant plusieurs propriétés remarquables dont la superfluidité. Cette propriété se manifeste par exemple par l'écoulement du fluide, à travers des fentes très fines, sans viscosité. L'origine de ces propriétés provient de la nature quantique du fluide à des températures aussi basses. L'étude de la superfluidité peut être abordée de façon microscopique [2, 5], mais il existe néanmoins une théorie hydrodynamique macroscopique rendant compte des propriétés de l'hélium : le modèle phénoménologique des deux fluides [3, 6]. Ce modèle considère que le superfluide est constitué en réalité de deux fluides, l'un ayant un comportement "normal", c'est-à-dire visqueux, et l'autre ayant un comportement superfluide. Il faut noter que les deux fluides n'échangent pas d'impulsion comme le feraient deux fluides ordinaires : le superfluide s'écoule à travers le fluide normal sans frottements. Pour chacun de ces fluides on définit une densité et une vitesse d'écoulement,  $n_n$  et  $\vec{v}_n$  pour la partie normale,  $n_s$  et  $\vec{v}_s$  pour la partie superfluide. En réalité ces deux fluides ne sont pas "physiquement" distincts mais tout se passe comme s'ils l'étaient. On peut alors, à partir de cette description, construire une approche hydrodynamique tout à fait correcte du point de vue de la phénoménologie, de l'hélium superfluide. Ce qui est intéressant de noter, toutefois, c'est l'origine de la vitesse superfluide  $\vec{v}_s$ .

En effet, au-delà de ces équations calquées sur celles du fluide normal, il faut également se rendre compte que le passage fluide normal-superfluide à la température critique s'accompagne d'une brisure de symétrie. Plus précisément le paramètre d'ordre de la transition de phase est la valeur moyenne dans l'état fondamental de l'opérateur de champ  $\langle \psi \rangle = \psi_0 e^{i\phi}$ . Le fait que  $\langle \psi \rangle \neq 0$  peut être considéré comme la définition du superfluide dans le même sens que l'aimantation est différente de zéro pour la phase ferromagnétique. En ce qui concerne le magnétisme encore, la transition para-ferro s'accompagne de la brisure de la symétrie par rotation. Pour la superfluidité, la symétrie brisée est la symétrie U(1) associée au nombre de particules. La brisure de cette symétrie étant par ailleurs étroitement reliée au phénomène de condensation de Bose, le module  $\psi_0$  est directement proportionnel au nombre de particules condensées. Du point de vue de l'hydrodynamique, si l'on se situe loin de la transition de phase,  $\psi_0$  peut être ignoré. Par contre la phase  $\phi$  constitue un ingrédient essentiel : il est en effet possible de montrer que  $(\hbar/m)\vec{\nabla}\phi$  n'est rien d'autre que la vitesse superfluide  $\vec{v}_s$  que nous évoquions précédemment. L'incorporation de la brisure de symétrie dans les équations hydrodynamiques va donc se faire *via* cette vitesse superfluide. Par ailleurs, pour conforter ce qui a été dit dans la partie précédente sur le lien entre brisure de symétrie, paramètre d'ordre et corrélations à longue portée,

il est possible de montrer, en étudiant de manière détaillée les fonctions de corrélation, qu'une petite variation de phase en un endroit du système va influencer sur la phase en un autre endroit éloigné : la phase est cohérente à longue distance.

Pour le gaz de pions en présence de matière nucléaire, la démarche reste la même. Le nombre de degrés de liberté hydrodynamiques, quatorze au total, est ainsi divisé en deux catégories. La première rassemble les onze variables hydrodynamiques du fluide chiral associées aux densités des grandeurs conservées, que sont la densité d'entropie  $s$ , la densité de moment  $T^{0i}$ , la densité de nombre baryonique  $n$  et les densités de charge droite et gauche, écrites sous la forme de matrices de  $SU(2)$ ,  $\rho_L \equiv \rho_L^i \tau_i / 2$  et  $\rho_R \equiv \rho_R^i \tau_i / 2$ . La deuxième catégorie de variables est, quant à elle, constituée par les modes de Goldstone associés à la brisure spontanée. Dans le cas de la symétrie chirale, ces modes sont les pions, au nombre de trois ( $\pi_1, \pi_2, \pi_3$  en coordonnées cartésiennes). Ces modes peuvent donc être représentés par une matrice de  $SU(2)$  (3 degrés de liberté car trois générateurs infinitésimaux) :  $\Sigma \equiv e^{i\vec{\tau} \cdot \vec{\pi} / f_\pi}$ , appelée par abus de langage phase du condensat chiral car  $\Sigma$  constitue la généralisation de la phase du condensat superfluide  $\phi$  ( $\phi$  appartenant à  $U(1)$ ) dans  $SU(2)$ .

Pour l'établissement des équations hydrodynamiques elles-mêmes, on peut utiliser (les principaux résultats sont rappelés dans [7]), une méthode générale, particulièrement bien adaptée au cas des brisures de symétrie, et donc au cas du superfluide et du gaz de pions [8]. Il s'agit d'une démarche fondée sur la mécanique analytique [9], qui permet le passage de l'espace de Hilbert d'une part, à l'espace des phases d'autre part dans lequel l'algèbre des crochets de Poisson remplace l'algèbre de Lie des commutateurs. Les opérateurs de première quantification redeviennent des quantités classiques. Les non commutations ne sont alors plus de nature quantique mais de nature matricielle (l'algèbre de  $SU(2)$  est non abélienne). Ainsi, si l'on regarde par exemple les crochets de Poisson spécifiques de la symétrie chirale, on constate que les composantes de  $\rho_L$  et  $\rho_R$  forment, à l'instar de leur homologues quantiques, deux algèbres fermées, séparées ( $\epsilon^{abc}$  est le tenseur complètement antisymétrique de Levi-Civita) :

$$\begin{aligned} \{\rho_L^a(\vec{x}), \rho_L^b(\vec{y})\} &= -\epsilon^{abc} \rho_L^c(\vec{x}) \delta^3(\vec{x} - \vec{y}) \\ \{\rho_R^a(\vec{x}), \rho_R^b(\vec{y})\} &= -\epsilon^{abc} \rho_R^c(\vec{x}) \delta^3(\vec{x} - \vec{y}) \\ \{\rho_L^a(\vec{x}), \rho_R^b(\vec{y})\} &= 0 \end{aligned} \quad (2.2)$$

En écrivant ensuite le hamiltonien le plus général, compatible avec la symétrie chirale, on détermine alors, grâce à ces crochets de Poisson, les équations hydrodynamiques du système [7, 4]. Ces équations sont finalement réécrites sous forme covariante en imposant l'invariance de Lorentz (le flux d'énergie est égal à la densité de moment) et en formant des combinaisons particulières des variables [10].

### 2.3.2 Hydrodynamique avec dissipation

Les équations relativistes pour un fluide normal en présence de processus dissipatifs s'établissent en déterminant la forme des termes supplémentaires dans le tenseur énergie-

impulsion et le vecteur "matière". Soient  $\tau^{\mu\nu}$  et  $\nu_\mu$  ces termes rendant compte de la dissipation ; par conséquent, la conservation de l'énergie-impulsion et du nombre de particules s'écrivent :

$$\partial_\mu(T^{\mu\nu} + \tau^{\mu\nu}) = 0, \quad (2.3)$$

$$\partial_\mu(n_0 u^\mu + \nu_\mu) = 0. \quad (2.4)$$

A cause de ces termes dissipatifs, l'entropie n'est plus conservée. Il est ainsi possible de déduire des équations hydrodynamiques ainsi que des relations thermodynamiques un terme de production d'entropie. Ce terme de production apparaît comme une forme bilinéaire entre les flux et les forces thermodynamiques. On peut ensuite exprimer les flux linéairement (le système est dans un état d'équilibre local, donc proche de l'équilibre global) en fonction de l'ensemble, *a priori*, des forces, les coefficients de proportionnalité étant bien entendu les coefficients de transport.

Cependant, il existe des contraintes sur les termes dissipatifs. Celles-ci sont tout d'abord liées au choix de la définition de la vitesse  $u^\mu$ . En effet, en relativité, on ne peut plus définir la vitesse d'après le flux de masse puisqu'il est lié au flux d'énergie. Le choix de Landau [3] impose par conséquent que dans le référentiel au repos ( $u^0 = 1, u^i = 0$ ) les densités d'énergie et d'impulsion soient données par les mêmes formules qu'en l'absence de dissipation ( $\tau_{00}, \tau_{0i} = 0$ ) et que la composante temporelle du flux de particules coïncide avec la densité de particules  $n_0$  ( $\nu_0 = 0$ ) ; d'où les relations (valables dans tout référentiel) :

$$\begin{aligned} u^\mu \tau_{\mu\nu} &= 0, \\ u^\mu \nu_\mu &= 0. \end{aligned} \quad (2.5)$$

Ces relations, combinées au fait que la production d'entropie doit être une quantité positive (deuxième principe de la thermodynamique), permettent d'éliminer certains termes, de contraindre les signes des coefficients de transport et d'obtenir des relations d'ordre entre eux.

Lorsque l'on est en présence d'un fluide avec symétrie brisée, il est bien entendu nécessaire de tenir compte de termes dissipatifs supplémentaires. Ainsi, par exemple, pour le superfluide, il faut rajouter un terme de dissipation lié à la brisure U(1). Techniquement, prendre en compte un tel terme dans les équations ne pose pas de problème [3]. Physiquement, cela implique l'existence d'un nouveau mode hydrodynamique associé à la nouvelle variable hydrodynamique, la phase du condensat. Ce mode supplémentaire, par rapport au fluide normal, est observable expérimentalement : c'est le second son. Il correspond à un processus propagatif associé à des ondes de température. Plus précisément, cela signifie que le transport de la température qui est un mode diffusif pour le fluide normal peut être maintenant de nature propagative. Ce phénomène s'observe en refroidissant l'hélium en ébullition (à la température de 4,2K) par pompage de l'hélium gazeux. La formation de bulles lors du passage du liquide au gaz est une conséquence du transport diffusif de la chaleur, processus lent qui crée des surchauffes locales. Lorsque l'on atteint la température de transition superfluide, les bulles disparaissent, le mécanisme du second son étant évidemment plus efficace pour transporter la chaleur sous forme d'onde.

Pour le gaz de pions, la prise en compte de la dissipation, bien qu'identique sur le principe à ce qui a été fait pour le superfluide, est assez délicate [10]. Les raisons en sont purement techniques (pour les calculs détaillés, voir [4]). Cela est dû, en premier lieu, au fait qu'il est impossible de partir d'un hamiltonien complètement général et qu'il est par conséquent nécessaire de se donner une forme explicite ; ensuite, ceci est à nouveau dû au fait qu'il faut former des combinaisons linéaires particulières, propres à ce hamiltonien, pour obtenir des équations covariantes ; enfin, la dernière raison est que la dissipation ne peut s'introduire directement dans ces équations car ce ne sont pas les équations physiques : il faut en réalité revenir à l'expression des lois de conservation des courants droits et gauches.

Le fait de considérer une (ou plusieurs) nouvelle variable hydrodynamique permet par ailleurs d'avoir de nouveaux couplages entre, d'une part, les flux associés aux variables hydrodynamiques "classiques" et la (les) force(s) associée(s) à la (aux) nouvelle(s) variable(s) et, d'autre part, le(s) flux associé(s) à la (aux) nouvelle(s) variable(s) et les forces associées aux variables "classiques". Ces couplages liés à la présence de la brisure de symétrie se traduisent par conséquent par l'existence de nouveaux coefficients de transport, à savoir, dans l'exemple du superfluide, deux autres viscosités volumiques. Cette augmentation du nombre de coefficients de transport est tout à fait générale et est également observée pour le gaz de pions puisque finalement une description des phénomènes dissipatifs pouvant survenir dans un tel système nécessite en tout 39 coefficients indépendants [10] ! Bien sûr, une étude complète devrait permettre d'identifier et caractériser l'ensemble des modes hydrodynamiques et d'exprimer tous les coefficients de transport de manière isolée en termes de fonctions de corrélations (formulation de Kubo). Une telle étude serait certainement très importante sur le plan de la physique et permettrait peut-être de prédire de "nouveaux" phénomènes (comme le second son pour le superfluide) ou encore de dégager une interprétation et une méthode de détermination des nouveaux coefficients de transport en essayant de construire des configurations particulières pour lesquelles ces coefficients pourraient avoir une influence importante. Cependant, étant données la durée de vie particulièrement brève et la taille particulièrement petite des systèmes de pions, cette étude revêtait un aspect formel assez prononcé. En effet, les mesures de coefficients de transport, même "habituels" (viscosité, conductivité thermique), sont très délicats à réaliser pour des systèmes petits : par exemple, la viscosité de la matière nucléaire dans les collisions à basse énergie au GANIL, avec des systèmes de plusieurs dizaines de nucléons n'a pas encore pu être mesurée. On peut par conséquent penser, qu'à plus haute énergie, et pour des systèmes à durée de vie encore plus courte, des valeurs précises pour tous ces coefficients sont difficilement envisageables. Nous avons donc préféré nous limiter au calcul d'un seul coefficient de transport, la viscosité de cisaillement  $\eta$ , qui avait déjà fait l'objet de travaux antérieurs par des approches différentes [11, 12, 13, 14] et qui avait été perçue comme importante dans l'évolution du profil de température observé dans les collisions d'ions lourds ultra-relativistes. Nous allons donc insister sur ces deux aspects (calcul de  $\eta$  et profil de température) dans les paragraphes suivants.

## 2.4 Calcul de la viscosité

Comme nous l'avons mentionné dans le paragraphe précédent, le calcul de la viscosité que nous allons aborder ici n'a pas d'objectif prédictif en vue de mesures expérimentales précises : il s'agit plus de "valider" notre méthode en comparant à des valeurs obtenues dans la littérature par des approches différentes.

Même si les termes dissipatifs contiennent des termes supplémentaires dûs à la brisure de symétrie, la structure demeure néanmoins la même en ce qui concerne les termes relatifs à la viscosité de cisaillement. Par conséquent, la formule de Kubo énoncée dans le premier paragraphe pour un fluide normal demeure valable. Il suffit donc de calculer la fonction de corrélation à partir d'un modèle microscopique, par exemple le modèle  $\sigma$  non linéaire, dont le lagrangien, à l'ordre quatre dans le champ de pion, s'écrit (dans une certaine représentation) :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial_\mu \vec{\pi} \cdot \partial^\mu \vec{\pi} - \frac{m_\pi^2}{2} \vec{\pi} \cdot \vec{\pi} + \frac{1}{f_\pi^2} \left[ -m_\pi^2 \frac{1}{24} (\vec{\pi} \cdot \vec{\pi})^2 + \vec{\pi} \cdot \vec{\pi} \partial_\mu \vec{\pi} \cdot \partial^\mu \vec{\pi} + \frac{1}{2} (\vec{\pi} \cdot \partial_\mu \vec{\pi})^2 \right]. \quad (2.6)$$

Le lagrangien ci-dessus a une partie identique à celui du modèle du champ scalaire  $\lambda\phi^4$ , dans lequel le champ serait un vecteur à trois composantes scalaires et où la constante de couplage  $\lambda$  s'identifierait à  $3m_\pi^2/f_\pi^2$ . La seule différence réside en fait dans la présence d'un terme d'interaction supplémentaire, le couplage dérivatif  $(\vec{\pi} \cdot \partial_\mu \vec{\pi})(\vec{\pi} \cdot \partial^\mu \vec{\pi})/2f_\pi^2$ . La définition du tenseur énergie-impulsion étant :

$$\begin{aligned} T^{\mu\nu} &= \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial(\partial^\mu \vec{\pi})} \cdot \partial^\nu \vec{\pi} - g^{\mu\nu} \mathcal{L} \\ &= \partial^\mu \vec{\pi} \cdot \partial^\nu \vec{\pi} + \frac{1}{f_\pi^2} \vec{\pi} \cdot \partial^\mu \vec{\pi} \vec{\pi} \cdot \partial^\nu \vec{\pi} - g^{\mu\nu} \left[ \frac{1}{2} (\partial^\rho \vec{\pi})^2 - \frac{m_\pi^2}{2} \vec{\pi}^2 - \frac{m_\pi^2}{8f_\pi^2} \vec{\pi}^4 + \frac{1}{2f_\pi^2} (\vec{\pi} \cdot \partial^\rho \vec{\pi})^2 \right]. \end{aligned}$$

on voit immédiatement que ce couplage dérivatif va impliquer la présence de fonctions de Green à quatre, six et huit points dans l'expression de la viscosité. Le calcul de telles fonctions de Green est particulièrement complexe. Aussi, même si cela n'est pas satisfaisant en vue d'obtenir des valeurs numériques extrêmement précises pour la viscosité elle-même, nous allons simplement factoriser les fonctions de Green en produits de propagateurs à une

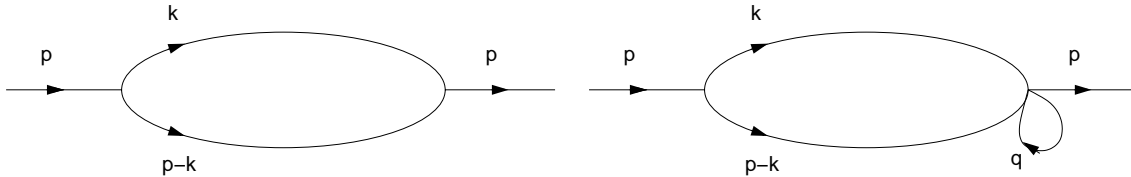


FIG. 2.3 – Représentation diagrammatique de la fonction de Green à quatre champs (à gauche) et à six points (à droite).

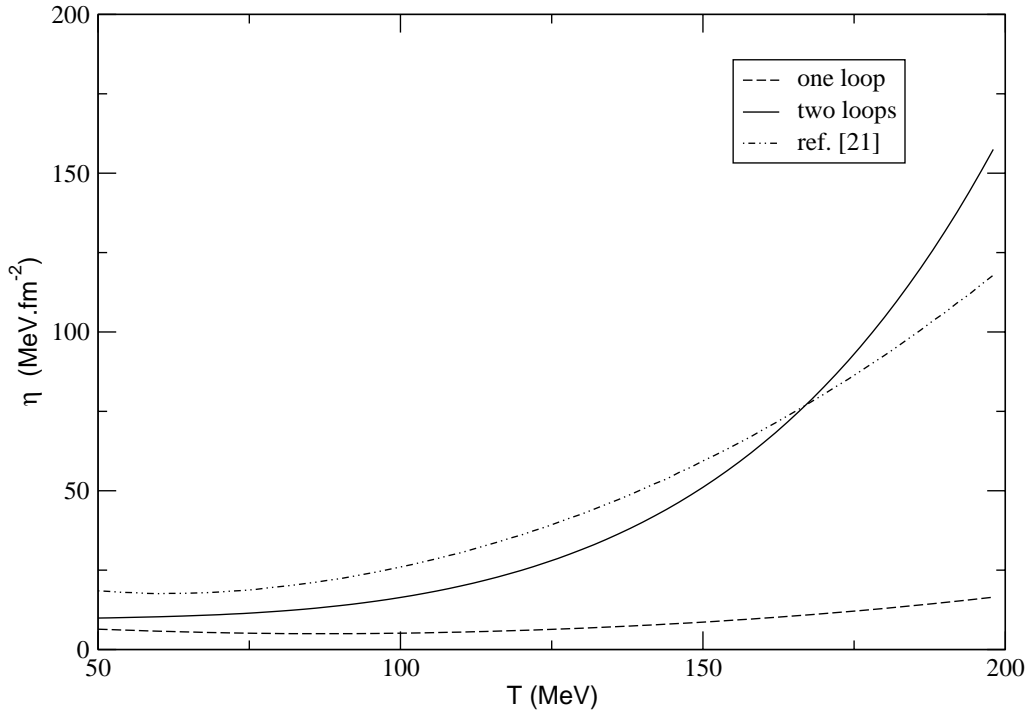


FIG. 2.4 – Résultats numériques pour la viscosité de cisaillement d'un gaz de pions.

particule. La fonction de Green à quatre points apparaît alors comme une simple boucle (voir figure 2.3) et celle à six points comme une correction de vertex (voir figure 2.3). Le dernier terme (fonction de Green à huit points), quant à lui, est au minimum un graphe à trois boucles et sera donc négligé.

On peut alors montrer que la fonction de corrélation, et par conséquent la viscosité, ne dépendent que de quantités connues [4]. Il est alors possible de faire le calcul explicite (voir figure 2.4).

Sur cette figure 2.4 est également représentée la viscosité de cisaillement issue d'un calcul différent fondé sur l'équation de Boltzmann, *via* un développement de Chapman-Enskog [12]. On constate que le résultat venant de la fonction de corrélation (courbe en trait plein) lui est directement comparable : les deux courbes ont le même comportement croissant, se croisent pour une température  $T \simeq 160$  MeV et diffèrent l'une de l'autre d'environ d'environ 30% dans le domaine des basses et hautes températures. étant données les approximations faites dans ce travail, on peut conclure que cette approche par la formulation de Kubo est non seulement compatible avec celle mentionnée ici [12] mais également avec les autres



calculs de viscosité de gaz de pions de la littérature [13, 14, 11]. La théorie cinétique et l'équation de Boltzmann sont traditionnellement utilisées pour calculer les propriétés de transport d'un système de particules que l'on peut traiter classiquement (excepté durant de brèves collisions). Quand le système est à l'équilibre local, et évolue vers l'équilibre global, on peut déterminer une solution de l'équation *via* le développement de Chapman-Enskog et ainsi obtenir une formule pour  $\eta$  [12]. La physique statistique hors équilibre, quant à elle, permet d'obtenir *via* la théorie de la réponse linéaire une formule de Kubo pour  $\eta$  qui est une fonction de corrélation. La validité de l'équation de Boltzmann est *a priori* plus réduite que l'hydrodynamique en général : elle concerne uniquement la physique des systèmes dilués où les collisions sont rares et violentes. Mais dans ce cas précis, il doit être normalement possible de comprendre pourquoi les deux approches conduisent à des résultats similaires. En fait, on peut montrer que les ingrédients physiques nécessaires à la description d'un système dans l'approche boltzmanienne et dans notre approche sont essentiellement les mêmes et conduisent formellement aux mêmes équations intégrales pour le calcul de la viscosité [15]. D'un côté nous avons en effet la section efficace pion-pion (dans le terme de collision) et de l'autre l'amplitude de diffusion pion-pion (dans la largeur). En fait, de nouveau, la "seule" différence provient du domaine de validité des deux approches. Le domaine de validité de l'équation de Boltzmann est plus restrictif du côté des hautes températures (le libre parcours moyen doit être supérieur à la longueur d'onde de Compton) et donc près de la transition de phase. Donc *a priori*, même si des améliorations peuvent encore être apportées au calcul, notre approche *via* les fonctions de corrélations semble être la meilleure et la plus prometteuse lorsque l'on approche la transition de phase (même si dans ce cas, comme nous l'avons déjà mentionné, les fluctuations du paramètre d'ordre doivent être incorporées). Un travail en ce sens mériterait d'être entrepris. Nous allons cependant terminer cette partie portant sur l'hydrodynamique du gaz de pions sur un aspect moins formel en présentant une application aux collisions d'ions lourds ultra-relativistes.

## 2.5 Application aux collisions d'ions lourds ultra-relativistes

L'hydrodynamique relativiste est fréquemment utilisée pour décrire les collisions d'ions lourds, lorsque l'on veut reproduire l'évolution spatio-temporelle de la matière dense et chaude créée dans de tels événements. En faisant l'hypothèse de l'équilibre local, cette approche donne directement une description de ce qui se passe jusqu'au "freeze-out", en termes de température, pression, etc... On suppose également souvent que la matière produite est idéale, c'est-à-dire que l'on considère un fluide normal, non dissipatif. Des modèles simples ont été développés pour la description de la géométrie des collisions d'ions lourds ultra-relativistes, dont le modèle de Bjorken qui a le grand intérêt de fournir des solutions analytiques.

Le modèle de Bjorken initial est un modèle hydrodynamique à  $(1+1)$  dimensions, valide à très haute énergie ( $E_{CM} \geq 100A.MeV$ ) [16, 17, 18]. Dans ce modèle, les deux noyaux, d'épaisseur négligeable à cause de la contraction de Lorentz, se traversent (dans cette gamme d'énergie, ils deviennent transparents l'un pour l'autre) puis déposent une grande

quantité d'énergie derrière eux. A  $(1 + 1)$  dimensions, seule l'expansion longitudinale est à considérer et le système est donc contenu dans un cylindre. Avec ces hypothèses, la collision se schématise comme suit :

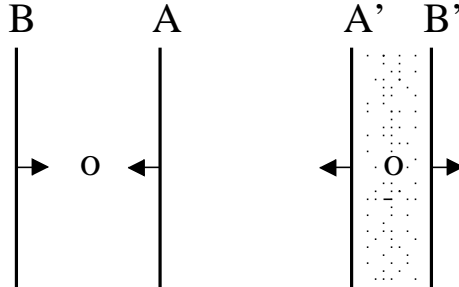


FIG. 2.5 – Schéma d'une collision d'ions lourds ultrarelativistes,  $A$  et  $B$ , dans le modèle de Bjorken, avant et après collision.

Les conditions initiales du fluide se spécifient sur une hyperbole de temps propre constant  $\tau_0$ . La coordonnée permettant de se repérer sur cette hyperbole est la rapidité  $y$ . Les particules issues d'une collision sont caractérisées par un temps caractéristique  $\tau$ . Si l'on suppose qu'elles ont été créées en  $(t, z) = (0, 0)$  et que l'on les assimile à des particules libres, alors  $\tau = \sqrt{t^2 - z^2}$ .

Le comportement du système peut se visualiser à l'aide d'un diagramme d'espace-temps suivant :

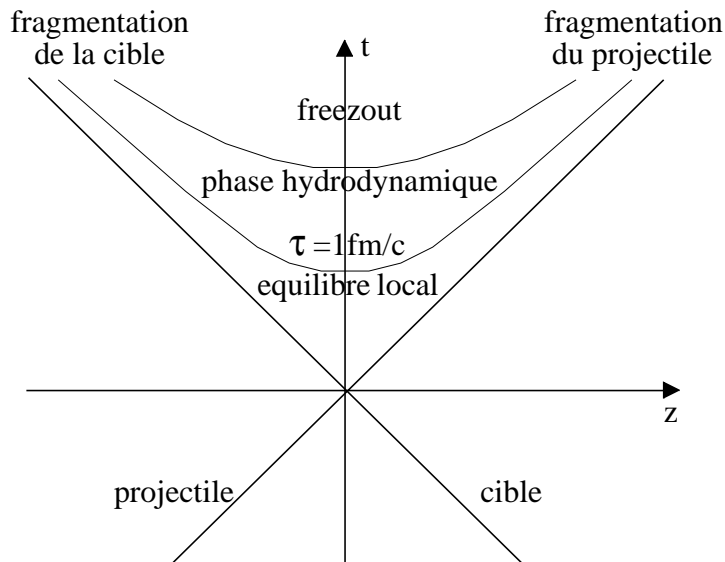


FIG. 2.6 – évolution dans l'espace-temps de la région centrale de rapidité dans le modèle de Bjorken : hyperboles paramétrées par le temps propre  $\tau$ .

Ce diagramme d'espace-temps comporte différentes parties, délimitées par des hyperboles  $\tau = \text{cte}$  à l'intérieur du cône de lumière [16] : pour  $\tau \leq \tau_0$ , nous sommes dans la zone d'existence éventuelle du plasma de quarks et de gluons ; il y a thermalisation du système jusqu'à obtention de l'équilibre local puis hadronisation en  $\tau = \tau_0$  (pour fixer les échelles de temps, si le plasma de quarks et de gluons n'est pas formé,  $\tau_0$  est au minimum de l'ordre du  $\frac{fm}{c}$ ). Pour  $\tau \geq \tau_0$ , le régime hydrodynamique devient rapidement valide et le gaz de pions évolue jusqu'à  $\tau_f$ , temps de "freeze-out", régime asymptotique correspondant à la libération des pions : ces derniers s'échappent du milieu dense et deviennent libres.

Comme mentionné précédemment, les variables pertinentes nécessaires à la description d'espace-temps de la collision ne sont pas  $t$  et  $z$  mais uniquement  $\tau$  car, par hypothèse, dans le modèle de Bjorken, les grandeurs sont indépendantes de la rapidité (à  $(1+1)$  dimensions, cette hypothèse est réaliste pour  $\tau \leq R/c \simeq 6fm/c$ , avec  $R$ , rayon des noyaux ; au-delà, un modèle à  $(3+1)$  dimensions est nécessaire [17]). La température, la pression, la densité d'énergie ou encore l'entropie ne dépendent donc que de  $\tau$ . Plus précisément, chacune de ces grandeurs suit une loi d'échelle. Par exemple, pour la température, nous avons :  $T(\tau) = T(\tau_0) \left(\frac{\tau_0}{\tau}\right)^{1/3}$ .

Lorsque l'on désire aller au-delà du fluide parfait, cette loi d'échelle n'est évidemment plus valable. Nous avons ainsi cherché à estimer, d'une part, l'effet de la brisure de symétrie, et d'autre part, l'effet de la dissipation. Pour la brisure de symétrie, nous avons considéré les équations hydrodynamiques décrites dans les paragraphes précédents à l'ordre le plus bas dans le champ de pions et le système comme ultrarelativiste. Il a ainsi été montré que, sous ces approximations, la loi d'échelle précédente, valable pour le gaz parfait ultrarelativiste, était modifiée par un terme qui, quantitativement, était de l'ordre du pourcent [19]. Pour la dissipation, par contre, les choses sont un peu plus compliquées. Il existe en effet plusieurs niveaux "de précision" pour la prendre en compte. Ainsi, l'ordre un correspond à l'hypothèse de linéarité du flux d'entropie dans les quantités dissipatives (comme pour les lois phénoménologiques de Fourier et Fick) : lorsqu'une inhomogénéité apparaît dans le système, ce dernier réagit, et un flux proportionnel au gradient se développe pour restaurer l'équilibre. Le second ordre, quant à lui, correspond au cas où le flux d'entropie est supposé quadratique dans les quantités dissipatives. Ceci s'avère en fait nécessaire pour remédier au problème bien connu de l'instabilité du premier ordre (qui conduit notamment à des temps de relaxation infinis). Il faut alors introduire alors un temps de relaxation pour les flux (théorie de Müller-Israel-Stewart). Leur détermination n'est absolument pas directe. Il faut en effet commencer par calculer les coefficients de transport par le biais de l'approche de la théorie cinétique fondée sur l'équation de Boltzmann *via* le développement de Chapman-Enskog. Par suite, ce n'est qu'en lui adjoignant la méthode des 14 moments de Grad, que l'on pourra accéder aux temps de relaxation [20]. En incorporant alors les valeurs de la viscosité de cisaillement et du temps de relaxation associé tirés de [12], on peut explicitement calculer l'évolution en température dans le cadre du modèle de Bjorken avec dissipation au premier et au deuxième ordre (cf [19]). Les résultats sont présentés sur la figure 2.7).

On peut observer que les premier et second ordres sont de même amplitude mais environ

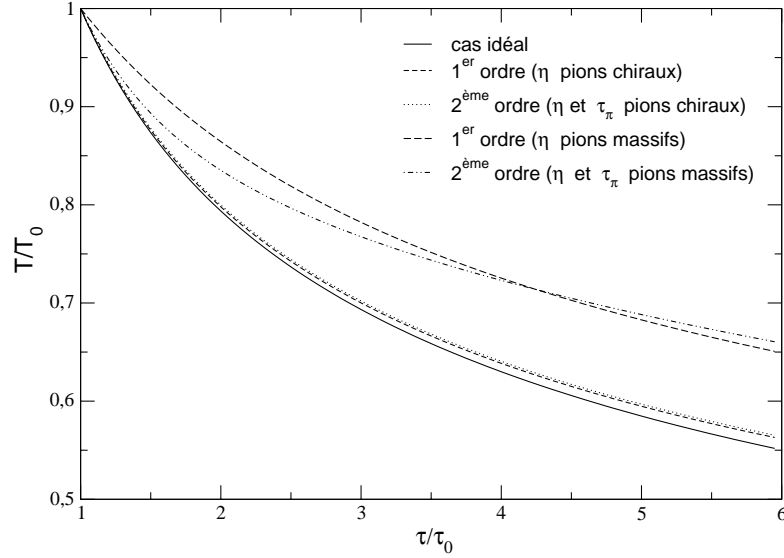


FIG. 2.7 – Profil de température par rapport au temps propre pour le fluide parfait, le premier et le second ordre de la théorie dissipative.

20% au-dessus du fluide parfait. Par exemple, pour une température initiale de 200 MeV, la température passe de 110 MeV pour le cas idéal à 140 MeV avec les effets dissipatifs pour  $\tau/\tau_0 = 6$ . Cela signifie que les effets dissipatifs induisent un refroidissement plus lent du système, et par conséquent devraient être pris en compte dans les simulations des collisions d'ions lourds.

## 2.6 Conclusion

Dans cette partie, nous avons étudié les modifications au niveau de la théorie hydrodynamique elle-même, dues à la brisure spontanée de la symétrie chirale. Nous avons notamment pu mettre en évidence que les équations hydrodynamiques devaient contenir les modes de Goldstone. Par ailleurs, lorsque la dissipation est incluse dans la théorie, de nouveaux coefficients de transport apparaissent. Il serait bien évidemment intéressant au niveau physique d'essayer de mettre en évidence des configurations géométriques dans lesquelles ces nouveaux coefficients pourraient avoir de l'importance. Néanmoins, étant données les faibles dimensions et durée de vie du système, nous avons préféré nous concentrer sur un coefficient particulier, la viscosité de cisaillement, qui avait déjà fait l'objet d'études antérieures. Nous avons ainsi pu constater que les valeurs obtenues par notre méthode (formulation de Kubo) sont tout à fait comparables aux valeurs de la littérature. Cette

approche semble toutefois plus prometteuse dans le sens où, sous la condition expresse d'inclure les fluctuations du condensat, il sera *a priori* possible d'approcher la transition de phase et donc de déterminer un exposant critique dynamique. Finalement, nous avons essayé de déterminer si le modèle du fluide idéal relativiste était justifié ou non pour la description de la phase hadronique formée dans les collisions d'ions lourds ultra-relativistes. Nous avons ainsi pu mettre en évidence dans le cadre d'un modèle géométrique simple, le modèle de Bjorken à  $1 + 1$  dimensions, que l'effet de la brisure de symétrie était négligeable sur le profil d'évolution de la température mais que l'effet de la dissipation était de l'ordre de 20%.

---

## Bibliographie

---

- [1] C. Vidal, G. Dewel, and P. Borckmans. *Au-delà de l'équilibre*. Hermann, 1994.
- [2] D. Forster. *Hydrodynamic fluctuations, broken symmetry and correlation functions*. Benjamin, 1975.
- [3] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Cours de Physique Théorique. Vol.6 : Mécanique des Fluides*. MIR, 1989.
- [4] Pujol Céline. *Hydrodynamique et brisure de symétrie chirale : application au gaz de pions et calcul de coefficients de transport*. PhD thesis, IPN Lyon, 2003. LYCEN T 2003-.
- [5] L. D. Landau and E. M. Lifshitz. *Course of Theoretical Physics. Vol.9 : Statistical Physics Part II*. Bergamon Press, 1980.
- [6] S.J. Putterman. *Superfluid Hydrodynamics*. North-Holland/American Elsevier, 1974.
- [7] D. T. Son. Hydrodynamics of nuclear matter in the chiral limit. *Phys. Rev. Lett.*, 84 :3771–3774, 2000.
- [8] D. T. Son. Hydrodynamics of relativistic systems with broken continuous symmetries. *Int. J. Mod. Phys.*, A16S1C :1284–1286, 2001.
- [9] I.E. Dzyaloshinskii and G.E. Volovick. Poisson brackets in condensed matter physics. *Annals of Physics*, 125 :67–97, 1980.
- [10] C. Pujol and D. Davesne. Relativistic dissipative hydrodynamics with spontaneous symmetry breaking. *Phys. Rev.*, C67 :014901, 2003.
- [11] P. Danielewicz. Transport properties of excited nuclear matter and the shock wave profile. *Phys. Lett.*, B146 :168–175, 1984.
- [12] Dany Davesne. Transport coefficients of a hot pion gas. *Phys. Rev.*, C53 :3069–3084, 1996.
- [13] Madappa Prakash, Manju Prakash, R. Venugopalan, and G. Welke. Nonequilibrium properties of hadronic mixtures. *Phys. Rept.*, 227 :321–366, 1993.
- [14] Felipe J. Llanes-Estrada and Antonio Dobado. Pion gas viscosity. 2003.
- [15] Sangyong Jeon. Hydrodynamic transport coefficients in relativistic scalar field theory. *Phys. Rev.*, D52 :3591–3642, 1995.
- [16] L.-P. Csernai. *Introduction to Relativistic Heavy Ion Collisions*. John Wiley and Sons, 1994.
- [17] J. D. Bjorken. Highly relativistic nucleus-nucleus collisions : The central rapidity region. *Phys. Rev.*, D27 :140–151, 1983.

- [18] Cheuk-Yin Wong. *Introduction to High-Energy Heavy-Ion Collisions*. World Scientific, 1994.
- [19] Y. Lallouet, D. Davesne, and C. Pujol. Hydrodynamics with spontaneous symmetry breaking : Application to relativistic heavy ion collisions. *Phys. Rev.*, C67 :057901, 2003.
- [20] S. R. De Groot, W. A. Van Leeuwen, and C. G. Van Weert. *Relativistic Kinetic Theory*. North Holland Publishing Compagny, 1980.

## Publication 4



# Relativistic dissipative hydrodynamics with spontaneous symmetry breaking

C. Pujol and D. Davesne

IPN Lyon, 43 Bd du 11 Novembre 1918, F-69622 Villeurbanne Cedex, France

(Received 30 April 2002; published 15 January 2003)

In this paper we consider dissipative hydrodynamic equations for systems with continuous broken symmetries. We first present the case of superfluidity, in which the symmetry  $U(1)$  is broken and then generalize to the chiral symmetry  $SU(2)_L \times SU(2)_R$ . The corresponding new transport coefficients are introduced.

DOI: 10.1103/PhysRevC.67.014901

PACS number(s): 25.75.-q, 11.30.Rd

## I. INTRODUCTION

Relativistic hydrodynamics has often been used as a starting point in the field of heavy ion collisions in order to reproduce single-particle spectra or multiparticle correlations (see Ref. [1], for example). However, the hot and dense hadronic phase created in such experiments is mainly constituted of pions and, until recently [2], no care has been taken on the fact that the breaking of the chiral symmetry can affect the theory of hydrodynamics itself [3,4]. Among all the applications of such a modification of the theory, two main directions emerge: first, it is highly wished to have a quantitative estimation of this effect when reproducing the experimental spectra [5] and, second, the aim of this paper, it is important to complete the whole theory, that is, to include dissipation.

In hydrodynamic regime, relevant variables are those whose variations in space and time are slow and relaxation time becomes infinite in the long wavelength, small frequency limit. Such variables are of two kinds: densities of conserved quantities and Goldstone modes associated to continuous broken symmetry [6]. The prototype of such a theory which includes both types of hydrodynamic variables is the well-established theory of superfluidity associated to the breaking of  $U(1)$  and developed many years ago by Landau [7] in the nonrelativistic case (see also Refs. [8,9] in the relativistic domain). The example of the superfluidity will be used in the first part as a guideline in order to show explicitly how to include dissipation in hydrodynamic equations with a broken continuous symmetry. Then, in a second part, we will generalize to the case of  $SU(2)_L \times SU(2)_R$ : starting from the equations of ideal hydrodynamics, we will introduce explicitly new transport coefficients associated to the chiral charge densities and Goldstone modes.

## II. SUPERFLUIDITY

Let us focus on our first example of hydrodynamics with a continuous broken symmetry: the superfluidity. As mentioned in the Introduction, the spontaneous breaking of a continuous symmetry implies that the Goldstone modes are hydrodynamic variables, i.e., relax very slowly to equilibrium in the long wavelength, small frequency limit. Concerning the superfluid, one therefore has to introduce  $\phi$ , which is the phase of the condensate which breaks the  $U(1)$  symmetry associated to the particle number, in our theory. More precisely, the equations for ideal (that is without dissipation) relativistic superfluid can be written as [10]

$$\partial_\mu (n_0 u^\mu - V^2 \partial^\mu \phi) = 0, \quad (1)$$

$$\partial_\mu T^{\mu\nu} = 0, \quad (2)$$

$$u^\mu \partial_\mu \phi = -\mu_0, \quad (3)$$

where  $T^{\mu\nu}$  is the energy-momentum tensor,  $V^2$  is the superfluid density in the nonrelativistic limit, and  $\mu_0 = \gamma\mu$  is the chemical potential ( $\gamma$  is the Lorentz factor). We have to notice at this stage that the third equation is equivalent to the one contained in the original two-fluid model of Landau [7] when making the correspondence:

$$\mu = \mu_{\text{Landau}} + \frac{v_s^2}{2} - \vec{v}_n \cdot \vec{v}_s,$$

where  $\vec{v}_n$  is the spatial part of the four-velocity  $u^\mu = \gamma(1, \vec{v}_n)$  and  $\vec{v}_s = (1/m)\vec{\nabla}\phi$  is the superfluid velocity.

We can see that the presence of the new hydrodynamic variable  $\phi$  manifests itself not only in the third equation but also in the first one (conservation of particle number) and in the second one since  $T^{\mu\nu}$  is equal to

$$T^{\mu\nu} = (\epsilon + p)u^\mu u^\nu - pg^{\mu\nu} + V^2 \partial^\mu \phi \partial^\nu \phi. \quad (4)$$

Since we are dealing with an ideal fluid the entropy conservation must be satisfied. Actually it is already contained in the second above equation when projected along the direction of  $u^\nu$ :  $u_\nu \partial_\mu T^{\mu\nu} = 0 \Rightarrow \partial_\mu (s_0 u^\mu) = 0$ .

Now, we can go further and add dissipative terms in the hydrodynamic equations. The method, described, for example, in Ref. [7], consists in introducing fluxes such as

$$\partial_\mu (n_0 u^\mu - V^2 \partial^\mu \phi + v^\mu) = 0, \quad (5)$$

$$\partial_\mu ((\epsilon + p)u^\mu u^\nu - pg^{\mu\nu} + V^2 \partial^\mu \phi \partial^\nu \phi + \tau^{\mu\nu}) = 0, \quad (6)$$

$$u^\mu \partial_\mu \phi = -\mu_0 - \phi'_0. \quad (7)$$

Moreover, our choice for the hydrodynamic velocity  $u^\mu$  imposes that  $u_\mu \tau^{\mu\nu} = 0$  and  $u_\mu v^\mu = 0$  (the Eckart choice leads to other constraints, see Ref. [11], for example).

With these equations, we are now able to derive explicitly the new equation for the entropy. Writing  $u_\nu \partial_\mu T^{\mu\nu} = 0$ , we obtain

$$\partial_\mu \left( s_0 u^\mu - \frac{\mu_0}{T_0} \nu^\mu \right) = -\nu^\mu \partial_\mu \frac{\mu_0}{T_0} + \frac{\phi'_0}{T_0} \partial_\mu (V^2 \partial^\mu \phi) + \frac{\tau^{\mu\nu}}{T_0} \partial_\mu u_\nu. \quad (8)$$

This equation has the generic form  $\partial_\mu S^\mu = \sigma$ , where  $S^\mu$  is the total four-flow entropy and  $\sigma$  the entropy production.  $\sigma$  is a bilinear form between fluxes and thermodynamic forces. In the hydrodynamic regime, we are by definition near the global equilibrium so that we can express linearly the relation between these fluxes and these forces. The coefficients of proportionality are called the transport coefficients. Their physical meaning is thus to characterize the magnitude of the response of the system (flows) to a certain disturbance (thermodynamic forces).

Moreover, because of thermodynamics,  $\sigma$  must be positive. This constraint when combined with the Onsager principle leads to

$$\nu^\mu = \kappa (g^{\mu\nu} - u^\mu u^\nu) \partial_\nu \left( \frac{\mu_0}{T_0} \right), \quad (9)$$

$$\tau^{\mu\nu} = (g^{\mu\nu} - u^\mu u^\nu) \left[ \zeta_1 \partial_\lambda (V^2 \partial^\lambda \phi) + \left( \zeta_2 - \frac{2}{3} \eta \right) \partial_\lambda u^\lambda \right] + \eta [(g^{\mu\lambda} - u^\mu u^\lambda) \partial_\lambda u^\nu + (g^{\lambda\nu} - u^\lambda u^\nu) \partial_\lambda u^\mu], \quad (10)$$

$$\phi'_0 = \zeta_1 \partial_\mu u^\mu + \zeta_3 \partial_\mu (V^2 \partial^\mu \phi), \quad (11)$$

where  $\kappa$  is proportional to the thermal conductivity and  $\eta, \zeta_1, \zeta_2, \zeta_3$  are the shear and bulk viscosities (notations are those defined in Ref. [7]). The positivity of  $\sigma$  implies that  $\eta, \zeta_2, \zeta_3$  are positive and  $\zeta_1^2 \leq \zeta_2 \zeta_3$ . The sign of  $\zeta_1$  has to be determined by physical considerations only (here, it can be checked by comparison with Ref. [7] that  $\zeta_1$  is positive as well).

### III. CHIRAL DYNAMICS

#### A. Ideal fluid

In this section, we are going to recall the main results of hydrodynamics with chiral SU(2) symmetry spontaneously broken [2]. The hydrodynamic degrees of freedom in a chiral fluid are the densities of the conserved quantities, namely, entropy density  $s$ , momentum density  $T^{0i}$ , baryonic number density  $n$ , left and right-handed charge densities written as SU(2) matrices  $\rho_L \equiv \rho_L^i \tau_i / 2$  and  $\rho_R \equiv \rho_R^i \tau_i / 2$  and finally the variables associated to the Goldstone modes. For chiral symmetry, these modes are actually the pions. Then, following Ref. [2], we can write the new hydrodynamic variables as a SU(2) matrix  $\Sigma \equiv e^{i\vec{\tau} \cdot \vec{\pi} / f_\pi}$  and, by analogy with the superfluid, denote  $\Sigma$  as ‘‘phases.’’ The energy density  $T^{00}$  is a function of all these variables and of the first partial derivatives of  $\Sigma$  (assuming  $\Sigma$  varies slowly). Following again Ref. [2] we thus write the energy density  $T^{00}$  as

$$T^{00} = \epsilon_0(s, n, T^{0i}) + \epsilon_1,$$

where  $\epsilon_0$  is the ‘‘normal fluid’’ part and  $\epsilon_1$  contains all the non trivial terms, at lowest order, compatible with chiral symmetry

$$\begin{aligned} \epsilon_1 = & \frac{f_s^2}{4} \left( \delta_{ij} - \frac{1 - v_\pi^2}{1 - v_\pi^2 v^2} v^i v^j \right) \text{tr} \partial_i \Sigma \partial_j \Sigma^\dagger \\ & + \frac{1}{\gamma^2 f_t^2 (1 - v_\pi^2 v^2)} \text{tr} (\rho_L - \Sigma \rho_R \Sigma^\dagger)^2 \\ & + \frac{1}{\gamma^2 f_v^2} \text{tr} (\rho_L + \Sigma \rho_R \Sigma^\dagger)^2 - i \frac{v_\pi^2}{\gamma^2 (1 - v_\pi^2 v^2)} \\ & \times v^k \text{tr} (\rho_L \Sigma \partial_k \Sigma^\dagger + \Sigma^\dagger \partial_k \Sigma \rho_R), \end{aligned}$$

where  $v_\pi \equiv f_s / f_t$  is the pion velocity and  $f_s, f_t$ , and  $f_v$  are functions to be determined by thermodynamics of the underlying fundamental theory, namely QCD.

We have fourteen hydrodynamics variables. Therefore we must have fourteen hydrodynamics equations. With the Hamiltonian density above, it is possible to show [2] that the equations can be written in a covariant way only if we make some combinations of the initial variables. Finally the result is

$$\partial_\mu (n_0 u^\mu) = 0, \quad (12)$$

$$\partial_\mu T^{\mu\nu} = 0, \quad (13)$$

$$\partial_\mu (\alpha u^\mu) + \frac{1}{2} [A, \alpha] = 0, \quad (14)$$

$$i \partial_\mu ((f_t^2 - f_s^2) u^\mu A + f_s^2 \Sigma \partial^\mu \Sigma^\dagger) + [A, \alpha] = 0, \quad (15)$$

with  $T^{\mu\nu} = (\epsilon + p) u^\mu u^\nu - p g^{\mu\nu} + (f_s^2 / 4) \text{tr} (\partial^\mu \Sigma \partial^\nu \Sigma^\dagger + \partial^\nu \Sigma \partial^\mu \Sigma^\dagger)$  and  $A = u^\mu \Sigma \partial_\mu \Sigma^\dagger$ .

The nine equations which are specific to chiral dynamics ( $\partial_\mu J^\mu_{L,R} = 0$  and the first order equation for  $\Sigma$ ) are actually contained in the first order equation (14) for  $\alpha \equiv (\rho_L + \Sigma \rho_R \Sigma^\dagger) / \gamma$  and in the second order equation (15) for  $\Sigma$  constructed from the combination  $(\rho_L - \Sigma \rho_R \Sigma^\dagger)$ .

Once again, starting from Eq. (13) and using all the other (hydrodynamic and thermodynamic) equations, it is possible to deduce the entropy conservation  $\partial_\mu (s_0 u^\mu) = 0$  as it should be for a perfect fluid. At this stage, we can already make some comparisons with the superfluid. First of all if  $\Sigma$  was associated with the breaking of U(1) type symmetry, namely,  $\Sigma = e^{i\phi}$ , then  $i \Sigma \partial_\mu \Sigma^\dagger$  would be equal to  $\partial_\mu \phi$ . This means that  $i \Sigma \vec{\nabla} \Sigma^\dagger$  plays the role of superfluid velocity. Then, by direct comparison between the energy-momentum tensors [for U(1) and SU(2)], we see that  $f_s^2 / 2$  can be interpreted as ‘‘superfluid density.’’

#### B. Dissipation

We are now in position to treat the dissipation case. As for the superfluid, we add some dissipative flux densities to con-

ervation equations:  $\nu^\mu$  for baryonic number,  $j_{L,R}^\mu \equiv j_{L,R;i}^\mu \tau_i/2$  for chiral charges and  $\tau^{\mu\nu}$  for energy-momentum tensor; and we add also a dissipative term for the other non-conserved variables  $(i/2)\Sigma'_0 \equiv (i/2)\Sigma'_{0,i} \tau_i/2$ .

Then, performing the same combinations as in the previous section, we can finally write after some calculations

$$\partial_\mu(n_0 u^\mu + \nu^\mu) = 0, \quad (16)$$

$$\partial_\mu \left( (\epsilon + p) u^\mu u^\nu - p g^{\mu\nu} + \frac{f_s^2}{4} \text{tr}(\partial^\mu \Sigma \partial^\nu \Sigma^\dagger + \partial^\nu \Sigma \partial^\mu \Sigma^\dagger) + \tau^{\mu\nu} \right) = 0, \quad (17)$$

$$\partial_\mu(\alpha u^\mu) + \frac{1}{2}[A^{(0)}, \alpha] = -\partial_\mu j_L^\mu - \Sigma \partial_\mu j_R^\mu \Sigma^\dagger, \quad (18)$$

$$i \partial_\mu [(f_i^2 - f_s^2) u^\mu A^{(0)} + f_s^2 \Sigma \partial^\mu \Sigma^\dagger] + [A^{(0)}, \alpha] = 2 \partial_\mu j_L^\mu - 2 \Sigma \partial_\mu j_R^\mu \Sigma^\dagger \quad (19)$$

with  $A = A^{(0)} + (i/2)\Sigma'_0$  which is the dissipative first order equation for  $\Sigma$ .  $A^{(0)}$  represents the nondissipative part of  $A$ . With these new equations, it is a simple task to express the equation for the entropy (note that, since the expressions for  $\epsilon$  and  $p$  must be given by the same formula as in the non-dissipative case,  $\epsilon$  and  $p$  depend actually only on  $A^{(0)}$  and not on  $A$ ):

$$\begin{aligned} \partial_\mu \left[ s_0 u^\mu - \frac{\mu_0}{T_0} \nu^\mu - \text{tr} \left( \frac{\mu_{L0}}{T_0} j_L^\mu + \frac{\mu_{R0}}{T_0} j_R^\mu \right) \right] \\ = -\nu^\mu \partial_\mu \left( \frac{\mu_0}{T_0} \right) + \frac{\tau^{\mu\nu}}{T_0} \partial_\mu u_\nu - \text{tr} \left[ j_L^\mu \partial_\mu \left( \frac{\mu_{L0}}{T_0} \right) \right. \\ \left. + j_R^\mu \partial_\mu \left( \frac{\mu_{R0}}{T_0} \right) + \frac{\Sigma'_0}{2T_0} \partial_\mu \left( \frac{f_s^2}{2} i \Sigma \partial^\mu \Sigma^\dagger \right) \right], \quad (20) \end{aligned}$$

where  $\mu_{L0} = 2\alpha/f_v^2 - iA^{(0)}$  and  $\mu_{R0} = \Sigma^\dagger(2\alpha/f_v^2 + iA^{(0)})\Sigma$ .

The introduction of the above shorthand notations  $\mu_{R0}$  and  $\mu_{L0}$  is motivated by the fact that they can be identified as chemical potentials but for the left and right chiral densities (they are thermodynamic conjugate variables of  $\rho_L$  and  $\rho_R$ ). Nevertheless, due to the fact that we are considering the SU(2) case and no more U(1), new features appear, that is we have now some couplings with the derivatives of these chemical potentials  $\mu_{R0}$  and  $\mu_{L0}$ .

On the right-hand side of the equation, the entropy production is, as usual, a bilinear form between ‘‘thermodynamic forces’’ and dissipative fluxes. Again, we can make linear combinations with those thermodynamic forces and introduce transport coefficients. Our choice for the hydrodynamic velocity imposes also that  $u_\mu j_L^\mu = 0$  and  $u_\mu j_R^\mu = 0$  and we have to make the entropy production positive. These prescriptions allow us to eliminate some coefficients and to obtain some constraints on the remaining others. We get

$$\Sigma'_0 = \left[ \zeta_{4,i} \partial_\mu u^\mu + [\zeta_3]_{i,j} \partial_\mu \left( \frac{f_s^2}{2} i (\Sigma \partial^\mu \Sigma^\dagger)_j \right) \right] \tau_i, \quad (21)$$

$$\begin{aligned} \nu^\mu = (g^{\mu\nu} - u^\mu u^\nu) \left[ \kappa \partial_\nu \left( \frac{\mu_0}{T_0} \right) + \kappa_{L,i} \cdot \partial_\nu \left( \frac{\mu_{L0,i}}{T_0} \right) \right. \\ \left. + \kappa_{R,i} \cdot \partial_\nu \left( \frac{\mu_{R0,i}}{T_0} \right) \right], \quad (22) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} j_L^\mu = (g^{\mu\nu} - u^\mu u^\nu) \left[ \kappa_{L,i} \partial_\nu \left( \frac{\mu_0}{T_0} \right) + [\kappa_{LL}]_{i,j} \partial_\nu \left( \frac{\mu_{L0,j}}{T_0} \right) \right. \\ \left. + [\kappa_{LR}]_{i,j} \partial_\nu \left( \frac{\mu_{R0,j}}{T_0} \right) \right] \tau_i, \quad (23) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} j_R^\mu = (g^{\mu\nu} - u^\mu u^\nu) \left[ \kappa_{R,i} \partial_\nu \left( \frac{\mu_0}{T_0} \right) + [\kappa_{LR}]_{j,i} \partial_\nu \left( \frac{\mu_{L0,j}}{T_0} \right) \right. \\ \left. + [\kappa_{RR}]_{i,j} \partial_\nu \left( \frac{\mu_{R0,j}}{T_0} \right) \right] \tau_i, \quad (24) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tau^{\mu\nu} = (g^{\mu\nu} - u^\mu u^\nu) \left[ \left( \zeta_2 - \frac{2}{3} \eta \right) \partial_\lambda u^\lambda \right. \\ \left. + \zeta_{1,j} \partial_\lambda \left( \frac{f_s^2}{2} i (\Sigma \partial^\lambda \Sigma^\dagger)_j \right) \right] + \eta [(g^{\mu\lambda} - u^\mu u^\lambda) \partial_\lambda u^\nu \\ + (g^{\lambda\nu} - u^\lambda u^\nu) \partial_\lambda u^\mu], \quad (25) \end{aligned}$$

where  $[Q]$  means that  $Q$  is a  $3 \times 3$  matrix. Due to the Onsager reciprocity principle, all the matrices except  $[\kappa_{LR}]$  are symmetric,  $4\zeta_{1,i} = \zeta_{4,i}$  and there are actually 39 independent coefficients. If we represent the quadratic form of the entropy production by a  $12 \times 12$  matrix, we can easily show that all coefficients appearing in the diagonal should be positive and that there exists inequalities between the 39 coefficients: as for the superfluid, all the principal minors have to be positive. We see that dissipative equations for  $SU(2)_L \times SU(2)_R$  symmetry implies new transport coefficients and couplings between baryonic, left-handed and right-handed currents. We also see that spontaneous breaking of the chiral symmetry implies the existence of matricial transport coefficient for, by instance, the bulk viscosities  $\zeta_1$  and  $\zeta_3$ : the thermodynamic force  $\partial_\lambda [(f_s^2/2) i (\Sigma \partial^\lambda \Sigma^\dagger)_j]$  which is the equivalent of  $\partial_\lambda (V^2 \partial^\lambda \phi)$  has now three components. These components are nevertheless all multiplied by the same factor  $f_s^2/2$  which is related to the amplitude of the order parameter of the chiral symmetry. Of course, near the transition phase this amplitude is not frozen as in our case and can fluctuate. The dynamics of these fluctuations is such that the amplitude of the order parameter has to be incorporated explicitly in the approach since then it becomes an hydrodynamic variable [12].

Finally let us remark that, since it is known that dissipation can affect the observables (see Ref. [13] for the modification of the temperature profile used to describe heavy ion collisions), it will be of fundamental importance to determine quantitatively the influence of these new couplings.

#### IV. CONCLUSIONS AND OUTLOOK

We have treated in this paper the dissipation in the hydrodynamic regime for relativistic systems with spontaneously broken symmetry  $U(1)$  and  $SU(2)$ . For the superfluid, we recovered the nonrelativistic limit of [7]. For the  $SU(2)$  case, we introduced new transport coefficients associated to the right and left charges and to the Goldstone modes. Since we know that transport coefficients can affect quantitatively observables, it would be interesting to express them with Kubo-type relations and then compute them explicitly from this microscopic approach. This work is under study [14]. Another extension of this paper is to determine the new relaxation times with the effect of the symmetry breaking in order

to know if this implies some noticeable modifications to the conclusions drawn in Ref. [3] concerning the typical equilibration time of heavy ions collisions. It is well known that the way we introduced the dissipative effects in that paper leads formally to instabilities and cannot allow us to reach the underlying physics of the relaxation times. In order to solve that problem one has to introduce them explicitly. One convenient way to do this is to use the 14 moments of Grad as done in Ref. [3].

#### ACKNOWLEDGMENTS

We thank G. Chanfray and D. T. Son for useful discussions.

- 
- [1] L.P. Csernai, *Introduction to Relativistic Heavy Ions Collisions* (Wiley, New York, 1972).
- [2] D.T. Son, Phys. Rev. Lett. **84**, 3771 (2000).
- [3] D. Davesne, Phys. Rev. C **53**, 3069 (1996).
- [4] A. Muronga, Proceedings of 17th Winter Workshop on Nuclear Dynamics, Park City, Utah, 2001 (unpublished).
- [5] Y. Lallouet, C. Pujol, and D. Davesne, hep-ph/0207329.
- [6] D. Forster, *Hydrodynamic Fluctuations, Broken Symmetry, and Correlation Functions* (Benjamin, New York, 1975).
- [7] L.D. Landau and E.M. Lifshitz, *Fluid mechanics* (Pergamon, Oxford, 1987).
- [8] B. Carter and I.M. Khalatnikov, Phys. Rev. D **45**, 4536 (1992); Ann. Phys. (N.Y.) **219**, 243 (1992).
- [9] S.J. Putterman, *Superfluid Hydrodynamics* (North-Holland, Amsterdam, 1974).
- [10] D.T. Son, Int. J. Mod. Phys. A **16S1C**, 1284 (2001).
- [11] S. Weinberg, *Gravitation and Cosmology: Principles and Applications of the General Theory of Relativity* (Wiley, New York, 1972).
- [12] V.L. Ginzburg and A.A. Sobyenin, J. Low Temp. Phys. **49**, 507 (1982).
- [13] A. Muronga, Phys. Rev. Lett. **88**, 062302 (2002).
- [14] C. Pujol and D. Davesne (work in progress).

## Publication 5

# Hydrodynamics with spontaneous symmetry breaking: Application to relativistic heavy ion collisions

Y. Lallouet, D. Davesne, and C. Pujol

*IPN Lyon, 43 Bd du 11 Novembre 1918, F-69622 Villeurbanne Cedex, France*

(Received 26 July 2002; revised manuscript received 4 February 2003; published 13 May 2003)

In this paper we apply hydrodynamics for systems with continuous broken symmetries to heavy ion collisions in the framework of (1+1) dimensional Bjorken model. The temperature profile with respect to proper time determined in that context exhibits no differences with the ideal fluid. On the contrary, it is shown that the profile obtained when Müller-Israel-Stewart second-order theory of dissipation is included on top of standard hydrodynamics indicates a slower cooling of the system.

DOI: 10.1103/PhysRevC.67.057901

PACS number(s): 24.10.Nz

Relativistic hydrodynamics is a very useful tool in the field of heavy ion collisions when one wants to reproduce the space-time evolution of the hot and dense matter created in such events. Upon the hypothesis of local equilibrium, which can be questionable for such small and short-lived systems, this approach directly gives in terms of usual quantities such as temperature, pressure, . . . , an intuitive description of what happens during the whole evolution of the system until the freeze-out takes place. Moreover, it is usually assumed that the matter under consideration is almost perfect, so that standard hydrodynamics can be applied directly. However, the hot and dense matter produced is mainly constituted of pions and, with the exception of Ref. [1], no attention has been drawn to the fact that the breaking of chiral symmetry can affect the theory of hydrodynamics itself. One of the aims of this paper is thus to give in a simple approach a quantitative estimate of this modification. More precisely, we will determine the temperature profile with respect to time in the framework of the (1+1) dimensional boost-invariant Bjorken model with and without the effect of the spontaneous breaking of the symmetry. In a second step we also introduce the dissipation process and compare the previous results with those obtained when Müller-Israel-Stewart second-order theory of dissipation is included on top of standard hydrodynamics.

Following Ref. [1], the hydrodynamic degrees of freedom in a chiral fluid with chiral SU(2) symmetry spontaneously broken are the densities associated to conserved quantities; namely, entropy density  $s$ , momentum density  $T^{0i}$ , baryonic number density  $n$ , left- and right-handed charge densities that can be written as SU(2) matrices  $\rho_L \equiv \rho_L^i \tau_i / 2$  and  $\rho_R \equiv \rho_R^i \tau_i / 2$  and finally the variables associated to the Goldstone modes introduced in the theory via a SU(2) matrix  $\Sigma \equiv e^{i\vec{\tau} \cdot \vec{\pi} / f_\pi}$ . If we focus on the central rapidity region of a heavy ion collision, we can neglect in a first step the baryonic density. Thus, the hydrodynamic equations taken from Ref. [1] become

$$\partial_\mu T^{\mu\nu} = 0, \quad (1)$$

$$i \partial_\mu [(f_t^2 - f_s^2) u^\mu u^\nu \Sigma \partial_\nu \Sigma^\dagger + f_s^2 \Sigma \partial^\mu \Sigma^\dagger] = 0, \quad (2)$$

where the energy-momentum tensor  $T^{\mu\nu}$  is given by  $T^{\mu\nu} = (\epsilon + p)u^\mu u^\nu - p g^{\mu\nu} + f_s^2 / 4 \text{tr} (\partial^\mu \Sigma \partial^\nu \Sigma^\dagger + \partial^\nu \Sigma \partial^\mu \Sigma^\dagger)$ .

In the above equations,  $f_i(f_s)$ , which can be interpreted as the temporal (spatial) pion decay constant, are actually not constants but have a nontrivial temperature dependence. Nevertheless, in order to have an estimation of the effects induced by the presence of the spontaneous breaking of the chiral symmetry, we will adopt two simple approaches. The first one, for the sake of simplicity, is to consider that  $f_t = f_s = f_\pi = 93$  MeV. Of course, at finite temperature, this is not true and, for instance, for small temperatures, one knows that  $f_t^2$  and  $f_s^2$  differ from  $f_\pi^2$  by a factor proportional to  $T^2$  while the correction for  $f_t^2 - f_s^2$  is of order  $T^4$ , so that (to first order)  $f_t^2 = f_s^2 = f_\pi^2 [1 - T^2 / (6f_\pi^2)]$ . This second approach, more realistic, is based on this formula, extended to larger temperatures.

Even if several important improvements concerning the geometric description of a heavy ion collision have been done since the pioneering paper of Bjorken [2], we will use here this simplified version. The Bjorken picture of a collision is based on the hypothesis that initial conditions are invariant under Lorentz transformations throughout the central rapidity plateau. This implies that, for a one-dimensional flow in the  $z$  direction, all the quantities depend actually not on the time  $t$  and the position  $z$  but only on the proper time  $\tau = \sqrt{t^2 - z^2}$ . The space-time evolution of the system can be then represented by hyperbola  $\tau = cst$ . If the hydrodynamic velocity  $u^\mu$  is taken as  $u^\mu = x^\mu / \tau = (t/\tau, 0, 0, z/\tau)$ , the hydrodynamic equations

$$\partial_\mu T^{\mu\nu} = 0 \quad (3)$$

with  $T^{\mu\nu} = (\epsilon + p)u^\mu u^\nu - p g^{\mu\nu}$  lead for an ultrarelativistic gas to the following differential equations [3,4]:

$$\frac{\partial s}{\partial \tau} + \frac{s}{\tau} = 0, \quad (4)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} + \frac{1}{3} \frac{T}{\tau} = 0, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial \tau} + \frac{4}{3} \frac{\epsilon}{\tau} = 0, \quad (6)$$

whose solutions give the following scaling behavior:

$$s(\tau) = s(\tau_0) \frac{\tau_0}{\tau}, \quad (7)$$

$$T(\tau) = T(\tau_0) \left( \frac{\tau_0}{\tau} \right)^{1/3}, \quad (8)$$

$$\epsilon(\tau) = \epsilon(\tau_0) \left( \frac{\tau_0}{\tau} \right)^{4/3}. \quad (9)$$

And, since  $p = \epsilon/3$ ,

$$p(\tau) = p(\tau_0) \left( \frac{\tau_0}{\tau} \right)^{4/3}. \quad (10)$$

We first take into account the effect of the spontaneous breaking of chiral symmetry where no renormalization of the pion decay constant occurs, i.e.,  $f_t = f_s = f_\pi = 93$  MeV. We thus obtain from the hydrodynamic equations (1) and (2) in the first nonvanishing order of the pion field,

$$\frac{\partial s}{\partial \tau} + \frac{s}{\tau} = 0, \quad (11)$$

$$\frac{\partial T}{\partial \tau} + \frac{1}{3} \frac{T}{\tau} = 0, \quad (12)$$

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial \tau} + \frac{T s(\tau_0) \tau_0}{\tau^2} - \frac{1}{\tau} \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\partial \pi^i}{\partial \tau} \right)^2 = 0, \quad (13)$$

$$\left( \frac{\partial}{\partial \tau} + \frac{1}{\tau} \right) \frac{\partial \pi^i}{\partial \tau} = 0; \quad (14)$$

and from the explicit expression of the pressure  $p$  given in Ref. [1],

$$p = aT^4 + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\partial \pi^i}{\partial \tau} \right)^2. \quad (15)$$

We see that there is no modification of the equation for the entropy density and for the temperature; that is, the scaling behavior is exactly the same [ $s(\tau) = s(\tau_0) \tau_0 / \tau$  and  $T(\tau) = T(\tau_0) (\tau_0 / \tau)^{1/3}$ ]. On the contrary, for the energy density and for the pressure, one can observe a modification due to a term proportional to  $\partial \pi^i / \partial \tau$ , which can be determined from the last equation (14). The solution for the time derivative is  $\partial \pi^i / \partial \tau = A / \tau$ , where  $A$  is a constant whose value is fixed by the initial condition for  $\tau = \tau_0$ . If we now report in the above equations, we can solve analytically the resulting system to obtain

$$\epsilon(\tau) = \epsilon(\tau_0) \left( \frac{\tau_0}{\tau} \right)^{4/3} - \frac{3}{2} \frac{A^2}{\tau_0^2} \left( \frac{\tau_0}{\tau} \right)^2, \quad (16)$$

$$p = p(\tau_0) \left( \frac{\tau_0}{\tau} \right)^{4/3} + \frac{3}{2} \frac{A^2}{\tau_0^2} \left( \frac{\tau_0}{\tau} \right)^2. \quad (17)$$

In order to fix the initial condition related to the value of  $A$ , let us now consider the density matrix  $\rho = \exp^{-\beta H}$ . The part of the Hamiltonian relevant for chiral hydrodynamics degrees of freedom can be taken from Ref. [1]. An explicit calculation with the Bjorken modelization of the collision gives

$$\rho = \exp \left( -\beta \int d^3x T^{00} \right) \propto \exp \left[ -\frac{\beta}{2} \int d^3x \sum_{i=1}^3 \left( \frac{\partial \pi^i}{\partial \tau} \right)^2 \right]. \quad (18)$$

Assuming isospin symmetry, we then have

$$\rho \propto \exp \left[ -\frac{3\beta}{2} \int d^3x \left( \frac{A}{\tau} \right)^2 \right].$$

For  $\tau = \tau_0$ , we thus immediately see that  $\rho$  is Gaussian distributed. Actually, if we call  $V_0$  the initial volume in the rest frame of the two colliding nuclei and  $\gamma_{cm}$  the Lorentz factor needed to go from that frame to the laboratory frame, we have

$$\rho(\tau_0) \propto \exp \left[ -\frac{3\beta}{2} \frac{V_0}{\gamma_{cm}} \left( \frac{A}{\tau_0} \right)^2 \right]. \quad (19)$$

We can easily estimate  $V_0$  by geometric arguments:  $V_0 = \pi R^2 2\tau_0$ , where  $R$  is the radius of the colliding nuclei. If we now put typical numbers on all these constants:  $R \simeq 5$  fm,  $\tau_0 = 1$  fm,  $\gamma_{cm} \simeq 10$ , and  $T(\tau_0) = 200$  MeV, we can directly estimate the effect of the terms associated to the spontaneous symmetry breaking since  $\langle A^2 \rangle$  is simply related to the Gaussian distribution  $\langle A^2 \rangle = T(\tau_0) \tau_0 \gamma_{cm} / (6\pi R^2)$ . Numerically, using these inputs, we obtain a correction of order  $\simeq 1\%$  with respect to the perfect case.

We now introduce the explicit chiral perturbation  $T$  dependence for  $f_t$  and  $f_s$ , i.e.,  $f_t^2 = f_s^2 = f_\pi^2 [1 - T^2 / (6f_\pi^2)]$ . The evolution of the temperature is then governed by the following equation:

$$4a\tau T^3 - \frac{\langle A'^2 \rangle}{\tau [1 - T^2 / (6f_\pi^2)]^2} \frac{T}{6f_\pi^2} = s(\tau_0) \tau_0 \quad (20)$$

where now  $\langle A'^2 \rangle = \langle A^2 \rangle (1 - T_0^2 / (6f_\pi^2))$ . The numerical results are presented in Fig. 1. We can observe that the correction that induces a faster cooling of the system is of order 5%.

Even if the approach can be considered too simplistic, it is not reasonably expected that an improved treatment can modify noticeably the order of magnitude. One can thus conclude that the effect due the spontaneous breaking of chiral symmetry is quite negligible and without any experimental consequences.

Previously, we have seen that it is possible to neglect the effect of the breaking of the symmetry on the hydrodynamics theory itself; that is, we can use “normal” hydrodynamics. Nevertheless, an important problem that has already been addressed in Ref. [5] is the effect of dissipation on the model of a perfect fluid.

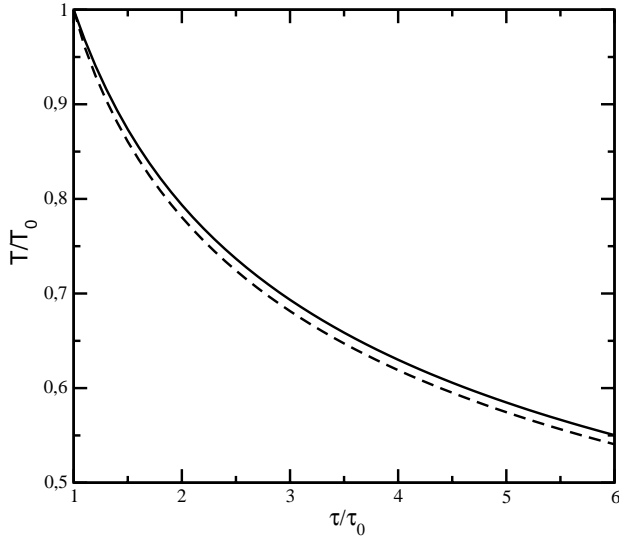


FIG. 1. Temperature profile with respect to proper time for two cases, without (solid line) and with (dashed line) the effect of symmetry breaking.

There are two nonequivalent possibilities for dissipation to be taken into account. First, one can use the usual formalism and just say that when an inhomogeneity appears in a system, the latter reacts, and a flow proportional to the gradient develops itself in order to restore equilibrium. This is first order theory. However, it is well known that this approach presents instabilities, and that it is necessary to consider a relaxation time for the flow. This goal is achieved through Müller-Israel-Stewart second-order theory. In the following, we will explore both methods.

In Ref. [5], the author showed that only the dissipative effects related to the shear viscosity  $\eta$  play a role for the temperature profile in the (1+1) dimensional Bjorken model. The main physical reason is that bulk viscosity vanishes for an ultra relativistic gas. He took the shear viscosity from Ref. [6] where the temperature dependence for  $\eta$  is  $\eta = \pi f_\pi^4 / (8T)$ . Then, the differential equations to be solved for the energy density  $\epsilon = 3aT^4$  are

$$\frac{\partial \epsilon}{\partial \tau} = -\frac{4}{3} \frac{\epsilon}{\tau} + \frac{\Phi}{\tau}, \quad (21)$$

where  $\Phi$  is related to the stress tensor (see Ref. [5] for further details) and  $\Phi=0$  for the ideal (perfect) fluid, and  $\Phi = \frac{4}{3}(\eta/\tau)$  for the first-order theory and  $\tau_\pi(\partial\Phi/\partial\tau) = -\Phi + \frac{4}{3}(\eta/\tau)$  for the second-order theory discussed before. In the last equation,  $\tau_\pi$  is the relaxation time associated to  $\Phi$ .

We now use Eq. (21), using the same inputs as Ref. [5], namely, massless pions and current algebra cross section. We can see in Fig. 2 that the correction due to viscosity compared to the ideal case is totally negligible not only for the (nonphysical but usual) first-order case but also for the second-order case. Our results are different from those presented in the original paper [5]. The difference lies, in fact, in a small computational mistake in Ref. [5]. The main point is

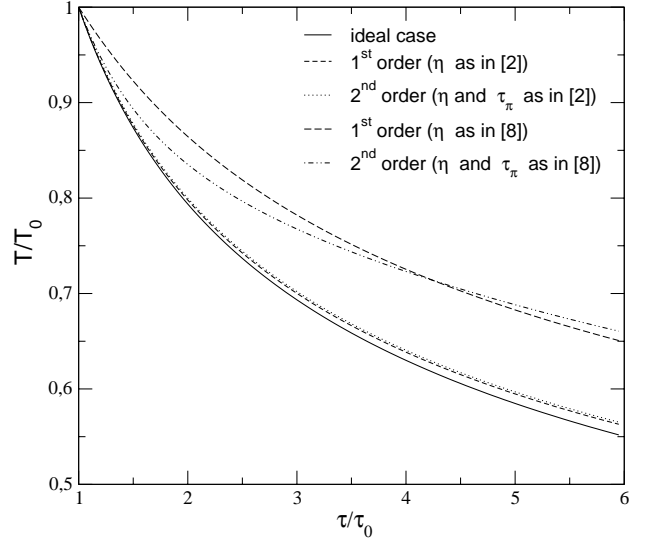


FIG. 2. Temperature profile with respect to proper time for the perfect fluid (solid line), first-order and second-order theories.

that, contrary to what is claimed in Ref. [5], there are (in this simple approach) no appreciable effects. If we would stop here, we could say (as in the first part dedicated to the breaking of chiral symmetry) that a realistic description of a pion gas can be achieved with the perfect fluid model.

However, we stress that this conclusion only holds because of the hypothesis used in Ref. [5]. The temperature dependences of the viscosity  $\eta$  and of the relaxation time  $\tau_\pi$  are only valid for massless pions, and when the cross section for  $\pi$ - $\pi$  interaction is given by current algebra. If we take, instead, the realistic case of massive pions and the experimental cross section, these dependences are completely different. For instance,  $\eta$  increases with temperature [6,7] instead of decreasing. With this realistic  $T$  dependence for the viscosity and the relaxation time for the pions taken from Ref. [7], we obtain the curves plotted in Fig. 2. We can now observe that the first- and the second-order ones are still close but they are now around 20% above the ideal fluid case. This means that dissipative effects imply a slower cooling of the system and should be incorporated in the simulations of heavy ion collisions.

In the beginning of this paper we have examined in a simple model an application of hydrodynamic equations with spontaneous breaking symmetry. In order to get an estimate of the magnitude of the effects, we have used the one-dimensional Bjorken description of a heavy ion collision. We have shown that the model of the perfect fluid is almost correct: the effect of the breaking of the symmetry is to give a correction of about 1% when no  $T$  dependence of the pion decay constant is taken into account, and a few percents when we consider a crude  $T$  dependence. In a second part, we have considered another deviation from the perfect fluid model, namely, the dissipation. The dissipative effects (when taken into account in a simple description [5]) are not so important as claimed in this reference, but actually represent a few percents. On the contrary, we have obtained sizable



effects with a correct  $T$  dependence for the shear viscosity and the shear flow relaxation time. For example, for an initial temperature of 200 MeV, the temperature goes from about 110 MeV in the ideal case to 140 MeV with our dissipative effects for  $\tau/\tau_0 \simeq 6$ . The whole conclusion of this paper is that the temperature profile generated from the perfect fluid approach and used in many simulations is almost correct if one takes into account only the effects of symmetry break-

ing. On the contrary, if we consider dissipative effects, the profile can be substantially modified; that is, we have a slower cooling of the pion gas.

We thank M. Ericson, Professor Emeritus at University Claude Bernard, and G. Chanfray for constant help and enlightening discussions. We also thank J. Serreau for many discussions.

- 
- [1] D.T. Son, Phys. Rev. Lett. **84**, 3771 (2000).  
[2] J.D. Bjorken, Phys. Rev. D **27**, 140 (1983).  
[3] L. P. Csernai, *Introduction to Relativistic Heavy Ion Collisions* (Wiley, New York, 1972).  
[4] Cheuk-Yin Wong, *Introduction to High-Energy Heavy-Ion Collisions* (World Scientific, Singapore, 1994).  
[5] A. Muronga, Proceedings of 17th Winter Workshop on Nuclear Dynamics, Park City, Utah (unpublished).  
[6] M. Prakash, M. Prakash, R. Venugopalan, and G.W. Welke, Phys. Rep. **227**, 321 (1993).  
[7] D. Davesne, Phys. Rev. C **53**, 3069 (1996).

## Deuxième partie

# Systemes en interaction : approche non perturbative



Au-delà de l'activité purement phénoménologique développée dans la première partie, je me suis intéressé à des aspects plus formels concernant le traitement non-perturbatif de systèmes en interaction. Comme je l'ai déjà mentionné dans l'introduction, cette séparation n'est pas aussi nette que le découpage du manuscrit peut le laisser penser. Il s'agit en fait d'une activité que nous menons en parallèle et qui est en réalité tout à fait complémentaire de la précédente. Elle est en effet motivée par la nature non-perturbative des problèmes qui émergent de plus en plus à l'heure actuelle au niveau expérimental dans les expériences d'ions lourds ultra-relativistes avec la matière hadronique chaude et dense. Loin d'être une activité marginale, on comprend donc au contraire fort bien que de plus en plus, il va falloir faire le lien, au niveau théorique, entre les théories effectives et la chromodynamique quantique. Plusieurs approches sont évidemment possibles. Citons par exemple les calculs sur réseaux qui permettent d'avoir accès à de plus en plus d'informations mais qui, malgré tout nécessite un matériel informatique particulièrement important et des temps de calculs toujours très longs. Citons encore le groupe de renormalisation qui, par raccordement des corrélateurs vectoriels et axiaux à une échelle de l'ordre du GeV permet de déterminer les paramètres nus d'une théorie effective.

Pour notre part, nous nous sommes attachés à essayer de développer des techniques non perturbatives pour la théorie quantique des champs et en présence de symétrie brisée (l'idée sous-jacente étant bien entendu le traitement de la symétrie chirale). Ces techniques sont issues du problème à N corps et ont déjà été testées avec succès dans le domaine non-relativiste en physique nucléaire et en physique de la matière condensée. Nous nous sommes particulièrement intéressés à la RPA, méthode qui permet de traiter correctement les problèmes liés aux symétries, et à ses extensions (RPA renormalisée notamment). Les résultats que nous avons obtenus sont encourageants mais nécessitent tout de même quelques aménagements ultérieurs pour pouvoir être appliqués à des théories plus complexes que celle que nous avons abordée (champ scalaire en auto-interaction).

En première partie de ce second volet du manuscrit figure également un travail mené conjointement avec un groupe expérimental de l'institut. Ce travail, qui s'inscrit dans la problématique générale de l'aval du cycle électronucléaire, consistait à étudier au niveau théorique la diffusion de l'iode (produit de fission) dans une matrice de zirconium (constituant principal de la gaine). La raison pour laquelle ce travail est inséré à cet endroit dans le manuscrit est qu'il aborde de manière "numérique" des aspects que nous traiterons de manière plus formelle dans le cadre de la RPA comme par exemple, le champ moyen ou encore l'énergie de corrélation. Il peut donc être perçu d'une part, comme ce qu'il est réellement, c'est-à-dire une collaboration étroite entre la théorie et l'expérience, mais d'autre part également, comme une introduction aux concepts qui seront développés dans le second chapitre.



# Diffusion de l'iode dans le zirconium : approche par des calculs *ab initio*

Dans ce chapitre nous allons étudier la diffusion de l'iode dans le zirconium par des techniques de calculs *ab initio*. Après avoir présenté rapidement la problématique de l'aval du cycle électronucléaire dans laquelle s'inscrit ce travail, nous décrirons brièvement le principe de la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT) que nous avons utilisée pour traiter le problème. Nous présenterons enfin les caractéristiques essentielles du pseudopotentiel du zirconium que nous avons mis au point ainsi que les résultats obtenus, à savoir que la diffusion de l'iode est un processus de type substitutionnel.

## 1.1 Problématique générale

Un réacteur nucléaire à eau pressurisée comprend de manière schématique essentiellement trois éléments, à savoir :

- un cœur à base de combustible, qui contient les éléments lourds fissiles,
- un modérateur (eau) jouant le rôle de ralentisseur de neutrons et
- un caloporteur, ou fluide primaire, (eau) permettant d'évacuer la chaleur produite au sein du combustible.

Le réacteur est ensuite associé à des équipements non nucléaires qui assurent l'évacuation et la création de l'énergie : le fluide primaire transfère sa chaleur à l'eau du circuit secondaire dans des échangeurs de chaleur appelés générateurs de vapeur, vapeur qui entraîne alors une turbine qui produit l'électricité.

Le cœur du réacteur est composé d'assemblages contenant chacun 264 crayons de combustible entourés d'une gaine. Ces derniers renferment un empilement de pastilles constituées, soit d'oxyde d'uranium  $\text{UO}_2$  enrichi entre 3,25 et 4,5 % en  $^{235}\text{U}$ , appelé combustible UOX, soit d'oxyde mixte d'uranium et de plutonium  $(\text{U,Pu})\text{O}_2$ , appelé combustible MOX.

Les crayons restent, à l'heure actuelle, 4 à 5 ans en réacteur puis sont entreposés en piscine sur le site du réacteur. Ensuite, ils sont sortis du réacteur pour être acheminés vers le site de retraitement de la Hague. Tout le combustible usé qui arrive à la Hague n'est cependant pas retraité (seuls sont retraités les combustibles  $\text{UO}_2$  dont le plutonium peut être recyclé dans les REP). Ceci conduit à prolonger l'entreposage du combustible usé excédentaire, vraisemblablement sur une longue durée.

La gaine du crayon combustible, en Zircaloy-4, constitue la première barrière de confinement du combustible, des actinides et des produits de fission. Elle doit, à ce titre, conserver son intégrité durant les périodes de service et de stockage du crayon. La seconde barrière, quant à elle, est soit l'eau dans le cas d'un entreposage sous eau, soit le conteneur en acier dans le cas d'un entreposage à sec. Il est clair que cette deuxième barrière n'est pas la plus efficace contre la radioactivité. On comprend alors mieux que la faisabilité du stockage à sec, voulu par la France pour prendre le relais de celui sous eau, dépend de manière cruciale de la migration des radionucléides dans la gaine. De nombreuses études ont alors été menées pour déterminer la faisabilité d'un tel stockage. C'est en effet un problème particulièrement complexe car cette migration est fonction des conditions extérieures telles que la température, les propriétés oxydoréductrices du milieu ou la radioactivité ambiante, qui non seulement conditionnent le processus de migration mis en jeu mais génèrent une évolution du matériau.

De manière plus précise encore, si l'on considère la radiotoxicité potentielle, c'est à dire intrinsèque du déchet sans considérer l'effet de barrières ni le relâchement de la radioactivité, c'est la radiotoxicité du plutonium qui domine. Par contre, si l'on regarde la radiotoxicité résiduelle qui est liée aux propriétés physicochimiques des différents radioéléments et des milieux de l'environnement géologique, ce sont les produits de fission iode et césium, qui dominent. L'iode et le césium sont donc particulièrement nocifs. Dans cette étude, nous nous limiterons aux problèmes liés à l'iode. De plus, le Zircaloy-4 n'est en réalité qu'une matrice de zirconium dans laquelle ont été ajoutées différentes impuretés afin d'améliorer les propriétés essentiellement mécaniques du zirconium. Ces impuretés, Sn, O, Fe, Cr, sont présentes dans des concentrations massiques très faibles (inférieures à 1%). Il est par conséquent tout à fait pertinent de prendre comme matériau de référence le zirconium et d'étudier la diffusion de l'iode à l'intérieur de ce cristal.

Cette étude a été menée au niveau expérimental par G. Carlot [1]. Elle a implanté de l'iode dans un cristal de zirconium et étudié l'évolution de la concentration de cet iode au cours du temps. Elle a ainsi pu montrer entre autres que l'iode diffusait selon un processus substitutionnel, phénomène particulièrement surprenant si l'on prend en compte le fait que l'iode est en réalité sous forme anionique. Pourquoi, en effet l'iode anionique occuperait-il un site cationique du cristal de zirconium ? Le seul élément en faveur de ce résultat est qu'il semblait en accord avec l'étude systématique de la diffusion de très nombreux éléments (mais pas l'iode !) dans le zirconium menée dans [2]. Le but a donc été de justifier ce résultat au niveau théorique grâce à des méthodes de calculs *ab initio* fondées sur la théorie de la fonctionnelle de la densité. Nous avons donc été amenés à déterminer le site de fixation préférentiel de l'iode dans le réseau hexagonal compact du zirconium. Le résultat obtenu, que nous détaillerons dans les paragraphes suivants, est que l'iode diffuse dans le zirconium suivant un processus qui est effectivement de type substitutionnel. Ceci implique alors un coefficient de diffusion très faible et donc un parcours moyen de l'iode dans le zirconium également très faible (inférieur au dixième de l'épaisseur de la gaine en dix ans). Si l'on se limite à cette étude, l'entreposage à sec est donc tout à fait possible.

Pour mener ce travail à son terme, nous avons utilisé un code de simulation numérique fonctionnant à l'aide de pseudopotentiels (FHI98MD [3]). Mais avant d'entrer plus dans

les détails du code, nous allons d'abord déjà rappeler succinctement les principes premiers sur lesquels il s'appuie, à savoir la théorie de la fonctionnelle de la densité.

## 1.2 Théorie de la fonctionnelle de la densité

La théorie de la fonctionnelle de la densité est maintenant couramment utilisée dans tous les domaines de la physique et de la chimie dans lesquels des propriétés relatives à des systèmes d'électrons doivent être calculées. Dans l'esprit, la DFT est très différente des autres approches du problème à N-corps pour lesquelles le but est en effet de mettre au point des approximations systématiques et contrôlées que l'on cherche ensuite à améliorer afin d'obtenir une meilleure précision sur les quantités à calculer. Ici, l'expression de théorie *ab initio* prend toute sa signification car il s'agit d'obtenir des résultats à partir de paramètres déterminés dès le départ par des considérations générales. En fait, le succès de la DFT vient simplement de la qualité des prédictions numériques obtenues !

La DFT repose sur les théorèmes d'Hohenberg et Kohn (1964) [4]. Ceux-ci stipulent tout d'abord que la quantité pertinente nécessaire à la description d'un gaz d'électrons soumis à un potentiel extérieur est la densité électronique  $\rho(\vec{r})$ . Ensuite, ils indiquent que la densité de l'état fondamental peut être obtenue *via* un principe variationnel. Cependant, il faut bien noter que même lorsque cette densité  $\rho_0$  est déterminée, il est impossible en pratique, d'avoir accès à l'énergie de l'état fondamental ou à d'autres quantités du système : les théorèmes d'Hohenberg et Kohn sont des théorèmes d'existence mais ne fournissent pas de schéma de calcul explicite. L'idée de base de ces travaux a sans aucun doute été ce qui est maintenant considéré comme l'exemple le plus ancien de la DFT et qui est connu sous le nom de modèle de Thomas-Fermi (1927). Ce modèle a permis de décrire de manière approchée l'atome comme un système à plusieurs électrons plongés dans le potentiel coulombien du noyau. Il avait cependant une portée limitée dans le sens où l'énergie d'échange était négligée et surtout la fonctionnelle de l'énergie cinétique calculée à partir de la distribution de Fermi relative à des particules libres. Depuis lors, de nombreux progrès ont été effectués mais il faut bien prendre conscience que l'application de la DFT à des cas concrets date des années 1960-70 et des travaux de Kohn et Sham [5].

L'expression de la fonctionnelle énergie  $E[\rho]$  pour un ensemble d'électrons dans un potentiel extérieur est :

$$E[\rho] = F[\rho] + \int V_{ext}(\vec{r})\rho(\vec{r})d^3\vec{r} \quad (1.1)$$

avec  $F[\rho] = T[\rho] + V_{ee}[\rho]$  où  $T[\rho]$  représente l'énergie cinétique des électrons et  $V_{ee}[\rho]$  le terme d'interaction entre électrons. En principe, il est possible de calculer la densité électronique de l'état fondamental en minimisant directement cette fonctionnelle. Cependant, à l'heure actuelle, il n'existe pas de formulation exacte pour exprimer l'énergie cinétique comme une fonctionnelle de la densité électronique. L'une des méthodes pour résoudre ce problème consiste à utiliser la formulation de Kohn et Sham. Ces derniers ont montré comment remplacer le problème à plusieurs corps en interaction par un système simple de particules sans interaction ayant la même densité électronique  $\rho(\vec{r})$  à l'état fondamental. Ils ont extrait



de  $F[\rho]$  la contribution de Hartree  $V_H$  en définissant la fonctionnelle  $G[\rho]$  suivante :

$$F[\rho] = \frac{e^2}{2} \int \int \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}d^3\vec{r}' + G[\rho] \quad (1.2)$$

$$G[\rho] = T_S[\rho] + E_{XC}[\rho] \quad (1.3)$$

où  $T_S[\rho]$  est l'énergie cinétique du système d'électrons sans interaction de densité  $\rho(\vec{r})$  et  $E_{XC}[\rho]$  contient les énergies d'échange et de corrélation du système avec interaction.

$$E_{XC}[\rho] = T[\rho] - T_S[\rho] + V_{ee}[\rho] - V_H[\rho] \quad (1.4)$$

Cette dernière est par définition la différence entre la valeur exacte de l'énergie cinétique  $T[\rho]$  et  $T_S[\rho]$  ainsi que la différence entre le potentiel d'interaction électronique  $V_{ee}[\rho]$  et le potentiel de Hartree  $V_H[\rho]$  définie par l'équation 1.8. L'énergie totale du système d'électrons s'écrit alors :

$$E[\rho(\vec{r})] = \sum_i \psi_i^*(\vec{r}) \left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 \right) \psi_i(\vec{r}) + \int V_{ext}(\vec{r})\rho(\vec{r})d^3\vec{r} + \frac{e^2}{2} \int \frac{\rho(\vec{r})\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}d^3\vec{r}' + E_{XC}[\rho(\vec{r})] \quad (1.5)$$

$\psi_i(\vec{r})$  étant la fonction d'onde monoélectronique du  $i^{\text{ème}}$  électron. Pour obtenir l'énergie totale du système complet, c'est à dire constitué de  $N$  atomes situés aux positions  $\vec{R}_K$ , on doit rajouter à l'équation la répulsion internucléaire entre noyaux de charge  $Z_K$  :

$$E[\psi_i, \vec{R}_K] = E[n(\vec{r})] + \frac{e^2}{2} \sum_K \sum_{K>L} \frac{Z_K Z_L}{|\vec{R}_K - \vec{R}_L|} \quad (1.6)$$

Les équations de Kohn-Sham s'écrivent alors :

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla_i^2 + V_{ext}(\vec{r}) + V_H[\rho(\vec{r})] + V_{XC}[\rho(\vec{r})] \right) \psi_i(\vec{r}) = \epsilon_i \psi_i(\vec{r}) \quad (1.7)$$

où  $\epsilon_i$  est la valeur propre de l'équation de Kohn-Sham pour le  $i^{\text{ème}}$  électron.  $V_H[\rho(\vec{r})]$  et  $V_{XC}[\rho(\vec{r})]$  sont respectivement le potentiel de Hartree et le potentiel d'échange et de corrélation.

$$V_H[\rho(\vec{r})] = \frac{e^2}{2} \int \frac{\rho(\vec{r}')}{|\vec{r} - \vec{r}'|} d^3\vec{r}' \quad (1.8)$$

$$V_{XC}[\rho(\vec{r})] = \frac{\delta E_{XC}[\rho(\vec{r})]}{\delta \rho(\vec{r})} \quad (1.9)$$

La résolution de ce système d'équations conduit à un ensemble de monofonctions d'onde  $\psi_i(\vec{r})$  à partir desquelles, la densité  $\rho(\vec{r})$  est calculée :

$$\rho(\vec{r}) = \sum_{i=1} f_i |\psi_i(\vec{r})|^2 \quad (1.10)$$

où  $f_i$  est l'occupation de l'état  $i$ .

La forme analytique de tous les termes est connue à l'exception de l'expression exacte du terme d'échange et de corrélation  $V_{XC}$ . Il existe plusieurs approximations pour ces termes : l'approximation locale et l'approximation non locale de la densité.

L'approximation locale tout d'abord, connue sous le sigle LDA (Local Density Approximation) consiste à écrire que la densité d'énergie d'échange et de corrélation,  $\epsilon_{XC}[\rho]$ , d'un système réel est égale à celle d'un gaz d'électrons qui aurait une densité uniforme, égale à la densité locale  $\rho(\vec{r})$ . Soit explicitement :

$$E_{XC}[\rho] = \int \rho(\vec{r})\epsilon_{XC}(\rho(\vec{r}))d^3\vec{r} \quad (1.11)$$

où

$$\epsilon_{XC}(\rho(\vec{r})) = \epsilon_X(\rho(\vec{r})) + \epsilon_C(\rho(\vec{r})) \quad (1.12)$$

L'énergie d'échange  $\epsilon_X(\rho(\vec{r}))$  s'écrit :

$$\epsilon_X(\rho(\vec{r})) = -\frac{3}{4\pi}(3\pi^2\rho)^{\frac{1}{3}} \quad (1.13)$$

Pour l'énergie de corrélation, par contre, on ne dispose pas de forme analytique et on doit donc utiliser une paramétrisation (voir par exemple Perdew et Wang [6]).

Dans l'approximation locale de la densité, le potentiel d'échange et de corrélation dépend uniquement de la densité électronique  $\rho(\vec{r})$ . Il est possible d'aller au-delà et d'inclure des corrections en gradient. On obtient alors l'approximation GGA (Generalized Gradient Approximation) qui donne :

$$E_{XC}[\rho] = \int n(\vec{r})f_{XC}(\rho(\vec{r}), |\vec{\nabla}\rho(\vec{r})|)d^3\vec{r} \quad (1.14)$$

$f_{XC}$  étant la fonction d'échange et de corrélation dépendant de la densité électronique et de son gradient. Le programme de simulation que nous avons utilisé, considère pour cette fonction la formulation de Perdew et Wang [6]. L'approximation GGA est en principe plus précise par construction même. Cependant, son utilisation n'est pas toujours privilégiée car elle est plus coûteuse du point de vue du temps de calcul. Par ailleurs, la précision gagnée par rapport à l'approximation LDA n'est pas toujours significative.

Nous avons travaillé avec les deux approches en comparant les résultats obtenus. Même si pour certains paramètres, l'approche GGA n'était pas forcément meilleure que l'approche LDA, c'est néanmoins avec les corrections de type GGA que nous avons obtenu les meilleurs résultats.

Tous les termes des équations de Kohn-Sham 1.7 sont maintenant connus et il ne reste plus désormais, qu'à exprimer les fonctions d'onde d'essai  $\psi_i(\vec{r})$ . Ces fonctions sont construites par des combinaisons linéaires de fonctions de base : orbitales atomiques, ondes planes ou combinaisons des deux. Il faut bien comprendre à ce stade que tout ce qui va être fait par la suite n'est absolument pas requis par des considérations théoriques mais

uniquement pratiques : seul le développement de techniques numériques sophistiquées a permis l'utilisation pratique de la DFT. Par exemple, si l'on considère des ondes planes, il est évident que le nombre de ces ondes planes nécessaires à la description des fonctions d'onde d'électrons fortement liés est extraordinairement important. C'est pourquoi, afin de réduire ce nombre de manière très significative, on est souvent amené à travailler avec des potentiels effectifs pour les atomes : les pseudo-potentiels.

### 1.3 Pseudo-potentiels

Il est bien connu que les propriétés physiques des solides dépendent beaucoup plus des électrons de valence que de ceux du cœur. Suivant cette idée on peut "modéliser" un atome par un pseudo-atome qui serait composé de deux parties : d'une part, un ion positif qui regroupe le noyau et les électrons considérés comme des électrons de cœur, et d'autre part, l'ensemble des électrons restants considérés comme des électrons de valence. Une sphère de rayon  $r_c$  centrée sur l'atome délimite la région de cœur. Le rayon de coupure  $r_c$  doit se situer après le nœud le plus extérieur des fonctions d'onde, de manière à remplacer toute la région contenant les oscillations, et avant le dernier extremum. Autrement dit, le fort potentiel du noyau est remplacé par un pseudo-potential plus doux qui reproduit les effets du système "électrons de cœur + noyau". Ce qui nous amène à remplacer le potentiel extérieur de l'équation 1.7 dû aux noyaux par une somme de pseudo-potentiels ioniques :

$$V_{ext}(\vec{r}) = \sum_K V^{ps}(\vec{r} - \vec{R}_K) \quad (1.15)$$

Les fonctions d'onde sont également remplacées par des pseudo-fonctions d'onde, qui par définition ne présentent pas de nœuds à l'intérieur du cœur. Par contre à l'extérieur de cette région, pseudo-potential et pseudo-fonctions d'onde de valence sont identiques à un potentiel tous électrons et aux fonctions d'onde correspondantes. Ceci est illustré par la Figure 1.1. Le nombre d'ondes planes nécessaire pour décrire la pseudo-fonction d'onde est ainsi beaucoup plus petit que celui nécessaire pour décrire la fonction d'onde associée au potentiel réel.

Plusieurs types de pseudo-potentiels existent ; nous ne développerons ici que les pseudo-potentiels dits "conservant la norme (Norm Conserving)", en particulier, ceux du type Troullier et Martins. Les pseudo-potentiels que l'on qualifie de "Norm Conserving" sont définis par l'ensemble des conditions suivantes :

- la charge enfermée dans la sphère de rayon  $r_c$  doit être la même qu'elle soit calculée à partir de la pseudo-fonction d'onde ou de la fonction d'onde réelle.

$$\int_0^{r_c} r^2 |\psi_i^{ps}(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} = \int_0^{r_c} r^2 |\psi_i^{ae}(\vec{r})|^2 d^3\vec{r} \quad (1.16)$$

où  $\psi_i^{ps}$  et  $\psi_i^{ae}$  sont respectivement les fonctions d'onde "pseudo" et "all electrons" pour le niveau de valence  $i$  de l'atome.

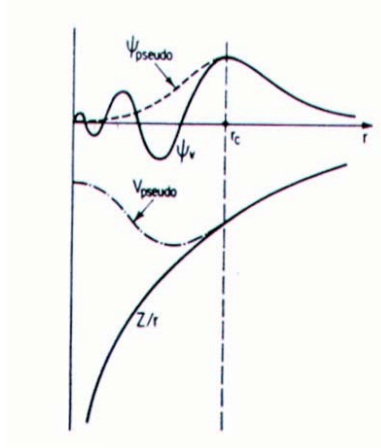


FIG. 1.1 – Comparaison entre le potentiel du noyau et le pseudo-potential et leurs fonctions d'onde correspondantes.

- les dérivées logarithmiques de la fonction d'onde et de la pseudo-fonction d'onde coïncident pour  $r = r_c$  :

$$\frac{d \ln \psi_i^{ps}(\vec{r})}{d\vec{r}} \Big|_{r=r_c} = \frac{d \ln \psi_i^{ae}(\vec{r})}{d\vec{r}} \Big|_{r=r_c} \quad (1.17)$$

- la même condition s'applique à la dérivée de cette quantité par rapport à l'énergie :

$$\frac{d}{dE} \left( \frac{d \ln \psi_i^{ps}(\vec{r})}{d\vec{r}} \right) \Big|_{r=r_c} = \frac{d}{dE} \left( \frac{d \ln \psi_i^{ae}(\vec{r})}{d\vec{r}} \right) \Big|_{r=r_c} \quad (1.18)$$

Le problème des pseudo-potentiels est qu'il faut qu'ils soient transférables. Cela signifie qu'il est possible de trouver énormément de pseudo-potentiels, tous différents au niveau des paramètres, satisfaisant tous aux critères mentionnés ci-dessus, mais ne permettant absolument de reproduire les propriétés des atomes lorsque ceux-ci, par exemple, appartiennent à un cristal. La grande difficulté de cette approche vient donc du fait qu'il faut pouvoir reproduire aussi bien les excitations de l'atome seul, que les fréquences de vibration des molécules ou les propriétés d'un cristal avec le même pseudo-potential !

## 1.4 Résultats pour le Zr

La difficulté pour la mise au point du pseudo-potential pour le Zr a été la présence d'orbitales  $d$  qui ne sont pas très localisées et ne permettent donc pas un découpage aisé en "coeur+valence". Le point fort de notre pseudo-potential (type Troullier-Martins [7]) est qu'il ne comporte que 4 électrons de valence ( $4d^2 5s^2$ ), ce qui limite évidemment le temps de calcul. Nous l'avons testé avec succès sur deux ionisations  $4d^2 5s^2 \rightarrow 4d^2 5s^0$ ,  $4d^2 5s^2 \rightarrow 4d^1 5s^2$  et deux excitations  $4d^2 5s^2 \rightarrow 4d^1 5s^2 5p^1$  et  $4d^2 5s^2 \rightarrow 4d^2 5s^1 5p^1$  qui sont

les plus classiques. Nous avons ensuite construit le cristal de Zr à partir de nos pseudo-atomes et déterminer plusieurs paramètres physiques essentiels dont le volume d'équilibre par atome pour chaque phase cristalline ainsi que le module de compressibilité à l'équilibre à  $T=0$  K. Pour ce faire, nous avons utilisé l'équation empirique de Murnaghan [8] qui donne l'évolution de l'énergie totale par atome  $E(V)$  en fonction du volume atomique  $V$  :

$$E(V) = E(V_0) + \frac{B_0 V}{B'_0(B'_0 - 1)} \left[ B'_0 \left( 1 - \frac{V_0}{V} \right) + \left( \frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} - 1 \right] \quad (1.19)$$

où  $B_0$  et  $B'_0$  sont respectivement le module de compressibilité et sa dérivée par rapport à la pression au volume d'équilibre  $V_0$ . Le volume d'équilibre correspond à la position du minimum de la courbe  $E(V)$  et le module de compressibilité à la courbure en ce point. Là encore, les résultats obtenus ont été en très bon accord avec les données expérimentales.

Une fois ce travail numérique important de validation du pseudo-potentiel effectué, nous avons pu ensuite construire des cristaux de Zr dans lesquels nous avons incorporé de l'iode en différents sites (le pseudo-potentiel de l'iode est très simple à construire). Le but est de connaître le site d'accueil préférentiel de fixation de l'iode dans le métal. Pour cela, nous avons été amené à envisager l'ensemble des positions possibles et à déterminer celle qui était la plus favorable du point de vue énergétique. Nous avons ainsi pu montrer que : en présence de lacune dans le réseau de zirconium, l'iode se placera en site substitutionnel à la place de la lacune ; dans le cas d'un cristal de zirconium parfait (sans lacune), il faudra fournir de l'énergie pour que l'iode prenne la place d'un atome de zirconium.

Nous avons également considéré la possibilité d'une position interstitielle de l'iode. La figure 1.2 indique les deux types de site envisageables. A cause de la taille importante de l'atome d'iode, le site octaédrique semblait *a priori* favorisé. Les calculs ont confirmé cette hypothèse en indiquant que l'énergie d'incorporation de l'iode dans le cristal était plus faible pour le site octaédrique que pour le site tétraédrique. Dit autrement, le site octaédrique est énergétiquement plus favorable pour accueillir l'iode.

Si l'on compare ensuite globalement les différents sites d'accueil (substitutionnel et interstitiel) on peut finalement conclure que, dans le cas d'un cristal de zirconium possédant des lacunes, un atome d'iode se mettra préférentiellement dans un site substitutionnel à la place d'une telle lacune et que dans le cas peu réaliste d'un cristal ne présentant aucun défaut ponctuel, l'atome d'iode ira préférentiellement dans un site interstitiel octaédrique.

Toute l'étude que nous venons de mener est valable pour un cristal de zirconium pur. Comme nous l'avons indiqué dans l'introduction, ceci correspond à une modélisation de la gaine, qui elle, contient quelques pourcentages atomiques d'impuretés. Malheureusement, au-delà des problèmes liés aux impuretés, il existe d'autres facteurs limitant *a priori* bien plus la portée de ce travail. En effet, au cours de son fonctionnement la gaine subit de nombreux dommages : oxydation, hydruration, contamination par des radio-éléments. Tout ceci a évidemment une influence sur les propriétés de la matrice de zirconium. Parmi tous ces éléments, l'oxygène est sans doute celui qui a le rôle le plus important (expérimentalement, il existe une oxydation du zirconium qui conduit à un oxyde de stœchiométrie pouvant aller jusqu'à 30% atomique). Nous nous sommes donc attachés à déterminer théoriquement

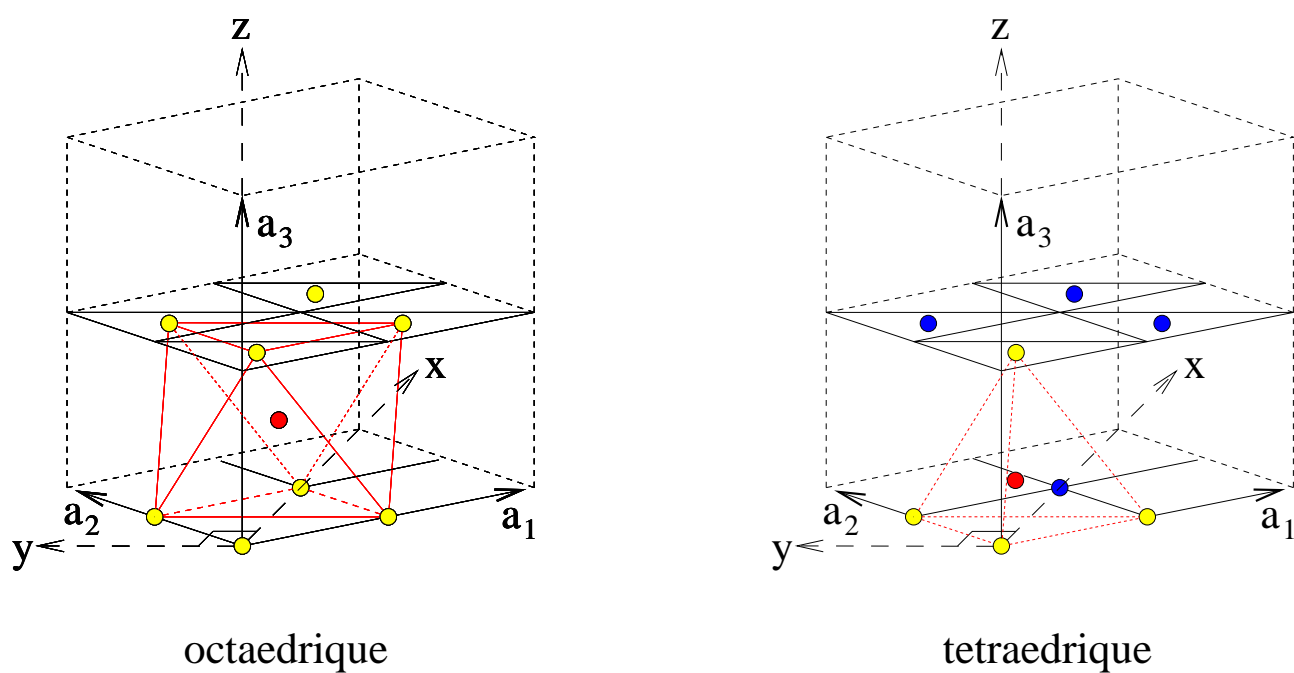


FIG. 1.2 – Cellules contenant 9 atomes construites pour les calculs d'énergie d'incorporation d'un atome d'iode en site interstitiel octaédrique ou tétraédrique. Le point rouge est l'atome d'iode, les points jaunes sont des atomes de zirconium qui entourent l'atome d'iode et les points bleus sont les autres atomes de zirconium du cristal.

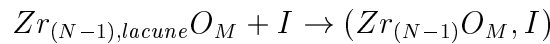
l'influence de la présence d'oxygène sur nos résultats.

Expérimentalement, nous n'avons pas pu mettre en évidence l'influence de la présence d'oxygène sur la diffusion de l'iode dans le zirconium. Nous avons donc estimé par calcul l'influence de la présence d'oxygène sur le site de fixation substitutionnel.

## 1.5 Influence de la présence d'oxygène sur le site de fixation de l'iode

Les atomes d'oxygène sont situés dans les sites octaédriques de la maille hexagonale compacte du zirconium [9]. Les atomes d'oxygène sont en solution solide jusqu'à 29% atomique.

Pour accéder à l'énergie d'incorporation d'un atome d'iode situé en site substitutionnel dans le réseau hexagonal compact du zirconium en présence d'atome d'oxygène en site octaédrique, nous avons simulé la réaction suivante :



$(Zr_{(N-1),lacune}O_M)$  représente la cellule avec  $N - 1$  atomes de zirconium, une lacune de zirconium et  $M$  atomes d'oxygène en site octaédrique.

$(Zr_{(N-1)}O_M, I)$  représente la cellule avec  $N - 1$  atomes de zirconium,  $M$  atomes d'oxygène en site octaédrique et un atome d'iode en substitution d'un atome de zirconium.

Nous accédons à l'énergie d'incorporation par la relation :

$$E_{incorporation} = E_{(Zr_{(N-1)}O_M, I)} - E_{Zr_{(N-1),lacune}O_M} - E_I$$

En faisant varier le nombre d'atomes d'oxygène de quelques pourcents à presque 33%, nous avons pu montrer que les énergies d'incorporation de l'iode dans le zirconium diminuent légèrement au fur et à mesure que l'on augmente le nombre d'atomes d'oxygène. Cela signifie concrètement que l'oxygène a donc tendance à rendre le site substitutionnel vacant moins favorable du point de vue énergétique pour accueillir l'iode.

## 1.6 Synthèse des résultats

Cette étude théorique a permis de déterminer le site d'accueil préférentiel de l'atome d'iode dans le réseau hexagonal compact du zirconium. Nous avons testé plusieurs sites d'accueil : un site substitutionnel, un site interstitiel octaédrique et un site interstitiel tétraédrique.

Nous avons mis en évidence que, en présence de lacunes dans le réseau de zirconium, le site le plus favorable énergétiquement pour recevoir l'atome d'iode est un site substitutionnel lorsqu'il est vide. Par contre, dans le cas où le cristal de zirconium est parfait, c'est-à-dire sans lacunes (cas peu réaliste), le site le plus favorable énergétiquement pour recevoir l'atome d'iode est un site interstitiel octaédrique.

Le site de fixation préférentiel de l'iode est donc substitutionnel. Cela implique un coefficient de diffusion très petit et donc une possibilité de stockage à long terme.





---

## Bibliographie

---

- [1] Gaelle Carlot. *Diffusion de l'iode dans le zirconium : influence des éléments d'alliage et de l'hydruration*. PhD thesis, IPN Lyon, 2000. LYCEN T 2000-157.
- [2] G. M. Hood. Point defect diffusion in alpha-Zr. *Journal of Nuclear Materials*, 159 :149–175, 1988.
- [3] J. Neugebauer et M. Scheffler M. Bockstedte, A. Kley. Density-functional theory calculations for poly-atomic systems : electronic structure, static and elastic properties and ab initio molecular dynamics. *Comput. Phys. Commun.*, 107 :187–222, 1997.
- [4] P. Hohenberg et W. Kohn. Inhomogeneous electron gas. *Physical Review B*, 136 :864–870, 1964.
- [5] W. Kohn et L. J. Sham. Self-consistent equations including exchange and correlation effects. *Physical Review A*, 140(4) :1133–1138, 1965.
- [6] J. P. Perdew et Y. Wang. Accurate and simple analytic representation of the electron-gas correlation. *Physical Review B*, 45 :13244, 1992.
- [7] N. Troullier and J.L. Martins. Efficient pseudopotentials for plane-wave calculations. *Physical Review B*, 43(3) :1993–2006, 1991.
- [8] F. D. Murnaghan. The compressibility of media under external pressures. *Proc. Natl. Acad. Sci.*, 30 :244–247, 1944.
- [9] B. Holmberg et T. Dagerhamn. X-ray studies on solid solutions of oxygen in  $\alpha$ -zirconium. *Acta Chemical Scand.*, 15(4) :919–925, 1961.

## Publication 6

## Energetically favourable sites of iodine atoms in zirconium: an *ab initio* approach

G. CARLOT<sup>†</sup> and D. DAVESNE

Institut de Physique Nucléaire de Lyon, 43 Boulevard du 11 Novembre 1918,  
F-69622 Villeurbanne Cedex, France

[Received 10 April 2001 and accepted 18 May 2001]

### ABSTRACT

This paper is devoted to the determination of the energetically favourable sites of iodine atoms in a zirconium crystal within the density functional framework and using norm-conserving pseudopotentials. We show that the substitutional sites are preferentially occupied compared with the interstitial sites. Our conclusion is that the diffusion process of iodine inside zirconium is of substitutional type in perfect agreement with an experimental study by Carlot.

### § 1. INTRODUCTION

Zirconium is a constitutive element of a great number of very important alloys such as Zircaloy-4 in the context of the nuclear industry (cladding tubes). On the one hand, Zircaloy-4 contains actually mainly zirconium and only a small amount of tin, iron and chromium (less than 1 at.%) and, on the other hand, *ab initio* total energy calculations with several elements are known to be quite an impossible task. Therefore it makes sense to consider pure zirconium metal for numerical simulations on that alloy.

In the nuclear fuel cycle, Zircaloy-4 (and therefore zirconium) is the first barrier for fission products. Among these, <sup>129</sup>I is probably one of the most problematic because of its volatile character and its very long half-life ( $T = 1.59 \times 10^7$  years). Therefore, one has to be sure that the diffusion of iodine inside zirconium is very small. However, it turns out that computing a diffusion coefficient from molecular dynamics is quite difficult; because of its smallness ( $D \approx 10^{-23} \text{ cm}^2 \text{ s}^{-1}$  at 600 °C (Carlot 2000)) the computational time would be too long (say, several years even with the most efficient computers and algorithms). Nevertheless, what we can do is to obtain some indirect information on the diffusion process itself (diffusion by substitutional or by interstitial mechanisms) by the determination of the preferential occupied sites (substitutional or interstitial). Effectively an element in a substitutional site (interstitial or respectively) will diffuse by a substitutional (interstitial or respectively) mechanism. Many diffusion studies have been realized in zirconium. Hood (1988) has carried out an analysis of these studies and defined field of substitutional diffusion coefficient values. So, if a substitutional site is energetically favourable, we could have an idea of the value of the diffusion coefficient and the value of the activation energy of the diffusion of iodine in zirconium.

---

<sup>†</sup> Email: g.carlot@ipnl.in2p3.fr

Therefore, we shall concentrate in this paper on the determination of the energetically favourable sites of iodine atoms in zirconium crystal. The method used is based on density functional (Born and Oppenheimer 1927, Hohenberg and Kohn 1964, Kohn and Sham 1965) and pseudopotential theories (Hamann *et al.* 1979, Troullier and Martins 1991). The first part will be devoted to the description and the validation of the pseudopotentials of zirconium and iodine elements. Then, in the second part we shall focus on the main result of this paper, that is the location of iodine atoms in zirconium.

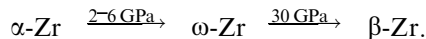
## § 2. CONSTRUCTION AND VALIDATION OF PSEUDOPOTENTIALS

### 2.1. Zirconium

The norm-conserving pseudopotential of Troullier–Martins (1991) type used in this work has been generated for the zirconium with the FHI98PP code (Fuchs and Scheffler 1999). We have started from a mixed configuration: the fundamental configuration ( $[\text{Kr}]4d^25s^2$ ) and a ionized configuration ( $[\text{Kr}]4d^25s^{0.8}5p^{0.2}$ ). Moreover, only the four external electrons have been treated as valence electrons. The cut-off radii for s, p and d angular momenta are respectively 2.91, 3.06 and 2.58 Bohr. The s component has been chosen as the local potential and a Kleinman–Bylander (1982) form has been used. Finally, we have examined four approximations for the exchange–correlation potential: the local density approximation (LDA), the generalized-gradient approximation (GGA), and both approximations with a core density cut-off radius. In the case of LDA calculations, we have considered the Ceperley–Alder (1980) parametrization and in the GGA case that from Perdew and Wang (1992).

In order to validate this pseudopotential, we now turn our attention to the construction of the zirconium crystal. We recall below several important sets of experimental data (Jayaraman *et al.* 1963, Pascal 1963, Xia *et al.* 1990, Xia and Parthasarathy 1990) and present the conventions used in this work.

At room temperature, zirconium exhibits an interesting crystal structure sequence:



The  $\alpha$  phase displays a hexagonal close packed structure with  $c/a$  ratio equal to 1.593 ( $a = 3.2 \text{ \AA}$  and  $c = 5.1 \text{ \AA}$ ). This structure has two atoms per unit cell. Following Wyckoff conventions, the atomic positions are  $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{4})$  and  $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{3}{4})$ . The space group is  $P6_3/mmc$ . The  $\omega$  phase displays a simple hexagonal structure with  $c/a$  ratio equal to 0.625 and with three atoms per unit cell. The atomic positions are  $(0, 0, 0)$ ,  $(\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, \frac{1}{2})$  and  $(\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, \frac{1}{2})$  and the space group is  $P6/mmm$ . Finally the  $\beta$  phase displays a centred cubic structure ( $a = 3.54 \text{ \AA}$ ) with one atom per unit cell located at  $(0, 0, 0)$ . Its space group is  $Im\bar{3}m$ .

We have now to reproduce some physical quantities. To reach this goal, we plot, for each of the three phases, the energy per atom with respect to the volume. These curves allow us to extract the equilibrium volume  $V_0$  (and consequently the cell parameter  $a$ ), the bulk modulus  $B_0$  and its first derivative  $B'_0$  via an empirical fit (Murnaghan 1944):

$$E(V) = E(V_0) + \frac{B_0 V}{B'_0(B'_0 - 1)} \left[ B'_0 \left( 1 - \frac{V_0}{V} \right) + \left( \frac{V_0}{V} \right)^{B'_0} - 1 \right]. \quad (1)$$

In order to obtain an accurate estimate of these parameters, the number of  $k$  points in the irreducible Brillouin zone (which determines the number of plane waves) and the cut-off energy  $E_c$  (which determines the largest value of  $k$ ) must be adjusted. Effectively, there is a compromise between a high accuracy of the result (which involves in general a great number of  $k$  points and a very large value for  $E_c$ ) and the required time to obtain this accurate result. In practice, we have fixed the number of  $k$  points to a very large value and looked at the variations in the parameters with increasing  $E_c$ . The results are presented in figure 1. Then, for each value of  $E_c$  the convergence was obtained; we looked at the variations in the parameters with respect to the number of  $k$  points (figure 2). Note also that we have chosen the  $k$  points according to Monkhorst and Pack (1976).

The final result is the following: to obtain results available up to 0.01 eV, we have to use a  $18 \times 18 \times 9$   $k$ -point mesh for the  $\alpha$  phase, a  $8 \times 8 \times 16$  mesh for the  $\omega$  phase, and a  $12 \times 12 \times 12$  mesh for the  $\beta$  case. Concerning  $E_c$ , we fixed it at 30 Ry for the three phases. The corresponding curves for the total energy with respect to the volume are presented in figure 3 for each phase and for the four exchange–correlation energy approximation schemes. Three of these schemes (GGA, GGA with 2.0 Bohr and LDA with 2.0 Bohr) exhibit the correct crystallographic sequence  $\alpha \rightarrow \omega \rightarrow \beta$  with decreasing volume. The values for equilibrium volumes and bulk modulus are presented in tables 1 and 2. The comparison between our values and experimental data (Jayaraman *et al.* 1963, Pascal 1963, Xia *et al.* 1990, Xia and Parthasarathy 1990) or other values obtained by calculations in the literature (Jomard *et al.* 1998) clearly indicates that the GGA pseudopotential generated with a core density cut-off radius equal to 2.0 Bohr gives the best results. Also deduced from the same curves and presented in table 3 is the transition pressure

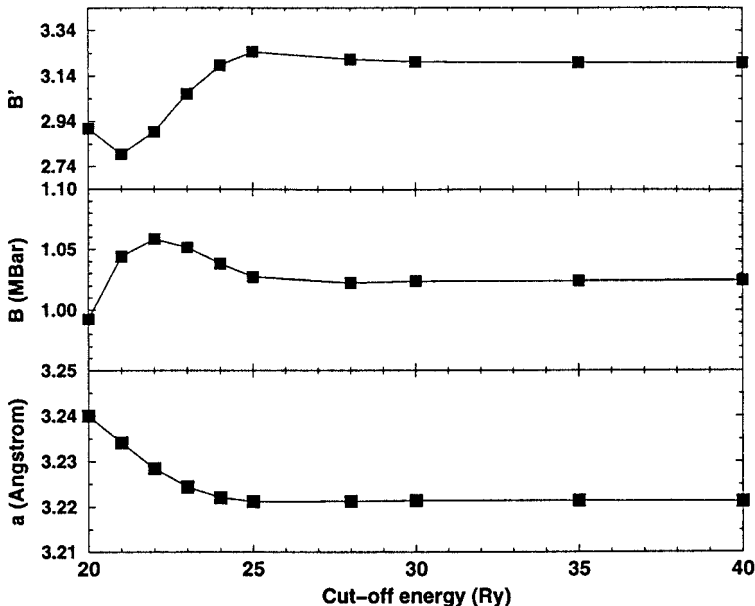


Figure 1. The lattice constant  $a$ , bulk modulus  $B_0$  and the first derivative  $B_0'$  of the bulk modulus versus the cut-off energy  $E_c$  for a fixed  $k$ -point mesh ( $18 \times 18 \times 9$ ) for the  $\alpha$  phase.

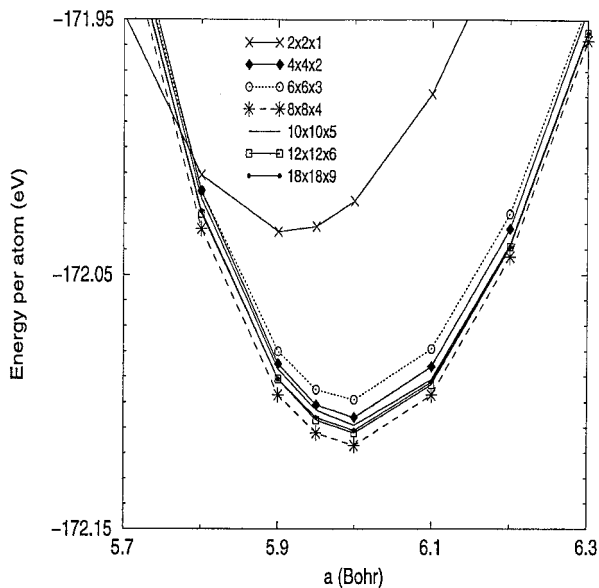


Figure 2. The calculated energy per atom of  $\alpha$  phase versus the unit-cell parameter  $a$  for different  $k$ -point meshes at a cut-off energy of 30 Ry.

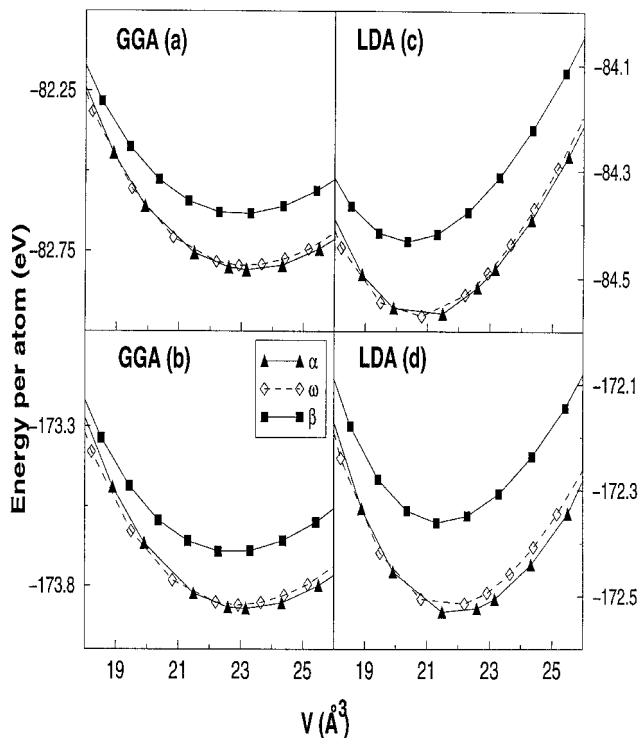


Figure 3. The calculated energy per atom versus the unit-cell volume  $V$  for zirconium: (a) GGA; (b) GGA with a core density cut-off radius equal to 2 Bohr; (c) LDA; (d) LDA with a core density cut-off radius equal to 2 Bohr.

Table 1. Calculated and experimental equilibrium volumes  $V_0$  for three phases of zirconium:  $\alpha$ ,  $\omega$  and  $\beta$ .

		$V_0$ ( $\text{\AA}^3$ )										
		$\alpha$ -Zr		$\omega$ -Zr		$\beta$ -Zr						
		GGA with 2 Bohr	LDA with 2 Bohr	GGA with 2 Bohr	LDA with 2 Bohr	GGA with 2 Bohr	LDA with 2 Bohr					
This study		23.28	20.85	21.82	23.12	22.92	20.56	21.61	23.00	22.74	20.35	21.44
Other study		23.52		22.03		23.27		21.81		22.91		21.32
Experiment		23.273–23.28				22.58						22.28



Table 2. Calculated and experimental data for the bulk moduli for the  $\alpha$  phase of zirconium.

	$B_0$ (GPa)			
	GGA	GGA with 2 Bohr	LDA	LDA with 2 Bohr
This study	102	114	123	125
Other study		94		104
Experiment			95	

Table 3. Calculated and experimental data for the transition pressures of the  $\omega$  phase.

	$P_{\alpha \rightarrow \omega}$ (GPa)			
	GGA	GGA with 2 Bohr	LDA	LDA with 2 Bohr
This study	9.2	5.8	—	5.1
Other study		2.4		5.7
Experiment			2–6	

between the  $\alpha$  phase and the  $\omega$  phase. For that parameter again the best agreement is obtained for GGA with 2.0 Bohr. However, we should mention that, in our study, it is impossible to determine the transition pressure between the  $\omega$  phase and the  $\beta$  phase. This is a real problem if one wants to have an ‘absolute’ pseudopotential for zirconium. However, in fact, what we want to do here is to incorporate iodine atoms in a crystal of zirconium ( $\alpha$  phase) and let the entire crystal relax. So, we have to be sure that, during this period, the crystal does not relax to another crystallographic phase. Since the  $\alpha$  phase is the most stable phase (see figure 3), therefore it does not matter whether the  $\beta$  phase is less stable than it should be. In any case, this problem would disappear if one uses a pseudopotential with ten valence electrons (Jomard *et al.* 1998). In conclusion, this problem of relative stability is not important from a physical point of view for our aim and our pseudopotential is much less time consuming because it has only four valence electrons. So we shall use it in the following.

## 2.2. Iodine

For the iodine ( $[\text{Kr}]4d^{10}5s^25p^5$ ) pseudopotential, we have used the same method. Its main features are seven valence electrons ( $5s^25p^5$ ), local s component and LDA and GGA approximations for the exchange–correlation energy with and without a core density cut-off radius equal to 2.0 Bohr.

For the validation of this pseudopotential, we have worked on molecular iodine ( $\text{I}_2$ ) and tried to reproduce the following relevant physical quantities: the vibration frequency (with a molecular dynamics simulation), the equilibrium bond distance (by a relaxation run) and the dissociation energy. The first step was, as before, to adjust the number of  $k$  points and the cut-off energy. We worked with a  $10 \times 10 \times 10$   $k$ -point mesh and  $E_c = 30$  Ry to obtain the same accuracy. The results are presented in

Table 4. Calculation on molecular iodine: vibration frequencies  $\nu$ , equilibrium bond distances  $d$  and dissociation energies  $E_d$ .

	$\nu$ (THz)	$d$ (Å)	$E_d$ (eV)
This study	5.6	2.66	-1.48
Experiments	6.4	2.67	-1.54

table 4. We can see that our calculations are in good agreement with the experimental data (Pascal 1960, *Handbook of Chemistry and Physics* 1995–1996). Our ‘best’ pseudopotential is, as in the preceding section, the GGA pseudopotential with a density cut-off radius.

We are now in position to include iodine atoms in the zirconium crystal ( $\alpha$  phase) in order to determine the preferential site for iodine. To access this result, we have to build cells of various types. These cells will contain either  $N$  zirconium atoms or  $N - 1$  zirconium atoms and one vacancy or  $N - 1$  zirconium atoms and one iodine atom in a substitutional position or  $N$  zirconium atoms and one iodine atom in an interstitial position. For each of these cases, we shall perform a total energy minimization run. This will give us the vacancy formation energy, the impurity energy and the incorporation energy. These energies calculations have been realized with the FHI98MD code (Kley *et al.* 1997) code. As recalled below, these energies give us information on the preferential site for iodine.

### § 3. CALCULATION OF THE VACANCY ZIRCONIUM FORMATION ENERGY AND INCORPORATION AND IMPURITY ENERGIES OF IODINE IN ZIRCONIUM

#### 3.1. Definitions

The vacancy formation energy is defined by (Braun *et al.* 1995, Korhonen *et al.* 1995):

$$E_{\text{vacancy}} = E_{Zr_{(N-1),\text{vacancy}}} - \frac{N-1}{N} E_{Zr_N},$$

where  $E_{Zr_{(N-1),\text{vacancy}}}$  is the total energy of the cell which contains  $N - 1$  atoms of zirconium and one vacancy and  $E_{Zr_N}$  is the total energy of the perfect cell which contains  $N$  atoms of zirconium. It represents the energy required to move an atom from the crystal to infinity.

The impurity energy is the energy necessary to substitute a zirconium atom by an iodine atom in the crystal (Grimes *et al.* 1989, Grimes and Catlow 1991). It is determined by the relation

$$E_{\text{impurity}} = E_{(Zr_{(N-1),I})} + E_{Zr} - E_{Zr_N} - E_I,$$

where  $E_{(Zr_{(N-1),I})}$  is the total energy of the cell with  $N - 1$  atoms of zirconium and an iodine atom in the substitutional position and  $E_I$  ( $E_{Zr}$ ) is the energy of the atom of iodine (zirconium) alone.  $E_{\text{impurity}}$  represents the energy required to move an atom of the crystal to infinity and to replace it by an impurity (iodine here) initially located at infinity.

Finally, the incorporation energy is the energy required to place an iodine atom at a pre-existing trap site (Grimes *et al.* 1989, Grimes and Catlow 1991). There are

two possibilities. One is to put an iodine atom in a substitutional site:

$$E_{\text{incorporation}} = E_{(Zr_{(N-1)}, I)} - E_{Zr_{(N-1)}, \text{vacancy}} - E_I.$$

The other is to put the iodine atom in an interstitial site:

$$E_{\text{incorporation}} = E_{(Zr_N, I)} - E_{Zr_N} - E_I$$

where  $E_{(Zr_N, I)}$  is the total energy of the cell which contains  $N$  atoms of zirconium and one atom of iodine in an interstitial position.

With these definitions, a negative value for the impurity or incorporation energies mean that the process is exothermic and thus energetically favourable.

### 3.2. Results with iodine in a substitutional site

From a practical point of view, we have carried out some total energy minimization runs on cells with different configurations and with different numbers of atoms. We have specialized to three sizes of cells composed of eight, 18 and 36 atoms respectively. Let us note that a cell containing more that 36 atoms is too time consuming. These cells consist of the repetition of the unit cell composed of two atoms: for example the cell with eight atoms is obtained by a multiplication by a factor of two in each direction. The three cells are presented in figure 4. For the

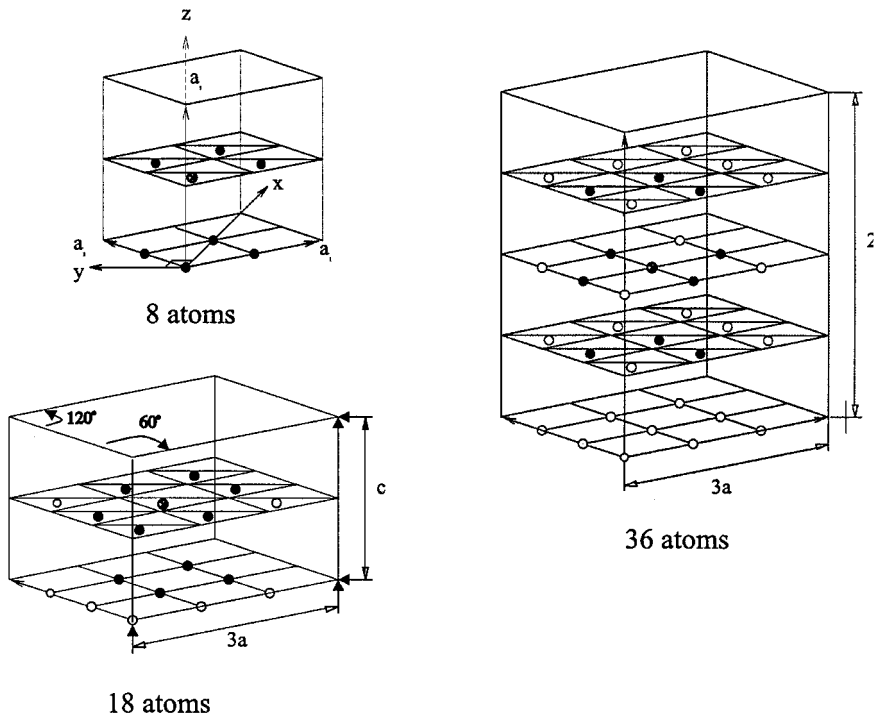


Figure 4. Cells composed of eight, 18 and 36 atoms built for computing the vacancy formation energy and the impurity and incorporation energies of an iodine atom in the hexagonal close packed structure of zirconium: ( $\otimes$ ), a zirconium atom or an iodine atom or a vacancy; ( $\bullet$ ), zirconium atoms allowed to move; ( $\circ$ ) fixed zirconium atoms.

vacancy zirconium formation energy, we have used two different types of these cells: one composed of  $N$  atoms of zirconium and the other composed of  $N - 1$  atoms of zirconium and one vacancy ( $N = 8, 18$  and  $36$ ). The crossed circles represent either a zirconium atom for a simulation with  $N$  atoms or a vacancy for a simulation with  $N - 1$  atoms. Full circles represent zirconium atoms allowed to move during the calculation, and open circles atoms that remain fixed during the calculation. Some atoms are not allowed to move in order to save computer time but, of course, we checked that this does not affect the final result. Finally, for the case of incorporation and impurity energies of iodine in a substitutional site, we used another type of cell: one with  $N - 1$  atoms of zirconium and one iodine atom (the crossed circle in that case).

In practice, it is impossible to work with a large cell and a large number of  $k$  points. Therefore, we have adopted the following strategy to estimate the errors produced by a 'simplified' calculations: firstly, we estimate the influence of the number of  $k$  points (table 5) on the smallest cell and say that the resulting error would be of approximately the same order for another cell whatever its size (this statement has been partially checked for different cells). Then, we estimate the influence of the size of the cell for a given  $k$ -point mesh (table 6) and say that the error would be of same order whatever the  $k$ -point mesh is. These errors are important because, on the one hand, we have to work with a large cell to isolate the impurity or the vacancy and, on the other hand, it is impossible to deal with a large number of  $k$  points when working with a large cell.

Of course, we have, in the way described above, a crude estimate of the error produced by the use of a small number of  $k$  points and/or a small cell. We shall see in the following that this crude estimate is actually sufficient.

Table 5. Zirconium vacancy formation energies, incorporation energies and impurity energies of an iodine atom substituted at a zirconium atom in a cell of eight atoms for different  $k$ -point meshes.

Mesh	Zirconium vacancy formation energy (eV)	Incorporation energy of iodine (eV)	Impurity energy of iodine (eV)
$4 \times 4 \times 2$	1.38	-2.85	2.35
$4 \times 4 \times 4$	1.37	-2.96	2.22
$8 \times 8 \times 8$	1.36	-2.95	2.20
$8 \times 8 \times 8$	1.36	-2.95	2.21
$10 \times 10 \times 10$	1.37	-2.97	2.19

Table 6. Zirconium vacancy formation energies, incorporation energies and impurity energies of an iodine atom substituted at a zirconium atom versus the number of atoms for a fixed  $k$ -point mesh ( $4 \times 4 \times 2$ ).

Number of atoms	Zirconium vacancy formation energy (eV)	Incorporation energy of iodine (eV)	Impurity energy of iodine (eV)
8	1.38	-2.85	2.35
18	1.33	-2.63	2.53
36	1.26	-2.78	2.28

Table 7. Incorporation energies of iodine in interstitial tetrahedral and octahedral sites versus the number of  $k$  points in a cell with nine atoms: eight atoms of zirconium and one atom of iodine.

Mesh	Incorporation energy of iodine in interstitial site (eV)	
	Octahedral site	Tetrahedral site
$4 \times 4 \times 2$	-0.77	1.61

The results presented in tables 5 show that the increase in the number of  $k$  points induced an error of 1.5% for the energy of zirconium vacancy formation, 7% for the impurity energy and 4% for the incorporation energy. In table 6, we see that the induced error is in all cases less 10%.

If we combine all the values, we can say that the results obtained show clearly that the impurity energy is, in all cases, positive and the incorporation energy negative.

### 3.3. Results with iodine in an interstitial site

The hexagonal close packed structure of zirconium presents several interstitial sites. Considering the size of a iodine atom, we have considered the largest sites, namely the octahedral and tetrahedral sites. We have then built some cells composed of nine atoms: eight atoms of zirconium and one iodine atom in an interstitial site.

The results are presented in table 7. We see that the values for the incorporation energy in octahedral and tetrahedral sites are of different signs. Taking into account errors from the size of the cell and from the number of  $k$  points discussed in the preceding section, these values have the same sign. Thus the process consisting in putting an iodine atom in an octahedral (tetrahedral) site is energetically favourable (unfavourable).

## §4. CONCLUSION

In conclusion, it has been shown that the iodine and zirconium pseudopotentials generated here accurately describe the experimental data.

For the energy calculations with iodine in a substitutional site, we show that in the hexagonal close packed structure of zirconium with one vacancy, the incorporation energy must be considered and it is negative. We can conclude that the process to replace a zirconium vacancy with an iodine atom is an energetically favourable process. In a perfect crystal, the impurity energy must be considered; so the process to replace a zirconium atom with an iodine atom is endothermic and energetically unfavourable. For the energy calculations with iodine in an interstitial site, the energetically favourable site is the octahedral site. Nevertheless, the value of the incorporation energy of iodine in a substitutional site is more negative than in an octahedral site. We can conclude that the energetically favourable site is a substitutional site. Iodine diffusion in zirconium seems to be a substitutional process. This result is in agreement with an experimental study (Carlot 2000) giving the diffusion coefficient of iodine in zirconium and concluded to be a substitutional process.

Another approach from Hood (1988), combined with this experimental study, is also in agreement with this.

Although we believe that the main conclusions of this work would remain unchanged, we should mention that some other effects have to be taken into account, for example a multiple-diffusion process, that is a diffusion process that involve more than two atoms (three atoms, two atoms and a vacancy, etc.). Moreover, it would be interesting to compute explicitly the migration energy (part of the activation energy). This work is in progress.

#### ACKNOWLEDGEMENTS

We thank Henry Jaffrezic and Thierry Petit for useful discussions.

#### REFERENCES

- BORN, M., and OPPENHEIMER, J. R., 1927, *An. Phys. Rev.*, **84**, 457.  
 BRAUN, P., FÄHNLE, M., SCHILFGAARDE, M. V., and JEPSEN, O., 1995, *Phys. Rev. B*, **44**, 845.  
 CARLOT, G., 2000, PhD Thesis LYCEN 2000-157, Université Claude Bernard Lyon 1.  
 CEPERLEY, D. M., and ALDER, B. J., 1980, *Phys. Rev. Lett.*, **45**, 567.  
 FUCHS, M., and SCHEFFLER, M., 1999, *Comput. Phys. Commun.*, **119**, 67.  
 GRIMES, R. W., and CATLOW, C. R. A., 1991, *Phil. Trans. R. Soc. A*, **335**, 609.  
 GRIMES, R. W., CATLOW, C. R. A., and STONEHAM, A. M., 1989, *J. Am. Ceram. Soc.*, **72**, 1856.  
 HAMANN, D. R., SCHLÜTER, M., and CHIANG, C., 1979, *Phys. Rev. Lett.*, **43**, 1494.  
*Handbook of Chemistry and Physics*, 1995–1996, 76th edition (Boca Raton, Florida: CRC Press).  
 HOHENBERG, P., and KOHN, W., 1964, *Phys. Rev. B*, **136**, 864.  
 HOOD, G. M., 1988, *J. nucl. Mater.*, **159**, 149.  
 JAYARAMAN, A., KLEMENT, W., and KENNEDY, G. C., 1963, *Phys. Rev.*, **131**, 644.  
 JOMARD, G., MAGAUD, L., and PASTUREL, A., 1998, *Phil. Mag. B*, **77**, 67.  
 KLEIMAN, L., and BYLANDER, D. M., 1982, *Phys. Rev. Lett.*, **48**, 1425.  
 KLEY, A., NEUGEBAUER, J., and SCHEFFLER, M., 1997, *Comput. Phys. Commun.*, **107**, 187.  
 KOHN, W., and SHAM, L. J., 1965, *Phys. Rev. A*, **140**, 1133.  
 KORHONEN, T., PUSKA, M. J., and NIEMINEN, R. M., 1995, *Phys. Rev. B*, **51**, 9526.  
 MONKHORST, H. J., and PACK, J. D., 1976, *Phys. Rev. B*, **13**, 5188.  
 MURNAGHAN, F. D., 1944, *Proc. natn. Acad. Sci. USA*, **40**, 244.  
 PASCAL, P., 1960, *Nouveau Traité de Chimie Minérale*, Tome XVI (Paris: Masson), p. 457;  
 1963, *Nouveau Traité de Chimie Minérale*, Tome IX (Paris: Masson), p. 319.  
 PERDEW, J. P., and WANG, Y., 1992, *Phys. Rev. B*, **45**, 13 244.  
 TROULLIER, N., and MARTINS, J. L., 1991, *Phys. Rev. B*, **43**, 1993.  
 XIA, H., DUCLOS, S. J., RUOFF, A. L., and VOHRA, Y. K., 1990, *Phys. Rev. Lett.*, **64**, 204.  
 XIA, H., and PARTHASARATHY, G., 1990, *Phys. Rev. B*, **42**, 6736.

# Chapitre 2 Applications de la RPA renormalisée aux théories de bosons

Dans ce chapitre, nous appliquons la méthode de la RPA renormalisée, dans le cadre du formalisme des équations de Dyson, à un modèle simple de théorie quantique des champs avec symétrie brisée à savoir la théorie  $\lambda\phi^4$ . L'application d'une telle méthode issue du problème à  $N$  corps à un modèle de bosons relativistes a requis des adaptations que nous présenterons. De plus, bien qu'ayant obtenus des résultats encourageants, nous nous sommes heurtés à des problèmes de principe inhérents à une théorie bosonique. Aussi, afin de tenter de les résoudre, nous avons traité le cas de l'oscillateur anharmonique à une dimension. Sur cet exemple, nous avons alors pu mettre au point une approche permettant de rendre compte de manière précise des corrélations dans l'état fondamental aussi bien dans la phase symétrique (dite sphérique) que dans la phase de symétrie brisée (dite déformée).

## 2.1 Présentation générale

Dans de nombreux domaines de la physique, la théorie des perturbations s'avère insuffisante pour rendre compte correctement d'un nombre important de phénomènes. Les états liés ou encore les excitations collectives illustrent parfaitement ce point. Dans ces situations, le problème physique posé est de nature non-perturbative et il est donc indispensable de disposer de méthodes fiables permettant de décrire de tels phénomènes. Dans le domaine non relativiste, les techniques du problème à  $N$  corps répondent dans la plupart des cas à ce besoin. Dans le domaine relativiste par contre, et en particulier dans le domaine des interactions fortes, la situation est différente. En effet, la description du monde hadronique à partir de la chromodynamique quantique ou encore l'évolution du vide brisé de la symétrie chirale en fonction de la température ou de la densité constituent de vrais défis théoriques. De plus, avec le développement des ordinateurs, ces quantités sont appréhendées dans le cadre de la QCD sur réseaux ou des calculs type Monte-Carlo. Mais de "vraies" méthodes théoriques permettant une approche systématique des problèmes manquent encore. En ce sens, une adaptation des techniques du problème à  $N$  corps au domaine relativiste est sans doute une voie prometteuse.

Parmi toutes ces techniques, la RPA semble assez séduisante car même dans sa forme

standard, elle est connue pour conserver les symétries : ainsi, dans le cadre du modèle  $\sigma$ -linéaire, il a été explicitement montré dans la référence [1] que les fluctuations RPA étaient capables d'engendrer les modes de Goldstone associés à la brisure spontanée de la symétrie chirale, ces modes mous n'étant pas obtenus au niveau du champ moyen. Malheureusement, la RPA possède également des défauts : elle ne satisfait par exemple pas au critère de Ritz. Par ailleurs, elle n'est pas auto-cohérente dans sa forme simple : ainsi, toujours dans le cas de la symétrie chirale, les états pioniques intermédiaires  $HF$  sont massifs alors que les modes RPA sont mous [2, 3] ! (ce problème a été résolu depuis grâce à un développement en  $1/N$  [2, 3, 4]). Enfin il faut signaler que, même si une version partiellement ou complètement auto-cohérente (SCRPA) a déjà été appliquée à des systèmes fermioniques [5, 6], la première tentative d'application à un système bosonique est récente [7]. Dans cette référence, nous avons explicitement inclus des corrélations qui sont normalement absentes dans l'état fondamental utilisé habituellement pour la RPA. Malheureusement nous montrerons que malgré les résultats encourageants obtenus, la procédure mise en oeuvre, qui pour la première fois permettait d'aller au-delà de la RPA standard pour une théorie de champs bosoniques, n'a pas donné entière satisfaction car certains principes fondamentaux, telle la covariance en physique relativiste, n'étaient pas respectés. Aussi, non pas pour résoudre ce problème spécifique de covariance, mais plus pour comprendre les problèmes inhérents liés au traitement de systèmes bosoniques, avons nous décidé de développer une approche cohérente sur un système plus simple de mécanique quantique à savoir l'oscillateur anharmonique à une dimension [8].

Avant de présenter notre travail à proprement parlé, nous allons toutefois rappeler brièvement les principales caractéristiques du formalisme de la RPA.

## 2.2 Présentation rapide du formalisme de la RPA et de ses extensions

Il existe deux méthodes pour parvenir aux équations caractéristiques de la RPA : celle de l'équation du mouvement due à Rowe [9, 10] et l'approche par l'équation de Dyson [11].

On considère dans la suite un hamiltonien  $H$  quelconque et on appelle  $|\nu\rangle$  ses états propres, normalisés,  $|0\rangle$  étant l'état fondamental (associé à l'énergie  $E_0$ ).

Pour la première méthode (celle de Rowe), on définit alors un ensemble d'opérateurs  $\{Q_\nu^\dagger\}$  tels que  $Q_\nu^\dagger|0\rangle = |\nu\rangle$  et  $|0\rangle$  soit le vide de ces opérateurs :  $Q_\nu|0\rangle = 0$ . Formellement de tels opérateurs existent puisque  $Q_\nu^\dagger = |\nu\rangle\langle 0|$  satisfait aux conditions ci-dessus. Évidemment  $Q_\nu^\dagger$  est un opérateur à  $N$  corps très compliqué : suivant la nature de  $|\nu\rangle$ , c'est-à-dire suivant que  $|\nu\rangle$  est un état excité contenant le même nombre de particules que l'état fondamental ou au contraire un nombre différent,  $Q_\nu^\dagger$  peut être une superposition d'opérateurs à un corps, deux corps, etc... Dans le cas général, on exprime donc  $Q_\nu^\dagger$  sous la forme d'une combinaison de tous ces opérateurs :

$$Q_\nu^\dagger = \sum_{\alpha} X_{\alpha}^{\nu} A_{\alpha}^{\dagger} - Y_{\alpha}^{\nu} A_{-\alpha} , \quad (2.1)$$



où  $\alpha$  représente tous les nombres quantiques et où  $A_\alpha^\dagger$  contient toutes les excitations que l'on aura choisies d'inclure, exprimées en terme d'opérateurs création et annihilation  $b$  et  $b^\dagger$ . Le choix des opérateurs d'excitation est fondamental : il doit être guidé par des considérations physiques portant sur le système que l'on étudie ; c'est donc lui qui conditionne la qualité du résultat obtenu. Il est donc *a priori* possible d'améliorer la précision des résultats obtenus en augmentant l'espace des excitations. Mais, comme nous le verrons par la suite, non seulement les calculs deviennent rapidement totalement inextricables, mais nous sommes également confrontés à des incohérences (cf paragraphe sur l'oscillateur anharmonique).

Les équations RPA à proprement parler sont des équations qui ont pour solutions les amplitudes  $X_\alpha^\nu, Y_\alpha^\nu$  et les énergies d'excitation  $E_\nu$ . Elles sont obtenues par minimisation de l'énergie  $E_\nu = \langle \nu | H | \nu \rangle$  par rapport à une variation  $\delta Q_\nu$  et s'écrivent de manière explicite comme :

$$\langle 0 | [\delta Q_\nu, [H, Q_\nu^\dagger]] | 0 \rangle = (E_\nu - E_0) \langle 0 | [\delta Q_\nu, Q_\nu^\dagger] | 0 \rangle . \quad (2.2)$$

En utilisant la forme explicite de  $Q_\nu^\dagger$  (équation 2.1), l'équation ci-dessus se transforme en un système matriciel aux valeurs propres :

$$\begin{bmatrix} \mathcal{A}_{ab} & \mathcal{B}_{ab} \\ \mathcal{B}_{-a-b}^* & \mathcal{A}_{-a-b}^* \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_b \\ Y_b \end{bmatrix} = \Omega_\nu \begin{bmatrix} \mathcal{N}_{ab} & 0 \\ 0 & -\mathcal{N}_{-a-b} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} X_b \\ Y_b \end{bmatrix} \quad (2.3)$$

où l'on a utilisé les notations :

$$\mathcal{A}_{ab} = \langle 0 | [A_a, [H, A_b^\dagger]] | 0 \rangle \quad (2.4)$$

$$\mathcal{B}_{ab} = -\langle 0 | [A_a, [H, A_{-b}]] | 0 \rangle \quad (2.5)$$

$$\mathcal{N}_{ab} = \langle 0 | [A_a, A_b^\dagger] | 0 \rangle . \quad (2.6)$$

Malheureusement, l'état fondamental  $|0\rangle$  étant inconnu, il faut avoir recours à des approximations supplémentaires. La méthode de la RPA standard consiste à approximer  $|0\rangle$  par le vide de champ moyen pour le calcul des doubles commutateurs  $\mathcal{A}_{ab}$  et  $\mathcal{B}_{ab}$  et de la matrice norme  $\mathcal{N}_{ab}$ . Ainsi, les valeurs moyennes qui étaient inconnues sont maintenant calculables d'une manière approchée. L'inconvénient de cette méthode est qu'elle surestime souvent les corrélations et par suite brise le critère de Ritz. Par ailleurs, l'énergie de l'état fondamental n'est pas calculable directement par la formule  $E_{RPA} = \langle H \rangle$  : on doit en effet avoir recours à la "charging formula" [12] ou encore à d'autres techniques (voir par exemple [13] dans le cadre de la bosonisation du hamiltonien).

Les versions qui vont au-delà de la RPA standard consistent à améliorer cette approximation portant sur le vide. On peut ainsi (RPA renormalisée) conserver les valeurs moyennes à un corps exactes, et non plus celles calculées avec le champ moyen. Le système final d'équations est alors obtenu en factorisant les valeurs moyennes à  $n > 2$  corps. Par exemple, on écrira :  $\langle abcd \rangle = \langle ab \rangle \langle cd \rangle + \langle ac \rangle \langle bd \rangle + \langle ad \rangle \langle bc \rangle$ . Cette approximation ne porte donc pas, cette fois, directement sur le vide lui-même mais sur les factorisations des valeurs moyennes pour ne conserver que celles à deux corps ( $\equiv$  nombres d'occupation). Pour clore le système, il est alors nécessaire de relier ces nombres d'occupation aux amplitudes (voir

par exemple [6, 14]). Dans cette approche, le principe variationnel n'est pas respecté non plus.

Il est également possible de conserver les valeurs moyennes exactes à trois, quatre, ... opérateurs. Les calculs deviennent alors beaucoup plus compliqués et, ainsi que nous le verrons dans le cadre de l'oscillateur anharmonique, nous serons confrontés à des incohérences au niveau du formalisme lui-même. En fait, ces contradictions peuvent en théorie être levées grâce à la SCRPA (Self-Consistent RPA) dans laquelle toutes les corrélations sont incluses. En pratique cependant, très peu de systèmes ont pu être traités en SCRPA [6, 15, 16, 17, 18, 19, 20, 21] du fait même de sa complexité de mise en oeuvre.

Le second formalisme de la RPA est celui des équations de Dyson. Son principal intérêt est d'être directement applicable en théorie des champs. De plus, les approximations réalisées au cours du calcul peuvent plus facilement s'interpréter diagrammatiquement.

Pour établir les équations, il faut partir de la définition d'une fonction de Green à l'équilibre à température nulle (la généralisation à température finie est directe) :

$$G_{\alpha\beta}(t, t') = -i\langle 0|T (A_\alpha(t) A_\beta^\dagger(t')) |0\rangle, \quad (2.7)$$

où  $T$  est l'opérateur qui ordonne dans le temps et où les opérateurs  $A_\alpha(t)$  et  $A_\beta^\dagger(t')$  sont les représentations de Heisenberg des opérateurs  $A_\alpha$  et  $A_\beta^\dagger$  intervenant dans l'expression de l'opérateur d'excitation  $Q_\nu$  de la méthode précédente (avec les amplitudes) :  $A_\alpha(t) = e^{iHt} A_\alpha(0) e^{-iHt}$  ( $H$  est l'hamiltonien complet). A l'équilibre, la fonction de Green ci-dessus ne dépend que de la différence des deux temps  $t$  et  $t'$ . Par conséquent, la transformée de Fourier ne va donc dépendre que d'une seule énergie  $E$  :

$$G_{\alpha\beta}(t, t') = \int \frac{dE}{2\pi} e^{-iE(t-t')} G_{\alpha\beta}(E), \quad (2.8)$$

L'équation du mouvement (de Dyson) pour  $G_{\alpha\beta}(E)$  s'écrit alors [5, 22] :

$$E G_{\alpha\beta}(E) = \mathcal{N}_{\alpha\beta} + \sum_{\beta', \gamma} \mathcal{DC}_{\alpha\beta'} \mathcal{N}_{\beta'\gamma}^{-1} G_{\gamma\alpha}(E), \quad (2.9)$$

avec :

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{\alpha\beta} &= \langle 0|[A_\alpha, A_\beta^\dagger]|0\rangle, \\ \mathcal{DC}_{\alpha\beta} &= \langle 0|[A_\alpha, H], A_\beta^\dagger|0\rangle. \end{aligned} \quad (2.10)$$

Il est alors possible, à partir de ces équations de retrouver les schémas d'approximation décrits pour la première méthode. Ainsi, l'approximation de la RPA standard consistera, comme précédemment, à remplacer le vide exact par le vide de champ moyen. De même, pour la RPA renormalisée, on factorisera les fonctions de Green pour ne conserver que les fonctions de Green à deux corps, la seule différence résidant dans la fermeture du système, fermeture qui se fera *via* le théorème spectral :

$$\langle BA \rangle = \lim_{\eta \rightarrow 0^+} \int \frac{i d\omega}{2\pi} e^{i\omega\eta} G_{A,B}(\omega). \quad (2.11)$$

En fait, il est possible de montrer que les deux méthodes décrites précédemment sont équivalentes si [22] :

$$\langle 0 | [H, [A_\alpha, A_\beta^\dagger]] | 0 \rangle = 0 . \quad (2.12)$$

Évidemment, ces relations sont automatiquement satisfaites si  $|0\rangle$  est l'état fondamental exact, ce qui n'est plus forcément le cas dès lors que l'on effectue des approximations. Nous les imposerons alors généralement comme contraintes. Lorsque  $[A_\alpha, A_\beta^\dagger]$  redonne un opérateur appartenant également au spectre d'excitation (ce qui ne sera pas toujours notre cas), ces équations correspondent à ce que l'on appelle les "équations du gap" généralisées. On peut montrer qu'elles sont équivalentes à la minimisation de l'énergie par rapport aux paramètres variationnels du problème (cf paragraphe sur l'oscillateur anharmonique). Mais, à nouveau, même si les deux formalismes présentés sont équivalents, nous avons déjà signalé que l'approche par les fonctions de Green était en fait plus adapté à la théorie des champs. C'est donc ce dernier formalisme que nous allons maintenant considéré dans notre premier exemple d'application de la RPA à une théorie bosonique, à savoir la théorie  $\lambda\phi^4$ .

## 2.3 RPA et extensions appliquées à une théorie de champs scalaires $\lambda\phi^4$

### 2.3.1 Potentiel effectif

Il est clair que le potentiel classique d'une théorie quantique des champs joue un rôle crucial lorsque l'on se préoccupe du phénomène de brisure de symétrie. Cependant, il arrive parfois que les corrections radiatives (et de manière plus générale, les fluctuations quantiques) puissent changer le comportement du potentiel classique. Le minimum du potentiel classique peut alors devenir instable du fait même des corrections quantiques. Ainsi, une symétrie spontanément brisée au niveau classique peut être restaurée au niveau quantique et, inversement, une symétrie peut être spontanément brisée au niveau quantique alors qu'elle ne l'est pas au niveau classique. Pour cette raison, la quantité pertinente à considérer n'est pas le potentiel classique mais ce que l'on appelle le potentiel effectif. Le potentiel effectif est l'analogie du potentiel classique dans le sens où c'est lui qu'il faudra minimiser pour avoir les états stables du système. La seule différence est qu'il prend en compte les effets quantiques. Ces derniers peuvent être inclus ordre par ordre en théorie des perturbations. Le potentiel effectif prendra donc une forme différente suivant que l'on travaille à une ou plusieurs boucles. En ce qui nous concerne, nous le déterminerons dans différentes approximations : champ moyen et RPA renormalisée.

### 2.3.2 Résultats pour la théorie scalaire à 1+1 dimensions

Le but de ce travail est de disposer de théories non-perturbatives qui soient applicables, dans un premier temps, au problème de la symétrie chirale et, enfin, aux théories de jauge. Afin de mettre au point ces approches non-perturbatives, nous allons commencer par un

modèle simple de théorie quantique des champs, à savoir le champ scalaire en interaction, dont la densité lagrangienne s'écrit ( $\lambda > 0$ ) :

$$\mathcal{L}(\Phi(x), \partial^\mu \Phi(x)) = \frac{1}{2} \partial_\mu \Phi(x) \partial^\mu \Phi(x) - \frac{\mu_0^2}{2} \Phi^2(x) - \frac{\lambda}{4} \Phi^4(x). \quad (2.13)$$

Afin de s'affranchir des difficultés techniques qui sont spécifiques à la théorie quantique des champs et donc se concentrer uniquement sur l'aspect non perturbatif du problème, nous allons nous limiter au cas à 1+1 dimensions. La théorie  $\lambda\Phi^4$  devient alors super-renormalisable.

Ce modèle a déjà été étudié par d'autres techniques : théorie des champs sur réseau [23, 24, 25] et développement en clusters [26]. Il sera par conséquent possible de comparer nos résultats avec ceux obtenus dans ces travaux, à savoir qu'il se produit une transition de phase du second ordre entre une phase symétrique où le condensat  $s$  est nul et une phase où  $s$  est différent de 0 (le condensat est défini par :  $\Phi = \phi + s$  avec  $s \equiv \langle 0|\Phi|0\rangle$  et  $\langle 0|\phi|0\rangle \equiv 0$ ).  $s$  joue donc le rôle de paramètre d'ordre.

### 2.3.3 Résultats dans le cadre de l'approximation de champ moyen

Partant du lagrangien 2.13, il est très facile de construire le hamiltonien. Dans le cadre d'une théorie de champ moyen, on introduit une masse  $m$  variationnelle, les opérateurs création ( $b^\dagger$ ) et annihilation ( $b$ ) correspondants et le vide  $|0_m\rangle$  associé ( $b|0_m\rangle = 0$ ). De manière explicite, le hamiltonien prend alors la forme :

$$H = \int dx \left[ \frac{1}{2} (\Pi^2 + (\nabla\phi)^2 + m^2\phi^2) + \frac{\lambda}{4} \Phi^4 + \frac{\mu_0^2}{2} \Phi^2 - \frac{m^2}{2} \phi^2 \right].$$

avec

$$\begin{aligned} \phi(\vec{x}, t) &= \int d\vec{p} [e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} b(\vec{p}, t) + e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} b^\dagger(\vec{p}, t)] \\ &= \int d\vec{p} [e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} (b(\vec{p}, t) + b^\dagger(-\vec{p}, t))] \end{aligned}$$

$$\text{avec la mesure invariante } d\vec{p} = \frac{d\vec{p}}{2p_0(2\pi)}.$$

et

$$\begin{aligned} \Pi(\vec{x}, t) &= \int d\vec{p} (-i p_0) [e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} b(\vec{p}, t) - e^{-i\vec{p}\cdot\vec{x}} b^\dagger(\vec{p}, t)] \\ &= \int d\vec{p} (-i p_0) [e^{i\vec{p}\cdot\vec{x}} (b(\vec{p}, t) - b^\dagger(-\vec{p}, t))]. \end{aligned}$$

Comme indiqué dans le paragraphe précédent, à 1+1 dimensions, la théorie est super-renormalisable et il suffit en fait ici d'un seul contreterme de masse pour la régularisation. En appelant  $\mu$  la masse renormalisée, on peut alors montrer qu'après renormalisation [7],

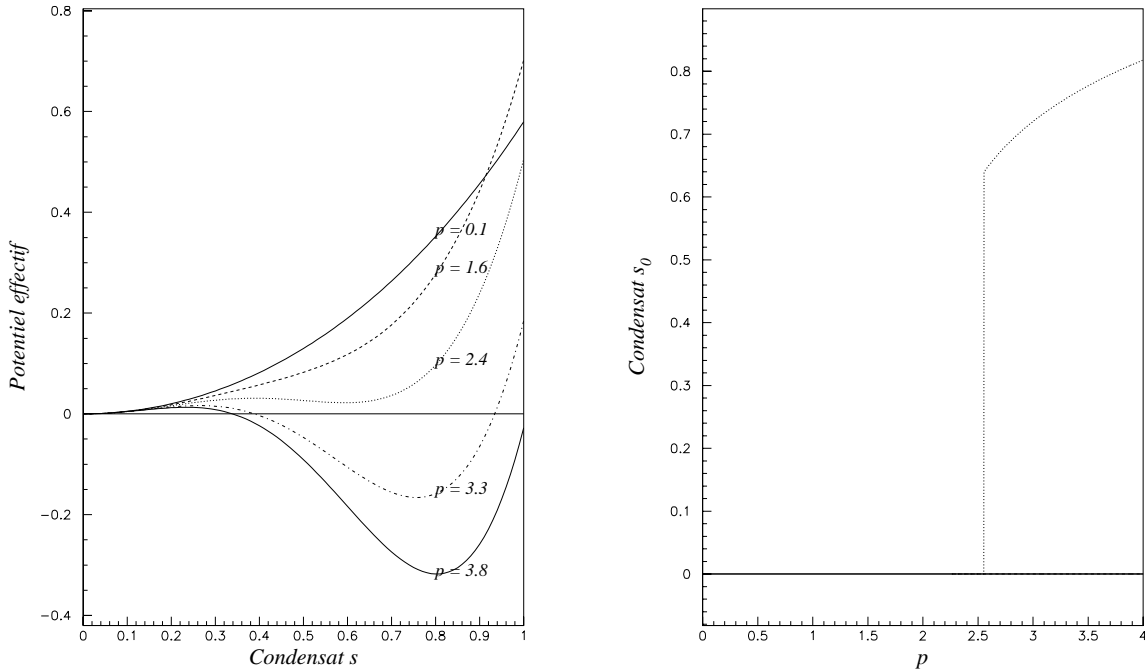


FIG. 2.1 – A gauche : potentiel effectif gaussien en fonction du condensat  $s$  (l'échelle est proportionnelle à la masse nue renormalisée  $\mu^2$ ) pour différentes valeurs de la constante de couplage  $p$ . A droite : condensat au minimum du potentiel effectif gaussien,  $s_0$ , tracé en fonction de  $p$  et à température nulle. La transition de phase se produit pour  $p_c = 2.56$ .  $s_0$  est discontinu, la transition de phase est donc du premier ordre.

le potentiel effectif (gaussien) prend la forme indiquée sur la figure 2.1 pour différentes valeurs de  $p \equiv \frac{\lambda}{4\mu^2}$ . Sur cette figure trois "catégories" de courbe apparaissent clairement : la catégorie ne présentant pas d'extremum autre que  $s = 0$  (correspondant à  $p < 2.3$ ) ; la catégorie possédant un minimum local différent de zéro (pour  $p \in [2.3, 2.45]$ ) et enfin celle possédant un minimum global différent de zéro (pour  $p > 2.45$ ).

Cela signifie que lorsque  $p$  augmente, il se produit une transition de phase. Celle-ci est du premier ordre car lorsque  $p$  augmente, le potentiel effectif développe un second minimum (c'est-à-dire autre que  $s = 0$ ) qui devient de plus en plus prononcé pour finalement l'emporter pour  $p \simeq 2.45$ ). Le paramètre d'ordre effectue donc un saut pour cette valeur de  $p$ . Il est possible de mieux visualiser le phénomène en traçant directement  $s_0$ , valeur du condensat au minimum global du potentiel effectif, en fonction de  $p$  (voir figure 2.2) : la courbe est en effet discontinue et le paramètre critique est  $p_c \simeq 2.56$ .

Nous avons donc mis en évidence le phénomène de brisure spontanée de la symétrie du lagrangien. Très souvent, quand ce phénomène apparaît, par exemple dans le mécanisme de Higgs, la brisure est explicitement contenue dans le potentiel, comme par exemple :

$V = -\frac{1}{2}\mu_0^2\Phi^2 + \frac{\lambda}{4}\Phi^4$ . Ici, cette brisure est d'origine dynamique.

Au niveau du champ moyen, la transition de phase observée est du premier ordre. Ceci est tout à fait en accord avec les résultats de l'article [26] (qui utilise une méthode différente, à savoir le développement en clusters pour les fonctions de Green) qui montre, qu'à l'approximation gaussienne, la transition est également du premier ordre et que le paramètre critique est  $p_c = 2.568$ . Ces deux résultats sont donc en contradiction avec la référence [27] qui montre, au sens mathématique du terme, l'impossibilité d'une transition de phase du premier ordre pour  $\Phi^4$  en 1 + 1 dimensions (il faut considérer  $\Phi^4$  comme limite du modèle d'Ising généralisé). L'approche de champ moyen est par conséquent insuffisante pour reproduire les propriétés du système au niveau de la transition de phase. Ceci n'est évidemment pas surprenant et nous allons donc maintenant passer aux résultats obtenus dans le cadre de la RPA.

### 2.3.4 Résultats dans le cadre de la RPA et de la RPA renormalisée

Nous avons introduit dans la section 2.2 quatre types de fonctions de Green que nous notons à nouveau sous la forme :

$$\begin{aligned}\mathcal{G}_{a\bar{b}} &= -i\langle 0|T(A_a A_b^\dagger)|0\rangle, \\ \mathcal{G}_{a-b} &= -i\langle 0|T(A_a A_{-b})|0\rangle, \\ \mathcal{G}_{-\bar{a}\bar{b}} &= -i\langle 0|T(A_{-a}^\dagger A_b^\dagger)|0\rangle, \\ \mathcal{G}_{-\bar{a}-b} &= -i\langle 0|T(A_{-a}^\dagger A_{-b})|0\rangle.\end{aligned}$$

Nous nous limitons pour ce problème à un espace à deux particules : ainsi, les opérateurs mis en jeu seront  $b_\alpha^\dagger$ ,  $b_{\alpha'}^\dagger$  et finalement  $b_\alpha^\dagger b_{-\alpha'}$  avec  $\alpha \neq \alpha'$  pour les excitations du type "particule-trou". Les raisons pour lesquelles on se limite à cette ordre sont uniquement liées à la faisabilité, les calculs devenant beaucoup trop lourds à trois particules. Pourtant, l'opérateur de masse, à cause du couplage à quatre champs, devrait faire apparaître des graphes à deux boucles, c'est-à-dire en pratique des excitations à trois particules. Il est donc évident, en se limitant à cet ordre dans les opérateurs d'excitation, que nous ne pourrions générer directement l'opérateur de masse dans son entier. Ceci constitue effectivement un problème. Toutefois, pour simplifier, nous conserverons tout de même cet ensemble d'opérateurs.

Le calcul est relativement complexe. Techniquement, nous suivons la méthode exposée dans le premier paragraphe, qui consiste, d'une part, à factoriser les différentes fonctions de Green en ne conservant à la fin que les valeurs moyennes à deux champs et d'autre part à utiliser, pour la RPA standard, le vide de champ moyen pour le calcul des double commutateurs. Le système est donc fermé et, en théorie, soluble. Pour la RPA renormalisée, le vide utilisé n'est plus celui de champ moyen et les valeurs moyennes à deux champs sont calculées *via* le théorème spectral.

Même si tout ce qui vient d'être dit est parfaitement exact sur le principe, les choses ne sont malheureusement pas aussi simples qu'il y paraît à première vue et de nombreuses subtilités sont en réalité nécessaires pour parvenir à effectuer le calcul jusqu'au bout. Tous

les détails sont présentés dans [7, 28]. Dans ce manuscrit, nous allons juste insister sur un problème propre à la RPA, à savoir le calcul de l'énergie cinétique. Plus précisément, les valeurs moyennes de  $\Phi_\alpha \Phi_\alpha^\dagger$  et  $\Pi_\alpha \Pi_\alpha^\dagger$  nécessitent la connaissance de valeurs moyennes d'opérateurs qui ne sont pas directement données par le calcul RPA lui-même. Il faut donc recourir à ce que l'on appelle la "charging formula". Le principe est d'utiliser un artifice de calcul en multipliant le hamiltonien d'interaction  $H_{int}$  par un paramètre arbitraire  $\rho \in [0, 1]$  (on modifie la constante de couplage). On a alors :

$$E(\rho) = \langle \Psi(\rho) | H_0 + \rho H_{int} | \Psi(\rho) \rangle \quad (2.14)$$

ou  $|\Psi(\rho)\rangle$  est l'état fondamental du hamiltonien  $H(\rho) \equiv H_0 + \rho H_{int}$ . On a alors :

$$\frac{dE}{d\rho} = \frac{1}{\rho} \langle \Psi(\rho) | \rho H_{int} | \Psi(\rho) \rangle.$$

que l'on intègre sur  $\rho$  :

$$E(\rho = 1) = E_{GEP} + \int_0^1 \frac{d\rho}{\rho} \langle \Psi(\rho) | \rho H_{int} | \Psi(\rho) \rangle. \quad (2.15)$$

L'adaptation de cette formule, qui permet le calcul de l'énergie de corrélation, à la théorie des champs relativistes a été particulièrement délicate [7]. Le point épineux a été de construire un hamiltonien "libre" et "d'interaction" appropriés afin de pouvoir effectuer le calcul. Le problème a été résolu en incluant dans le hamiltonien libre l'ensemble des termes du hamiltonien complet contribuant au champ moyen [7]. Nous avons alors pu déterminer le potentiel effectif, dans le cadre de la RPA standard et de la RPA renormalisée. Les résultats sont représentés sur la figure 2.2 (figure de gauche : RPA standard ; figure de droite : RPA renormalisée).

En ce qui concerne la RPA standard (figure de gauche), nous obtenons une transition de phase du deuxième ordre (pas de phase métastable). Cela signifie que les fluctuations RPA ont été suffisantes pour générer le bon ordre de la transition vis à vis du champ moyen. Il y a donc continuité entre la zone où  $s_0 = 0$  et celle où  $s_0 \neq 0$ . Le paramètre critique, quant à lui, est égal à  $p_c \simeq 1,86$ . Cette valeur est plus basse que le résultat de champ moyen et on s'éloigne donc du résultat calculé par les réseaux (2,56 dans [24]) mais nous sommes en accord avec le résultat théorique qui interdit une transition de premier ordre. Cependant, il faut signaler que cette courbe a été en réalité obtenue, suite à une approximation supplémentaire, en éliminant une instabilité provenant d'un propagateur à une particule (ce propagateur a dû ainsi être remplacé par son équivalent calculé en champ moyen).

La présence même de cette instabilité suffit à elle seule à justifier le fait qu'il est nécessaire d'aller au-delà. En d'autres termes, il est intéressant d'inclure des corrélations absentes dans le formalisme standard, afin de savoir si elles vont faire disparaître l'instabilité. En réalité, il faut également mentionner qu'à ce stade, le résultat est également non covariant et que les relations spectrales ne donnent pas le bon résultat (ce point sera rediscuté dans le cas de l'oscillateur anharmonique).

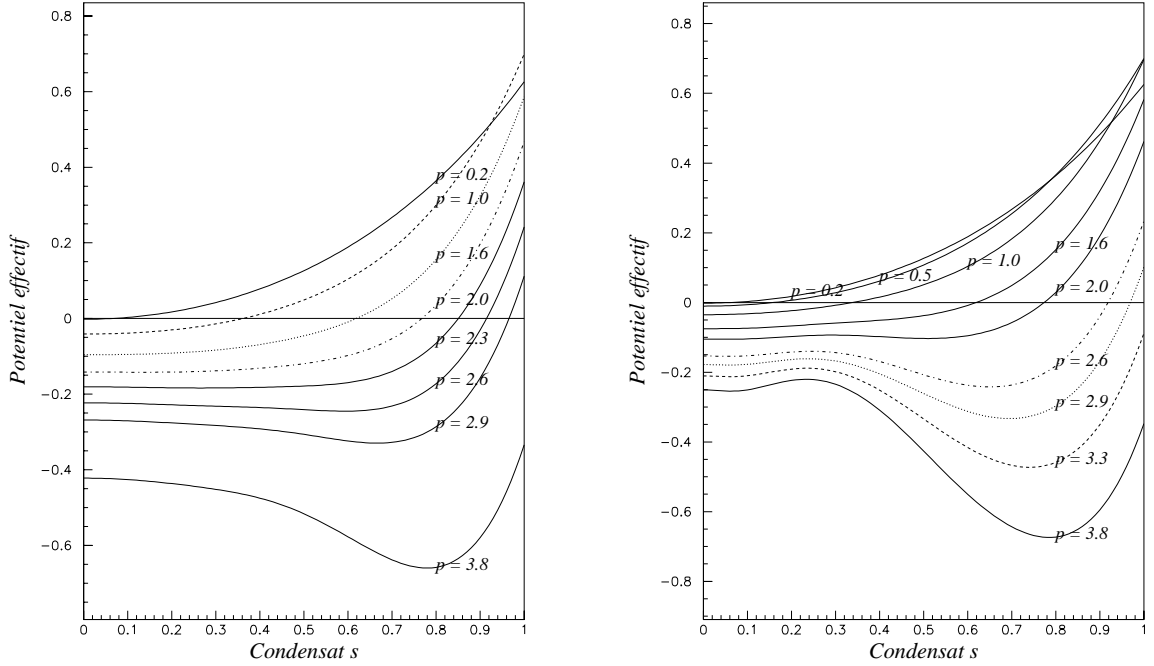


FIG. 2.2 – Potentiel effectif RPA standard (à gauche) et RPA renormalisée (à droite).

En ce qui concerne la RPA renormalisée, nous observons une transition de phase du premier ordre (en désaccord avec [27]) pour  $p_c \simeq 2.3$ . Cependant, cette valeur de  $p_c$  se rapproche du résultat calculé sur réseau [23, 24, 25], ce qui est encourageant. De plus, même si la transition de phase n'est pas du bon ordre, la zone de métastabilité s'est considérablement réduite par rapport au champ moyen (la barrière de potentiel entre la phase stable et métastable est plus faible qu'en champ moyen). Les fluctuations de la RPA renormalisée (fluctuations à deux corps, mais calculées sur le vide RPA autocohérent contrairement à la méthode standard) diminuent donc le caractère premier ordre de la transition de phase et améliorent la valeur du paramètre critique. De plus, l'instabilité de la RPA standard a été éliminée.

A nouveau, ces résultats sont encourageants mais ne doivent pas faire oublier qu'ils ont été obtenus à la suite d'approximations et qu'un certain nombre de problèmes non résolus subsistent, outre la non covariance. Prenons par exemple l'utilisation des relations spectrales. Ainsi, si nous voulons calculer  $\langle b_1^\dagger b_{-2} b_3 \rangle$ , on obtient

$$\delta_{1+2-3} \langle b_1^\dagger b_{-2} b_3 \rangle = \delta_{1+2-3} \lim_{t \rightarrow 0^+} \langle b_1^\dagger(t) (b_{-2} b_3)(0) \rangle = \delta_{1+2-3} \int \imath \frac{dE}{2\pi} e^{\imath E \eta^+} G_{b_{-2} b_3, b_1^\dagger}(E) \quad (2.16)$$

ou, en utilisant une autre décomposition,

$$\delta_{1+2-3} \langle b_1^\dagger b_{-2} b_3 \rangle = \delta_{1+2-3} \lim_{t \rightarrow 0^+} \langle (b_1^\dagger b_{-2})(t) b_3(0) \rangle = \delta_{1+2-3} \int \imath \frac{dE}{2\pi} e^{\imath E \eta^+} G_{b_3, b_1^\dagger b_{-2}}(E) \quad (2.17)$$



La deuxième solution donne un résultat nul, contrairement à la première...

Plusieurs hypothèses peuvent être avancées pour tenter d'expliquer les problèmes que nous avons rencontrés. On peut par exemple se demander si la façon de tronquer les équations en éliminant systématiquement les valeurs moyennes connectées à trois ou quatre champs dans nos équations est légitime ou non (nous verrons d'ailleurs sur l'oscillateur anharmonique comment il est possible de lever partiellement cette approximation). Il est également possible d'objecter que l'espace des opérateurs d'excitation n'est peut-être pas en adéquation avec le problème étudié, à savoir qu'il faudrait sans doute, ainsi que nous l'avons déjà mentionné, inclure les excitations à trois particules. Là encore, nous verrons comment nous pouvons les inclure dans la phase symétrique dans le cas de l'oscillateur anharmonique. Ensuite, il faut remarquer que notre approche, contrairement à la méthode originelle de la RPA, n'utilise pas la bosonisation des paires de bosons. Dans le cas de fermions, cette "non bosonisation" s'est déjà révélée avantageuse par rapport à l'approche habituelle, en ce sens qu'elle permettait de mieux respecter le principe de Pauli [29, 30, 31]. Il n'y a donc aucune raison particulière de croire que cela devrait poser un quelconque problème dans le traitement de systèmes de bosons. Enfin, en ce qui concerne la non-covariance des expressions obtenues, une réflexion est menée quant à l'utilisation du cône de lumière.

On le constate, de nombreuses pistes sont à l'étude pour essayer de pallier aux insuffisances de notre approche qui, soulignons-le tout de même encore une fois, a fourni de nombreux résultats encourageants.

## 2.4 Application de la RPA à l'oscillateur anharmonique à une dimension

Afin de sérier les problèmes, nous avons décidé de considérer l'exemple de l'oscillateur anharmonique à une dimension. Évidemment, ce système relève de la mécanique quantique pure. Cela signifie que le problème de la covariance ne sera pas résolu par ce biais. Néanmoins, nous allons ainsi pouvoir isoler les spécificités des systèmes bosoniques. Nous allons tout d'abord commencer par présenter brièvement l'approche par la RPA standard puis indiquer, dans une seconde partie comment il est possible d'améliorer les résultats en vérifiant à chaque étape la cohérence de notre approche.

### 2.4.1 Résultats pour la RPA standard et la RPA renormalisée

Notre hamiltonien de départ est :

$$H = \frac{p^2}{2} + \mu^2 \frac{X^2}{2} + gX^4 \quad (2.18)$$

avec  $\mu^2 < 0$  et  $g > 0$ . On peut alors introduire les opérateurs création et annihilation habituels  $a^\dagger$  et  $a$  ( $a = (\tilde{\mu} + ip)/\sqrt{2}$  avec  $\tilde{\mu} \equiv \sqrt{|\mu^2|}$ ) ainsi que le vide  $|V\rangle$  associé ( $a|V\rangle = 0$ ). Pour la mise en place du formalisme de la RPA, il est ensuite nécessaire d'effectuer une

transformation de Bogoliubov :

$$|HF\rangle = e^{ua^\dagger + \frac{1}{2}ta^{\dagger 2}}|V\rangle \quad (2.19)$$

L'opérateur  $b$  qui annihile le vide  $|HF\rangle$  est alors facilement obtenu en fonction des paramètres  $u$  et  $t$  de la transformation de Bogoliubov :

$$b = (1 - t^2)^{-1/2}(a - ta^\dagger - u) \quad (2.20)$$

On en déduit finalement :

$$x \equiv X + s = \frac{1}{\sqrt{2\omega}}(b + b^\dagger) \quad (2.21)$$

$$p = -i\sqrt{\frac{\omega}{2}}(b - b^\dagger) \quad (2.22)$$

où  $s$  et  $\omega$  s'expriment très simplement en fonction de  $u$  et  $t$ . La raison pour laquelle nous avons décidé de considérer ces deux nouveaux paramètres est qu'ils ont une interprétation physique particulièrement simple :  $s$  correspond à une translation et  $\omega$  à la fréquence modifiée de l'oscillateur.

Le but d'une transformation de Bogoliubov est de sélectionner la meilleure base possible, c'est-à-dire de déterminer les valeurs des paramètres variationnels qui minimisent l'énergie  $E_0^{HF} = \langle HF|H|HF\rangle$ .  $s$  et  $\omega$  doivent donc vérifier :  $\partial E_0^{HF}/\partial s = 0$  et  $\partial E_0^{HF}/\partial \omega = 0$ . Ce qui est très important, et c'est pour cette raison que nous avons donné beaucoup de détails sur la transformation de Bogoliubov, c'est que les deux relations ci-dessus sont équivalentes à :

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_0^{HF}}{\partial s} = 0 &\Leftrightarrow \langle HF|[H, b]|HF\rangle = 0, \\ \frac{\partial E_0^{HF}}{\partial \omega} = 0 &\Leftrightarrow \langle HF|[H, bb]|HF\rangle = 0. \end{aligned} \quad (2.23)$$

En d'autres termes, l'origine profonde des équations du gap est la minimisation de l'énergie par rapport aux paramètres variationnels de la transformation de Bogoliubov. Cela implique que l'on ne peut donc pas choisir le spectre d'opérateurs que l'on souhaite ! En effet, considérer des opérateurs à trois particules est *a priori* impossible : on ne pourrait pas, par exemple, avoir  $\langle HF|[H, bbb]|HF\rangle = 0$  alors qu'il n'y a pas de troisième paramètre dans la transformation de Bogoliubov. Il est donc *a priori* nécessaire que cette transformation soit plus riche pour pouvoir élargir le spectre d'excitation.

Cette remarque importante étant faite, nous allons maintenant examiner les corrections RPA par rapport au champ moyen dans le cadre d'un spectre d'excitation  $\{b, b^\dagger, bb, b^\dagger b^\dagger\}$ . Le calcul de  $E_0^{RPA} \equiv \langle RPA|H|RPA\rangle$ <sup>1</sup> nécessite l'évaluation de termes  $\langle RPA|AB|RPA\rangle$ .

<sup>1</sup>Dans le langage habituel, l'énergie calculée dans le cadre de la RPA ne correspond pas à ce que nous avons baptisé  $E_0^{RPA}$  mais nécessite l'utilisation, comme dans le paragraphe précédent de la charging formula. Notre objectif, cependant, est de comparer les différentes valeurs de  $\langle gs|H|gs\rangle$ , quelque soit  $|gs\rangle$  ( $|HF\rangle, |RPA\rangle$ , etc...)

Dans le cadre du formalisme de l'équation de Dyson, ces valeurs moyennes sont données par le théorème spectral qui s'écrit, dans la limite  $t \rightarrow t'$  :

$$\langle RPA|AB|RPA\rangle = i \int \frac{dE}{2\pi} G_{AB}(E) \quad (2.24)$$

Dans le cadre de la RPA standard, les valeurs moyennes du membre de droite ne sont pas calculées de manière auto-cohérente mais à partir du vide  $|HF\rangle$ . De plus, l'application directe de cette formule à un cas simple indique par exemple que  $\langle RPA|x^2|RPA\rangle$  doit être calculé à partir de  $G_{xx}$ , c'est-à-dire une combinaison linéaire appropriée de fonction de Green du type  $G_{b,b}$ ,  $G_{b,b^\dagger}$ , etc... Par conséquent, le spectre d'excitation étant limité à deux particules, l'évaluation directe par cette méthode de  $\langle RPA|x^4|RPA\rangle$  est impossible. Nous avons donc eu recours à une factorisation systématique afin de ne conserver que les valeurs moyenne à deux particules. Par exemple :

$$\langle RPA|x^4|RPA\rangle \simeq 3\langle RPA|x^2|RPA\rangle^2 \quad (2.25)$$

Le calcul explicite de tous les termes devient alors relativement aisé. Les résultats numériques obtenus seront présentés à la fin, après la description des schémas plus élaborés que nous avons mis en place (cf paragraphe suivant).

Pour la RPA renormalisée, nous avons suivi exactement la même procédure de factorisation que pour la RPA standard en ce qui concerne les valeurs moyennes. La seule différence, mais qui est d'importance, est que les valeurs moyennes du membre de droite ne sont plus calculées à partir du vide  $|HF\rangle$  mais du vide corrélé  $|0\rangle$ . Chaque application du théorème spectral fournit donc une relation d'auto-cohérence qu'il s'agira de résoudre. Sur le principe, ce schéma d'approximation est totalement identique à celui que nous avons mis en place dans le cadre de la théorie des champs. Cependant, il n'est pas cohérent : en effet, le calcul direct imposerait explicitement que  $\langle 0|p^2|0\rangle = \langle 0|x^2|0\rangle = 0$ , ce qui est évidemment faux. Une telle contradiction apparaissait déjà sous une autre forme dans le cadre de la théorie des champs. La manière dont nous avons alors contourné le problème, c'est que nous avons abandonné l'équation du gap pour  $s$ . C'est en effet cette équation introduite explicitement dans les autres, qui conduit à la contradiction mentionnée ci-dessus. Ce faisant, on perd bien évidemment la symétrie des doubles commutateurs, puisqu'alors :

$$\langle 0|[b, [H, b^\dagger b^\dagger]]|0\rangle - \langle 0|[b^\dagger b^\dagger, [H, b]]|0\rangle = \langle 0|[H, b^\dagger]|0\rangle \neq 0 \quad (2.26)$$

Or, cette symétrie est très importante pour la stabilité du système. Nous avons donc décidé de modifier notre approche en incorporant d'autres corrélations, afin de voir si ce problème pouvait être résolu et les résultats numériques améliorés, par rapport à la RPA standard et au champ moyen.

## 2.4.2 Résultats dans le cadre de la RPA renormalisée étendue

La stratégie suivie pour améliorer le schéma décrit dans le paragraphe précédent a été d'inclure les corrélations de plus bas ordre non nulles. De manière plus précise, nous avons

pris en compte les valeurs moyennes à trois particules pour  $s \neq 0$  et à quatre particules pour  $s = 0$ .

Ceci nécessite quelques explications. En effet, nous avons déjà signalé que le calcul de valeurs moyennes à quatre particules était impossible sans inclure les excitations à trois particules et qu'inclure ces excitations à trois particules impliquait la présence d'un paramètre variationnel supplémentaire dans la transformation de Bogoliubov. Ceci reste tout à fait exact dans le cas  $s \neq 0$ . Cependant, les relations qui devraient être vérifiées dans le cas où l'on aurait trois paramètres variationnels (par exemple  $\langle [H, bbb] \rangle = 0$ ) le sont automatiquement dans le cas  $s = 0$ . Cela implique, qu'il est possible, sans induire de contradiction avec ce qui a été dit précédemment, d'inclure, pour le cas  $s = 0$  uniquement, les opérateurs d'excitation à trois particules. Les calculs deviennent alors plus complexes mais parfaitement réalisables [8].

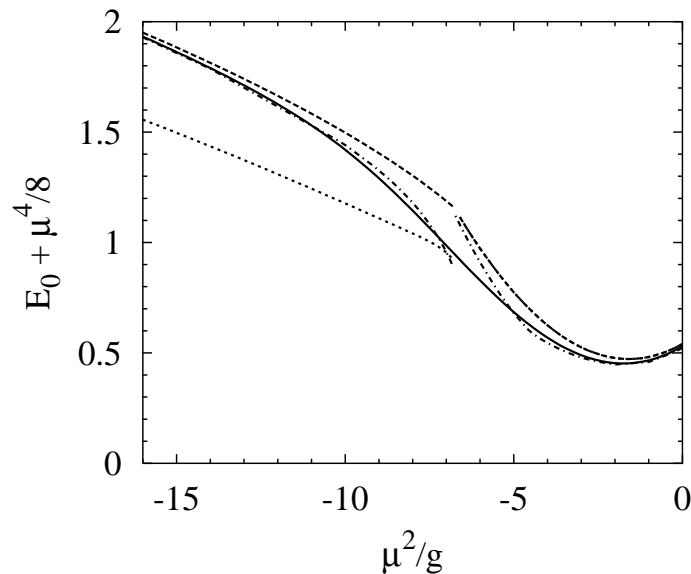


FIG. 2.3 – Solution exacte pour l'énergie de l'état fondamental (trait plein), solution champ moyen (tirets), solution RPA (pointillés) et solution RPA renormalisée étendue (traits-points) en fonction de  $\mu^2/g$  avec  $g = 0.5$ . Pour avoir des énergies positives, nous avons ajouté  $\mu^4/8$ .

Les valeurs moyennes à trois et quatre opérateurs ont été calculées explicitement et de manière auto-cohérente. Des progrès ont donc été réalisés vers l'application de la RPA totalement auto-cohérente. Malgré tout, il faut signaler que nous n'avons pas encore pu aller au-delà pour le moment. Des pistes sont encore à explorer plus en détails, comme par exemple l'introduction de deux types de bosons dans la transformation de Bogoliubov (bosonisation d'une paire de bosons) afin d'introduire un autre paramètre variationnel. Le but serait évidemment de savoir inclure de manière systématique un nombre quelconque d'opérateurs d'excitation et donc de pouvoir traiter de manière symétrique les deux do-

maines  $s = 0$  et  $s \neq 0$ . Ceci est en fait plus une question de principe qu'une question de précision numérique. On peut en effet voir sur la figure 2.3 que les résultats obtenus dans le cadre de notre approche sont excellents. Cela signifie que la plupart des corrélations qui manquent dans le cadre du champ moyen et de la RPA sont en réalité contenues dans les valeurs moyennes à trois et quatre particules. Le seul écart notable par rapport au résultat exact est près de la transition de phase (cf 2.3). Ceci est compréhensible dans le sens où à la transition toutes les corrélations doivent être présentes. Par ailleurs, comme nous l'avons déjà mentionné, notre approche n'est pas symétrique dans les deux phases. Ceci explique pourquoi la courbe est discontinue lors du passage  $s = 0$  vers  $s \neq 0$ .

Pour terminer, signalons qu'un traitement identique à celui que nous venons de décrire pour l'oscillateur anharmonique a été mis en oeuvre dans le cadre de la théorie  $\lambda\phi^4$ . Le système d'équations tensorielles auto-cohérentes qui en résulte est cependant beaucoup plus difficile à résoudre. Il est par conséquent difficile d'affirmer pour le moment que les problèmes décrits dans les paragraphes précédents seront tous résolus ou si, au contraire, le problème de la covariance subsistera ou non.

---

## Bibliographie

---

- [1] Z. Aouissat, G. Chanfray, P. Schuck, and J. Wambach. A non-perturbative treatment of the pion in the linear sigma-model. *Nucl. Phys.*, A603 :458–470, 1996.
- [2] Z. Aouissat, P. Schuck, and J. Wambach. The linear sigma model in the  $1/N$  expansion via dynamical boson mappings and applications to  $\pi\pi$  scattering. *Nucl. Phys.*, A618 :402–426, 1997.
- [3] Zoheir Aouissat. Single boson images via an extended holstein-primakoff mapping. *Phys. Rev.*, C62 :012201, 2000.
- [4] M. Oertel, M. Buballa, and J. Wambach. Meson loop effects in the NJL model at zero and non-zero temperature. *Phys. Atom. Nucl.*, 64 :698–726, 2001.
- [5] S. Schäfer and Peter Schuck. Dyson equation approach to many-body green's functions and self-consistent RPA : Application to the hubbard model. *Phys. Rev. B*, 59 :1712, 1999.
- [6] A. Rabhi, R. Bennaceur, G. Chanfray, and P. Schuck. Self-consistent quasi-particle rpa for the description of superfluid fermi systems. *Phys. Rev.*, C66 :064315, 2002.
- [7] H. Hansen, G. Chanfray, D. Davesne, and P. Schuck. Random phase approximation and extensions applied to a bosonic field theory. *Eur. Phys. J.*, A14 :397–411, 2002.
- [8] D. Davesne, M. Oertel, and H. Hansen. A consistent approximation scheme beyond RPA for bosons. *Eur. Phys. J.*, A16 :35–42, 2003.
- [9] D.J. Rowe. *Rev. Mod. Phys.*, 40 :153, 1968.
- [10] D.J. Rowe. *Nuclear Collective Motion*. Methuen, London, 1970.
- [11] Peter Schuck and S. Ethofer. *Nucl. Phys.*, A212 :269, 1973.
- [12] A. L. Fetter and J. D. Walecka. *Quantum theory of many-particle systems*. Mc Graw-Hill, 1971.
- [13] P. Ring and P. Schuck. *The nuclear many-body problem*. Springer-Verlag, 1980.
- [14] F. Catara, N. Dinh Dang, and M. Sambataro. Ground-state correlations beyond RPA. *Nucl. Phys. A*, 579 :1–12, 1994.
- [15] J. Dukelsky, G. Röpke, and P. Schuck. Generalized Brückner-Hartree-Fock theory and self-consistent RPA. *Nucl. Phys. A*, 628, 1998.
- [16] F. Krmpotic, E. J. V. de Passos, D. S. Delion, J. Dukelsky, and P. Schuck. Self consistent random phase approximation within the  $O(5)$  model and fermi transitions. 1998.

- [17] J. Dukelsky and P. Schuck. The Self Consistent RPA in a many level pairing model. *Phys. Lett. B*, 464, 1999.
- [18] D. S. Delion, J. Dukelsky, P. Schuck, E. J. V. de Passos, and F. Krmpotic. Proton neutron selfconsistent quasiparticle random phase approximation within the O(5) model. *Phys. Rev.*, C62 :044311, 2000.
- [19] E. J. V. de Passos, A. F. R. de Toledo Piza, and F. Krmpotic. Self Consistent and Renormalized particle-particle RPA in a Schematic Model. *Phys. Rev.*, C58 :1841–1844, 1998.
- [20] T. Bertrand, P. Schuck, G. Chanfray, Z. Aouissat, and J. Dukelsky. Selfconsistent random phase approximation in a schematic field theoretical model. *Phys. Rev.*, C63 :024301, 2001.
- [21] Jorge G. Hirsch, Alejandro Mariano, Jorge Dukelsky, and Peter Schuck. Fully Self-consistent RPA description of the many level pairing model. *Annals Phys.*, 296 :187–213, 2002.
- [22] Peter Schuck, J. Dukelsky, and G. Röpke. The Dyson equation approach to many body green’s functions. World Scientific, Singapore.
- [23] W. Janke and T. Sauer. Monte carlo simulation of (1+1)-dimensional  $\phi^{**4}$  quantum field theory. *Nucl. Phys. Proc. Suppl.*, 42 :917–919, 1995.
- [24] Will Loinaz and R. S. Willey. Monte carlo simulation calculation of critical coupling constant for continuum  $\phi^{**4}(2)$ . *Phys. Rev.*, D58 :076003, 1998.
- [25] Pablo J. Marrero, Erick A. Roura, and Dean Lee. A non-perturbative analysis of symmetry breaking in two- dimensional  $\phi^{**4}$  theory using periodic field methods. *Phys. Lett.*, B471 :45, 1999.
- [26] J. M. Häuser, W. Cassing, A. Peter, and M. H. Thoma. Connected green function approach to symetry breaking in  $\phi_{1+1}^4$ –theory. *Z. Phys.*, A353 :301–310, 1996.
- [27] B. Simon and R. G. Griffith. *Commun. Math. Phys.*, 33(145), 1973.
- [28] Hubert Hansen. *Méthodes non-perturbatives en théorie quantique des champs. Au-delà du champ moyen, l’approximation de la phase aléatoire*. PhD thesis, IPN Lyon, 2003. LYCEN T 2003-.
- [29] Jorge G. Hirsch, Alejandro Mariano, Jorge Dukelsky, and Peter Schuck. Fully self-consistent RPA description of the many level pairing model. *Annals Phys.*, 296 :187–213, 2002.
- [30] P. Curutchet, Jorge Dukelsky, G. G. Dussel, and A. J. Fendrik. Two-level bosonic model that simulates the transition from a superconductive condensate to an alpha cluster condensate. *Phys. Rev.*, C40 :2361–2366, 1989.
- [31] Jorge Dukelsky and Peter Schuck. Towards a variational theory for RPA-like correlations and fluctuations. *Nucl. Phys.*, A512 :466–482, 1990.

## Publication 7



# Random phase approximation and extensions applied to a bosonic field theory

H. Hansen<sup>1,a</sup>, G. Chanfray<sup>1</sup>, D. Davesne<sup>1</sup>, and P. Schuck<sup>2</sup>

<sup>1</sup> IPN Lyon, 43 Bd du 11 Novembre 1918, F-69622 Villeurbanne Cedex, France

<sup>2</sup> IPN Orsay, Université Paris-Sud, France

Received: 18 February 2002  
Communicated by V. Vento

**Abstract.** An application of a self-consistent version of RPA to quantum field theory with broken symmetry is presented. Although our approach can be applied to any bosonic field theory, we specifically study the  $\varphi^4$  theory in 1 + 1 dimensions. We show that the standard RPA approach leads to an instability which can be removed when going to a superior version, *i.e.* the renormalized RPA. We present a method based on the so-called charging formula of the many-electron problem to calculate the correlation energy and the RPA effective potential.

**PACS.** 03.70.+k Theory of quantized fields – 21.60.Jz Hartree-Fock and random-phase approximations – 24.10.Cn Many-body theory

## 1 Introduction

One central aim of the relativistic heavy-ion program is to produce highly excited hot and dense matter possibly constituting a quark-gluon plasma. In such a phase quarks and gluons should be liberated and chiral symmetry should be realized in its Wigner form. A central theoretical question is thus to have a correct description of the broken vacuum and of the progressive restoration of chiral symmetry with increasing temperature and/or baryonic density. This problem is highly non-perturbative in nature and the usual perturbative loop expansion techniques are certainly not sufficient by construction. These features provide at least one important motivation to develop tractable non-perturbative methods to be applied in the context of (effective) field theories with broken symmetries.

One hope is to try to adapt to quantum-field problems very well-controlled non-perturbative methods from the nuclear many-body problem possibly of variational nature. A very popular method, known as the Gaussian approximation for interacting bosons, exactly corresponds to the Hartree-Fock-Bogoliubov mean-field approximation which constitutes the basic building block of the nuclear many-body theory *i.e.* for fermions, see, *e.g.*, [1]. This variational method has already been applied to theories with a global symmetry [2] as well as with a local symmetry [3]. Nevertheless, when this HFB approach is applied to a bosonic  $O(N)$  model (*i.e.* to the linear sigma model) the pion ap-

pears with a finite mass or, in other words, Goldstone theorem is violated as discussed in [4]. As demonstrated in recent papers, RPA fluctuations are able to generate this soft mode, known as the spurious mode in the context of nuclear physics [5, 6]. The RPA approach thus appears as a very promising technique to treat non-perturbative problems in the context of quantum field theory. However, in its simplest form, this method is not variational and its predictions are not always very well under control. In particular, it is well known that standard RPA has the tendency to overestimate the attractive correlation energy, at least in examples of nuclear physics. The purpose of this paper is therefore two-fold: first, a complete presentation of the RPA technique is given in the context of the simplest field theory, namely the  $\lambda\varphi^4$  theory with a specific application to the 1+1 dimensional case. The second goal is to develop the formalism of more elaborated versions of the RPA approach, namely the so-called renormalized RPA (r-RPA), which, to our knowledge, has never been done before. Let us mention that there exist previous attempts to apply many-body techniques for this specific problem. For instance, Häuser *et al.* use the cluster expansion of Green's functions [7]. Of course other methods, such as lattice calculation, have been employed, see, *e.g.*, [8–10]. Our aim is not really to compete with these numerical methods but actually to develop a tractable approach allowing direct physical interpretations in view of further applications in the context of chiral or gauge theories. In this preliminary work our aim is rather modest and limited to the presentation of the formalism and the discussion of the remaining

---

<sup>a</sup> e-mail: hansen@ipnl.in2p3.fr

problems to be solved such as the explicit covariance of the obtained results. We also present the method to calculate the RPA correlation energy in the context of a field theory within a Green's function formalism. One important point of this paper is to adapt the so-called "charging formula" method (see, *e.g.*, [11]) for quantum field theory beyond the standard RPA scheme. Some numerical results are also obtained showing in particular how to cure the instability of the standard RPA in the broken-symmetry region.

## 2 The $\varphi^4$ theory

### 2.1 The Hamiltonian

We consider the Lagrangian density

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \partial^\mu \varphi(x) \partial_\mu \varphi(x) - \frac{1}{2} \mu_0^2 \varphi^2(x) - \frac{b}{24} \varphi^4(x), \quad (1)$$

where  $\mu_0^2$  is a constant and the bare coupling constant  $b = \lambda/6$  is positive for reasons of stability. We decompose the scalar field  $\varphi(x)$  in a classical part or condensate  $s$  and a fluctuating piece  $\phi(x)$ :

$$\varphi(x) = \phi(x) + s, \quad s = \langle \varphi(x) \rangle. \quad (2)$$

The presence of the condensate  $s$  indicates a spontaneous breaking of the underlying  $\varphi \rightarrow -\varphi$  symmetry. Introducing the conjugate field  $\Pi(x)$ , one obtains for the Hamiltonian (in  $d+1$  dimensions)

$$\begin{aligned} H = \int d^d x \left\{ \frac{1}{2} \mu_0^2 s^2 + \frac{b}{24} s^4 + \left( \mu_0 s + \frac{b}{6} s^3 \right) \phi(x) \right. \\ \left. + \frac{1}{2} \left[ \Pi^2(x) + (\partial_i \phi)^2(x) + \left( \mu_0^2 + \frac{b}{2} s^2 \right) \phi^2(x) \right] \right. \\ \left. + \frac{b s}{6} \phi^3(x) + \frac{b}{24} \phi^4(x) \right\}. \quad (3) \end{aligned}$$

Putting the system in a large box of volume  $V = L^d$ , it is convenient to work in momentum space and to expand the fields according to

$$\begin{aligned} \phi(x) &= \frac{1}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} \phi_{\vec{q}}(t), \\ \Pi(x) &= -\frac{i}{\sqrt{V}} \sum_{\vec{q}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{x}} \Pi_{\vec{q}}(t). \quad (4) \end{aligned}$$

The hermiticity of  $\phi(x)$  and  $\Pi(x)$  imposes  $\phi_{\vec{q}}^\dagger = \phi_{-\vec{q}}$  and  $\Pi_{\vec{q}}^\dagger = -\Pi_{-\vec{q}}$  and canonical equal-time commutation relations translate into

$$[\phi_{\vec{q}}, \Pi_{\vec{q}'}^\dagger] = \delta_{\vec{q}, \vec{q}'}. \quad (5)$$

The Hamiltonian can be rewritten as

$$\begin{aligned} H = V \left( \frac{1}{2} \mu_0^2 s^2 + \frac{b}{24} s^4 \right) \\ + \sqrt{V} \sum_{\vec{q}} \left( \mu_0 s + \frac{b}{6} s^3 \right) \phi_{\vec{q}} \delta_{\vec{q}, 0} \\ + \sum_{\vec{q}} \left( \Pi_{\vec{q}} \Pi_{\vec{q}}^\dagger + \mathcal{O}_{\vec{q}}^2 \phi_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}}^\dagger \right) + \frac{1}{6} \sum_{123} V_{1,2,3} \phi_1 \phi_2 \phi_3 \\ + \frac{1}{24} \sum_{1234} V_{1,2,3,4} \phi_1 \phi_2 \phi_3 \phi_4, \quad (6) \end{aligned}$$

where  $\phi_i$  is a shorthand notation for  $\phi_{\vec{q}_i}$  and the three-body and four-body interactions are given by

$$V_{1,2,3} = \frac{b s}{\sqrt{V}} \delta_{\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3}, \quad V_{1,2,3,4} = \frac{b}{V} \delta_{\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3 + \vec{q}_4}. \quad (7)$$

The bare single-particle energy appearing in the Hamiltonian is

$$\mathcal{O}_{\vec{q}}^2 = \vec{q}^2 + \mu_0^2 + \frac{b}{2} s^2. \quad (8)$$

In the following, we will call  $H_3$  and  $H_4$  the three-body and four-body interacting Hamiltonians.

### 2.2 The Gaussian approximation

In the Gaussian approximation the ground state is represented by a trial wave function which is a functional of the field  $\varphi(\vec{x})$ :

$$\begin{aligned} |\psi(\varphi)\rangle &= \\ \mathcal{N} \exp \left( -\frac{1}{2} \int d^d x d^d y (\varphi(\vec{x}) - s) h(\vec{x} - \vec{y}) (\varphi(\vec{y}) - s) \right). \quad (9) \end{aligned}$$

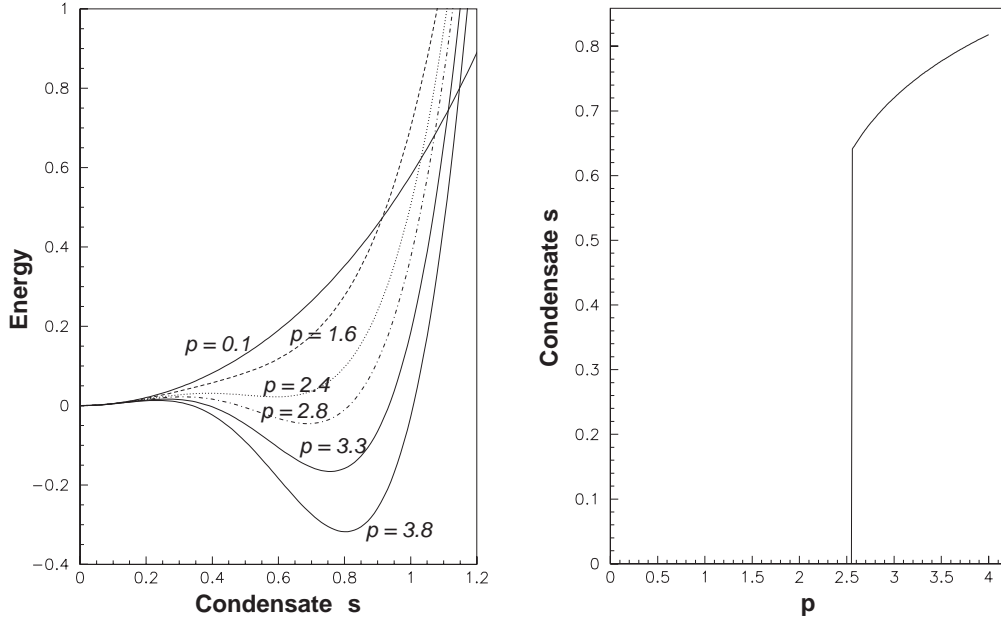
The optimal wave function is obtained by minimizing  $\langle \psi(\varphi) | H | \psi(\varphi) \rangle$  with respect to  $h(\vec{x} - \vec{y})$ . The resulting function, which still depends on the condensate  $s$ , defines the Gaussian effective potential. The various minima in  $s$  correspond to the possible phases of the system. Working in momentum space, one introduces the Fourier transform of  $h(\vec{x} - \vec{y})$  according to

$$h(\vec{x} - \vec{y}) = \int d^d q e^{i\vec{q}\cdot(\vec{x}-\vec{y})} \varepsilon_q. \quad (10)$$

It is easy to show that the trial ground state is the vacuum of the canonical destruction operator  $b_{\vec{q}}$  such that

$$\phi_{\vec{q}} = \sqrt{\frac{1}{2\varepsilon_q}} (b_{\vec{q}} + b_{-\vec{q}}^\dagger), \quad \Pi_{\vec{q}} = \sqrt{\frac{\varepsilon_q}{2}} (b_{\vec{q}} - b_{-\vec{q}}^\dagger). \quad (11)$$

The single-particle excitation of this vacuum have energies  $\varepsilon_q$  which differ from the bare energies  $\mathcal{O}_q$ . In other words we have rotated the original bare basis with single-particle energies  $\mathcal{O}_q$  into a basis associated to the  $\varepsilon_q$ 's through a Hartree-Fock-Bogoliubov (HFB) transformation. In this



**Fig. 1.** Left panel: Gaussian effective potential for various values of the dimensionless coupling constant  $p$ . Right panel: value of the condensate  $s$  minimizing the Gaussian effective potential as a function of  $p$ .

HFB ground state the energy density is easily calculated with by using the Wick theorem

$$\mathcal{E}_0(\varepsilon, s) = \frac{1}{2}\mu_0^2 s^2 + \frac{b}{24} s^4 + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}} \left( \frac{\varepsilon_{\vec{q}}}{2} + \frac{\mathcal{O}_{\vec{q}}^2}{2\varepsilon_{\vec{q}}} \right) + \frac{b}{8} \langle \phi^2 \rangle^2, \quad (12)$$

where the scalar density  $\langle \phi^2 \rangle$  is given by

$$\langle \phi^2 \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \langle \phi_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}}^\dagger \rangle = \frac{1}{V} \sum_{\vec{q}} \frac{1}{2\varepsilon_{\vec{q}}} \equiv \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{1}{2\varepsilon_{\vec{q}}}. \quad (13)$$

Minimization with respect to  $\varepsilon_{\vec{q}}$  gives the HFB quasi-particle mass  $m$ :

$$m^2 = \varepsilon_{\vec{q}}^2 - \vec{q}^2 = \mu_0^2 + \frac{b}{2} (s^2 + \langle \phi^2 \rangle). \quad (14)$$

It has been demonstrated in  $d = 3$  spatial dimensions that the above gap equation can be rendered finite by appropriate mass and coupling-constant renormalizations [12]. Here we concentrate onto the  $d = 1$  case where the theory becomes super-renormalizable and only requires a mass renormalization. We eliminate  $\mu_0$  in favor of the renormalized mass  $\mu$  according to

$$\mu_0^2 = \mu^2 - \frac{b}{2} \int_{-\Lambda}^{+\Lambda} \frac{dq}{2\pi} \frac{1}{2\sqrt{q^2 + \mu^2}}, \quad (15)$$

where  $\Lambda$  is a ultraviolet cutoff. The gap equation becomes

$$m^2 = \mu^2 + \frac{b}{2} (s^2 + \langle \Delta \phi^2 \rangle_\mu) \quad (16)$$

$$\langle \Delta \phi^2 \rangle_\mu = \int_{-\Lambda}^{+\Lambda} \frac{dq}{2\pi} \left( \frac{1}{2\sqrt{q^2 + m^2}} - \frac{1}{2\sqrt{q^2 + \mu^2}} \right) - \frac{1}{4\pi} \ln \frac{m^2}{\mu^2} \quad (17)$$

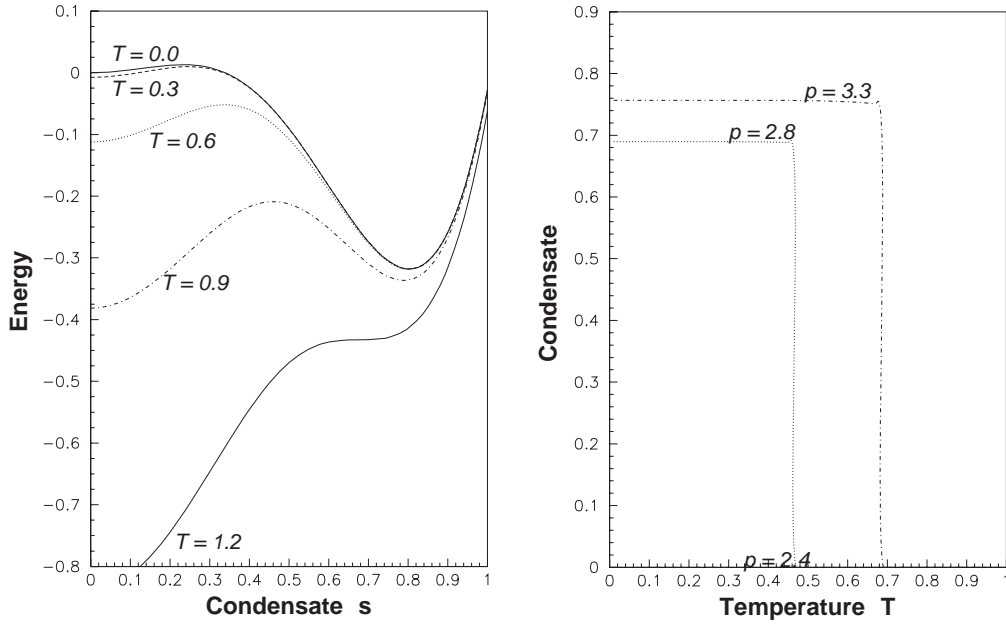
which is independent of the cutoff  $\Lambda$ . Re-injecting the solution for the mass  $m$  into the expression of the energy density one gets the effective potential which is also finite, once the energy of the perturbative vacuum of particles with mass  $\mu$  is removed. The result is

$$\frac{\mathcal{E}_0(s)}{\mu^2} = \frac{1}{2} s^2 + p s^4 + \frac{1}{8\pi} \left( \frac{m^2}{\mu^2} - 1 - \frac{m^2}{\mu^2} \ln \frac{m^2}{\mu^2} \right) - \frac{3p}{16\pi^2} \left( \ln \frac{m^2}{\mu^2} \right)^2, \quad (18)$$

where

$$p = b/24\mu^2$$

is the dimensionless coupling constant. At low  $p$  the effective potential has a minimum at  $s = 0$ : the unbroken phase is thus stable. Increasing  $p$ , a new minimum develops at finite  $s$  corresponding to a meta-stable broken phase. At a certain critical  $p_c = 2.57$  the deformed phase becomes stable and the system undergoes a first-order phase transition (see fig. 1) in agreement with [7]. The approach can be straightforwardly extended to finite temperature using the so-called statistical variational principle.



**Fig. 2.** Left panel: Gaussian effective potential for  $p = 3.8$  for various temperatures  $T$  in units of  $\mu$ . Right panel: value of the condensate  $s$  minimizing the Gaussian effective potential as a function of  $T$  (in units of  $\mu$ ) for various values of  $p$ .

One obtains for the finite-temperature effective potential (*i.e.* the grand potential)

$$\frac{\Omega_0(s, T)}{\mu^2} = \frac{T}{\mu} \int \frac{dq}{2\pi} \ln \left( 1 - \exp \left( \frac{\varepsilon_q}{T} \right) \right) + \frac{1}{2} s^2 + p s^4 + \frac{1}{8\pi} \left( \frac{m^2}{\mu^2} - 1 - \frac{m^2}{\mu^2} \ln \frac{m^2}{\mu^2} \right) - 3p \langle \Delta\phi^2 \rangle_\mu^2(T) \quad (19)$$

with

$$\langle \Delta\phi^2 \rangle_\mu(T) = \int \frac{dq}{2\pi} \left( \frac{1 + n(\varepsilon_q/T)}{2\sqrt{q^2 + m^2}} - \frac{1}{2\sqrt{q^2 + \mu^2}} \right), \quad (20)$$

where  $n(x) = 1/(\exp(x) - 1)$  is the Bose-Einstein distribution and the gap equation (16) is unchanged once  $\langle \Delta\phi^2 \rangle_\mu$  is replaced by its finite-temperature expression given just above. Some numerical results are shown on fig. 2. Choosing  $p > p_c$  the vacuum is in a broken phase. At a certain critical temperature  $T_c$  one gets a first-order transition towards the symmetry restored phase.

### 3 The RPA approach

#### 3.1 The equation-of-motion method (EOM)

The aim of the RPA method is to describe the excitation spectrum of a Hamiltonian  $H$ . The excited states  $|\nu\rangle$  and the ground state  $|0\rangle$  are defined by the conditions

$$|\nu\rangle = Q_\nu^\dagger |0\rangle, \quad Q_\nu |0\rangle = 0. \quad (21)$$

Minimizing  $E_\nu = \langle \nu | H | \nu \rangle / \langle \nu | \nu \rangle$  with respect to the operators  $Q_\nu$ , one gets the following set of equations [1, 13]:

$$\langle 0 | [\delta Q_\nu, [H, Q_\nu^\dagger]] | 0 \rangle = \Omega_\nu \langle 0 | [\delta Q_\nu, Q_\nu^\dagger] | 0 \rangle, \quad (22)$$

where  $\Omega_\nu = E_\nu - E_0$  is the excitation energy. Equation (22) is supplemented by the conditions

$$\langle 0 | [H, Q_\nu] | 0 \rangle = 0 \quad (23)$$

which will determine the mean-field basis. Equation (23) is a natural complement to eq. (22), since both equations hold in the exact case [14]. In general in this EOM approach, the excitation operators are searched only within a limited domain. They are usually taken in the form

$$Q_\nu^\dagger = \sum_a (X_a^\nu A_a^\dagger - Y_a^\nu A_{-a}), \quad (24)$$

where the  $A_a$  constitute a set of non-Hermitian operators labeled by a set of quantum numbers  $a$  (for instance momentum or isospin state). The RPA equations (22) now become matrix equations which allow to determine the excitation energy and the  $X$  and  $Y$  amplitudes (summation over repeated indices is understood):

$$\begin{pmatrix} \mathcal{A}_{ab} & \mathcal{B}_{ab} \\ \mathcal{B}_{-a-b}^* & \mathcal{A}_{-a-b}^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} X_b^\nu \\ Y_b^\nu \end{pmatrix} = \Omega_\nu \mathcal{N}_{ab} \begin{pmatrix} X_b^\nu \\ Y_b^\nu \end{pmatrix} \quad (25)$$

with the matrix elements given by the double commutators

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{ab} &= \langle 0 | [A_a, [H, A_b^\dagger]] | 0 \rangle, \\ \mathcal{B}_{ab} &= -\langle 0 | [A_a, [H, A_{-b}]] | 0 \rangle \end{aligned} \quad (26)$$

and the norm matrix is

$$\mathcal{N}_{ab} = \begin{pmatrix} \langle 0 | [A_a, A_b^\dagger] | 0 \rangle, & \langle 0 | [A_a, A_{-b}] | 0 \rangle \\ -\langle 0 | [A_a, A_{-b}] | 0 \rangle, & -\langle 0 | [A_a, A_b^\dagger] | 0 \rangle \end{pmatrix}. \quad (27)$$

The previous conditions (23) translate into equations having the form of gap equations:

$$\langle 0 | [H, A_a] | 0 \rangle = 0. \quad (28)$$

In practice the quality of the RPA scheme depends on the approximation which are made. Firstly the larger is the space of  $A_a$  operators, the better is the accuracy of the method. Here, in practice we will limit ourselves to single- and pair-boson operators namely  $A_a^\dagger = \{b_{\vec{q}}^\dagger, b_{\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}'}^\dagger, b_{\vec{q}}^\dagger b_{\vec{q}'}^\dagger\}$ . Secondly, one crucial point is the calculation of the ground-state matrix elements of the double commutators and of the matrix elements appearing in the gap equations. Calculating the matrix elements on the true RPA ground state constitutes the self-consistent RPA (SCRPA). In practice this is a formidable task both formally and numerically which only has been fully achieved in a very limited number of simple model cases. In the most common approximation (*i.e.* the standard RPA), the ground-state matrix elements entering the RPA equations are calculated on the mean-field ground state. In our case it coincides with the Gaussian or HFB ground state discussed above. There is an intermediate approximation scheme, called in nuclear physics renormalized RPA (r-RPA)[13,15–17], which allows to incorporate part of the correlations in the ground state. In sect. 4, we will propose the first application of this method in the context of quantum field theory.

### 3.2 The Dyson equation approach (DEA)

We present an alternative but equivalent formulation of the RPA scheme based on a Green's function (GF) approach [18]. Although equivalent in principle to the equation-of-motion approach, this DEA method is more convenient for quantum field theory. We define the time-ordered Green's functions:

$$\begin{aligned} G_{a,\bar{b}}(t, t') &= -i \langle 0 | T (A_a(t), A_{\bar{b}}^\dagger(t')) | 0 \rangle, \\ G_{a,-b}(t, t') &= -i \langle 0 | T (A_a(t), A_{-b}(t')) | 0 \rangle, \\ G_{-\bar{a},\bar{b}}(t, t') &= -i \langle 0 | T (A_{-\bar{a}}^\dagger(t), A_{\bar{b}}^\dagger(t')) | 0 \rangle, \\ G_{-\bar{a},-b}(t, t') &= -i \langle 0 | T (A_{-\bar{a}}^\dagger(t), A_{-b}(t')) | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (29)$$

We introduce the energy representation of these GF according to

$$G(t, t') = \int \frac{dE}{2\pi} e^{-iE(t-t')} G(E) \quad (30)$$

and the matrix

$$\mathcal{G}_{a,b}(E) = \begin{pmatrix} G_{a,\bar{b}}(E), & G_{a,-b}(E) \\ G_{-\bar{a},\bar{b}}(E), & G_{-\bar{a},-b}(E) \end{pmatrix}. \quad (31)$$

The RPA equations have now the form of a set of coupled integral equations for the various GF:

$$E \mathcal{G}_{a,b}(E) = \mathcal{N}_{a,b} + \sum_{c,d} \begin{pmatrix} \mathcal{A}_{ac}, & \mathcal{B}_{ac} \\ \mathcal{B}_{-a-c}^*, & \mathcal{A}_{-a-c}^* \end{pmatrix} \mathcal{N}_{c,d}^{-1} \mathcal{G}_{d,b}(E) \quad (32)$$

with

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_{ab} &= \langle 0 | [[A_a, H], A_b^\dagger] | 0 \rangle, \\ \mathcal{B}_{ab} &= -\langle 0 | [[A_a, H], A_{-b}] | 0 \rangle. \end{aligned} \quad (33)$$

Notice that the double commutators are ordered differently from the ones obtained in the equation-of-motion method. In practice, it can be shown that they are always identical.

## 4 The RPA and the renormalized RPA applied to the $\varphi^4$ theory

### 4.1 Solution of the RPA problem

We will limit ourselves to the case where the  $A$  operators are only one-body and two-body operators. We introduce creation  $b_\beta^\dagger$  and destruction operators  $b_\beta$  depending on the parameters  $\kappa_\beta$  according to

$$b_\beta = \sqrt{\frac{\kappa_\beta}{2}} \phi_\beta + \sqrt{\frac{1}{2\kappa_\beta}} \Pi_\beta, \quad (34)$$

or equivalently

$$\phi_\beta = \sqrt{\frac{1}{2\kappa_\beta}} (b_\beta + b_{-\beta}^\dagger), \quad \Pi_\beta = \sqrt{\frac{\kappa_\beta}{2}} (b_\beta - b_{-\beta}^\dagger). \quad (35)$$

By construction they obey standard canonical commutation relation for boson creation and destruction operators:

$$[b_\beta, b_{\beta'}^\dagger] = \delta_{\beta,\beta'}, \quad [b_\beta, b_{\beta'}] = 0. \quad (36)$$

The  $\beta$ 's represent the quantum numbers of the created boson state; here this is simply a momentum index and  $-\beta$  represents the opposite momentum.

The excitation operators  $A_a^\dagger$  will be the one-body operators  $b_\alpha^\dagger$  and the two-body operators  $b_\beta^\dagger b_{\beta'}^\dagger$  and  $b_\beta^\dagger b_{-\beta'}^\dagger$  with  $\beta \neq \beta'$  for the ‘‘particle-hole’’ operators. The gap equation  $\langle [H, b_\beta] \rangle = 0$  will give the extrema in the condensate  $s$  of the vacuum energy. Since we will calculate the effective potential giving directly the true minimum (*i.e.* the stable phase) we will not use it here. The most interesting non-trivial gap equation is  $\langle [H, b_\beta b_{-\beta}] \rangle = 0$  which constrains the basis, that is the  $\kappa_\beta$  parameters. This gap equation gives ( $\langle \dots \rangle$  stands for the ground-state expectation value)

$$\begin{aligned} \langle \Pi_\beta \Pi_\beta^\dagger \rangle - \varepsilon_\beta^2 \langle \phi_\beta \phi_\beta^\dagger \rangle &= \frac{1}{2} \sum_{1,2} \langle \phi_\beta \phi_1^\dagger \phi_2^\dagger \rangle_{\text{conn}} V_{1,2,-\beta} \\ &+ \frac{1}{6} \sum_{1,2,3} \langle \phi_\beta \phi_1^\dagger \phi_2^\dagger \phi_3^\dagger \rangle_{\text{conn}} V_{1,2,3,-\beta}, \end{aligned} \quad (37)$$

where the suffix ‘‘conn’’ means connected operators which contain exclusively correlated expectation values:

$$\begin{aligned} \langle ABCD \rangle_{\text{conn}} &= \langle ABCD \rangle - \langle AB \rangle \langle CD \rangle \\ &- \langle AC \rangle \langle BD \rangle - \langle AD \rangle \langle BC \rangle \end{aligned} \quad (38)$$

and  $\varepsilon_\beta$  is given by

$$\varepsilon_\beta^2 = \bar{q}_\beta^2 + \mu_0^2 + \frac{b}{2}s^2 + \frac{b}{2}\langle\phi^2\rangle \quad (39)$$

with

$$\begin{aligned} \langle\phi^2\rangle &= \frac{1}{V} \sum_{\bar{q}} \langle\phi_{\bar{q}}\phi_{\bar{q}}^\dagger\rangle = \\ &= \frac{1}{V} \sum_{\bar{q}} \frac{1}{2\kappa_{\bar{q}}} \langle 1 + 2b_{\bar{q}}^\dagger b_{\bar{q}} + b_{\bar{q}}^\dagger b_{-\bar{q}}^\dagger + b_{\bar{q}} b_{-\bar{q}} \rangle. \end{aligned} \quad (40)$$

The  $\varepsilon_\beta$ 's can be seen as the generalized mean-field single-particle energies. But at variance with the Gaussian case these energies depend on the correlated self-consistent scalar density  $\langle\phi^2\rangle$ .

### Standard RPA

In the standard RPA, we omit the connected parts. We thus get from the gap equation (37)

$$\langle\Pi_\beta\Pi_\beta^\dagger\rangle - \varepsilon_\beta^2 \langle\phi_\beta\phi_\beta^\dagger\rangle = 0 \quad (41)$$

and take for  $\langle\phi_\beta\phi_\beta^\dagger\rangle$  its value in the Gaussian HFB ground state. This implies (see eq. (35))

$$\kappa_\beta = \varepsilon_\beta. \quad (42)$$

The basis is fixed and coincides with the HFB basis. Similarly all the matrix elements appearing in the calculation of the double commutators and the norm matrix are simply obtained by using the Wick theorem on the Gaussian ground state.

### Renormalized RPA

In renormalized RPA (r-RPA), one still systematically omits the correlated expectation values. Hence, the gap equation (41) remains valid. However, the scalar density is not yet fixed. It has to be determined self-consistently. The problem of its evaluation (in a non-relativistic many-body problem for Fermi systems it corresponds to the occupation numbers) is one of the subtleties of self-consistent RPA (SCRPA). We will come to this problem later on. The gap equation can be rewritten as

$$(\kappa_\beta^2 - \varepsilon_\beta^2) \langle 1 + 2b_\beta^\dagger b_\beta \rangle = (\kappa_\beta^2 + \varepsilon_\beta^2) \langle b_\beta^\dagger b_{-\beta}^\dagger + b_\beta b_{-\beta} \rangle. \quad (43)$$

The basis  $\kappa_\beta$  is not yet totally fixed. However, we have checked that the result of the r-RPA calculation does not depend on its choice, provided the above gap equation is satisfied. Thus, we can choose it as  $\kappa_\beta = \varepsilon_\beta$ , *i.e.* the generalized mean-field basis. This choice has the merit of significantly simplifying the lengthy calculation of the double commutators. In that case one has

$$\langle b_\beta^\dagger b_{-\beta}^\dagger \rangle = \langle b_\beta b_{-\beta} \rangle = 0. \quad (44)$$

In SCRPA this last property has to be always satisfied because the  $b_\beta^\dagger b_{-\beta}^\dagger$  operators are just linear combinations of the genuine RPA excitation operators  $Q_\nu^\dagger$  whose expectation values on the true RPA ground state vanish by construction.

The many-body operator expectation values are also calculated using the Wick theorem but the resulting two-body operator matrix elements depend on the various occupation numbers. In other words all the ground-state matrix elements entering the double commutators and norm matrices are expressible in term of the fixed momentum densities  $\mathcal{N}_\beta = \langle\phi_\beta\phi_\beta^\dagger\rangle$ . We display here some examples:

$$\begin{aligned} \langle b_\beta b_{-\beta} \rangle &= \frac{\kappa_\beta^2 - \varepsilon_\beta^2}{2\varepsilon_\beta} \mathcal{N}_\beta, \\ \langle b_\beta^\dagger b_\beta \rangle &= -\frac{1}{2} + \frac{\kappa_\beta^2 + \varepsilon_\beta^2}{2\varepsilon_\beta} \mathcal{N}_\beta, \\ \langle b_1^\dagger b_2^\dagger b_3 b_4 \rangle &= \langle b_1^\dagger b_1 \rangle \langle b_2^\dagger b_2 \rangle (\delta_{1,3} \delta_{2,4} + \delta_{1,4} \delta_{2,3}) \\ &\quad + \langle b_1^\dagger b_{-1}^\dagger \rangle \langle b_3 b_{-3} \rangle (\delta_{1,-2} \delta_{3,-4}). \end{aligned} \quad (45)$$

We do not give the details of the calculation to obtain the solution of the RPA problem (32). Even if we limit ourselves to one- and two-body operators, it represents quite a lot of algebra. The results for the various GF are listed in the appendix. Here we give only the GF relative to the field operator  $\phi_{\vec{P}}$ . For the one-particle GF, *i.e.* the  $\phi$  particle propagator, one obtains

$$\begin{aligned} G_{\phi_{\vec{P}},\phi_{\vec{P}'}}(E) &\equiv \delta_{\vec{P},\vec{P}'} G(E,\vec{P}), \\ G(E,\vec{P}) &= \left( E^2 - \varepsilon_{\vec{P}}^2 - \Sigma(E,\vec{P}) \right)^{-1}, \end{aligned} \quad (46)$$

where the mass operator has the following form:

$$\Sigma(E,\vec{P}) = \frac{b^2 s^2}{2} \tilde{I}(E,\vec{P}),$$

with

$$\tilde{I}(E,\vec{P}) = \frac{I(E,\vec{P})}{1 - \frac{b}{2}I(E,\vec{P})} \quad (47)$$

and the two-particle loop has the explicit expression

$$\begin{aligned} I(E,\vec{P}) &= \int \frac{d\vec{k}_1 d\vec{k}_2}{(2\pi)^d} \delta^{(d)}(\vec{P} - \vec{k}_1 - \vec{k}_2) \\ &\quad \times \left[ \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2\varepsilon_1\varepsilon_2} \frac{\varepsilon_1 \mathcal{N}_1 + \varepsilon_2 \mathcal{N}_2}{E^2 - (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2 + i\eta} \right. \\ &\quad \left. - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2\varepsilon_1\varepsilon_2} \frac{\varepsilon_1 \mathcal{N}_1 - \varepsilon_2 \mathcal{N}_2}{E^2 - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + i\eta} \right]. \end{aligned} \quad (48)$$

Notice that correlations are present in this expression through the densities  $\mathcal{N}_i = \langle\phi_i\phi_i^\dagger\rangle$ . We will see in subsect. 4.4 how to calculate these densities in r-RPA. For the 1p-2p and 2p-2p GF we give the particular combinations which are directly relevant for the calculation of the

$$\begin{aligned} & \frac{1}{24V} \int \frac{i dE}{(2\pi)} e^{iE\eta^+} \left[ \sum_{1234} V_{1,2,-3,-4} (G_{\phi_3\phi_4, \phi_1^\dagger\phi_2^\dagger}(E) - G_{\phi_3\phi_4, \phi_1^\dagger\phi_2^\dagger}^0) \right] = \\ & \frac{1}{24} \int \frac{d\vec{P}}{(2\pi)^d} \int \frac{i dE}{(2\pi)} e^{iE\eta^+} \left[ b^2 \frac{I^2(E, \vec{P})}{1 - \frac{b}{2} I(E, \vec{P})} + b^3 s^2 \left( \frac{I(E, \vec{P})}{1 - \frac{b}{2} I(E, \vec{P})} \right)^2 G(E, \vec{P}) \right] \end{aligned} \quad (51)$$

effective potential

$$\begin{aligned} & \sum_{123} V_{1,-2,-3} G_{\phi_2\phi_3, \phi_1^\dagger}(E) = \\ & V \int \frac{d\vec{P}}{(2\pi)^d} 2 \Sigma(E, \vec{P}) G(E, \vec{P}), \\ & \sum_{1234} V_{1,2,-3,-4} G_{\phi_3\phi_4, \phi_1^\dagger\phi_2^\dagger}(E) = \\ & V \int \frac{d\vec{P}}{(2\pi)^d} b \left[ 2I(E, \vec{P}) + b \frac{I^2(E, \vec{P})}{1 - \frac{b}{2} I(E, \vec{P})} \right. \\ & \left. + b^2 s^2 \left( \frac{I(E, \vec{P})}{1 - \frac{b}{2} I(E, \vec{P})} \right)^2 G(E, \vec{P}) \right]. \end{aligned} \quad (49)$$

The reader may check that these results have a very clear diagrammatic interpretation (see fig. 4 in the following). From these expressions, one can get the expectation value of the three-body Hamiltonian by taking the appropriate  $t' \rightarrow t$  limit of the GF

$$\langle H_3 \rangle / V = \frac{1}{6} \int \frac{d\vec{P}}{(2\pi)^d} \int \frac{i dE}{(2\pi)} e^{iE\eta^+} 2 \Sigma(E, \vec{P}) G(E, \vec{P}). \quad (50)$$

The correlated part of the four-body Hamiltonian is obtained with the same technique but the uncorrelated GF has to be removed. As we will see below, the expression of the correlated energy will involve the following quantity:

*see eq. (51) above*

where the first-order term (*i.e.* the one-loop term  $I(E, \vec{P})$  of eq. (49)) has been removed.

## 4.2 The effective potential

The starting Hamiltonian equations (6), (7) contains a free Hamiltonian of bare particles with energy  $\mathcal{O}_{\vec{q}}$  and an interacting Hamiltonian  $H_3 + H_4$ . To simplify the writing we now replace the momentum labels  $\vec{q}$  by integers  $i$  and omit the linear term in  $\phi$  which does not directly play a role in the formal manipulations:

$$\begin{aligned} H = & V \left( \frac{1}{2} \mu_0^2 s^2 + \frac{b}{24} s^4 \right) \\ & + \sum_1 \frac{1}{2} \left( \Pi_1 \Pi_1^\dagger + \mathcal{O}_1^2 \phi_1 \phi_1^\dagger \right) + H_3 + H_4. \end{aligned} \quad (52)$$

In the RPA approach, the contribution of the interacting part of the Hamiltonian systematically transforms, in

the expressions of the various double commutators, the bare single-particle energy into the generalized mean-field single-particle energy (39) which is finite after mass renormalization in one spatial dimension:

$$\mathcal{O}_1^2 \rightarrow \varepsilon_1^2 = \mathcal{O}_1^2 + \frac{b}{2} \langle \phi^2 \rangle_R \quad (53)$$

where  $\langle \phi^2 \rangle_R = (1/V) \sum \langle \phi_1 \phi_1^\dagger \rangle$  is in principle the correlated vacuum density (see subsect. 4.4) except in standard RPA where it is taken on the Gaussian ground state. This suggests to rewrite the Hamiltonian as

$$H = H_0 + H_{\text{int}} \quad (54)$$

with

$$H_{\text{int}} = H_3 + H_4 - \frac{b}{4} \langle \phi^2 \rangle_R \sum_1 : \phi_1 \phi_1^\dagger :_\varepsilon - V \frac{b}{8} \langle \phi^2 \rangle_\varepsilon^2. \quad (55)$$

$\langle \phi^2 \rangle_\varepsilon$  is the expectation value taken on the ground state of the mean-field quasi-particles with energies  $\varepsilon_1$  and  $: \dots :_\varepsilon$  is the normal ordering with respect to this vacuum, namely:

$$: \phi_1 \phi_1^\dagger :_\varepsilon = \phi_1 \phi_1^\dagger - \langle \phi_1 \phi_1^\dagger \rangle_\varepsilon. \quad (56)$$

We use again the notation  $\langle \phi^2 \rangle_R$  for the scalar density. In renormalized RPA this scalar density is in principle the correlated one. In standard RPA the quantity  $\langle \phi^2 \rangle_R$  appearing in  $H_{\text{int}}$  is identified with the mean-field scalar density  $\langle \phi^2 \rangle_\varepsilon$  and  $\varepsilon$  refers to the Gaussian HFB mean field. In that case, the interacting Hamiltonian reduces to

$$(H_{\text{int}})_{\text{standard RPA}} = H_3 + : H_4 :_\varepsilon. \quad (57)$$

The  $H_0$  Hamiltonian is obtained as  $H - H_{\text{int}}$ :

$$\begin{aligned} H_0 = & V \left( \frac{1}{2} \mu_0^2 s^2 + \frac{b}{24} s^4 \right) + \sum_1 \frac{1}{2} \left( \Pi_1 \Pi_1^\dagger + \mathcal{O}_1^2 \phi_1 \phi_1^\dagger \right) \\ & + \frac{b}{4} \langle \phi^2 \rangle_R \sum_1 : \phi_1 \phi_1^\dagger :_\varepsilon + V \frac{b}{8} \langle \phi^2 \rangle_\varepsilon^2. \end{aligned} \quad (58)$$

Again in the case of standard RPA the self-consistent scalar density  $\langle \phi^2 \rangle_R$  is replaced in the above expression by the Gaussian HFB scalar density  $\langle \phi^2 \rangle_\varepsilon$ .  $H_0$  can be rewritten as

$$H_0 = E_0 + \sum_1 \frac{1}{2} \left( : \Pi_1 \Pi_1^\dagger :_\varepsilon + \varepsilon_1^2 : \phi_1 \phi_1^\dagger :_\varepsilon \right). \quad (59)$$

It has the form of a free Hamiltonian for quasi-particles with mass  $m$  (see eq. (39)), *i.e.*  $m^2 = \varepsilon_{\vec{q}}^2 - \vec{q}^2$ . In one

spatial dimension, this mass is rendered finite by a simple mass renormalization:

$$m^2 = \mu^2 + \frac{b}{2} s^2 + \frac{b}{2} \left( \langle \phi^2 \rangle_R - \int_{-A}^{+A} \frac{dq}{2\pi} \frac{1}{2\sqrt{q^2 + \mu^2}} \right). \quad (60)$$

$E_0$  is the generalized mean-field vacuum energy

$$\begin{aligned} \frac{E_0}{V} &= \frac{1}{2} \mu_0^2 s^2 + \frac{b}{24} s^4 + \frac{b}{8} \langle \phi^2 \rangle_\varepsilon^2 \\ &+ \sum_1 \frac{1}{2} \left( \langle \Pi_1 \Pi_1^\dagger \rangle_\varepsilon + \mathcal{O}_1^2 \langle \phi_1 \phi_1^\dagger \rangle_\varepsilon \right) = \\ &\frac{1}{2} \mu_0^2 s^2 + \frac{b}{24} s^4 + \frac{1}{2V} \sum_{\vec{q}} \left( \frac{\varepsilon_q}{2} + \frac{\mathcal{O}_q^2}{2\varepsilon_q} \right) + \frac{b}{8} \langle \phi^2 \rangle_\varepsilon = \\ &\mu^2 \left[ \frac{1}{2} s^2 + p s^4 + \frac{1}{8\pi} \left( \frac{m^2}{\mu^2} - 1 - \frac{m^2}{\mu^2} \ln \frac{m^2}{\mu^2} \right) \right. \\ &\quad \left. - \frac{3p}{16\pi^2} \left( \ln \frac{m^2}{\mu^2} \right)^2 \right]. \quad (61) \end{aligned}$$

We may notice that  $E_0/V$  is formally equal to the Gaussian energy density (12), (18). However, the single-particle energy  $\varepsilon_q$  and the corresponding quasi-particle mass  $m$  entering its expression now depends on the correlated scalar density  $\langle \phi^2 \rangle$ , in the self-consistent version.

$\langle H_3 \rangle$  and  $\langle H_4 \rangle$  can be calculated once the RPA 2p-1p and 2p-2p GF are known (see the end of the previous subsection). But to calculate the total energy we also need the expectation value on the RPA ground state of the one-body operators  $\phi_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}}^\dagger$  and  $\Pi_{\vec{q}} \Pi_{\vec{q}}^\dagger$  which are not directly given by the RPA calculation. This is the well-known difficulty of RPA, even in its simplest standard form, which frequently appears in the context of nuclear physics. In other words the calculation of the kinetic energy in RPA needs further manipulations. One possible way to achieve this is to use the so-called charging formula [11] for the calculation of the correlation energy (*i.e.* the deviation from the mean-field energy  $E_0$ ) which has been historically introduced for the electron gas problem. Here we will show how to adapt the charging formula beyond the standard RPA, namely in the r-RPA case in the context of a quantum field theory.

The idea is to introduce a Hamiltonian where the coupling constant is varying between zero and its physical value. We thus define the auxiliary Hamiltonian

$$H'(\rho) = H_0 + \rho H_{\text{int}}, \quad H'(\rho = 1) = H. \quad (62)$$

The first thing to do is to solve the RPA problem for the  $H'(\rho)$  Hamiltonian. For this purpose, one can notice that

its explicit form is given by

$$\begin{aligned} H'(\rho) &= V \left( \frac{1}{2} \mu_0^2 s^2 + \frac{b}{24} s^4 \right) \\ &+ \sum_1 \frac{1}{2} \left( \Pi_1 \Pi_1^\dagger + \mathcal{O}_1^2 \phi_1 \phi_1^\dagger \right) + \rho (H_3 + H_4) \\ &+ (1-\rho) \left( \frac{b}{4} \langle \phi^2 \rangle_R \sum_1 : \phi_1 \phi_1^\dagger :_\varepsilon + V \frac{b}{8} \langle \phi^2 \rangle_\varepsilon^2 \right). \quad (63) \end{aligned}$$

Up to constant terms, the Hamiltonian  $H'(\rho)$  can be rewritten as

$$\begin{aligned} H'(\rho) &= V \left( \frac{1}{2} \mu_0^2 s^2 + \frac{b}{24} s^4 \right) + \sum_1 \left[ \frac{1}{2} \Pi_1 \Pi_1^\dagger \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left( \mathcal{O}_1^2 + \frac{b}{2} (1-\rho) \langle \phi^2 \rangle_R \right) \phi_1 \phi_1^\dagger \right] + \rho (H_3 + H_4). \quad (64) \end{aligned}$$

For what concerns the solution of the  $H'(\rho)$  RPA problem (in practice for the calculation of the commutators and double commutators entering the RPA equations) one has to make the following modifications with respect to the  $H$  problem:

$$\begin{aligned} H &\rightarrow H'(\rho), \\ \mathcal{O}_1^2 &\rightarrow \mathcal{O}_{1\rho}^2 = \mathcal{O}_1^2 + \frac{b}{2} (1-\rho) \langle \phi^2 \rangle_R, \\ H_3 + H_4 &\rightarrow \rho (H_3 + H_4). \quad (65) \end{aligned}$$

The single-particle energy occurring in the self-consistent RPA GF will be thus modified according to

$$\begin{aligned} \varepsilon_1^2 &\rightarrow \varepsilon_{1\rho}^2 = \mathcal{O}_{1\rho}^2 + \frac{b}{2} \rho \langle \phi^2 \rangle_{R\rho} = \\ &\mathcal{O}_1^2 + \frac{b}{2} ((1-\rho) \langle \phi^2 \rangle_R + \rho \langle \phi^2 \rangle_{R\rho}) = \\ &\varepsilon_1^2 + \frac{b}{2} \rho (\langle \phi^2 \rangle_{R\rho} - \langle \phi^2 \rangle_R), \quad (66) \end{aligned}$$

where  $\langle \phi^2 \rangle_\rho$  is the scalar density in the correlated RPA ground state of  $H'(\rho)$ . Again the notation  $\langle \phi^2 \rangle_{R\rho}$  is employed: in r-RPA, it coincides with the scalar density calculated on the self-consistent ground state of the  $H'(\rho)$  Hamiltonian, while in the standard RPA, it coincides with the Gaussian density, *i.e.* calculated on the ground state of  $H_0$ . The solution of the  $H'(\rho)$  r-RPA problem is obtained formally from the solution of the  $H$  r-RPA problem (eq. (46)-(51)) by simply replacing  $\varepsilon_1$  by  $\varepsilon_{1\rho}$ , the coupling constant  $b$  by  $\rho b$  and  $\mathcal{N}_1 = \langle \phi_1 \phi_1^\dagger \rangle_R$  by  $\mathcal{N}_{1\rho} = \langle \phi_1 \phi_1^\dagger \rangle_{R\rho}$  calculated self-consistently with the  $H'(\rho)$  Hamiltonian.

In the standard RPA all the expectation values of  $\phi^2$  are taken on the Gaussian ground state. In this case the energies  $\varepsilon_\rho$  remain identical to the Gaussian single-particle energies  $\varepsilon$ : standard RPA:  $\langle \phi^2 \rangle_{R\rho} = \langle \phi^2 \rangle_R = \langle \phi^2 \rangle_\varepsilon$ ,  $\varepsilon_{1\rho} = \varepsilon_1$ .

Once the r-RPA problem is solved one can calculate the RPA ground-state energy relative to the starting Hamiltonian. Since both  $H_0$  and  $H_{\text{int}}$  are independent of



$\rho$  and since  $H'(\rho = 1)$  coincides with the original  $H$  one can apply the charging formula. The RPA ground state energy can be obtained as

$$E_{\text{RPA}} = E_0 + \int_0^1 \frac{d\rho}{\rho} \langle \rho H_{\text{int}} \rangle_\rho, \quad (67)$$

where  $E_0$  is the already calculated generalized mean-field energy. Using the Wick theorem with respect to the vacuum of quasi-particles with energies  $\varepsilon_\rho$ , the correlated part can be rewritten as

$$\begin{aligned} \langle \rho H_{\text{int}} \rangle_\rho &= \langle \rho H_3 \rangle_\rho + \langle \rho : H_4 :_{\varepsilon_\rho} \rangle_\rho \\ &- V \frac{\rho b}{8} (\langle \phi^2 \rangle_{\varepsilon_\rho} - \langle \phi^2 \rangle_\varepsilon)^2 - V \frac{\rho b}{4} (\langle \phi^2 \rangle_R - \langle \phi^2 \rangle_{\varepsilon_\rho}) \\ &\times \left( \frac{1}{V} \sum_1 \langle \phi_1 \phi_1^\dagger \rangle_\rho - \langle \phi^2 \rangle_\varepsilon \right). \end{aligned} \quad (68)$$

In this formula  $\langle \phi^2 \rangle_R$  is as before the self-consistent scalar density of the original  $H$ .  $\langle \phi^2 \rangle_\varepsilon$  is the scalar density on the generalized mean-field vacuum (vacuum of quasi-particles with energy  $\varepsilon_\rho$ ) in the  $H$  problem and  $\langle \phi^2 \rangle_{\varepsilon_\rho}$  corresponds to the equivalent quantity for the  $H'(\rho)$  Hamiltonian. The remaining expectation values noted  $\langle \dots \rangle_\rho$  have to be taken on the r-RPA ground state of  $H'(\rho)$ . The calculation of these latter expectation values are made using eqs. (46)-(51) where all the quantities are now relative to the  $H'(\rho)$  problem as explained before.

In the particular case of the standard RPA the extra-term in the expression of the correlation energy disappears since, following eq. (57), one has

$$\langle \rho H_{\text{int}} \rangle_\rho = \langle \rho H_3 \rangle_\rho + \langle \rho : H_4 :_{\varepsilon} \rangle_\rho. \quad (69)$$

As we will see explicitly in the next subsection the expectation value of the normal-ordered Hamiltonian will involve an integration over the calculated Green's functions. In the case of the standard RPA the  $\rho$  integration can be done analytically. This is not the case in the r-RPA since these Green's functions will involve the  $\varepsilon_\rho$ 's and the self-consistent densities  $\mathcal{N}_\rho$  which depend explicitly on  $\rho$ .

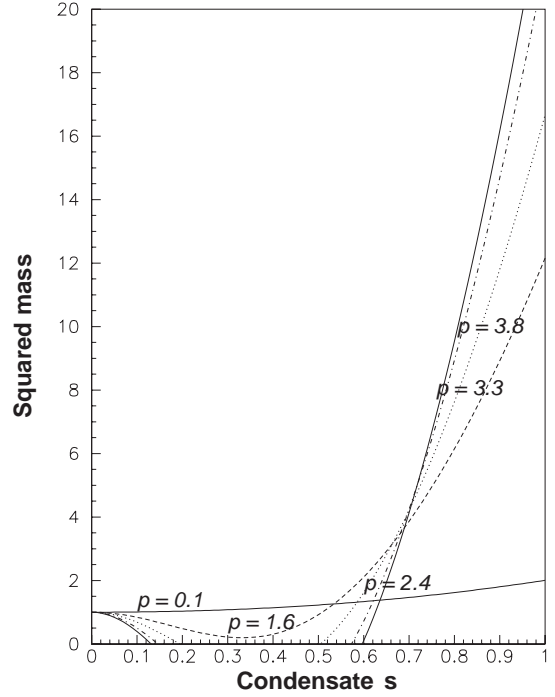
### 4.3 Results in standard RPA in 1 + 1 dimension

#### Single-particle mode

The RPA single-particle mode  $\omega_P$  with momentum  $\vec{P}$  is obtained as the solution of the equation see, *e.g.*, eq. (46):

$$\omega_P^2 = \varepsilon_P^2 + \Sigma(E = \omega_P, \vec{P}). \quad (70)$$

In the standard RPA, the densities are simply taken as  $\mathcal{N}_1 = 1/2\varepsilon_1$ , where the  $\varepsilon_1$ 's are the Gaussian single-particle energies. In that case  $I(E, \vec{P})$  (eq. (48)) and consequently  $\Sigma(E, \vec{P})$  (eq. (47)) are explicitly covariant in the sense that they depend only on  $E^2 - \vec{P}^2$  and not on  $E$  and



**Fig. 3.** Squared standard RPA mass (in unit of  $\mu^2$ ) as a function of  $s$ .

$\vec{P}$  separately. After a simple boost-like change of variables one can show that

$$I(E, \vec{P}) \equiv I(E^2 - \vec{P}^2) = \int \frac{d\vec{t}}{(2\pi)^d} \frac{1}{\varepsilon_t} \frac{1}{E^2 - \vec{P}^2 - 4\varepsilon_t^2 + i\eta}. \quad (71)$$

Consequently, the RPA mode has a dispersion relation which is  $\omega_P^2 = M^2 + \vec{P}^2$ . The mass  $M$  of the single-particle RPA mode is thus the solution of the equation

$$M^2 = m^2 + \Sigma(E^2 - \vec{P}^2 = M^2). \quad (72)$$

In one spatial dimension the RPA mass operator is finite and there is no need of further coupling-constant renormalization. In fig. 3 the result of the calculation for various values of the dimensionless coupling constant  $p$  as a function of  $s$ . It is apparent that for  $p$  larger than a certain value the RPA equation may have an imaginary solution. Such a feature, which can appear in RPA, simply means that the HFB ground state is unstable. Hence for that particular theory one has to go to a superior version of the HFB-RPA approach.

#### Correlation energy

Although the standard RPA leads, in this particular theory, to an instability in a certain range of coupling constants, it is however interesting to look at the expression

of the correlation energy at least at a formal level. We divide the correlation energy density in three pieces

$$\frac{E_{\text{corr}}}{V} = \frac{E_{\text{corr}}^{(3)}}{V} + \frac{E_{\text{corr}}^{(4c)}}{V} + \frac{E_{\text{corr}}^{(4nc)}}{V}. \quad (73)$$

According to eqs. (50), (67), the piece corresponding to the three-body Hamiltonian reads

$$\begin{aligned} \frac{E_{\text{corr}}^{(3)}}{V} &= \int_0^1 \frac{d\rho}{\rho} \int \frac{d\vec{P}}{(2\pi)^d} \int \frac{i dE}{(2\pi)} e^{iE\eta^+} \frac{\rho^2 b^2 s^2}{6} \\ &\times \frac{I(E, \vec{P})}{1 - \frac{\rho b}{2} I(E, \vec{P})} \\ &\times \left( E^2 - \vec{P}^2 - m^2 - \frac{\rho^2 b^2 s^2}{2} \frac{I(E, \vec{P})}{1 - \frac{\rho b}{2} I(E, \vec{P})} \right)^{-1}. \end{aligned} \quad (74)$$

Notice that, as mentioned before, the  $\rho$  integration can be performed analytically. It is convenient to transform the energy integration into an integration on the imaginary axis (Wick rotation) by making the change of variable  $E = iz$ . In the usual RPA, the loop  $I(E, \vec{P})$  and thus the whole integrand  $h_3$  actually depends only on  $E^2 - \vec{P}^2$ . After the Wick rotation it depends only on  $\mathcal{S} = z^2 + \vec{P}^2$  and the momentum integration can be done analytically in 1 + 1 dimension

$$\int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dP}{2\pi} \int \frac{idE}{(2\pi)} e^{iE\eta^+} h_3(E^2 - \vec{P}^2) = - \int_0^\infty \frac{d\mathcal{S}}{4\pi} h_3(-\mathcal{S}). \quad (75)$$

For what concerns the four-body interacting piece we start from the explicit form of its normal ordering with respect to the  $\varepsilon$  basis

$$\begin{aligned} \langle : H_4 : \varepsilon \rangle &= \frac{b}{24 V \sqrt{\prod_i 2\varepsilon_i}} \delta_{1+2+3+4} \\ &\times \left( \left\langle b_1^\dagger b_2^\dagger b_3^\dagger b_4^\dagger + b_{-1} b_{-2} b_{-3} b_{-4} + 4 b_1^\dagger b_2^\dagger b_3^\dagger b_{-4} \right. \right. \\ &\left. \left. + 4 b_1^\dagger b_{-2} b_{-3} b_{-4} + 6 b_1^\dagger b_2^\dagger b_{-3} b_{-4} \right\rangle \right), \end{aligned} \quad (76)$$

where summation over repeated indices is now omitted. As explained in subsect. 4.1, these matrix elements can be evaluated as an energy integral of two-particle Green's functions whose explicit expressions are given in the appendix. Noticing that all the matrix elements  $\langle b^\dagger b^\dagger b^\dagger b \rangle$  are identically zero, it is convenient, after standard manipulations, to split  $\langle : H_4 : \varepsilon \rangle$  into two pieces:

$$\langle : H_4 : \varepsilon \rangle = \langle : H_4 : \varepsilon \rangle^{(c)} + \langle : H_4 : \varepsilon \rangle^{(nc)},$$

$$\begin{aligned} \langle : H_4 : \varepsilon \rangle^{(c)} &= \frac{b}{24 V \sqrt{\prod_i 2\varepsilon_i}} \delta_{1+2+3+4} \\ &\times \left( \left\langle (b_1^\dagger b_2^\dagger + b_{-1} b_{-2}) (b_{-3} b_{-4} + b_3^\dagger b_4^\dagger) \right. \right. \\ &\left. \left. - 2 \delta_{1+3} \delta_{2+4} (1 + 2 \langle b_1^\dagger b_{11} \rangle) \right\rangle \right) = \\ &\frac{b}{24 V} \int \frac{i dE}{(2\pi)} e^{iE\eta^+} \left[ \delta_{1+2-3-4} \right. \\ &\left. \times \left( G_{\phi_3\phi_4, \phi_1^\dagger\phi_2^\dagger}(E) - G_{\phi_3\phi_4, \phi_1^\dagger\phi_2^\dagger}^0 \right) \right], \\ \langle : H_4 : \varepsilon \rangle^{(nc)} &= \frac{b}{24 V \sqrt{\prod_i 2\varepsilon_i}} 4 \left\langle b_1^\dagger b_2^\dagger b_{-3} b_{-4} \right\rangle = \\ &\frac{b}{24 V} \int \frac{i dE}{(2\pi)} e^{iE\eta^+} \left[ \delta_{1+2-3-4} G_{b_3 b_4, b_1^\dagger b_2^\dagger}(E) \right], \end{aligned} \quad (77)$$

where the suffices (c) and (nc) stand for covariant and non-covariant in a sense to be discussed just below. It is important to notice that the above result remains valid even in the case of the r-RPA, where the occupation numbers  $\langle b^\dagger b \rangle$  do not vanish. Using the results of the appendix and the charging formula, the corresponding contributions to the correlation energy can now be obtained:

$$\frac{E_{\text{corr}}^{(4c)}}{V} = \int_0^1 \frac{d\rho}{\rho} \int \frac{d\vec{P}}{(2\pi)^d} \times \int \frac{i dE}{(2\pi)} e^{iE\eta^+} I^2(E, \vec{P}) F(E, \vec{P}, \rho), \quad (78)$$

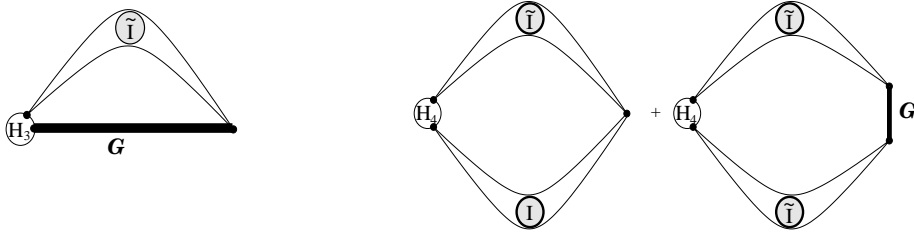
$$\frac{E_{\text{corr}}^{(4nc)}}{V} = \int_0^1 \frac{d\rho}{\rho} \int \frac{d\vec{P}}{(2\pi)^d} \times \int \frac{i dE}{(2\pi)} e^{iE\eta^+} I^{(1)2}(E, \vec{P}) F(E, \vec{P}, \rho), \quad (79)$$

where the  $\rho$  integration can be again performed analytically, in standard RPA.  $F(E, \vec{P}, \rho)$  has the explicit expression

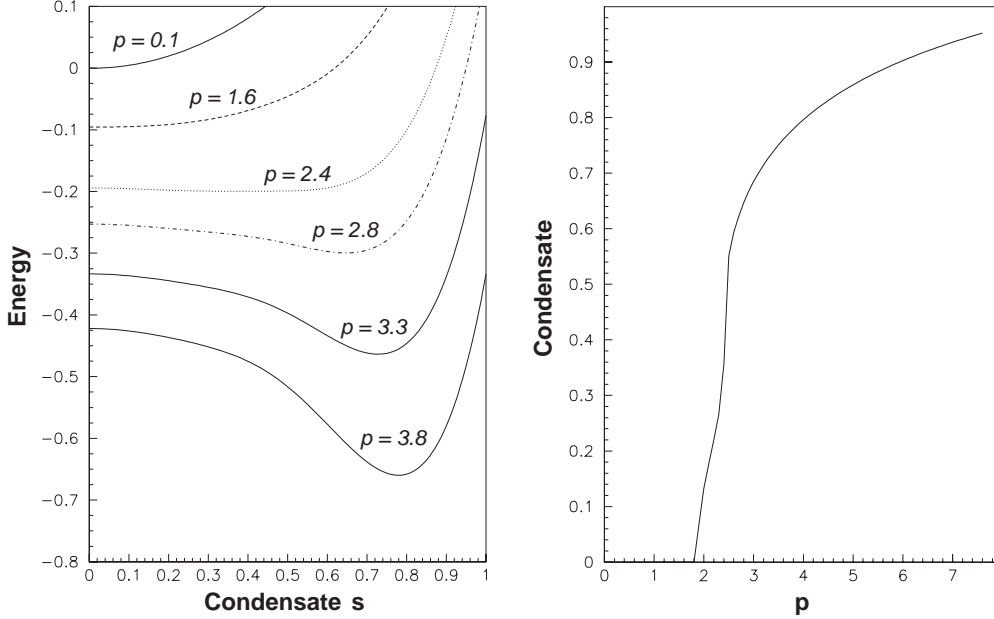
$$\begin{aligned} F(E, \vec{P}, \rho) &\equiv F(E^2 - \vec{P}^2, \rho) = \\ &\frac{1}{24} \left( \frac{\rho^2 b^2}{1 - \frac{\rho b}{2} I(E, \vec{P})} + \frac{\rho^3 b^3 s^2}{(1 - \frac{\rho b}{2} I(E, \vec{P}))^2} \right. \\ &\left. \times \left( E^2 - \vec{P}^2 - m^2 - \frac{\rho^2 b^2 s^2}{2} \frac{I(E, \vec{P})}{1 - \frac{\rho b}{2} I(E, \vec{P})} \right)^{-1} \right). \end{aligned} \quad (80)$$

The contribution  $E_{\text{corr}}^{(4c)}$  is explicitly covariant in the sense that the integrand depends only on  $E^2 - \vec{P}^2$  and the trick of eq. (75) can be applied again. For what concerns  $E_{\text{corr}}^{(4nc)}$ , the explicit calculation is more delicate since

$$\begin{aligned} I^{(1)}(E, \vec{P}) &= \int \frac{d\vec{k}_1 d\vec{k}_2}{(2\pi)^d} \frac{\delta^{(d)}(\vec{P} - \vec{k}_1 - \vec{k}_2)}{2\varepsilon_1 2\varepsilon_2} \\ &\times \frac{1}{E - \varepsilon_1 + \varepsilon_2 + i\eta}, \end{aligned} \quad (81)$$



**Fig. 4.** Diagrammatic view of the correlation energy. In the actual calculation, the RPA one-particle propagator (thick line) is replaced by the mean-field one.



**Fig. 5.** Left panel: Effective potential for various values of the dimensionless coupling constant  $p$  in standard RPA. Right panel: value of the condensate minimizing the standard RPA effective potential as a function of  $p$ .

appearing in eq. (79), depends separately on  $E^2$  and  $P^2$ . However, as it is familiar in nuclear physics,  $E_{\text{corr}}^{(4\text{nc})}$  which involves expectation values of the  $b^\dagger b^\dagger b b$ 's is of higher order in the  $Y$  amplitudes than  $E_{\text{corr}}^{(4\text{c})}$  involving  $bbbb$  ground-state matrix elements. Indeed, it can be checked analytically that to leading order in the interaction (*i.e.* replacing  $F(E, \vec{P}, \rho)$  by a constant value  $\rho^2 b^2/24$ ),  $E_{\text{corr}}^{(4\text{nc})}$  identically vanishes.

Hence, we find that the correlation energy contains a piece,  $E_{\text{corr}}^{(4\text{nc})}$ , which is manifestly non-covariant even in the standard RPA. This problem has not been pointed out before, since, to our knowledge, the RPA correlation energy has never been calculated in a case of a relativistic theory for bosons. We have neglected this contribution in our preliminary numerical estimate for the reasons given just above. Nevertheless, we give the explicit result, involving a four-dimensional integration, of this non-covariant contribution. After some manipulations and change of integration variables, one obtains

$$\frac{E_{\text{corr}}^{(4\text{nc})}}{V} = \int_0^1 \frac{d\rho}{\rho} \int_0^\infty \frac{dS}{2\pi^2} \times \int_0^{\pi/2} d\theta \left( S \cos^2 \theta J^2(S, \theta) - I^2(-S) \right) F(-S), \quad (82)$$

with

$$J(S, \theta) = - \int \frac{dt}{2\pi} \frac{1}{\varepsilon_t \sqrt{4\varepsilon_t^2 + S \sin^2 \theta}} \frac{1}{S + 4\varepsilon_t^2} \quad (83)$$

to be compared with

$$I(-S) = - \int \frac{dt}{2\pi} \frac{1}{\varepsilon_t} \frac{1}{S + 4\varepsilon_t^2}. \quad (84)$$

As mentioned above there is an instability of the HFB ground state against RPA fluctuations which makes the correlation energy divergent. However, to have a first idea of the influence of the RPA fluctuations we replace in the above expressions for the correlation energy the RPA one-particle propagator by the mean-field one. This is illustrated in fig. 4 where a diagrammatic interpretation of the RPA correlation energy is shown. Adding this correlation energy to the mean-field energy  $E_0$  one obtains the RPA effective potential, *i.e.* the RPA energy *versus* the condensate  $s$  for various values of the dimensionless coupling constant  $p$ . One gets a second-order phase transition with a critical coupling  $p_c = 1.8$  (see fig. 5). This has to be compared with the lattice result [9] and cluster expansion technique [7] showing a second-order transition, respectively, at  $p_c = 2.55$  and  $p_c = 2.45$ . It is fair to mention

that the neglected non-covariant contribution  $E_{\text{corr}}^{4c}$  is repulsive and will likely push the critical coupling constant to a higher value closer to the lattice result. Although this result is encouraging, it is obviously needed to go beyond the standard RPA to eliminate the unphysical instability mentioned above and seen in fig. 3.

#### 4.4 Results in renormalized RPA in 1 + 1 dimension

##### Single-particle mode

In view of the calculation of the correlation energy we have now to solve the RPA problem for any value of  $\rho$ . The main problem is thus to determine the self-consistent  $\mathcal{N}_{\vec{q},\rho} \equiv \langle \phi_{\vec{q}} \phi_{\vec{q}}^\dagger \rangle_\rho$ . One very usual possibility is to calculate it self-consistently according to

$$\mathcal{N}_{\vec{P}\rho} = \int \frac{idE}{2\pi} e^{iE\eta^+} G_\rho(E, \vec{P}), \quad (85)$$

where  $G_\rho(E, \vec{P})$  is the one-particle propagator for the  $H'(\rho)$  problem. One serious difficulty is that covariance is now lost in the sense that the loop integral  $I_\rho(E, \vec{P})$  and consequently the mass operator  $\Sigma_\rho(E, \vec{P})$  depends separately on  $E$  and  $\vec{P}$  due to the presence of the density  $\mathcal{N}$  in its expression. This is certainly a weakness of the present approach. However, as discussed above, even standard RPA seems to have problems with covariance so we think that this additional difficulty simply reflects the fact that there is a general problem of RPA with respect to covariance. Further work is needed to clarify this point. On the other hand, one natural possibility to recover covariance consists in imposing that the correct  $I_\rho(E, \vec{P})$  is obtained through its CM expression according to

$$I_\rho(E, \vec{P}) \equiv I_\rho(E^2 - \vec{P}^2) = \int \frac{dt}{2\pi} \frac{2\mathcal{N}_{t\rho}}{E^2 - \vec{P}^2 - 4\varepsilon_{t\rho}^2 + i\eta}. \quad (86)$$

Lets us call  $\Omega_{P\rho} = \sqrt{M_\rho^2 + P^2}$  the RPA single-particle mode which is the solution of the equation

$$\Omega_{P\rho}^2 = \varepsilon_{P\rho}^2 + \Sigma_\rho(E^2 - \vec{P}^2 = M_\rho^2). \quad (87)$$

In the quasi-particle approximation, the solution for  $\mathcal{N}_{P\rho}$  is

$$\mathcal{N}_{P\rho} \equiv \langle \phi_{\vec{P}} \phi_{\vec{P}}^\dagger \rangle_\rho = \frac{1}{2\Omega_{P\rho}}. \quad (88)$$

The self-consistent equation for the density thus becomes an equation for the mass of the RPA single-particle mode which explicitly reads

$$M_\rho^2 = m_\rho^2 + \frac{\rho^2 b^2 s^2}{2} \left( \frac{I_\rho}{1 - \frac{\rho b}{2} I_\rho} \right) (E^2 - P^2 = M_\rho^2) \quad (89)$$

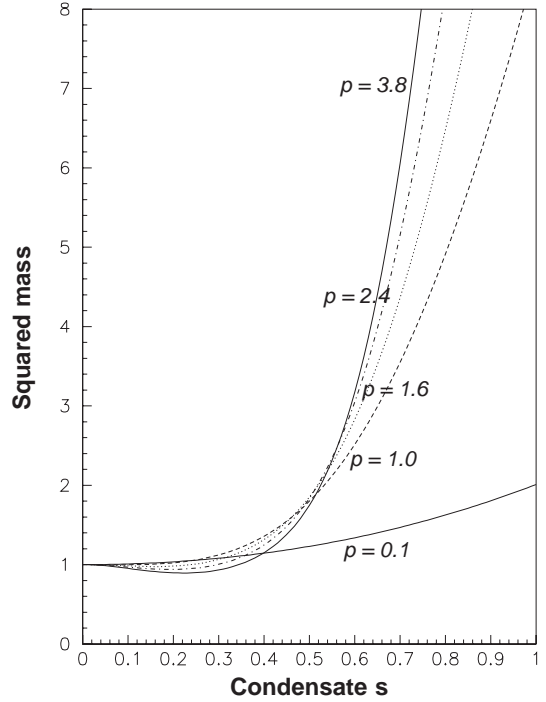


Fig. 6. Squared r-RPA mass as a function of  $s$ .

with the generalized mean-field single-particle mass given by

$$m_\rho^2 = \mu^2 + \frac{b}{2} s^2 + \frac{b}{2} \left( \langle \phi^2 \rangle - \int_{-A}^{+A} \frac{dq}{2\pi} \frac{1}{2\sqrt{q^2 + \mu^2}} \right) + \frac{\rho b}{2} (\langle \phi^2 \rangle_\rho - \langle \phi^2 \rangle), \quad (90)$$

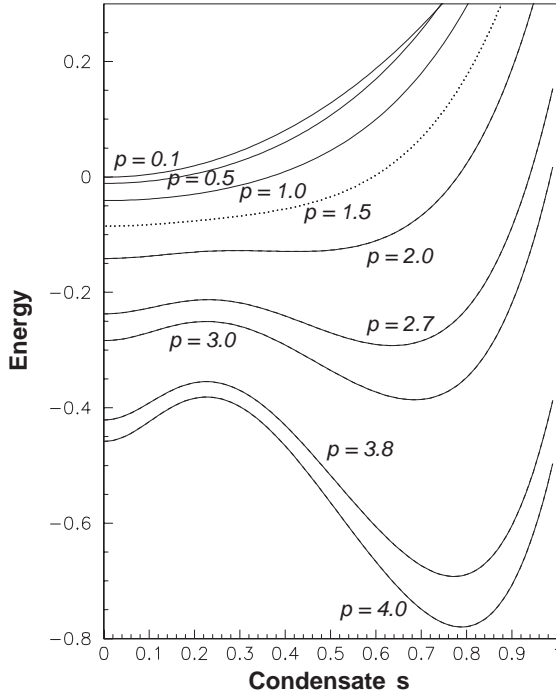
which follows directly from (66). Hence we see that the equations for the generalized mean-field energy and for the single-particle RPA mode are now coupled, due to the presence of the self-consistent scalar density  $\langle \phi^2 \rangle$ . They finally reduce to determine  $M_\rho$ . The procedure to solve the resulting equation at a given value of  $b$  and  $s$  is the following. We first solve the equation for  $\rho = 1$ , which gives the RPA mode mass  $M$ , the densities  $\mathcal{N}_P$ ,  $\langle \phi^2 \rangle = \sum_P \mathcal{N}_P / V$  and the mean-field mass  $m$ . Once this is done we solve for  $M_\rho$  which allows to obtain  $m_\rho$  and  $\varepsilon_{\rho P} = \sqrt{P^2 + m_\rho^2}$ .

We show on fig. 6 the results of the calculation for the RPA mass  $M$ . We see that the instability problem has now disappeared. This is a first important success of the renormalized RPA.

##### Correlation energy

The calculation of the correlation energy can now be done by assuming again covariance in the sense explained just above. The results of eqs. (74), (75), (78), (79), (82) can be applied by just making in the final expressions, the replacements

$$I(-S) \rightarrow I_\rho(-S) = - \int \frac{dt}{2\pi} \frac{2\mathcal{N}_{t\rho}}{S + 4\varepsilon_{t\rho}^2}, \quad (91)$$



**Fig. 7.** Effective potential for various values of  $p$  in r-RPA.

$$J(\mathcal{S}, \theta) \rightarrow J_\rho(\mathcal{S}, \theta) = - \int \frac{dt}{2\pi} \frac{1}{\sqrt{4\varepsilon_{t\rho}^2 + \mathcal{S} \sin^2 \theta}} \times \frac{2\mathcal{N}_{t\rho}}{\mathcal{S} + 4\varepsilon_{t\rho}^2}. \quad (92)$$

In fig. 7, we show the effective potential for various values of the dimensionless coupling constant  $p$ , again neglecting the non-covariant piece (82) for the reasons explained above. For  $p$  below  $\simeq 2$  there is only one minimum at  $s = 0$ , *i.e.* corresponding to a symmetry unbroken phase. Beyond this value, a weakly pronounced minimum starts to develop at finite  $s$ . The symmetry broken phase becomes stable at  $p_c \simeq 2.3$  indicating a very weak first-order transition. It is satisfying to see that the value of  $p_c$  has moved in the right direction towards the value given by cluster expansion [7] and lattice calculation [9]. It remains to calculate the non-covariant contribution to see if it is able to transform this weak first-order transition into a genuine second-order one. Work in this direction is now in progress.

#### 4.5 Towards full renormalized RPA

In the previous section we have presented a version of r-RPA which incorporates RPA correlations in the scalar density which are induced by the presence of a non-vanishing condensate. However, in the usual non-symmetry broken case this version is still equivalent to the standard RPA. To go beyond standard RPA is, as already stated, a difficult problem. One possibility is to introduce the dynamical mass operator modifying the single-particle

propagator. This mass operator is of the form

$$\Sigma_\alpha^{(d)}(t, t') = 2\varepsilon_\alpha \langle -iT([H, b_\alpha](t), [H, b_\alpha^\dagger](t')) \rangle_{\text{irr}} = \frac{1}{36} \sum_{123} \sum_{1'2'3'} V_{\alpha, -1, -2, -3} \times \langle -iT(\phi_1 \phi_2 \phi_3(t), \phi_1^\dagger \phi_2^\dagger \phi_3^\dagger(t')) \rangle V_{\alpha, -1', -2', -3'}. \quad (93)$$

Applying the perturbation theory on top of the already-calculated one-particle propagator, one obtains for the full propagator

$$G_\alpha^{\text{RPA}}(t, t') = G_\alpha(t, t') + \int dt_1 dt_2 G_\alpha(t, t_1) \Sigma_\alpha^{(d)}(t_1, t_2) G_\alpha(t_2, t'). \quad (94)$$

Using a factorization approximation, one obtains:

$$\Sigma_\alpha^{(d)}(t, t') = \frac{1}{6} \sum_{123} \sum_{1'2'3'} V_{\alpha, -1, -2, -3} \times \delta_{1,1'} G_1(t, t') G_{\phi_1 \phi_2, \phi_2^\dagger, \phi_3^\dagger}(t, t') V_{\alpha, -1', -2', -3'}. \quad (95)$$

The density  $\mathcal{N}_\alpha$  can be in principle calculated as

$$\mathcal{N}_\alpha = \langle \phi_\alpha^\dagger \phi_\alpha \rangle \equiv i \lim_{t' \rightarrow t^+} G_\alpha^{\text{RPA}}(t, t') \equiv \int \frac{i dE}{2\pi} e^{iE\eta^+} G_\alpha^{\text{RPA}}(E). \quad (96)$$

The solution of this problem, *i.e.* to find self-consistently the scalar densities, is both formally and numerically very involved. However, as shown in a separate publication [19] at least in the symmetry-involved region of the anharmonic oscillator, this procedure reproduces to leading order in  $Y^2$  the correct occupation number from the exact SCRPA ground-state wave function.

## 5 Further remarks and discussions on the formalism

It is well known in non-relativistic many-body theory that standard RPA corresponds to a bosonization either of pairs of fermion operators or pairs of boson operators. As a matter of fact, the RPA has first been invented for Fermi systems and the bosonization of boson pair operators has appeared much later in the literature [20,21]. However, in any case the bosonization of boson pair operators (which are themselves NOT ideal bosons) goes along the same lines as in the fermion case [22] and also the generalization to relativistic field theory [6] presents no particular obstacle (as a specific example, the bosonization technics has extensively been studied in the case of the NJL model, see, *e.g.*, [23]). In doing so, one would naturally replace the boson pair operators present in the definition of the Green's function (29) by ideal boson operators, that is for example  $b_q^+ b_q^+ \rightarrow B_{qq^+}$ , with  $B_{qq^+}$  being an ideal boson operator. With such a bosonization scheme the equation of motion for the Green's function

corresponding to eq. (29) would lead to an inhomogeneity  $\mathcal{N}_{ab}$  in the Dyson equation (32) which contains only unit operators on the diagonal. Inspection of eq. (32), however, reveals that  $\mathcal{N}_{ab}$  contains in addition one-body expectation values. This fact stems from the particular feature that in our approach we do not bosonise but stay with the original boson pair operators. Contrary to the usual two-body Green's function technique, the boson pair operators are, however, taken to be at equal times and not at two different times. This means that we single out the  $S$ -channel. It is not widely known that an exact integral equation for such two-body two-time Green's functions can be established analogous to the Dyson equation in the one-body case. The mass operator of this "two-body Dyson equation" presents, as in the one-body case, an instantaneous mean-field-type part and a truly dynamical part depending on the energy. Neglecting the latter leads precisely to the self-consistent equation (32). It has turned out that in this way, working with pairs of fermion or boson operators without bosonization, allows to better respect the Pauli principle and in the case of fermions this has given excellent results in a series of applications to non-trivial models where comparison with exact solutions was available [14, 20, 24]. There is no reason not to believe that this advantage should not carry over to the case of relativistic interacting boson fields. In the relativistic case, however, our ansatz (29) for the Green's function has the disadvantage that it is not manifestly covariant and this is certainly at the origin of some difficulties we encountered in this respect and which we have discussed in the main text. However, as we have shown in sect. 4, even standard RPA has, in our model at least, some difficulties with covariance. Further studies are necessary to elucidate this point and eventually to cure it. We believe nevertheless that the results we have found in the present study are encouraging and that we will be able to apply our theory in future work as successfully to relativistic field theory as we did already in the past for the non-relativistic many-body problem.

## 6 Conclusion

In this work we have tried to make the first step in elaborating an extension of the RPA theory, which has been very successful in the context of the non-relativistic many-body problem [13, 15–17, 24], to relativistic field theory. Applications of the standard RPA to the relativistic field theory has emerged in the recent past and proven its great potential interest [4–6]. The main quality of the RPA approach is to sum a certain class of diagrams (the rings) to all order and by the same token to restore spontaneously broken symmetries and to fulfill the conservation laws. The drawback of standard RPA is to ignore, at a certain step of its derivation, correlations in the vacuum (the quasi-boson approximation). This often entails a rather strong overbinding of the ground state. To avoid this approximation is the aim of the afore-mentioned extension of RPA leading to the so-called self-consistent RPA (SCRPA). An intermediate but considerably less compli-

cated version of this theory is the so-called renormalized RPA (r-RPA) where, with respect to standard RPA, only the occupation numbers are modified due to ground-state correlations. It is this latter version which we have tried to develop here in the context of relativistic field theory with application to the  $\varphi^4$  theory in  $1+1$  dimension. We have studied the transition to a symmetry broken phase in varying the coupling constant. We have found a very slight first-order phase transition and concluded that it will turn to second order, as it is expected in this model, once further correlations of the SCRPA are included. This opinion stems from the fact that going from the mean-field theory (Gaussian approximation) to the r-RPA solution the first-order character of the transition has been very much attenuated. We also point out a certain number of difficulties with the extension of RPA to relativistic field theory for bosons. This concerns for instance the fact that the approach is not manifestly covariant. Although the standard RPA yields at the end a covariant solution for the single-particle mode, surprisingly we found that it has difficulties for the calculation of the correlation energy with respect to covariance. Apparently this had not been noticed before. At the r-RPA level we find that covariance is violated already for the single-particle mode and we have to restore it by an *ad hoc* but natural assumption. It will be an interesting further study whether SCRPA inherently violates covariance or whether this is due to the approximations we have been forced to introduce. Another open question to be studied in the future concerns renormalization. In the present model study this difficulty was absent since the  $\varphi^4$  theory in  $1+1$  dimensions is super-renormalizable. However, in the general case, this problem has obviously to be mastered. Finally, a detailed comparison of the diagrammatic content of the RPA and the cluster expansion [7], in the context of relativistic bosonic theories with a broken symmetry, would be certainly of great interest.

In short we have applied for the first time an extension of the RPA theory, which turns out to be successful in the non-relativistic many-body problem, to a relativistic but schematic field-theoretic model. Although some problems are still present, we believe that our results are quite encouraging. Studies for the resolution of the remaining problems are under way.

We would like to thank Z. Aouissat for very useful discussions concerning various aspects of SCRPA and its application to field-theoretical problems.

## Appendix A.

In this appendix we list the explicit expressions for the Green's functions. For this purpose we introduce various quantities:

$$I_{\beta\beta'}^{(1)}(E) = \frac{1}{2\varepsilon_\beta} \frac{1}{2\varepsilon_{\beta'}} \frac{\varepsilon_\beta \mathcal{N}_\beta + \varepsilon_{\beta'} \mathcal{N}_{\beta'}}{E - \varepsilon_\beta - \varepsilon_{\beta'} + i\eta},$$

$$I_{\beta\beta'}^{(2)}(E) = \frac{\varepsilon_\beta - \varepsilon_{\beta'}}{2\varepsilon_\beta \varepsilon_{\beta'}} \frac{\varepsilon_\beta \mathcal{N}_\beta - \varepsilon_{\beta'} \mathcal{N}_{\beta'}}{E^2 - (\varepsilon_\beta - \varepsilon_{\beta'})^2 + i\eta},$$

$$I_{\beta\beta'}^{(3)}(E) = -\frac{1}{2\varepsilon_\beta} \frac{1}{2\varepsilon_{\beta'}} \frac{\varepsilon_\beta \mathcal{N}_\beta + \varepsilon'_{\beta'} \mathcal{N}_{\beta'}}{E + \varepsilon_\beta + \varepsilon_{\beta'} - i\eta}. \quad (\text{A.1})$$

We also introduce the loop integrals

$$I_\alpha^{(i)}(E) = \frac{1}{V} \sum_{\beta\beta'} \delta_{\alpha-\beta-\beta'} I_{\beta\beta'}^{(i)}(E),$$

$$I_\alpha(E) = I_\alpha^{(1)}(E) + I_\alpha^{(2)}(E) + I_\alpha^{(3)}(E). \quad (\text{A.2})$$

In particular, for  $\alpha$  corresponding to the momentum  $\vec{P}$ , one has the explicit expression

$$I(E, \vec{P}) \equiv I_{\alpha=\vec{P}}(E) = \int \frac{d\vec{k}_1 d\vec{k}_2}{(2\pi)^d} \delta^{(d)}(\vec{P} - \vec{k}_1 - \vec{k}_2)$$

$$\times \left[ \frac{\varepsilon_1 + \varepsilon_2}{2\varepsilon_1 \varepsilon_2} \frac{\varepsilon_1 \mathcal{N}_1 + \varepsilon_2 \mathcal{N}_2}{E^2 - (\varepsilon_1 + \varepsilon_2)^2 + i\eta} \right.$$

$$\left. - \frac{\varepsilon_1 - \varepsilon_2}{2\varepsilon_1 \varepsilon_2} \frac{\varepsilon_1 \mathcal{N}_1 - \varepsilon_2 \mathcal{N}_2}{E^2 - (\varepsilon_1 - \varepsilon_2)^2 + i\eta} \right]. \quad (\text{A.3})$$

For the one-particle Green's functions one obtains

$$G_{\alpha\alpha'}(E) = \delta_{\alpha,\alpha'} \frac{E + \varepsilon_\alpha + \frac{\Sigma_\alpha(E)}{2\varepsilon_\alpha}}{2\varepsilon_\alpha} G_\alpha(E),$$

$$G_{-\alpha'-\alpha'}(E) = \delta_{\alpha,\alpha'} \frac{-E + \varepsilon_\alpha + \frac{\Sigma_\alpha(E)}{2\varepsilon_\alpha}}{2\varepsilon_\alpha} G_\alpha(E),$$

$$G_{-\alpha'\alpha'}(E) = G_{\alpha-\alpha'}(E) = \delta_{\alpha,\alpha'} \frac{\Sigma_\alpha(E)}{4\varepsilon_\alpha^2} G_\alpha(E), \quad (\text{A.4})$$

where the full propagator is

$$G_{\phi_\alpha \phi_\alpha^\dagger}(E) = \delta_{\alpha,\alpha'} G_\alpha(E) = \delta_{\alpha,\alpha'} (E^2 - \varepsilon_\alpha^2 - \Sigma_\alpha(E))^{-1}. \quad (\text{A.5})$$

The mass operator being given by

$$\Sigma_\alpha(E) = \frac{b^2 s^2}{2} \frac{I_\alpha(E)}{1 - \frac{b}{2} I_\alpha(E)}. \quad (\text{A.6})$$

For what concerns the 2p-1h and 2p-2p Green's functions we introduces indices  $i$  to label the destruction (creation) operators:  $1 = \beta, \beta'(\beta^\dagger, \beta'^\dagger)$ ,  $2 = (\beta, -\beta'^\dagger)_{\text{sym}}((\beta^\dagger, -\beta')_{\text{sym}})$  and  $3 = -\beta^\dagger, -\beta'^\dagger(-\beta, -\beta')$ . The results are:

$$G_{\beta\beta',\alpha^\dagger}^{(i)}(E) = G_{\alpha^\dagger,\beta\beta'}^{(i)}(E) =$$

$$\frac{b s}{\sqrt{V}} \delta_{\alpha-\beta-\beta'} \frac{I_{\beta\beta'}^{(i)}(E)}{1 - \frac{b}{2} I_\alpha(E)} \left( \frac{E + \varepsilon_\alpha}{2\varepsilon_\alpha} \right) G_{\phi_\alpha \phi_\alpha^\dagger}(E),$$

$$G_{\beta\beta',-\alpha}^{(i)}(E) = G_{-\alpha,\beta\beta'}^{(i)}(E) =$$

$$\frac{b s}{\sqrt{V}} \delta_{\alpha-\beta-\beta'} \frac{I_{\beta\beta'}^{(i)}(E)}{1 - \frac{b}{2} I_\alpha(E)} \left( \frac{-E + \varepsilon_\alpha}{2\varepsilon_\alpha} \right) G_{\phi_\alpha \phi_\alpha^\dagger}(E), \quad (\text{A.7})$$

$$G_{\beta\beta',\gamma\gamma'}^{(ij)}(E) = I_{\beta\beta'}^{(i)}(E) \delta_{i,j} (\delta_{\beta\gamma} \delta_{\beta'\gamma'} + \delta_{\beta\gamma'} \delta_{\beta'\gamma})$$

$$+ \frac{b}{V} \sum_\alpha \frac{\delta_{\alpha-\beta-\beta'} I_{\beta\beta'}^{(i)}(E) \delta_{\alpha-\gamma-\gamma'} I_{\gamma\gamma'}^{(i)}(E)}{1 - \frac{b}{2} I_\alpha(E)}$$

$$+ \frac{b^2 s^2}{V} \sum_\alpha \frac{\delta_{\alpha-\beta-\beta'} I_{\beta\beta'}^{(i)}(E) \delta_{\alpha-\gamma-\gamma'} I_{\gamma\gamma'}^{(i)}(E)}{(1 - \frac{b}{2} I_\alpha(E))^2} G_{\phi_\alpha \phi_\alpha^\dagger}(E). \quad (\text{A.8})$$

## References

1. P. Ring, P. Schuck, *The Nuclear Many-Body Problem* (Springer-Verlag, 1980).
2. P.M. Stevenson, Phys. Rev. D **30**, 1712 (1984); **32**, 1389 (1985); Y. Bihay, M. Consoli, Phys. Lett. B **157**, 48 (1985); P.M. Stevenson, Z. Phys. C **35**, 467 (1987); P.M. Stevenson, B. Allès, R. Tarrach, Phys. Rev. D **35**, 2407 (1987); A.K. Kerman, C. Martin, D. Vautherin, Phys. Rev. D **47**, 632 (1993); G. Amelino-Camelia, Phys. Lett. B **407**, 268 (1997) and references therein.
3. A.K. Kerman, D. Vautherin, Ann. Phys. (N.Y.) **192**, 408 (1989); C. Martin, D. Vautherin, hep-ph/9401261; I.I. Kogan, A. Kovner, Phys. Rev. D **52**, 3719 (1995) and references therein.
4. V. Dmitrasinovic, J.A. McNeil, J.R. Shepard, Z. Phys. C **69**, 35 (1996).
5. Z. Aouissat, G. Chanfray, P. Schuck, J. Wambach, Nucl. Phys. A **603**, 458 (1996).
6. Z. Aouissat, P. Schuck, J. Wambach, Nucl. Phys. A **618**, 402 (1997).
7. J.M. Håuser, W. Cassing, A. Peter, M.H. Thoma, Z. Phys. A **353**, 301 (1995).
8. W. Janke, T. Sauer, Nucl. Phys. Proc. Suppl. **42**, 917 (1995).
9. W. Loinaz, R.S. Willey, Phys. Rev. D **58**, 076003 (1998).
10. P.J. Marrero, E.A. Roura, D. Lee, Phys. Lett. B **471**, 45 (1999).
11. A.L. Fetter, J.D. Walecka, *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New-York, 1971).
12. A.K. Kerman, Ann. Phys. (N.Y.) **269**, 55 (1998).
13. D.J. Rowe, Rev. Mod. Phys. **40**, 153 (1968); *Nuclear Collective Motion* (Methuen, London, 1970).
14. J. Dukelsky, P. Schuck, Nucl. Phys. A **512**, 466 (1990).
15. K. Hara, Progr. Theor. Phys. **32**, 88 (1964).
16. F. Catara, N. Dinh Dang, M. Sambatoro, Nucl. Phys. A **579**, 1 (1994).
17. J. Toivanen, J. Suhonen, Phys. Rev. Lett. **75**, 410 (1995).
18. P. Schuck, S. Ethofer, Nucl. Phys. A **212**, 269 (1973).
19. G. Chanfray, D. Davesne, M. Oertel, P. Schuck, in preparation.
20. P. Curutchet, J. Dukelsky, G.G. Dussel, A.J. Fendrik, Phys. Rev. C **40**, 2361 (1989).
21. R. Bijker, S. Pittel, J. Dukelsky, Phys. Lett. B **219**, 5 (1989).
22. J.P. Blaizot, G. Ripka, *Quantum Theory of Finite Systems* (Mit Press, 1986).
23. G. Ripka, *Quarks Bound by Chiral Fields. The Quark Structure of the Vacuum and of Light Mesons and Baryons* (Clarendon Press, 1997).
24. J. Dukelsky, P. Schuck, Mod. Phys. Lett. A **26**, 2429 (1991); P. Krüger, P. Schuck, Europhys. Lett. **72**, 395 (1994); J. Dukelsky, P. Schuck, Phys. Lett. B **387**, 233 (1996); J. Dukelsky, G. Röpke, P. Schuck, Nucl. Phys. A **628**, 17 (1998); J.G. Hirsch, A. Mariano, J. Dukelsky, P. Schuck, nucl-th/0109036.

## Publication 8



# A consistent approximation scheme beyond RPA for bosons

D. Davesne<sup>a</sup>, M. Oertel, and H. Hansen

IPN Lyon, 43 Bd du 11 Novembre 1918, F-69622 Villeurbanne Cedex, France

Received: 17 June 2002 / Revised version: 23 August 2002 /

Published online: 17 January 2003 – © Società Italiana di Fisica / Springer-Verlag 2003

Communicated by A. Molinari

**Abstract.** In this paper, we develop a consistent extension of RPA for bosonic systems. In order to illustrate the method, we consider the case of the anharmonic oscillator. We compare our results with those obtained in mean-field and standard RPA approaches with the exact ones and show that they are very close to these ones.

**PACS.** 24.10.Cn Many-body theory – 04.25.-g Approximation methods; equations of motion

## 1 Introduction

In many domains of physics perturbation theory fails to describe physical phenomena correctly. For example, bound states or collective excitations cannot be described perturbatively. In particular, in the low-energy regime of strong interactions non-perturbative effects play an important role. Although much progress has been made in understanding the hadronic world, it is still indispensable to develop non-perturbative, symmetry conserving methods.

In the last few years much effort has been made to apply non-perturbative techniques well established in many-body theory to quantum field theory (see, *e.g.*, refs. [1–4]). In this article we will concentrate on approaches related to the random phase approximation (RPA). In its standard form the RPA is known to respect symmetries. For example, in ref. [2] it has been demonstrated within a linear  $\sigma$ -model that the RPA fluctuations generate the Goldstone bosons related to the spontaneously broken global (chiral) symmetry. At mean-field level, on the contrary, these soft modes do not emerge. Thus, the RPA seems to be a method very well suited to treat non-perturbative systems with spontaneously broken symmetries. Nevertheless it has some shortcomings: It is not of variational character and, therefore, does not necessarily fulfill the Rayleigh-Ritz criterion. In addition, it is not self-consistent, and therefore the intermediate states (corresponding to the mean-field quasiparticles) do not coincide with the final RPA particles. In particular, even if the RPA states show up as massless Goldstone modes, the intermediate states are massive. This has been pointed out by Aouissat *et al.* [3,5] in the context of pionic excitations in an  $O(N)$  model.

It is obvious that this self-consistency problem can be circumvented in  $1/N$  expansions [3,5,6]. On the other hand, a fully self-consistent approximation such as self-consistent RPA (SCRPA) [7] is desirable. This method has already been applied successfully to fermionic systems, *e.g.*, to the Hubbard model [8] and the seniority model [9]. For a bosonic field theory a first attempt in this direction has been made in ref. [4]. There, some of the correlations are included, which are not present in the mean-field ground state used in standard RPA. This procedure, however, causes serious problems: In particular, it does not preserve covariance, an essential ingredient of a relativistic quantum field theory.

In order to establish a consistent method and to clearly state the problems related to the treatment of a bosonic system in an extended RPA formalism, we will reduce the dimension of the system. Instead of a  $\lambda\Phi^4$  theory as in ref. [4] we will study a one-dimensional anharmonic oscillator. Of course this is a purely quantum-mechanical, non-relativistic system and we cannot certainly tackle the problem of covariance. Nevertheless, we can isolate some of the inherent contradictions related to bosonic systems. It has to be examined within a future work whether the method presented here is able to preserve covariance.

Our toy model, the anharmonic oscillator, has the advantage that exact results are known and that we can directly compare the results obtained in different approximation schemes with those obtained by solving the Schrödinger equation. It has already been used as a test ground, *e.g.*, for coupled cluster techniques [10] or first attempts within SCRPA [11].

The article is organized as follows: We begin with presenting the RPA equations in sect. 2. In sect. 3, we review the Hartree-Fock (mean-field) approximation together with the standard RPA. The renormalized RPA

<sup>a</sup> e-mail: davesne@ipnl.in2p3.fr

(r-RPA) and its problems are discussed in sect. 4. In sect. 5, we present our extended r-RPA approach. Section 6 is devoted to a discussion of the numerical results, in particular for the ground-state energy, obtained within the different approximation schemes. Finally, in sect. 7, we will draw our conclusions.

## 2 The RPA equations

First of all, we have to state our starting point, the RPA equations. There are mainly two different ways to derive the RPA equations: the equation-of-motion method due to Rowe [12] and the Dyson-Schwinger approach [13]. To derive the former, we suppose that we can generate an excited state  $|\nu\rangle$  by the action of an operator  $Q_\nu^\dagger$  on the ground state  $|\text{gs}\rangle$ :  $|\nu\rangle = Q_\nu^\dagger|\text{gs}\rangle$ ,  $|\text{gs}\rangle$  being the vacuum of  $Q_\nu$ . Obviously  $Q_\nu^\dagger$  is a highly non-trivial many-body operator. Depending on the nature of  $|\nu\rangle$  (excited state with the same number of particles or excited state with a different number of particles),  $Q_\nu^\dagger$  can be seen as a superposition of (non-Hermitian) one-, two- or more-body operators. In general,  $Q_\nu^\dagger$  is expressed in the following form:

$$Q_\nu^\dagger = \sum_{\alpha} X_{\alpha}^{\nu} A_{\alpha}^{\dagger}, \quad (1)$$

where  $A_{\alpha}^{\dagger}$  contains all the chosen excitation operators expressed in terms of  $a_i$  and  $a_i^{\dagger}$  (annihilation and creation operators) and  $\alpha$  represents all quantum numbers. Moreover, minimization of the energy  $E_{\nu} = \langle \nu | H | \nu \rangle$  with respect to a variation  $\delta Q_{\nu}$  leads to a system of equations, whose solution gives the amplitudes  $X_{\alpha}^{\nu}$  and the excitation energies

$$\langle \text{gs} | [\delta Q_{\nu}, [H, Q_{\nu}^{\dagger}]] | \text{gs} \rangle = (E_{\nu} - E_0) \langle \text{gs} | [\delta Q_{\nu}, Q_{\nu}^{\dagger}] | \text{gs} \rangle, \quad (2)$$

where  $E_0$  represents the energy of the ground state  $|\text{gs}\rangle$ .

In the Dyson-Schwinger approach, which will be used in this paper, one starts from the definition of a time-ordered Green's function at zero temperature in equilibrium (the generalization to finite temperature is direct):

$$G_{\alpha\beta}(t, t') = -i \langle \text{gs} | T \left( A_{\alpha}(t) A_{\beta}^{\dagger}(t') \right) | \text{gs} \rangle, \quad (3)$$

where  $T$  is the time-ordering operator and  $A$  and  $A^{\dagger}$  depend on time via  $A(t) = e^{iHt} A(0) e^{-iHt}$ , where  $H$  is the exact Hamiltonian. In equilibrium the above two-time Green's function<sup>1</sup> is a function of the time difference  $t - t'$  so that the Fourier transform  $G(E)$  depends only on one frequency. Our aim is to derive a Dyson equation for  $G(E)$ . If we define

$$G_{\alpha\beta}(t, t') = \int \frac{dE}{2\pi} e^{-iE(t-t')} G_{\alpha\beta}(E), \quad (4)$$

<sup>1</sup> Note that we deal with a two-time Green's function. This means that, if, e.g.,  $A = a^{\dagger} a^{\dagger}$ , both particles are created at the same time.

the result is

$$E G_{\alpha\beta}(E) = \mathcal{N}_{\alpha\beta} + \sum_{\beta', \gamma} \mathcal{D}C_{\alpha\beta'} \mathcal{N}_{\beta'\gamma}^{-1} G_{\gamma\alpha}(E), \quad (5)$$

with

$$\begin{aligned} \mathcal{N}_{\alpha\beta} &= \langle \text{gs} | [A_{\alpha}, A_{\beta}^{\dagger}] | \text{gs} \rangle, \\ \mathcal{D}C_{\alpha\beta} &= \langle \text{gs} | [[A_{\alpha}, H], A_{\beta}^{\dagger}] | \text{gs} \rangle. \end{aligned} \quad (6)$$

It has to be noted that the operators entering the above eq. (6) have to be taken at equal times since the truly dynamical contribution has been omitted (see, e.g., the derivation in refs. [8, 14]).

One can show that the two methods mentioned above are strictly equivalent, provided that [14]

$$\langle \text{gs} | [H, [A_{\alpha}, A_{\beta}^{\dagger}]] | \text{gs} \rangle = 0. \quad (7)$$

Of course, if  $|\text{gs}\rangle$  is the exact ground state, i.e., an eigenstate of the Hamiltonian, this relation is automatically satisfied. Within an approximation this needs, however, not to be the case. Nevertheless, in most practical situations, including our treatment of the anharmonic oscillator, it can be shown that both methods are indeed equivalent.

Obviously it is not possible to include the complete Hilbert space of excitation operators in  $A$  and it is necessary to restrict it. In principle the approximation can straightforwardly be refined by enlarging the space of excitation operators contained in  $A$ . But, in practice this often turns out to be a very difficult task because, on the one hand, the dimension of the RPA matrix to be diagonalized increases and, on the other hand, there exist consistency problems for the theory itself (see the next section).

Another crucial point in solving the above RPA equations, eq. (5), is the way in which the expectation values are determined since the exact ground state is not known. It is, however, clear that it strongly influences the quality of the approximation. In standard RPA the exact ground state is usually replaced by a mean-field (Hartree-Fock) one. But we will show in the next section, using as an example the anharmonic oscillator, that it is possible to take into account an important part of the correlations present in the exact ground state in a fully consistent way.

## 3 The model in standard RPA

We start from the Hamiltonian of an anharmonic oscillator with quartic coupling

$$H = \frac{p^2}{2} + \mu^2 \frac{X^2}{2} + gX^4 \quad (8)$$

with constants  $\mu^2 < 0$  and  $g > 0$ . In the following sections,  $\tilde{\mu} \equiv \sqrt{|\mu^2|}$ . This Hamiltonian can be rewritten as

$$H = \frac{p^2}{2} + \frac{X^2}{2} + (\mu^2 - 1) \frac{X^2}{2} + gX^4 \quad (9)$$

and can be seen as a harmonic oscillator disturbed by a potential  $V(X) = (\mu^2 - 1)\frac{X^2}{2} + gX^4$ . We introduce the usual destruction and creation operators  $a$  and  $a^\dagger$  defined by  $a = (\tilde{\mu}X + ip)/\sqrt{2\tilde{\mu}}$ . The basis for standard RPA is the mean-field approximation which is usually formulated with the help of a Bogoliubov transformation. Thereby the starting point is the following trial wave function (see, *e.g.*, ref. [10]):

$$|\text{HF}\rangle = e^{(ua^\dagger + \frac{1}{2}ta^{\dagger 2})}|V\rangle, \quad (10)$$

with variational parameters  $u$  and  $t$ .  $|V\rangle$  is the vacuum of the initial destruction operator  $a$ :  $a|V\rangle = 0$ . The destruction operator of the Hartree-Fock vacuum  $b|\text{HF}\rangle = 0$  can be expressed with the help of  $u$  and  $t$ :

$$b = (1 - t^2)^{-1/2}(a - ta^\dagger - u). \quad (11)$$

For later convenience we define  $\omega \equiv \tilde{\mu}(1 - t)/(1 + t)$  and  $s \equiv \sqrt{2/\tilde{\mu}}u/(t - 1)$ . In terms of the new creation and destruction operators, we then obtain

$$\begin{aligned} x \equiv X + s &= \frac{1}{\sqrt{2\omega}}(b + b^\dagger), \\ p &= -i\sqrt{\frac{\omega}{2}}(b - b^\dagger), \end{aligned} \quad (12)$$

which makes the role of the variational parameters obvious:  $s$  simply describes a translation in space and  $\omega$  a modified frequency of the oscillator. The Hamiltonian can be cast into the following form:

$$\begin{aligned} \text{H} &= -\frac{\omega}{4}(b - b^\dagger)^2 + \frac{\mu^2 + 12gs^2}{4\omega}(b + b^\dagger)^2 \\ &\quad - \frac{s\mu^2 + 4gs^3}{\sqrt{2\omega}}(b + b^\dagger) - \frac{4sg}{\sqrt{8\omega^3}}(b + b^\dagger)^3 \\ &\quad + \frac{g}{4\omega^2}(b + b^\dagger)^4 + gs^4 + \frac{\mu^2 s^2}{2}. \end{aligned} \quad (13)$$

The aim of the Bogoliubov transformation is to select the best basis in the sense that the parameters  $\omega$  and  $s$  minimize the mean-field ground-state energy,  $E_0^{\text{HF}} = \langle \text{HF} | \text{H} | \text{HF} \rangle$ . These two parameters are thus determined by:  $\frac{\partial E_0^{\text{HF}}}{\partial s} = 0$ ,  $\frac{\partial E_0^{\text{HF}}}{\partial \omega} = 0$ . As can easily be checked by a direct calculation, the above equations are equivalent to the so-called ‘‘gap equations’’:

$$\begin{aligned} \frac{\partial E_0^{\text{HF}}}{\partial s} = 0 &\Leftrightarrow \langle \text{HF} | [\text{H}, b] | \text{HF} \rangle = 0, \\ \frac{\partial E_0^{\text{HF}}}{\partial \omega} = 0 &\Leftrightarrow \langle \text{HF} | [\text{H}, bb] | \text{HF} \rangle = 0. \end{aligned} \quad (14)$$

If  $|\text{HF}\rangle$  was the exact ground state, the above gap equations would be satisfied automatically. However, the deeper origin of these equations (minimization of the ground-state energy with respect to the Bogoliubov parameters  $\omega$  and  $s$ ) implies that they have always to be satisfied.

Let us now discuss the RPA corrections to the ground-state energy. In standard RPA the excitation operator  $A$  entering the RPA equations, eqs. (5), is taken to be  $A \in \{b, b^\dagger, bb, b^\dagger b^\dagger\}$ . We define the RPA ground-state energy as follows:

$$E_0^{\text{RPA}} = \langle \text{RPA} | \text{H} | \text{RPA} \rangle. \quad (15)$$

This expression involves expectation values of the type  $\langle \text{RPA} | A B | \text{RPA} \rangle$ . These RPA corrected values can be calculated from the RPA Green’s functions in the limit  $t \rightarrow t'$

$$\langle \text{RPA} | A B | \text{RPA} \rangle = i \int \frac{dE}{2\pi} G_{AB}(E). \quad (16)$$

It is in this way that we introduce RPA fluctuations in the calculation of the ground-state energy.

In standard RPA the Green’s functions on the right-hand side of eq. (16) are not determined self-consistently, *i.e.*, the expectation values entering the Green’s functions themselves are determined using the mean-field ground state  $|\text{HF}\rangle$ . In our simple toy model we can obtain analytic expressions for the Green’s functions.

Note that from eqs. (5) we do not directly obtain Green’s functions like  $G_{x,x^2}$  or  $G_{p,p}$ , for example, since the operators  $x$ ,  $x^2$ , and  $p$  are not contained in our set of excitation operators  $\{b, b^\dagger, bb, b^\dagger b^\dagger\}$ . Hence, in order to apply eq. (16) to expectation values like  $\langle x^3 \rangle$  or  $\langle p^2 \rangle$ , the operators  $x$  and  $p$  are expressed in terms of  $b$  and  $b^\dagger$  (cf. eq. (12)), and the resulting expectation values like  $\langle bbb \rangle$ ,  $\langle b^\dagger bb \rangle$ ,  $\langle bb \rangle$ , etc., are obtained from the Green’s functions  $G_{b,bb}$ ,  $G_{b^\dagger,bb}$ ,  $G_{b,b}$ , etc.<sup>2</sup>. The short-hand notation  $G_{x^3}$  or  $G_{p^2}$  has to be understood as the corresponding linear combination of Green’s functions like  $G_{b,bb}$ ,  $G_{b^\dagger,bb}$ ,  $G_{b,b}$ , etc., needed for the calculation of  $\langle x^3 \rangle$  or  $\langle p^2 \rangle$ .

To determine  $E_0^{\text{RPA}}$  we need, in addition to  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle p^2 \rangle$ , and  $\langle x^3 \rangle$ , also the expectation value  $\langle x^4 \rangle$ . However,  $G_{x^4}$  contains Green’s functions of the type  $G_{b^\dagger,bbb}$ , that is,  $A \in \{b, b^\dagger, bb, b^\dagger b^\dagger\}$  is not sufficient to calculate  $\langle x^4 \rangle$ <sup>3</sup>. We, thus, approximate this term by a factorization:

$$\langle \text{RPA} | x^4 | \text{RPA} \rangle \simeq 3 \langle \text{RPA} | x^2 | \text{RPA} \rangle^2. \quad (17)$$

Finally, note that in the symmetric case ( $s = 0$ ), the three-operator expectation values vanish, which implies that the Green’s functions are the Hartree-Fock ones

$$i \int \frac{dE}{2\pi} G_{x^2}^{s=0}(E) = \langle \text{HF} | x^2 | \text{HF} \rangle \quad (18)$$

Hence, in this case the RPA energy is equal to the mean-field one.

In the literature the term RPA is used for a similar approximation to the Green’s functions as described above.

<sup>2</sup> Note that there is an ambiguity in the assignment of the time arguments to some of the Green’s functions. This does, however, not influence the results (see appendix A for a more detailed discussion).

<sup>3</sup> Since the excitation operators have to be non-Hermitian, two-particle operators of the form  $b^\dagger b$  are not allowed. Thus we cannot use, *e.g.*,  $G_{b^\dagger b, bb}$  to determine  $G_{x^4}$ .

But, it has to be mentioned that often the charging formula [4,15],

$$E_0 = E_{\text{HF}} + \int_0^1 \frac{d\lambda}{\lambda} \langle \lambda | \text{H}_{\text{int}}(\lambda) | \lambda \rangle, \quad (19)$$

is applied to determine the ground-state energy. Thereby  $\text{H}_{\text{int}}(\lambda) = \lambda \text{H}_{\text{int}}$  and the state  $|\lambda\rangle$  is defined as the ground state with respect to  $\text{H}(\lambda) = \text{H}_{\text{bare}} + \lambda \text{H}_{\text{int}}$ , where  $\text{H}_{\text{int}}$  is the interacting part of the Hamiltonian.

But, what we want to do is to compute directly  $\langle gs | \text{H} | gs \rangle$  with  $|gs\rangle = |\text{HF}\rangle, |\text{RPA}\rangle$  or  $|0\rangle$  (see next section) and compare the result obtained within the different approximations. Thus again,  $E_0^{\text{RPA}}$  is not the energy as understood in standard RPA but directly  $\langle \text{RPA} | \text{H} | \text{RPA} \rangle$ .

## 4 The renormalized RPA approach

What we want to do now is to go beyond the standard RPA approach and retain some of the correlations in the ground state. The starting point will be again the Bogoliubov transformation described in sect. 3. In contrast to standard RPA we will, however, not use the mean-field ground state  $|\text{HF}\rangle$  but a more complicated one denoted  $|0\rangle$ . This new ground state, which will not be constructed explicitly in the following, contains some correlations. Since we want to use the “best” one, the parameters  $\omega$  and  $s$  will be again determined by the minimization of the ground-state energy  $E_0 = \langle 0 | \text{H} | 0 \rangle$ . This leads to the generalized gap equations:

$$\frac{\partial E_0}{\partial s} = 0 \Leftrightarrow \langle 0 | [\text{H}, b] | 0 \rangle = 0, \quad (20)$$

$$\frac{\partial E_0}{\partial \omega} = 0 \Leftrightarrow \langle 0 | [\text{H}, b b^\dagger] | 0 \rangle = 0, \quad (21)$$

which are analogous to  $\langle 0 | [\text{H}, Q_\nu^\dagger] | 0 \rangle = 0$  with the formalism introduced in sect. 2. We may note that the equivalence between these formulas is no longer valid if we consider three particle excitation operators (see sect. 5 for further details).

More precisely, independent of the approximation made to include correlations in the ground state, the above equations will guarantee that the basis is the energetically most favored one within this approximation.

In the remaining part of this article we will assume that all expectation values of the type  $\langle 0 | bb | 0 \rangle, \langle 0 | bb^\dagger | 0 \rangle, \langle 0 | bbb^\dagger | 0 \rangle$ , etc. are real. This implies, for example, that  $\langle 0 | p x | 0 \rangle = -i/2$  or  $\langle 0 | p x^2 | 0 \rangle = 0$ , independently of the specific ground state used. Thus, the key point is to determine the remaining expectation values in the *a priori* unknown ground state  $|0\rangle$ . In renormalized RPA [12,16–18] this is achieved with the use of Green’s functions in the limit  $t \rightarrow t'$ . More precisely, we get self-consistency conditions for expectation values with two operators, *i.e.*,  $\langle 0 | x^2 | 0 \rangle$  and  $\langle 0 | p^2 | 0 \rangle$  from

$$\langle 0 | A B | 0 \rangle = i \int \frac{dE}{2\pi} G_{AB}(E). \quad (22)$$

In contrast to eq. (16), the expectation values entering the Green’s functions on the right-hand side of the above equation are determined self-consistently, *i.e.*, not within the Hartree-Fock ground state. The remaining expectation values are approximated using a factorization, *e.g.*,

$$\langle 0 | p^2 x^2 | 0 \rangle = \langle 0 | p^2 | 0 \rangle \langle 0 | x^2 | 0 \rangle + 2 \langle 0 | p x | 0 \rangle^2. \quad (23)$$

This means that the self-consistent procedure is limited to expectation values with at most two operators and that the correlated part of the expectation values with more than two operators is neglected [4]. Moreover, since  $\langle x \rangle$  vanishes, it follows immediately that terms with three operators such as, *e.g.*,  $\langle x^3 \rangle$  vanish.

As for the standard RPA analytic expressions for the Green’s functions can be given in terms of  $\langle x^2 \rangle, \langle p^2 \rangle$  and  $\langle p x \rangle$  (see appendix A). The latter expectation values have then, in principle, to be determined numerically via the self-consistency conditions, eq. (22). With these values at hand, we are able, in principle, to calculate the ground-state energy  $E_0$ . However, renormalized RPA is known to miss an important part of the correlation energy [19]. Besides, this method cannot be derived via a variational principle and, therefore, the Ritz criterion is no longer applicable. In fact, what happens in most cases, is that the ground state obtains overbinding [19]. In our case it is even worse since one can show that a contradiction with the virial theorem and the Heisenberg uncertainty principle occurs. To that end let us look at the explicit equation for  $\langle p^2 \rangle$ , which is obtained by integrating  $G_{p^2}(E)$ , given in eq. (A.6), over  $E$ . The result is

$$\begin{aligned} \langle p^2 \rangle &= i \int \frac{dE}{2\pi} G_{p^2}(E) = \epsilon^2 \langle x^2 \rangle \\ &+ i \frac{4(12sg)^2 \langle p^2 \rangle}{\epsilon^2} \int \frac{dE}{2\pi} \frac{1}{(E^2 - E_1^2)(E^2 - E_2^2)}, \end{aligned}$$

where  $\epsilon, E_1$  and  $E_2$  are defined in eq. (A.7). If we now look at the explicit form (eq. (A.9)) of the gap equation for  $\omega$ , we conclude that the second term on the right-hand side should vanish. However, this is only possible for  $\langle p^2 \rangle = 0$ , implying a vanishing kinetic energy. This is obviously not a physically reasonable solution as it is in contradiction to the virial theorem. Even if we forget for the moment this contradiction, the self-consistent procedure cannot give the right values for the occupation numbers and consequently for the energy. A possible way to circumvent that problem, that is to compute correctly the energy, is to use the “charging formula” as developed, *e.g.*, in [4]. It is applied in a similar way as in standard RPA (cf. sect. 3) to compute the correlation energy. The main difference is that we now have in principle a closed system of equations which have to be solved self-consistently. Following [4], one therefore replaces the gap equation concerning  $s$ , eq. (20), by a minimization of the ground-state energy obtained with the help of the charging formula (cf. eq. (19)). This has, of course, one disadvantage: One loses the symmetry of the double commutators, *i.e.*

$$\langle [b, [\text{H}, b^\dagger b^\dagger]] \rangle - \langle [b^\dagger b^\dagger, [\text{H}, b]] \rangle = \langle [\text{H}, b^\dagger] \rangle \neq 0. \quad (24)$$

This symmetry property, however, is crucial for the stability of the system [20]. We will therefore proceed in another direction.

## 5 The extended r-RPA approach

Instead of using the charging formula, our strategy to include further correlations in a minimal way will be as follows: We will abandon the factorization approximation for the lowest non-vanishing expectation values of products of more than two operators.

For the deformed case ( $s \neq 0$ ) this means that we will keep the values of  $\langle x^3 \rangle$  and  $\langle p^2 x \rangle$  (these are the only non-vanishing expectation values of three operators). Similar to  $\langle x^2 \rangle$  and  $\langle p^2 \rangle$ , their actual values are determined via the self-consistency conditions, eq. (22). With these expectation values at hand the ground-state energy is then obtained, as before, as the expectation value of the Hamilton operator (cf. eq. (13)):

$$E_0^{s \neq 0} = \frac{\langle p^2 \rangle}{2} + \frac{\mu^2}{2} (\langle x^2 \rangle + s^2) + g(3\langle x^2 \rangle^2 + s^4 + 6s^2\langle x^2 \rangle - 4s\langle x^3 \rangle) . \quad (25)$$

First of all we have to note that there is no longer any obvious contradiction with the virial theorem. Moreover, as we will see in the next section, as far as we are not too close to the “phase transition”, our results for the ground-state energy are very close to the exact ones, without any further manipulation, like, *e.g.*, the charging formula. This means  $\langle x^3 \rangle$  and  $\langle p^2 x \rangle$  contain already an important part of the so far missing correlations. This does not necessarily imply that we also reproduce the exact values for, *e.g.*,  $\langle x^2 \rangle$  or  $\langle p^2 \rangle$ . But the correlations are combined in such a way that the energy is determined very precisely within this approximation.

If we try to go further and include, *e.g.*, also the correlated part of expectation values with four operators, we face serious problems. To obtain the Green’s functions necessary to calculate  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle p^2 \rangle$ ,  $\langle px \rangle$ ,  $\langle x^3 \rangle$  and  $\langle p^2 x \rangle$  it suffices to restrict the space of excitation operators to  $A = \{b, b^\dagger, bb, b^\dagger b^\dagger\}$ , *i.e.*, two-particle excitations. As long as we stay in that space, the gap equations together with the assumption of real expectation values for  $\langle bb^\dagger \rangle$ , etc., guarantees the symmetry of the double commutators. As already discussed in sect. 3, we need Green’s functions of the type  $G_{b^\dagger, bbb}$  to obtain, *e.g.*,  $\langle x^4 \rangle$ . That is, three-particle excitation operators have to be included. In addition to the (practical) computational problems we encounter another difficulty: As mentioned in sect. 3, the Bogoliubov transformation contains only two parameters and consequently, including three particles implies *a priori* an approximation for the double commutators since there is no relation to enforce their symmetry. For instance, to ensure the following symmetry relation:

$$\langle [bb, [H, b^\dagger b^\dagger b^\dagger]] \rangle - \langle [b^\dagger b^\dagger b^\dagger, [H, bb]] \rangle = 6\langle [H, b^\dagger b^\dagger b] \rangle , \quad (26)$$

we needed an equation which guarantees  $\langle [H, b^\dagger b^\dagger b] \rangle = 0$ . As mentioned above the Bogoliubov transformation does

not provide us with an additional adjustable parameter. The assumption of a generalized gap equation of the form  $\langle [H, Q] \rangle = 0$  as used in many RPA approaches also did not help. In this context boson expansion techniques [3, 5], mapping a pair of bosons onto one new boson, could be helpful.

In the symmetric case  $s = 0$ , it is known that, by parity,  $\langle x^3 \rangle$  and  $\langle p^2 x \rangle$  vanish. Following the same underlying philosophy as in the deformed case, we are now led to include  $\langle x^4 \rangle$ ,  $\langle p^4 \rangle$  and  $\langle p^2 x^2 \rangle$ . This is, as stated above, a subtle task since the double commutators need no longer to be symmetric. Fortunately, this difficulty can be overcome: Although in principle there are inherent problems with the symmetry of the double commutators, one can explicitly check that all non-symmetric terms disappear for  $s = 0$ . This enables us to solve the Dyson equation without symmetrizing by hand (as it is often done in nuclear physics [20]). The corresponding Green’s functions are listed in appendix A. The expectation values  $\langle x^2 \rangle$ ,  $\langle p^2 \rangle$ ,  $\langle x^4 \rangle$ ,  $\langle p^4 \rangle$  and  $\langle p^2 x^2 \rangle$  are then determined self-consistently using eq. (22). In this case the ground-state energy is given by

$$E_0^{s=0} = \frac{\langle p^2 \rangle}{2} + \frac{\mu^2}{2} \langle x^2 \rangle + g\langle x^4 \rangle . \quad (27)$$

As can be seen in the next section, the numerical results for the ground-state energy are in very good agreement with the exact ones.

We have to emphasize that our approach is not fully self-consistent in the sense of SCRPA, although the expectation values of up to three or four operators, respectively, are calculated self-consistently. Let us mention one point which enlightens the difference of our method to the SCRPA approach used in ref. [11]. The authors use the following form for the RPA excitation operator:

$$Q^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} (\lambda b^\dagger b^\dagger - \mu bb) . \quad (28)$$

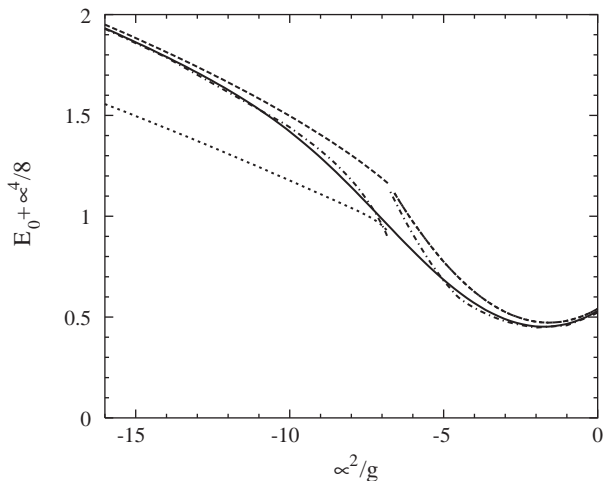
This relation is easily inverted to give  $bb$  and  $b^\dagger b^\dagger$  in terms of  $Q^\dagger$  and  $Q$ . Then the relation

$$Q|\text{SCRPA}\rangle = 0 \quad (29)$$

can be applied to show that, *e.g.*,  $\langle bb \rangle$  vanishes. Our excitation operator contains in addition one- and three-particle operators, proportional to  $b, b^\dagger$  and  $bbb, b^\dagger b^\dagger b^\dagger$ , respectively. This renders the inversion less obvious and we, therefore, cannot directly make use of eq. (29). Thus, *a priori*, we have to calculate several expectation values which can be shown to vanish within the SCRPA formalism of ref. [11]. The SCRPA results for the ground-state energy in the symmetric case are also in very good agreement with the exact ones [11].

## 6 Numerical results

This section is devoted to a discussion of the numerical results. In fig. 1 the energy of the ground state is displayed



**Fig. 1.** Exact solution for the ground-state energy (solid line), mean-field solution (dashed line), RPA solution (dotted line) and our extended r-RPA solution (dashed-dotted line) as a function of  $\mu^2/g$  with  $g = 0.5$ . Following [10], we added  $\mu^4/8$  in order to have positive energies. In the region where  $s = 0$  the mean-field and the RPA solution coincide (see text).

within the different approaches (exact result, mean-field, RPA, and our extended r-RPA result) as a function of  $\mu^2/g$ . Of course, even the mean-field result is in reasonable agreement with the exact results (10% at worst). The largest discrepancy can be observed in the region near the “phase transition” at  $\mu^2/g \approx -6.8$ , *i.e.*, where  $s$  jumps from some value  $s \neq 0$  to  $s = 0$ . This is also the case for the RPA and our r-RPA approach. But the figure clearly shows that the correlations incorporated in our approach are important: The agreement with the exact result is much better than in mean field or RPA and discrepancies show up only in a very small region. Note that, the curve obtained within our approach is not continuous at the transition point. This is of course due to the difference in approximations made in the two domains: In one case,  $s \neq 0$ , one has incorporated the effect of  $\langle x^3 \rangle$  and  $\langle p^2 x \rangle$ , whereas in the other case,  $s = 0$ , we have included correlations in  $\langle x^4 \rangle$ ,  $\langle p^4 \rangle$  and  $\langle p^2 x^2 \rangle$ . Near the transition, also higher-order correlations become important, and we therefore miss the exact result near the transition point.

Before we come to the conclusion, we would like to give one explicit example concerning the difference of our approach to the SCRPA: For  $\mu^2/g = -1$ , we obtain  $\langle b^\dagger b b b \rangle = -0.033$  and  $\langle b^\dagger b^\dagger b b \rangle = 0.026$ , *i.e.*, both expectation values are of the same order of magnitude. In the SCRPA approach used in ref. [11] the former expectation value vanishes identically.

## 7 Conclusion

We have considered an extended version of renormalized RPA that yields values of high accuracy for the ground-state energy of the anharmonic oscillator. Moreover, the self-consistent procedure developed here removes contradictions present in renormalized RPA, that is  $\langle x^2 \rangle$  and

$\langle p^2 \rangle$  can be determined without evidently violating the virial theorem or the Heisenberg uncertainty principle.

This means that the correlations included,  $\langle x^3 \rangle$  and  $\langle p^2 x \rangle$  for  $s \neq 0$  and  $\langle x^4 \rangle$ ,  $\langle p^4 \rangle$  and  $\langle p^2 x^2 \rangle$  for  $s = 0$ , represent the most important part of the correlations missed in renormalized RPA. Furthermore, the systematics of the method allow us to think that it can be easily applied to quantum field theory and cure some of the problems which emerged in the work of ref. [4]. One problem of our approach, on which we certainly should improve, is the fact that we do not have a unified approach for the two cases  $s = 0$  and  $s \neq 0$ .

Of course, it should be mentioned that there exist other powerful methods such as CCM (Coupled Cluster Method) [10] that describe very accurately the properties of the anharmonic oscillator. For problems concerning quantum chemistry or solid state physics, this technically and numerically very involved method and its extensions (see [10] for further details) are probably the most precise and well suited. Actually, the approach developed in this paper probably cannot compete with CCM in all these situations. Nevertheless, it has the great advantage to identify clearly the underlying physics (correlations) and to be very easy to use.

We gratefully acknowledge stimulating discussions with Z. Aouissat and A. Rabhi. We also would like to thank G. Chanfray and P. Schuck for their constant interest in this work. One of us (M.O.) would like to thank the Alexander von Humboldt foundation for financial support.

## Appendix A. Explicit expressions for the Green’s functions

We present here the analytical results for the various Green’s functions needed throughout the calculation. Note that the Green’s functions listed below do not directly emerge from the solution of the system of eqs. (5) but we have to re-express operators containing  $x$  and  $p$  with  $b$  and  $b^\dagger$ , cf. eqs. (12). For instance

$$G_{:x^4:}(E) = \frac{1}{4\omega^2} G_{:(b+b^\dagger)^4:}(E) = \frac{1}{4\omega^2} (G_{bb,bb}(E) + G_{b^\dagger b^\dagger, b^\dagger b^\dagger}(E) + 2G_{b^\dagger b^\dagger, bb}(E) + 4G_{b^\dagger, bbb}(E) + 4G_{b^\dagger b^\dagger b^\dagger, b}(E) + 4G_{b^\dagger b^\dagger, bb}(E)). \quad (\text{A.1})$$

One point is worth noting: We are dealing (in configuration space) with two-time Green’s functions and the notation  $G_{A,B}(E)$  indicates that the time arguments for the corresponding Fourier transformed quantity  $G_{A,B}(t-t')$  are assigned as  $A(t), B(t')$ . This means that there is an ambiguity in the assignment of time arguments to the Green’s functions which contain more than two operators. In most cases this can be overcome by the fact that our excitation operators are limited to non-Hermitian ones, *i.e.* an operator like  $b^\dagger(t)b(t)$  cannot exist. But,  $G_{bb,bb}(E)$  as well as  $G_{b,bbb}(E)$  do exist and in general they do not lead

to the same expression. We are, however, only interested in the limit  $t \rightarrow t'$  to determine the expectation values at equal times. In this limit all functions coincide.

### Appendix A.1. Symmetric case

In the symmetric case, *i.e.*,  $s = 0$ , we obtain

$$\begin{aligned}
G_{x^2}(E) &= \frac{(E^2 - \Sigma_{33}) - 9\frac{(\eta-\nu)\sigma^2}{4\alpha_3^2\omega}}{(E^2 - E_1^2)(E^2 - E_2^2)}, \\
G_{p^2}(E) &= \frac{\epsilon^2(E^2 - \Sigma_{33}) - 9\frac{(\eta+\nu)(\lambda-\omega^3\sigma)}{4\alpha_3^2\omega^5}}{(E^2 - E_1^2)(E^2 - E_2^2)}, \\
G_{:x^4:}(E) &= \frac{1}{4\omega^2} \left( -\frac{2(\lambda - 2g\omega + 3\omega^3(\alpha_2 E + \Omega))}{\omega^3(E^2 - E_{01}E_{02})} \right. \\
&\quad \left. + \frac{\tau}{4\alpha_3^2\omega^6(E^2 - E_1^2)(E^2 - E_2^2)} \right), \\
G_{:p^4:}(E) &= \frac{\omega^2}{4} \left( -\frac{2(\lambda - 2g\omega + 3\omega^3(\alpha_2 E + \Omega))}{\omega^3(E^2 - E_{01}E_{02})} \right. \\
&\quad \left. - \frac{\tau}{4\alpha_3^2\omega^6(E^2 - E_1^2)(E^2 - E_2^2)} \right), \\
G_{:p^2x^2:}(E) &= \frac{\alpha_2}{2\omega^3} \frac{E + E_{02}}{E^2 - E_{01}E_{02}}, \tag{A.2}
\end{aligned}$$

where we have defined the following abbreviations:

$$\begin{aligned}
\epsilon^2 &= \mu^2 + 12g\langle x^2 \rangle, \\
\alpha_2 &= \frac{\langle p^2 \rangle + \omega^2\langle x^2 \rangle}{2\omega}, \\
\alpha_3 &= \frac{9}{2} \langle : p^2 x^2 : \rangle - 3 + \frac{9}{4\omega^2} (\langle : p^4 : \rangle + 4\langle p^2 \rangle\omega \\
&\quad + 4\omega^3\langle x^2 \rangle + \omega^4\langle : x^4 : \rangle), \\
\sigma &= \langle p^2 \rangle - \omega^2\langle x^2 \rangle, \\
\lambda &= 2g \left( -3\langle p^2 \rangle(1 - 2\omega\langle x^2 \rangle) + \omega(-2 \right. \\
&\quad \left. - 6\langle : p^2 x^2 : \rangle + 3\omega(5\langle x^2 \rangle - 2\omega\langle x^2 \rangle^2 \right. \\
&\quad \left. + 2\omega\langle : x^4 : \rangle)) \right) + \omega(\omega^2 - \epsilon^2)\sigma, \\
\Sigma_{33} &= \frac{\eta^2 - \nu^2}{\alpha_3^2}, \\
\eta &= \langle [bbb, [\mathbf{H}, b^\dagger b^\dagger b^\dagger]] \rangle, \\
\nu &= \langle [bbb, [\mathbf{H}, bbb]] \rangle, \\
\Omega &= \frac{1}{\omega^3} \left( \lambda - 4\omega^3(\langle p^2 \rangle + \epsilon^2\langle x^2 \rangle) + 22g\omega \right. \\
&\quad \left. + 16\omega^2g(-6\langle x^2 \rangle + 3\omega\langle x^2 \rangle^2 - 2\omega\langle : x^4 : \rangle) \right), \\
\tau &= 6\alpha_3 \left( 9\lambda^2\sigma + \lambda(-27\sigma^2 + 4(\alpha_3 E + \eta + \nu) \right. \\
&\quad \times (E - \omega)\omega^3 + 2\sigma\omega^5 (\omega(-4E(\alpha_3 E + \eta) + 9\sigma^2 \\
&\quad + 2(\alpha_3 E + \eta + \nu)\omega) + 2(\alpha_3 E + \eta - \nu)\epsilon^2) \left. \right), \\
E_{01,2} &= \frac{\Omega}{\alpha_2} \pm \frac{\lambda - 2g\omega}{\alpha_2\omega^3}. \tag{A.3}
\end{aligned}$$

The energies  $E_1^2$  and  $E_2^2$  are the solution of the following equation:

$$\begin{aligned}
E^4 &+ \frac{E^2}{4\alpha_3\omega^3} (18\sigma(\lambda - \sigma\omega^3) - 4\alpha_3\omega^3(\Sigma_{33} + \epsilon^2)) \\
&+ \frac{1}{16\alpha_3^2\omega^6} ((81\sigma^2 + 36\omega(\eta + \nu))(\lambda - \sigma\omega^3)^2 \\
&+ \epsilon^2\omega^5(36\sigma^2(\eta - \nu) + 16\alpha_3^2\omega\Sigma_{33})) = 0. \tag{A.4}
\end{aligned}$$

$\langle x^3 \rangle$  and  $\langle p^2 x \rangle$  vanish because of parity.  $\langle : \mathcal{O} : \rangle$  denotes the expectation value of the normal ordered product of the operator  $\mathcal{O}$ . If  $|\text{HF}\rangle$  is taken as ground state, those expectation values obviously vanish and  $\langle x^2 \rangle = 1/(2\omega)$ ,  $\langle p^2 \rangle = \omega/2$ . From the gap equations, eqs. (20),(21), we obtain the following condition:

$$\begin{aligned}
\omega^2(\langle p^2 \rangle - \epsilon^2\langle x^2 \rangle) + 3g - 12g\omega\langle x^2 \rangle(1 - \omega\langle x^2 \rangle) \\
- 4g\omega^2\langle : x^4 : \rangle = 0. \tag{A.5}
\end{aligned}$$

### Appendix A.2. Deformed case

In the deformed case, *i.e.*  $s \neq 0$ , we obtain

$$\begin{aligned}
G_{x^2}(E) &= \frac{E^2 - \frac{\beta\kappa}{\alpha_2^2}}{(E^2 - E_1^2)(E^2 - E_2^2)} = \\
&\quad \frac{1}{E^2 - \epsilon^2 + \frac{9g^2\delta^2(\beta-\kappa)}{\omega^2\alpha_2^2} \frac{1}{E^2 - \frac{\beta\kappa}{16\omega^4\alpha_2^2}}}, \\
G_{p^2}(E) &= \epsilon^2 G_{x^2}(E) + \frac{288\delta^2 g^2 \kappa}{\alpha_2^2} \frac{1}{(E^2 - E_1^2)(E^2 - E_2^2)}, \\
G_{:x^3:}(E) &= -\frac{6\delta g (\alpha_2^2 E^2 + 4\omega\kappa + 3E(\kappa + \alpha_2\omega))}{\alpha_2\omega^2(E^2 - E_1^2)(E^2 - E_2^2)}, \\
G_{:p^2x:}(E) &= \frac{6\delta g (\alpha_2^2 E^2 - E(\kappa + \alpha_2\omega))}{\alpha_2(E^2 - E_1^2)(E^2 - E_2^2)}, \tag{A.6}
\end{aligned}$$

where we have introduced in addition the following abbreviations:

$$\begin{aligned}
\epsilon^2 &= \mu^2 + 12g(s^2 + \langle x^2 \rangle), \\
\beta &= 4(\langle p^2 \rangle + \langle x^2 \rangle)(\epsilon^2 + 12g\langle x^2 \rangle) - 18gs\langle : x^3 : \rangle, \\
\delta &= 2s\langle x^2 \rangle - \langle : x^3 : \rangle, \\
\kappa &= 2 \left( \langle p^2 \rangle \left( 1 + \frac{\epsilon^2}{\omega^2} \right) - 12gs\langle : x^3 : \rangle + (\omega^2 + \epsilon^2)\langle x^2 \rangle \right. \\
&\quad \left. - \frac{24g}{\omega^2} \langle : p^2 x : \rangle s \right), \\
E_{1,2}^2 &= \frac{1}{2} \left( \epsilon^2 + \frac{\beta\kappa}{\alpha_2^2} \pm \sqrt{\left( \epsilon^2 - \frac{\beta\kappa}{\alpha_2^2} \right)^2 + 8(12g\delta)^2 \frac{\kappa}{\alpha_2^2}} \right). \tag{A.7}
\end{aligned}$$

In this case we end up with two gap equations, one determining the value of  $s$ ,

$$s^3 + s \left( 3\langle x^2 \rangle + \frac{\mu^2}{4g} \right) - \langle : x^3 : \rangle = 0, \tag{A.8}$$

and another one concerning  $\omega$ ,

$$\langle p^2 \rangle = \epsilon^2 \langle x^2 \rangle - 12g_s \langle : x^3 : \rangle. \quad (\text{A.9})$$

Note that the expression for  $G_{x^2}(E)$  given in eq. (A.6) can be interpreted as a free “propagator” with an additional “self-energy” depending on  $E$ . Similar interpretations are possible for all the other expressions.

## References

1. J.M. Häuser, W. Cassing, A. Peter, M.H. Thoma, Z. Phys. A **353**, 301 (1995).
2. Z. Aouissat, G. Chanfray, P. Schuck, J. Wambach, Nucl. Phys. A **603**, 458 (1996).
3. Z. Aouissat, P. Schuck, J. Wambach, Nucl. Phys. A **618**, 402 (1997).
4. H. Hansen, G. Chanfray, D. Davesne, P. Schuck, Eur. Phys. J. A **14**, 397 (2002).
5. Z. Aouissat, Phys. Rev. C **62**, 012201 (2000).
6. M. Oertel, M. Buballa, J. Wambach, Phys. At. Nucl. **64**, 698 (2001).
7. G. Röpke, Z. Phys. B **99**, 83 (1995); J. Dukelsky, P. Schuck, Phys. Lett. B **387**, 233 (1996).
8. S. Schäfer, P. Schuck, Phys. Rev. B **59**, 1712 (1999).
9. A. Rabhi, P. Schuck, R. Bennaceur, G. Chanfray, J. Dukelsky, preprint nucl-th/0208037.
10. R.F. Bishop, M.F. Flynn, Phys. Rev. A **38**, 2211 (1988).
11. J. Dukelsky, P. Schuck, Nucl. Phys. A **512**, 466 (1990); Mod. Phys. Lett. A **6**, 2429 (1991).
12. D.J. Rowe, Rev. Mod. Phys. **40**, 153 (1968); *Nuclear Collective Motion* (Methuen, London, 1970).
13. P. Schuck, S. Ethofer, Nucl. Phys. A **212**, 269 (1973).
14. P. Schuck, J. Dukelsky, G. Röpke, *The Dyson equation approach to many body Green's functions*, in *Proceedings of the VI Hispalensis International Summer School, Oromana (Spain) June 1997* (World Scientific, Singapore, 1998).
15. A.L. Fetter, J.D. Walecka *Quantum Theory of Many-Particle Systems* (McGraw-Hill, New York, 1971).
16. K. Hara, Progr. Theor. Phys. **32**, 88 (1964).
17. F. Catara, N. Dinh Dang, M. Sambatoro, Nucl. Phys. A **579**, 1 (1994).
18. J. Toivanen, J. Suhonen, Phys. Rev. Lett. **75**, 410 (1995).
19. J.G. Hirsch, A. Mariano, J. Dukelsky, P. Schuck Ann. Phys. (N.Y.) **296**, 187 (2002).
20. M. Tohyama, P. Schuck, in preparation.





---

## Conclusion

---

Un sujet de préoccupation majeur de la physique nucléaire actuelle est de comprendre le comportement de la matière hadronique chaude et dense. Cette matière, déjà produite au CERN et à RHIC lors de collisions entre ions lourds ultra-relativistes, va être créée en grande quantité dans un avenir proche avec l'avènement du LHC. De par sa densité et de par la température qui y règne, elle est le siège de comportements différents de ceux observés à basse énergie. Ainsi, par exemple, observe-t-on des modifications importantes des propriétés des hadrons (masse, propagation, interaction) et des phénomènes plus généraux tels que la restauration (partielle) de la symétrie chirale. Beaucoup de données expérimentales comme les spectres en dileptons (CERES) ou encore les spectres de pions (CHAOS) ont d'ailleurs pu être interprétées en ce sens.

La quantité importante à considérer pour l'étude de la restauration de la symétrie chirale est sans conteste le paramètre d'ordre, à savoir le condensat de quarks  $\langle \bar{q}q \rangle$ . En pratique, il s'agit de déterminer son évolution en fonction de la température et/ou de la densité. Dans ce travail, nous avons pu montrer que cette évolution était directement conditionnée par celle de la densité scalaire de pions. Cette dernière avait déjà été introduite dans des travaux antérieurs dans ce que l'on appelle le mélange axial-vecteur à température finie. Ce mélange a pour conséquence directe que la réponse d'un système à une sonde vectorielle est contaminée par une composante axiale. Ici, le rôle de la densité scalaire a été étendu pour prendre en compte les effets liés à la densité, les pions virtuels du nuage nucléonique remplaçant les pions du bain thermique. Nous avons ainsi explicitement relié la densité scalaire de pions à la réponse de spin-isospin longitudinale. Il a alors été possible de déterminer quantitativement l'effet simultané de la température et de la densité sur le condensat de quarks. Le résultat principal que nous avons obtenu est que les pions virtuels contribuent pour une part importante. Par ailleurs, nous nous sommes également intéressés, dans le cadre de cette thématique sur la restauration de la symétrie chirale, à la modification de l'interaction pion-pion dans le canal scalaire-isoscalaire. En effet, avant de parvenir à une restauration complète, c'est-à-dire à un état dans lequel les partenaires chiraux doivent être dégénérés, nous allons assister à une restauration progressive de la symétrie qui doit se traduire par un adoucissement du mode collectif scalaire-isoscalaire, c'est-à-dire du méson sigma. La fonction spectrale de celui-ci doit donc augmenter de manière significative au niveau de l'énergie de seuil du canal de désintégration en deux pions. Ce phénomène avait déjà été observé en incluant uniquement les effets de modes collectifs pioniques dans le milieu. Nous avons pu montrer qu'il était en réalité beaucoup

plus prononcé lorsque l'on prenait en compte les effets liés à la restauration de la symétrie chirale comme par exemple la diminution de la masse du sigma dans le milieu. Du point de vue pratique, nous avons généré, à densité finie, un potentiel pion-pion à partir d'un modèle effectif de quarks (modèle de Nambu-Jona-Lasinio) dans lequel les masses du pion et du sigma ainsi que la constante de désintégration du pion variaient en fonction de la densité. Ensuite, partant de ce potentiel, nous avons alors inclus les effets collectifs pioniques.

Tout ce qui vient d'être décrit concerne la matière nucléaire à l'équilibre. Ceci constitue une approximation relativement correcte dans la plupart des expériences dans le sens où le temps de vie des systèmes créés est relativement important. Cela signifie que la matière évolue dans un état d'équilibre local. Mais, même si les effets dynamiques sont donc négligés avec une bonne approximation, il est important de souligner qu'ils peuvent également contribuer à fournir des informations intéressantes sur la matière elle-même. Par exemple, la connaissance des coefficients de transport en fonction de la température donne des renseignements sur l'exposant critique dynamique associé et par conséquent sur la transition de phase. Dans ce travail, nous nous sommes attachés dans un premier temps à prendre en compte explicitement les modifications de la théorie hydrodynamiques dues à la brisure spontanée de la symétrie chirale. Il est en effet fondamental d'inclure au niveau des modes hydrodynamiques non seulement les quantités conservées mais également les modes de Goldstone. Nous avons ainsi pu montrer que la description hydrodynamique d'un gaz de pion nécessitait quatorze équations et que l'analyse complète des propriétés dissipatives faisait intervenir un nombre de coefficients de transport bien plus important que pour le fluide ordinaire ou même le superfluide (brisure de la symétrie  $U(1)$ ). Dans un schéma relativement simple de description des collisions d'ions lourds ultra-relativistes (modèle de Bjorken à 1+1 dimensions), nous avons cherché à estimer quantitativement les effets de la brisure spontanée de symétrie et de la dissipation sur l'évolution du profil de température. Le résultat est que seule la dissipation modifie notablement la température, impliquant un refroidissement plus lent de la matière hadronique.

Comme je l'ai déjà mentionné, la matière hadronique chaude et dense produite dans les collisionneurs, est le siège de comportements nouveaux par rapport à ceux observés à plus basse énergie. Cela implique donc obligatoirement le développement de techniques, de théories permettant de faire le lien entre les différentes gammes d'énergie. Une possibilité est évidemment d'essayer d'étendre les modèles effectifs existant déjà. Une autre possibilité, peut-être plus intéressante du point de vue de son champ d'application, est de développer au niveau formel de nouveaux schémas de calcul issus du problème à  $N$  corps afin d'obtenir des outils mieux adaptés. Dans ce cadre, je me suis intéressé à différentes techniques du problème à  $N$  corps. En tout premier lieu, à travers l'étude de la diffusion de l'iode dans le zirconium, j'ai utilisé la Théorie de la Fonctionnelle de la Densité (DFT). Cette théorie, fondée sur une description non relativiste de système de fermions en interaction, nous a permis de déterminer que le coefficient de diffusion de l'iode dans le zirconium était très faible, ce qui rend *a priori* possible le stockage à long terme des déchets nucléaires. Dans un second temps, avec le souci de pouvoir l'appliquer ultérieurement à la symétrie chirale et à des théories de jauge, nous avons développé, à travers l'exemple simple du champ scalaire en auto-interaction, un formalisme allant au-delà de la RPA standard. Cela

signifie concrètement que nous avons inclu dans nos calculs des corrélations absentes dans l'approche standard. Nous avons alors constaté que les instabilités présentes au niveau de la RPA disparaissaient et que l'ordre de la transition de phase entre, d'une part, la phase symétrique et, d'autre part, la phase déformée, se rapprochait du résultat exact (transition du deuxième ordre). Malgré ces résultats encourageants, des problèmes spécifiques aux théories bosoniques sont apparus clairement. Afin de comprendre leur origine, nous sommes revenus à un modèle de mécanique quantique habituel, l'oscillateur anharmonique à une dimension. Nous avons alors pu construire explicitement une approche permettant d'inclure exactement les corrélations à deux, trois, voire même quatre champs dans la phase symétrique, de manière cohérente. Malheureusement, la transposition stricte de cette méthode à la théorie quantique des champs pose pour le moment des problèmes techniques que nous n'avons pas encore résolus. Je pense néanmoins que de telles méthodes permettant d'aborder de manière non perturbative les différents problèmes posés par la physique hadronique actuelle sont très prometteuses. Ainsi, dans cet esprit, il est prévu d'essayer de construire une théorie qui, s'appuyant sur des contraintes phénoménologiques bien établies à basse température et/ou densité, permette d'obtenir des prédictions lorsque l'on se rapproche de la transition de phase chirale. Plus précisément, le but est d'utiliser le groupe de renormalisation pour raccorder des fonctions de corrélation issues d'une théorie phénoménologique à la théorie fondamentale, la QCD et ainsi établir un pont entre les différents domaines d'énergie et obtenir des informations de nature non-perturbative.