

Bosons en interaction dans une boîte Transformation de Bogolubov

① Introduction

- Dans les 2 cours précédents V et VI, on s'est intéressé uniquement à l'état fondamental d'un système de N bosons piégés à $T = 0^\circ \text{K}$. De plus, cet état fondamental a été déterminé de manière approchée à partir d'une méthode variationnelle qui décrit le mouvement de chaque particule dans le champ moyen créé par les $N-1$ autres et qui néglige les corrélations entre particules; les fonctions d'essai sont des fonctions produits.
- Ce cours VII présente une approche plus élaborée, l'approche de Bogolubov. Cette approche fournit des informations plus précises sur l'état fondamental, en particulier sur les corrélations qui existent dans cet état. Elle donne également les premiers états excités du système qui ne sont autres que les excitations élémentaires du système de bosons auxquelles on peut associer des "quasiparticules".
- Le cas des bosons enfermés dans une boîte (système appelé "homogène" ou "uniforme") est plus simple à traiter que celui des bosons piégés dans un potentiel extérieur (où la densité varie dans l'espace et est donc inhomogène). Des prédictions analytiques peuvent en particulier être obtenues à partir de l'approche de Bogolubov. Nous commencerons donc par étudier ce cas. Nous aborderons ensuite le problème des excitations élémentaires d'un gaz de bosons piégés dans un potentiel harmonique.
- Nous supposons, comme dans les cours précédents, que les atomes interagissent par un potentiel $V(r)$ ne dépendant que de leur distance et nous ignorons les collisions à 3 corps. La plupart des expressions sont écrites en supposant $V(r)$ quelconque et traitable à l'approximation de Born. Si cette approximation n'est pas valable pour $V(r)$, il faut remplacer $V(r)$ par le pseudopotentiel V_{pseudo} de même longueur de diffusion (cf cours IV). La plupart du temps, on peut d'ailleurs remplacer V_{pseudo} par un potentiel en fonction

delta V_g , car les 2 opérateurs ont les mêmes éléments de matrice entre fonctions d'onde n'ayant pas de comportement singulier en $r=r'$. Des précautions sont cependant nécessaires quand apparaissent des problèmes de convergence non uniforme (voir cours IV).

- Nous supposons ici que la longueur de diffusion a du potentiel est positive. Contrairement à ce qui se passe dans un piège, le gaz de bosons ne serait pas stable en présence d'interactions effectives attractives caractérisées par une longueur de diffusion $a < 0$.

② Hamiltonien du système en seconde quantification

- Comme nous supposons ici $V_{ext}(\vec{r}) = 0$, le Hamiltonien H du système s'écrit dans le formalisme usuel :

$$H = \sum_{i=1}^N \frac{\vec{p}_i^2}{2m} + \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} V(\vec{r}_i - \vec{r}_j) \quad (7.1)$$

Les particules sont numérotées. H est complètement symétrique.

- Dans le formalisme de la seconde quantification, on travaille dans un espace de Fock où les états de base du système sont repérés par les nombre d'occupation $n_\alpha, n_\beta \dots$ d'une base d'états individuels $\varphi_\alpha, \varphi_\beta \dots$. les opérateurs du système s'expriment comme des sommes de produits d'opérateurs d'annihilation $a_\alpha, a_\beta \dots$ détruisant une particule dans l'état $\varphi_\alpha, \varphi_\beta \dots$ et d'opérateurs de création $a_\alpha^+, a_\beta^+ \dots$ créant une particule dans ces états. Les propriétés de symétrie des états imposées par le postulat de symétrisation entraînent des relations de commutation pour les a et a^+

$$[a_\alpha, a_\beta^+] = \delta_{\alpha\beta} \quad (7.2)$$

tous les autres commutateurs étant nuls

- Ainsi, tout opérateur à 1 particule (somme symétrique d'opérateurs à 1 particule) de la forme

$$F = \sum_{i=1}^N f(i) \quad (7.3)$$

devient en seconde quantification

$$F = \sum_{\alpha} \sum_{\beta} a_{\beta}^+ a_{\alpha} \langle \varphi_{\beta} | f | \varphi_{\alpha} \rangle \quad (7.4)$$

Tout opérateur à 2 particules de la forme

$$G = \frac{1}{2} \sum_i \sum_{j \neq i} g(i, j) \quad (7.5)$$

avec $g(i, j) = g(j, i)$, devient

$$V = \frac{1}{2} \sum_{\alpha} \sum_{\beta} \sum_{\gamma} \sum_{\delta} a_{\delta}^{\dagger} a_{\gamma}^{\dagger} a_{\beta} a_{\alpha} \langle \delta \gamma | g | \beta \alpha \rangle \quad (7.6)$$

où $\langle \delta \gamma | g | \beta \alpha \rangle$ est l'élément de matrice de g entre les états représentés sur la figure 1

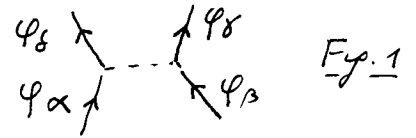


Fig. 1

- Notons que dans (7.4) or (7.6), tout numéro de particule (non physique) a disparu et que les sommations portent sur les états individuels $\alpha, \beta \dots$ et non plus sur les numéros.
- Appliquons maintenant un tel formalisme à l'opérateur H écrit en (7.1).

Terme d'énergie cinétique

- L'opérateur $\vec{p}^2/2m$ individuel est diagonal dans une base d'ondes planes.
- Nous prendrons des conditions aux limites périodiques dans une boîte de côté L . Les états de base $|\vec{k}\rangle$ sont donc décrits par les fonctions d'onde normalisées

$$\langle \vec{r} | \vec{k} \rangle = \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} \quad (7.7)$$

où les composantes $k_{x,y,z}$ de $\vec{k}$ sont de la forme

$$k_{x,y,z} = \frac{2\pi}{L} n_{x,y,z} \quad (7.8)$$

$n_{x,y,z}$ étant un entier ≥ 0 .

- Dans cette base, l'opérateur d'énergie cinétique (1^{er} terme du second membre de (7.1)) s'écrit, compte tenu de (7.4)

$$H_{\text{cin}} = \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}}^{\dagger} a_{\vec{k}} \quad (7.9)$$

Terme d'interaction - Potentiel $V(r)$ quelconque

- Dans la base de l'opérateur position $\{|\vec{r}\rangle\}$, le dernier terme de (7.1) devient en seconde quantification

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{2} \iint d^3r d^3r' \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}) \hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}') V(\vec{r}-\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r}) \hat{\psi}(\vec{r}') \quad (7.10)$$

où $\hat{\psi}(\vec{r})$ [resp. $\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r})$] est l'opérateur de destruction [resp. de création] d'une particule au point $\vec{r}$.

- $\hat{\psi}(\vec{r})$ et $\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r})$ se développent sur les $a_{\vec{k}}$ et $a_{\vec{k}}^{\dagger}$

$$\hat{\psi}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{L^{3/2}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} a_{\vec{k}} \quad (7.11)$$

$$\hat{\psi}^{\dagger}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \frac{1}{L^{3/2}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{r}} a_{\vec{k}}^{\dagger} \quad (7.12)$$

- Reportons (7.11) et (7.12) dans (7.10), et introduisons les variables

$$\vec{R} = \frac{\vec{r} + \vec{r}'}{2} \quad \vec{s} = \vec{r} - \vec{r}' \quad (7.13)$$

L'invariance par translation de V qui ne dépend que de $s = |\vec{s}|$ entraîne que le produit des 4 opérateurs apparaissant dans (7.6) $a_{\vec{k}_4}^+ a_{\vec{k}_3}^+ a_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}$ est tel que $\vec{k}_3 + \vec{k}_4 = \vec{k}_1 + \vec{k}_2$. L'intégration sur $\vec{R}$ fait en effet apparaître $\delta_{\vec{k}_3 + \vec{k}_4 - \vec{k}_1 - \vec{k}_2}$ qui traduit la conservation de l'impulsion globale. Reste l'intégration sur $\vec{s}$ qui fait apparaître la transformée de Fourier spatiale de V

$$\tilde{V}(\vec{k}) = \int d^3s e^{-i\vec{k} \cdot \vec{s}} V(s) \quad (7.14)$$

Finalement, on obtient pour H_{int}

$$H_{int} = \frac{1}{2L^3} \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2, \vec{k}} \tilde{V}(\vec{k}) a_{\vec{k}_1}^+ a_{\vec{k}_2}^+ a_{\vec{k}_2 + \vec{k}} a_{\vec{k}_1 - \vec{k}} \quad (7.15)$$

Terme d'interaction - Pseudopotentiel

- L'équation (7.10) s'écrit maintenant, compte tenu de la définition (4.22) de V_{pseudo}

$$H_{int} = \frac{1}{2} g \iint d^3r d^3r' \hat{\psi}^+(\vec{r}) \hat{\psi}^+(\vec{r}') \delta(\vec{r} - \vec{r}') \frac{\partial}{\partial s} [s \hat{\psi}(\vec{r}') \hat{\psi}(\vec{r})] \quad (7.16)$$

où $s = |\vec{r} - \vec{r}'|$

- Comme plus haut, reportons (7.11) et (7.12) dans (7.16). Passons des variables $\vec{r}, \vec{r}'$ aux variables $\vec{R}, \vec{s}$ écrites en (7.13). L'intégration sur $\vec{R}$ fait apparaître la conservation de l'impulsion globale. On obtient alors

$$H_{int} = \frac{1}{2L^3} g \int d^3s \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}^+ a_{\vec{k}_2}^+ \delta(\vec{s}) \left[\frac{\partial}{\partial s} s \sum_{\vec{k}} a_{\vec{k}_2 + \vec{k}} a_{\vec{k}_1 - \vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{s}} \right] \quad (7.17)$$

Lors de l'intégration sur s , la présence de $\delta(\vec{s})$ entraîne qu'il faut prendre la valeur du crochet en $s=0$ et l'on obtient finalement

$$H_{int} = \frac{1}{2L^3} g \sum_{\vec{k}_1, \vec{k}_2} a_{\vec{k}_1}^+ a_{\vec{k}_2}^+ \left[\frac{\partial}{\partial s} s \sum_{\vec{k}} e^{-i\vec{k} \cdot \vec{s}} a_{\vec{k}_2 + \vec{k}} a_{\vec{k}_1 - \vec{k}} \right]_{s=0} \quad (7.18)$$

- Dans les éléments de matrice de H_{int} , on tombe sur l'action de $\frac{\partial}{\partial s} s$ sur des sommes de fonctions de s évaluées en $s=0$. Si les développements correspondants sont uniformément convergents, on trouve le même résultat que si l'on avait utilisé $V_g = g \delta(\vec{r})$ au lieu de V_{pseudo} , ce qui revient à remplacer $\tilde{V}(\vec{k})$ par g dans (7.15). Sinon, les 2 résultats sont différents et, seuls, ceux obtenus avec V_{pseudo} sont corrects (cf cours IV).

③ Calcul perturbatif habituel

Dans ce paragraphe, nous utilisons la théorie des perturbations pour étudier l'effet de H_{int} sur l'état fondamental du système et sur le 1^{er} état excité. Nous verrons qu'il est impossible d'obtenir ainsi les excitations élémentaires du système, mais certains résultats obtenus nous seront utiles pour la suite.

a - Calcul du 1^{er} ordre

Déplacement de l'état fondamental

- L'état fondamental non perturbé correspond à une situation où les N particules sont toutes dans l'état fondamental individuel $\vec{k} = \vec{0}$ (fonction d'onde uniforme égale à $1/\sqrt{L^3}$) d'énergie nulle. Nous notons un tel état

$$|0\rangle = |n_0 = N\rangle \quad (7.19)$$

Seuls les nombres d'occupation non nuls (ici le nombre d'occupation n_0 de l'état $\vec{k} = \vec{0}$) sont indiqués.

- Le déplacement d'ordre 1 de cet état est donné par

$$\delta E_0^{(1)} = \langle 0 | H_{int} | 0 \rangle \quad (7.20)$$

Dans le développement (7.15) de H_{int} , le seul terme qui intervient est $\frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} a_0^\dagger a_0^\dagger a_0 a_0$. En utilisant $a_0 |n_0\rangle = \sqrt{n_0} |n_0-1\rangle$, on obtient

$$\delta E_0^{(1)} = \frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} N(N-1) \quad (7.21)$$

- Comme il n'y a pas ici de somme sur k , les éléments de matrice de V_{pseudo} sont égaux à ceux de $V_g = g\delta(\vec{r})$ et on obtient, en notant que $\tilde{V}_g(0) = g$

$$\delta E_0^{(1)} = \frac{g}{2L^3} N(N-1) \simeq \frac{g N^2}{2L^3} = \frac{N}{2} g \rho \quad (7.22)$$

où $\rho = N/V$ est la densité de particules.

Déplacement du 1^{er} état excité

- En supposant les 3 côtés de la boîte inégaux, le 1^{er} état excité

$$|1\rangle = |n_0 = N-1, n_1 = 1\rangle \quad (7.23)$$

n'est pas dégénéré et son déplacement au 1^{er} ordre vaut

$$\delta E_1^{(1)} = \langle 1 | H_{int} | 1 \rangle \quad (7.24)$$

Ici 5 termes de H_{int} interviennent dans l'élément de matrice :
 $a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 \tilde{V}(0)/2L^3$, $a_0^+ a_1^+ a_1 a_0 \tilde{V}(0)/2L^3$, $a_1^+ a_0^+ a_0 a_1 \tilde{V}(0)/2L^3$,
 $a_1^+ a_0^+ a_1 a_0 \tilde{V}(\vec{k}_1 - \vec{k}_0)/2L^3$, $a_0^+ a_1^+ a_0 a_1 \tilde{V}(\vec{k}_0 - \vec{k}_1)/2L^3$

A cause de la symétrie sphérique de V , $\tilde{V}(\vec{k}) = \tilde{V}(-\vec{k})$. De plus, à la limite $L \rightarrow \infty$, $\tilde{V}(\vec{k}_1 - \vec{k}_0) \rightarrow \tilde{V}(0)$. Les 5 termes précédents sont tous proportionnels à $\tilde{V}(0)/2L^3$ avec des coefficients qui valent respectivement $(N-1)(N-2)$, $N-1$, $N-1$, $N-1$, $N-1$. On obtient finalement

$$\delta E_1^{(1)} = \frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} [N(N-1) + 2(N-1)] \simeq \delta E_0^{(1)} + \frac{N}{L^3} \tilde{V}(0) \quad (7.25)$$

Pour V_g ou V_{pseudo} , $\delta E_1^{(1)}$ se réduit à

$$\delta E_1^{(1)} = \delta E_0^{(1)} + g \frac{N}{V} = \delta E_0^{(1)} + g \rho \quad (7.26)$$

- Il apparaît ainsi un écart ("gap") égal à $g\rho$ entre les 2 corrections du 1^{er} ordre à E_0 et E_1 , qui reste fini quand $N \rightarrow \infty$, $V \rightarrow \infty$ avec $\rho = N/V$ constant, alors que l'écart entre les énergies non perturbées $\rightarrow 0$. Un tel résultat montre clairement que la théorie des perturbations aux ordres les plus bas n'est pas valable puisque les corrections en énergie sont supérieures aux écarts entre énergies non perturbées. L'approche de Bogolubov exposée plus loin revient à diagonaliser exactement $H = H_0 + H_{int}$ dans un sous-espace avec certaines approximations effectuées sur les éléments de matrice de H_{int} . Avant d'exposer cette méthode, nous allons encore calculer le déplacement au 2^{ème} ordre de l'état fondamental car certains résultats relatifs à l'utilisation de V_{pseudo} nous seront utiles plus loin.

b - Déplacement de l'état fondamental au 2^{ème} ordre

Etats auxquels l'état fondamental est couplé

- A cause de la conservation de l'impulsion globale, les seuls états auxquels l'état fondamental $|0\rangle$ est couplé sont les états où 2 particules ont disparu de l'état $\vec{k} = \vec{0}$ pour être remplacées par une paire $\vec{k}, -\vec{k}$. Nous noterons l'état correspondant $|\vec{k}, -\vec{k}\rangle$

$$|\vec{k}, -\vec{k}\rangle = |n_0 = N-2, n_{\vec{k}} = 1, n_{-\vec{k}} = 1\rangle \quad (7.27)$$

- Dans les sommations sur les états $|\vec{k}, -\vec{k}\rangle$, il suffit de sommer sur $\vec{k}$ variant dans un $1/2$ espace. Sinon, on compterait 2 fois le même état puisque $|\vec{k}, -\vec{k}\rangle = |-\vec{k}, \vec{k}\rangle$. Nous noterons une telle somme $\sum_{\vec{k}}^{1/2}$ (le terme $\vec{k}=\vec{0}$ étant exclu)

- Dans le calcul de $\langle \vec{k}, -\vec{k} | H_{int} | 0 \rangle$, les seuls termes de (7.15) qui contribuent sont [en utilisant $\tilde{V}(\vec{k}) = \tilde{V}(-\vec{k})$]:

$$\frac{\tilde{V}(\vec{k})}{2L^3} [a_{-\vec{k}}^+ a_{\vec{k}}^+ a_0 a_0 + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+ a_0 a_0] \quad (7.28)$$

On en déduit que

$$\langle \vec{k}, -\vec{k} | H_{int} | 0 \rangle = \frac{\tilde{V}(\vec{k})}{L^3} \sqrt{N(N-1)} \quad (7.29)$$

- L'absence de singularité en $\vec{r}=\vec{r}'$ entraîne que les éléments de matrice de H_{int} écrits avec V_g ou V_{pseudo} sont égaux à

$$\langle \vec{k}, -\vec{k} | H_{int} | 0 \rangle_g = \langle \vec{k}, -\vec{k} | H_{int} | 0 \rangle_{pseudo} = \frac{g}{L^3} \sqrt{N(N-1)} \quad (7.30)$$

- La correction au 1^{er} ordre à $|0\rangle$ s'écrit donc

$$|\psi_0^{(1)}\rangle = \sum_{\vec{k}}^{1/2} |\vec{k}, -\vec{k}\rangle \frac{\langle \vec{k}, -\vec{k} | H_{int} | 0 \rangle}{E_0 - E_{\vec{k}, -\vec{k}}} \quad (7.31)$$

Comme $E_0 - E_{\vec{k}, -\vec{k}} = 0 - 2 \frac{\hbar^2 k^2}{2m} = -\frac{\hbar^2 k^2}{m}$, on déduit de (7.29) et (7.31)

$$|\psi_0^{(1)}\rangle = - \sum_{\vec{k}}^{1/2} \frac{\tilde{V}(\vec{k})}{L^3} \frac{m}{\hbar^2} \sqrt{N(N-1)} \frac{1}{k^2} |\vec{k}, -\vec{k}\rangle \quad (7.32)$$

$\tilde{V}(\vec{k})$ étant remplacé par g quand on utilise V_g ou V_{pseudo}

Calcul du déplacement pour un potentiel $V(r)$

$$\delta E_0^{(2)} = \sum_{\vec{k}}^{1/2} \frac{|\langle \vec{k}, -\vec{k} | H_{int} | 0 \rangle|^2}{E_0 - E_{\vec{k}, -\vec{k}}} \quad (7.33)$$

En utilisant (7.29) et en remplaçant $\sum_{\vec{k}}^{1/2}$ par $\frac{1}{2} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}}$, on obtient

$$\delta E_0^{(2)} = - \frac{N(N-1)m}{2\hbar^2 L^6} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{|\tilde{V}(\vec{k})|^2}{k^2} \quad (7.34)$$

Si $\tilde{V}(\vec{k})$ tend suffisamment vite vers 0 quand $k \rightarrow \infty$, la somme sur $\vec{k} \neq \vec{0}$ converge.

Calcul du déplacement pour un potentiel $V_g = g\delta(\vec{r})$

On a alors $\tilde{V}(\vec{k}) = g$ et

$$\delta E_0^{(2)} = - \frac{N(N-1)m g^2}{2\hbar^2 L^6} \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{1}{k^2} = \infty \quad (7.35)$$

Calcul du déplacement pour V_{pseudo}

- Il faut alors partir de (7.32) avec $\tilde{V}(k)$ remplacé par g et de

$$\delta E_0^{(2)} = \langle 0 | H_{\text{int}} | \Psi_0^{(1)} \rangle \quad (7.36)$$

- Les seuls termes de (7.18) qui interviennent dans (7.36) sont

$$\frac{g}{2L^3} \left\{ a_0^+ a_0^+ \left[\frac{\partial}{\partial s} s e^{-i\vec{k}\cdot\vec{s}} a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} \right]_{s=0} + a_0^+ a_0^+ \left[\frac{\partial}{\partial s} s e^{i\vec{k}\cdot\vec{s}} a_{-\vec{k}} a_{\vec{k}} \right]_{s=0} \right\} \quad (7.37)$$

- Faisons agir (7.37) sur $|\Psi_0^{(1)}\rangle$ et projetons sur $\langle 0 |$.

On obtient

$$\delta E_0^{(2)} = - \frac{N(N-1)mg^2}{2\hbar^2 L^6} \left[\frac{\partial}{\partial s} s \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{s}}}{k^2} \right]_{s=0} \quad (7.38)$$

- Comme nous l'avons expliqué dans le cours IV, il faut, à cause de problèmes de convergence non uniforme, effectuer la somme sur $\vec{k}$ dans (7.38) avant de faire agir $\frac{\partial}{\partial s} s$.

A la limite $L \rightarrow \infty$, on peut remplacer les sommes discrètes sur $\vec{k}$ par des intégrales

$$\sum_{\vec{k}} \rightarrow \frac{L^3}{(2\pi)^3} \int d^3k \quad (7.39)$$

Par ailleurs, comme l'intégrand de $\int d^3k \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{s}}}{k^2}$ ne diverge pas en $k=0$, on peut s'affranchir de la restriction $\vec{k} \neq \vec{0}$ figurant dans 7.38 et utiliser

$$\int d^3k \frac{e^{i\vec{k}\cdot\vec{s}}}{k^2} = \frac{(2\pi)^3}{4\pi s} \quad (7.40)$$

On voit apparaître alors

$$\left[\frac{\partial}{\partial s} s \frac{1}{s} \right]_{s=0} = 0 \quad (7.41)$$

ce qui montre que le déplacement au 2^{ème} ordre de l'état fondamental calculé avec V_{pseudo} est nul.

- Dans la suite de ce cours, nous effectuerons la plupart des temps les calculs avec V_S car ils sont plus simples. Cependant, quand nous rencontrerons des expressions divergentes comme (7.35), nous les remplacerons par 0 car nous venons de voir qu'un calcul correct avec V_{pseudo} donne un résultat nul.

④ L'approche de Bogolubov

a - Principe de la démarche

- En l'absence d'interactions, l'état fondamental d'un gaz parfait de bosons correspondrait à une situation où tous les atomes seraient dans l'état $\vec{k} = \vec{0}$: $n_0 = N$, $n_k = 0$ si $k \neq 0$. En présence d'interactions, et si le gaz est suffisamment dilué pour que l'effet des interactions ne soit pas trop fort, on s'attend à ce que, dans l'état fondamental et les premiers états excités du système, n_0 reste macroscopique, de l'ordre de N , et très grand devant tous les autres n_k avec $k \neq 0$.
- La méthode de Bogolubov consiste à se restreindre à un sous-espace $\tilde{E}$ d'états caractérisés par n_0 de l'ordre de N , tous les autres n_k étant de l'ordre de quelques unités, puis à simplifier l'expression de H en ne gardant que les termes d'ordre 1 en $\epsilon = \sum_{k \neq 0} n_k / N$. On obtient alors un Hamiltonien effectif H_{eff} suffisamment simple pour pouvoir être diagonalisé exactement.

b - Détermination de H_{eff}

Action de a_0 sur les états du sous-espace $\tilde{E}$

$$a_0 |\{n_k\}\rangle = \sqrt{N - \sum_{k \neq 0} n_k} |\{n_k - \delta_{k0}\}\rangle \approx \sqrt{N} |\{n_k - \delta_{k0}\}\rangle \quad (7.42)$$

Les éléments de matrice de a_0 (de même que ceux de a_0^+) sont donc de l'ordre de $\sqrt{N} \gg 1$. Parmi les divers termes de (7.15) il est donc légitime de ne garder que ceux contenant 4 a_0 (ou a_0^+), ou 2 a_0 (ou a_0^+). Il n'y a pas de terme contenant 3 a_0 (ou a_0^+) à cause de la conservation de l'impulsion globale. Nous négligerons les termes ne contenant qu'un a_0 (ou a_0^+), ou aucun. Enfin, dans les termes conservés, nous remplacerons a_0 et a_0^+ par $\sqrt{N}$ (voir toutefois ci-dessous pour le terme à 4 opérateurs a_0 ou a_0^+)

Terme contenant 4 a_0 ou a_0^+

$$\frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} a_0^+ a_0^+ a_0 a_0, \text{ de l'ordre de } \frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} N^2 \quad (7.43)$$

Comme ce terme est très important il est important de le calculer plus précisément et de tenir compte de la différence entre N et le nombre d'occupation n_0 de l'état $\vec{k} = \vec{0}$. Pour cela, on écrit

$$a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 = a_0^+ (a_0 a_0^+ - 1) a_0 = (a_0^+ a_0)^2 - (a_0^+ a_0) \quad (7.44)$$

$$a_0^+ a_0 = \hat{N}_0 = N - \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k \quad (7.45)$$

$$(a_0^+ a_0)^2 = \left(N - \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k\right)^2 \approx N^2 - 2N \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k \quad (7.46)$$

$$a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 \simeq N^2 - 2N \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k - N = N(N-1) - 2N \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k \quad (7.47)$$

de sorte que finalement

$$\frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} a_0^+ a_0^+ a_0 a_0 = \frac{1}{2} \rho (N-1) \tilde{V}(0) - \rho \tilde{V}(0) \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k \quad (7.48)$$

où $\rho = \frac{N}{L^3} = \frac{N}{V}$ (7.49)

est la densité de particules (qu'on note ρ , et non plus n_0 , pour ne pas la confondre avec le nombre d'occupation n_0 de l'état $\vec{k} = \vec{0}$).

Termes contenant $2a_0$ ou a_0^+

$$a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+ a_0 a_0 \frac{\tilde{V}(\vec{k})}{2L^3} = \frac{\rho}{2} a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}}^+ \tilde{V}(\vec{k}) \quad (7.50.a)$$

$$a_0^+ a_0^+ a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} \frac{\tilde{V}(\vec{k})}{2L^3} = \frac{\rho}{2} a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}} \tilde{V}(\vec{k}) \quad (7.50.b)$$

$$a_{\vec{k}}^+ a_0^+ a_{\vec{k}} a_0 \frac{\tilde{V}(\vec{k})}{2L^3} = \frac{\rho}{2} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \tilde{V}(\vec{k}) \quad (7.50.c)$$

$$a_0^+ a_{-\vec{k}}^+ a_0 a_{-\vec{k}} \frac{\tilde{V}(\vec{k})}{2L^3} = \frac{\rho}{2} a_{-\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}} \tilde{V}(\vec{k}) \quad (7.50.d)$$

$$a_0^+ a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} a_0 \frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} = \frac{\rho}{2} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \tilde{V}(0) \quad (7.50.e)$$

$$a_{\vec{k}}^+ a_0^+ a_0 a_{\vec{k}} \frac{\tilde{V}(0)}{2L^3} = \frac{\rho}{2} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} \tilde{V}(0) \quad (7.50.f)$$

Récapitulation

Ajoutons les 6 termes (7.50) à (7.48). Les 2 termes (7.50.e) et (7.50.f) se simplifient avec le dernier terme de (7.48) et on obtient finalement (en n'oubliant pas le terme Han écrit en (7.9) et en remplaçant $N-1$ par N)

$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{2} N \rho \tilde{V}(0) + \sum_{\vec{k}} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + \frac{1}{2} \rho \sum_{\vec{k} \neq \vec{0}} \tilde{V}(\vec{k}) [a_{\vec{k}}^+ a_{\vec{k}} + a_{-\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}}^+ a_{-\vec{k}} + a_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}] \quad (7.51)$$

C. Diagonalisation de H_{eff}

L'expression (7.51) de H_{eff} est une fonction quadratique des $a_{\vec{k}}$ et $a_{\vec{k}}^+$ qu'il est possible de mettre sous forme d'une somme de termes $b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}$ où les $b_{\vec{k}}$ et $b_{\vec{k}}^+$ sont des combinaisons linéaires des $a_{\vec{k}}$ et $a_{\vec{k}}^+$ satisfaisant les mêmes relations de commutation que les $a_{\vec{k}}$ et $a_{\vec{k}}^+$. Les opérateurs $b_{\vec{k}}$ et $b_{\vec{k}}^+$ apparaissent alors comme des opérateurs de destruction et de création de "quasiparticule" décrivant les excitations élémentaires du système.

Définitions des opérateurs $b_{\vec{k}}$ et $b_{\vec{k}}^+$

$$\begin{cases} b_{\vec{k}} = u_{\vec{k}} a_{\vec{k}} + v_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}^+ \\ b_{-\vec{k}}^+ = u_{\vec{k}} a_{-\vec{k}}^+ + v_{\vec{k}} a_{\vec{k}} \end{cases} \quad (7.52)$$

où les $u_{\vec{k}}, v_{\vec{k}}$ sont des coefficients réels, ne dépendant que de $k = |\vec{k}|$

- A partir de (7.52) on calcule aisément

VII-11

$$[b_{\vec{k}}, b_{\vec{k}}^+] = u_k^2 [a_{\vec{k}}, a_{\vec{k}}^+] + v_k^2 [a_{-\vec{k}}, a_{-\vec{k}}] = u_k^2 - v_k^2 \quad (7.53)$$

Si l'on veut que $b_{\vec{k}}$ et $b_{\vec{k}}^+$ satisfassent les relations de commutation bosoniques, il faut donc imposer

$$u_k^2 - v_k^2 = 1 \quad (7.54)$$

ce qui est réalisé en prenant

$$u_k = \cosh \theta_k \quad v_k = \sinh \theta_k \quad (7.55)$$

θ_k sera déterminé ultérieurement.

- L'inversion de (7.52) donne, compte tenu de (7.54)

$$\begin{cases} a_{\vec{k}} = u_k b_{\vec{k}} - v_k b_{-\vec{k}}^+ \\ a_{-\vec{k}}^+ = u_k b_{-\vec{k}}^+ - v_k b_{\vec{k}} \end{cases} \quad (7.56)$$

Expressions de H_{eff} en fonction de $b_{\vec{k}}$ et $b_{\vec{k}}^+$

- Reexprimons (7.51) en remplaçant partout les $a_{\vec{k}}$ et $a_{\vec{k}}^+$ par leur expression (7.56) en fonction des $b_{\vec{k}}$ et $b_{\vec{k}}^+$. La symétrie sphérique de $V(r)$ entraîne que $\tilde{V}(\vec{k})$ ne dépend que de $k = |\vec{k}|$. On obtient ainsi après un calcul sans difficulté, l'expression suivante de H_{eff}

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} = & \frac{1}{2} N \rho \tilde{V}(0) + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} v_k^2 + \rho \tilde{V}(k) [v_k^2 - u_k v_k] \right\} \\ & + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ \frac{\hbar^2 k^2}{2m} (u_k^2 + v_k^2) + \rho \tilde{V}(k) [u_k^2 + v_k^2 - 2u_k v_k] \right\} b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} \\ & + \sum_{\vec{k} \neq 0} \left\{ -\frac{\hbar^2 k^2}{2m} u_k v_k + \frac{\rho}{2} \tilde{V}(k) [-2u_k v_k + u_k^2 + v_k^2] \right\} (b_{\vec{k}}^+ b_{-\vec{k}}^+ + b_{-\vec{k}} b_{\vec{k}}) \end{aligned} \quad (7.57)$$

Choix de θ_k pour obtenir un Hamiltonien d'excitations élémentaires

- Choisissons le paramètre θ_k défini en (7.55) de manière à ce que le coefficient de $(b_{\vec{k}}^+ b_{-\vec{k}}^+ + b_{-\vec{k}} b_{\vec{k}})$ dans la 3^{ème} ligne de (7.57) soit nul

$$-\frac{\hbar^2 k^2}{2m} u_k v_k + \frac{\rho}{2} \tilde{V}(k) [-2u_k v_k + u_k^2 + v_k^2] = 0 \quad (7.58)$$

L'expression (7.57) de H_{eff} se réduit alors à la première ligne, qui est une constante, et à la 2^{ème} ligne, qui est une somme de termes $b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}}$, apparaissant comme un Hamiltonien d'excitations élémentaires.

- En remplaçant u_k et v_k par $\cosh \theta_k$ et $\sinh \theta_k$ dans (7.58), on obtient l'équation suivante pour θ_k , équivalente à (7.58):

$$\tanh 2\theta_k = \frac{\rho \tilde{V}(k)}{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \rho \tilde{V}(k)} \quad (7.59)$$

Quand on utilise V_S ou V_{pseudo} , l'équation (7.59) devient :

VII-12

$$\tanh 2\theta_k = \frac{8n\rho a}{k^2 + 8n\rho a} = \frac{k_0^2}{k^2 + k_0^2} \quad (7.60)$$

où $k_0 = \sqrt{8n\rho a} = 1/\xi_0$ (7.61)

ξ_0 étant la longueur de relaxation introduite dans le cours V

- Enfin, on peut utiliser (7.59) pour exprimer les diverses quantités $u_k^2, v_k^2, u_k v_k$ apparaissant dans (7.57)

$$u_k^2 + v_k^2 = \cosh^2 \theta_k + \sinh^2 \theta_k = \cosh 2\theta_k = \frac{1}{\sqrt{1 - \tanh^2 2\theta_k}} = \frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \rho \tilde{V}(k)}{\sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\rho \tilde{V}(k) \right)}} \quad (7.62)$$

Comme $u_k^2 - v_k^2 = 1$, on en déduit

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \rho \tilde{V}(k)}{\sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\rho \tilde{V}(k) \right)}} + 1 \right] \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + \rho \tilde{V}(k)}{\sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\rho \tilde{V}(k) \right)}} - 1 \right] \quad (7.63)$$

$$u_k v_k = \cosh \theta_k \sinh \theta_k = \frac{1}{2} \sinh 2\theta_k = \frac{1}{2} \frac{\tanh 2\theta_k}{\sqrt{1 - \tanh^2 2\theta_k}} = \frac{1}{2} \frac{\rho \tilde{V}(k)}{\sqrt{\frac{\hbar^2 k^2}{2m} \left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2\rho \tilde{V}(k) \right)}} \quad (7.64)$$

- Les expressions précédentes se simplifient quand on utilise (7.60)

$$u_k^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{k^2 + k_0^2}{\sqrt{k^2(k^2 + 2k_0^2)}} + 1 \right] \quad v_k^2 = \frac{1}{2} \left[\frac{k^2 + k_0^2}{\sqrt{k^2(k^2 + 2k_0^2)}} - 1 \right] \quad u_k v_k = \frac{1}{2} \frac{k_0^2}{\sqrt{k^2(k^2 + 2k_0^2)}} \quad (7.65)$$

Expression finale de H_{eff}

- Quand on reporte les expressions (7.63) et (7.64) (ou (7.65)) dans (7.57), on obtient

$$H_{eff} = E_0 + \sum_{\vec{k} \neq 0} \hbar \omega(k) b_{\vec{k}}^+ b_{\vec{k}} \quad (7.66)$$

où E_0 et $\omega(k)$ sont des fonctions de k dont les expressions seront données plus loin

- H_{eff} apparaît ainsi comme une somme de Hamiltoniens d'oscillateurs harmoniques, décrivant les excitations élémentaires du gaz de bosons, ou quasiparticules. $b_{\vec{k}}$ et $b_{\vec{k}}^+$ sont les opérateurs de destruction et de création d'une quasiparticule d'énergie $\hbar \omega(k)$ et d'impulsion $\hbar \vec{k}$. La fonction $\omega(k)$ n'est autre que la relation de dispersion de ces excitations élémentaires

- L'état fondamental du système est le "vide" des opérateurs $b_{\vec{k}}$

$$b_{\vec{k}} |\psi_0\rangle = 0 \quad \forall \vec{k} \quad (7.67)$$

E_0 est l'énergie de cet état fondamental

- Le contenu physique de ces résultats et la comparaison avec les prédictions des théories de champ moyen seront donnés dans le cours VIII, qui contiendra aussi une liste de références.