

REPUBLIQUE ALGERIENNE DEMOCRATIQUE ET POPULAIRE
MINISTRE DE L'ENSEIGNEMENT SUPERIEUR ET DE LA RECHERCHE
SCIENTIFIQUE
UNIVERSITE DES SCIENCES ET DE LA TECHNOLOGIE
HOUARI BOUMEDIENNE
FACULTÉ DE PHYSIQUE



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de MAGISTER

En : PHYSIQUE

Spécialité : **PHYSIQUE THEORIQUE DES BASSES**

ET MOYENNES ENERGIES

Présenté par : **Mme Cherifi Bakhta**

Thème :

**EFFET DU TRIPLET DANS UN
GAZ PIEGE ULTRA-FROID**

Soutenu publiquement le 08/06/2013 devant le jury composé de :

Mr. Mouloud Tribeche
Mr. Mohamed Benarous
Mr. Salem Kessal
Mr. Mourad Djebli
Mr. Abdelhafid Kellou

professeur à l'USTHB
professeur à l'UHB Chlef
professeur à l'USTHB
professeur à l'USTHB
professeur à l'USTHB

Président
Directeur de thèse
Examinateur
Examinateur
Examinateur

REMERCIEMENTS

Je tiens tout d'abord à remercier mon directeur de thèse le professeur monsieur Mohamed Benarous, qui m'a offert cette chance formidable de travailler sur un sujet aussi passionnant. Grâce à ses suggestions et à son suivi continuel, j'ai pu apprendre que la chose la plus importante pour un jeune chercheur est la méthodologie de la recherche, je lui exprime toute ma gratitude.

Je souhaiterais aussi exprimer mes profonds remerciements au docteur Mr Tribeche M qui a accepté de présider le jury de cette thèse malgré ses nombreuses obligations. Je le remercie vivement.

Je ne voudrais surtout pas oublier de remercier mon très cher père, ma mère, mes sœurs :Zahra et Asmaa et mes frères Mohammed, Djillali, Abdelkader et Yassine ainsi que mon époux Ahmed Taibouni, ma belle sœur Houria et sa fille Samiha et ses fils, mes beaux frères Abdelkader, Ali, Belkacem, Mohamed et ses fils et ma belle mère Halima .

Que le soutien moral de tous mes autres amis trouvent ici l'expression de mes meilleurs sentiments en particulier Touzane, Boudjemaa, Houria Chachou, merci à tous.

RESUME

Ce travail porte sur une proposition d'extension variationnelle de la théorie du champ moyen appliquée à un gaz dilué de bosons ultra-froids et en self-interaction.

Nous exposons les diverses approximations utilisées telles que celle de Popov, de Bogoliubov ou de Hattie-Fock-Bogoliubov. Ces méthodes négligent entre autres le couplage entre les atomes condensés et les atomes non condensés, ce qui a pour effet non seulement de perdre une grande part de la physique mais en plus la consistance mathématique de l'approche. En effet, un certain nombre d'auteurs soulignent des inconsistances de l'approximation HFB qui consiste à négliger pour un gaz dilué l'effet du triplet (corrélations à trois bosons). Or, celui-ci est pour une grande partie responsable des interactions entre le condensat et le nuage thermique.

A l'opposé, le principe variationnel de Balian-Vénéroni, a montré son efficacité théorique à plusieurs égards (consistance, invariances,...) tout en permettant d'étendre les approximations précédentes.

Notre travail consiste à étendre variationnellement l'approximation HFB en injectant les corrélations de hauts ordres dans l'état du système sans s'affranchir complètement de l'approximation gaussienne. En choisissant des espaces d'essai relativement simples, mais physiquement acceptables, nous obtenons un système d'équations dynamiques, tenant compte aussi bien des corrélations à un corps qu'à deux corps d'une façon consistante.

L'application à des hamiltoniens quadratiques redonne les équations exactes tandis que pour des hamiltoniens cubiques ou quartiques, on obtient une version quantique tronquée de la hiérarchie BBGKY. La comparaison avec les équations d'Ehrenfest fournit des expressions formellement exactes au moins à l'ordre du cumulant d'ordre 3.

Sommaire

REMERCIEMENTS.

RESUME.

SOMMAIRE

INTRODUCTION GENERALE..... 6

CHAPITRE I :

I-LES DIVERSES APPROXIMATIONS THEORIQUES

I-1 qu'est ce qu'un condensat de Bose- Einstein ?..... 10

I -2 Aspects expérimentaux11

I-3 techniques de refroidissement pour réaliser un condensat de Bose-Einstein12

I-3-1 Piégeage magnétique.....12

I-3-2 Refroidissement par évaporation12

I-4 Perspectives.....13

I-5 Aspects théoriques.....14

I-5-1 Introduction 14

I-5-2 Diverses approximations pour l'étude du condensat15

I-5-3 Approximation de Bogoliobov..... 15

I-5-4 Approximation de Popov..... 19

I-5-5 Approximation de Hartree-Fock-Bogoliubov 22

I-5-6 Le principe variationnel de Balian-Vénéroni..... 23

I-6 Application du principe de Balian-Vénéroni à un système de bosons piégés.....24

CHAPITRE II :

II-EQUATIONS POST-GAUSSIENNES GENERALES

II.1 Formalisme général de Balian –Vénéroni : 25

II.1.2 le principe variationnel de Balian-Vénéroni:.....	26
II.2. Application du principe de Balian-Vénéroni à un système de bosons piégés.....	27
II-2-1 Les espaces variationnels.....	28
II-2-2 Les équations des mouvements.....	32
 CHAPITRE III :	
III- APPLICATION AU GAZ PIEGE ULTRA-FROID	
III-1-1 Application à un hamiltonien quadratique :.....	34
III-1-1-a le calcul de q_i	34
III-1-1-b le calcul de Q_{ij}	35
III-1-1-C le calcul de Ω_{ij}	35
III-1-2 Application à un hamiltonien quartique.....	36
III-1-2-a Le calcul de q_i , Q_{ij} et Ω_{ij}	36
III-1-2-b Le calcul de \sum_{ijk}	38
 CHAPITRE IV :	
IV- APPLICATION ET COMPARAISON AUX EQUATIONS D’EHRENFEST	
IV-1 Relations d'Ehrenfest.....	42
IV-3 Application a un Hammiltonien quartique	42
CONCLUSION GENERALE.....	47
APPENDICE A.....	50
APPENDICE B.....	54
BIBLIOGRAPHIE.....	60

Introduction Générale

Au début du XX^{ème} siècle, la théorie de la mécanique quantique fut essentiellement élaborée pour décrire des phénomènes microscopiques comme la description de l'atome et des liaisons chimiques. Toutefois, la mécanique quantique peut se manifester à une échelle macroscopique. La supraconductivité et la superfluidité en sont de flagrants exemples. En 1924, le jeune physicien indien Satiendranath Nathal Bose retrouva l'expression de la loi de Planck expliquant le rayonnement du corps noir, expérience fondatrice de la mécanique quantique. Pour cela, il établit une description statistique de la lumière par des particules indiscernables sans masse: les photons. Ayant des difficultés à faire valoir son résultat, il envoya son travail à Albert Einstein. Ce dernier comprit rapidement la portée de l'article de S. N. Bose et le recommanda pour publication. A. Einstein approfondit l'idée de statistique de Bose aux atomes de spin entier et prédit, qu'en dessous d'une température dite critique, une fraction macroscopique d'atomes s'accumulerait dans l'état fondamental du système: le condensat de Bose-Einstein.

L'idée fut fraîchement accueillie par les contemporains des deux physiciens mais la condensation de Bose-Einstein et les interrogations qu'elles suscitérent réapparaîtront lors de différentes manifestations macroscopique de la mécanique quantique telle que la superfluidité de l'hélium liquide découverte en 1937 par Allen, Misner et Kapista. La superfluidité peut être interprétée comme une manifestation de la condensation de Bose - Einstein mais la description théorique resta complexe car il faut tenir compte des interactions fortes dans l'hélium liquide. Il aura fallu plus de soixante-dix années pour vérifier expérimentalement la prédiction d'Einstein. La condensation de Bose-Einstein fut observée pour la première fois en 1995 dans des gaz dilués d'atomes alcalins (Rubidium puis Sodium). Cette découverte fut récompensée par le prix Nobel de physique en 2001, attribué à C. Wieman, E.Cornell [1] et W. Ketterle [2].

Le nombre de particules et la nature de leurs interactions font que seule la théorie quantique permet de comprendre et de prédire le comportement observable des systèmes physiques [3]. Néanmoins, le traitement exact de ces systèmes est quasiment impossible. Des méthodes d'approximations de plus en plus élaborées ont été développées, dans des domaines aussi variés que la mécanique [4, 5, 6, 7, 8] ou la physique moléculaire [9, 10]. Après les travaux de Feynman [11] et Schwinger [12], le champ d'application de ces méthodes s'est

élargi à la théorie quantique des champs [13, 14, 15, 16, 17, 18, 19, 20]. Parmi ces méthodes, nous pouvons citer les approximations dites de champs moyen (ou à particules indépendantes) et leurs extensions telles que l'approximation de Popov[21], Bogoliubov[22], et de Hartree-Fock-Bogoliubov[23, 24].

Ces méthodes négligent entre autres le couplage entre les atomes condensés et les atomes non condensés et entre les atomes du nuage thermique eux-mêmes. Or, diverses expériences et calculs théoriques [26] montrent clairement que ces couplages jouent un rôle prépondérant dans la description dynamique de ces systèmes.

Afin de pallier à ces imperfections, on doit à tous prix introduire ces couplages tout en maintenant la faisabilité des calculs. Une façon de faire est de procéder à une approche variationnelle. Le principe variationnel de Balian-Vénéroni (BV) [26, 27] en est un exemple qui a montré son efficacité théorique à plusieurs égards. Le but de ce principe est d'optimiser la valeur moyenne d'une observable mesurée à partir de la connaissance, même imparfaite, de l'état initial du système. Utilisant le formalisme de la matrice densité, il s'attache plus particulièrement à l'étude de problèmes de mécanique statistique en introduisant la notion d'état le moins biaisé (*least biased state*), qui consiste en une description simple contenant un minimum d'informations compatibles avec les données sur le système. Une telle approche n'est évidemment pas étrangère au principe d'entropie maximale.

L'outil variationnel de base est une observable jouant le rôle d'opérateur densité. Elle est généralement choisie sous forme gaussienne (ou exponentielle de forme quadratique) afin que le théorème de Wick soit exploitable [28]. Toutefois, cet *ansätze*, décrivant essentiellement des particules non corrélées, conduit à un formalisme de champ moyen. Les équations TDHF (pour les fermions) [29] et TDHFB pour les bosons [27], sont un exemple frappant, et ont été dérivées par ailleurs. Bien que décrivant correctement une multitude de propriétés d'équilibre, elles sont en général incapables de prédire le comportement dynamique des systèmes à N-corps, car négligeant un aspect important de ces systèmes que sont les corrélations.

Afin de remédier à ces difficultés, on peut soit adopter un opérateur densité non gaussien, auquel cas, il faudra trouver un moyen pour conduire tous les calculs, ou, tenter d'étendre cette forme gaussienne en maintenant la faisabilité des calculs. L'idée est donc de s'inspirer du principe d'entropie maximale qui stipule que le meilleur opérateur densité, à

l'équilibre, est de la forme $\exp(-\beta H)$ où H est l'Hamiltonien du système et $\beta=1/kT$ est l'inverse de la température (k étant la constante de Boltzmann). Si H n'est pas un opérateur quadratique (oscillateur harmonique), cette forme n'est pas tellement utile. Toutefois, on pourra imaginer un développement en cumulant de la partie non quadratique, ce qui engendrera une hiérarchie que l'on espère être analogue à la hiérarchie BBGKY. L'avantage de l'approche variationnelle est que, une fois l'*ansätze* choisi, on peut s'affranchir de toute hypothèse perturbative et ainsi ne pas imposer à notre développement, même s'il est tronqué, d'être "petit". C'est ainsi que l'on arrive à un *ansätze* post-gaussien [28] où le cumulant à trois bosons est présent sans pour autant altérer la faisabilité des calculs.

L'objet de notre travail est de tester cette approche sur un gaz de bosons piégé et ultra-froid. Ces gaz subissent une transition de phase à l'état condensé à très basse température, où l'ordre à longue portée est dominant bien que les interactions (généralement considérées comme des collisions binaires) soient de portée nulle. Notre travail sera néanmoins relativement formel, car l'on s'intéressera avant tout à analyser la consistance de notre approche.

Le présent travail est subdivisé en quatre chapitres. Dans le premier chapitre, nous relaterons les différentes techniques utilisées pour l'élaboration et l'étude d'un condensat de Bose-Einstein (BEC). On discutera en particulier, les différents pièges et les méthodes de refroidissement. Ensuite, nous aborderons certaines approches théoriques pour l'étude du BEC à savoir, les approximations de Bogoliubov, Popov et de Hartree-Fock-Bogoliubov. Le chapitre deux présente notre outil de base, à savoir le principe variationnel de Balian et Vénéroni. Nous présenterons une application dans le cas d'un opérateur densité gaussien, puis post - gaussien. Nous noterons en particulier l'apparition des corrélations à trois bosons (triplet) dans les équations dynamiques ce qui induit une généralisation évidente des équations TDHFB.

Dans le chapitre trois, nous appliquons ce formalisme à un gaz dilué de bosons à très basse température. Cela nous permet de mener à bout tous les calculs et d'obtenir les équations dynamiques pour les diverses grandeurs physiques à savoir, le paramètre d'ordre du système, la matrice densité à un corps ainsi que le triplet. Ces équations sont évidemment couplées et hautement non linéaires. Elles montrent clairement l'effet du triplet. Toutefois, afin de nous assurer de leur pertinence, nous établissons au chapitre quatre les équations

exactes pour ces diverses grandeurs, en utilisant le théorème d'Ehrenfest qui, rappelons-le, ne permet pas de fermer le système d'équations. Nous discutons en particulier comment l'approximation variationnelle s'arrange pour simuler, non seulement le cumulant à trois bosons mais aussi les cumulants de hauts ordres.

Nous terminons ce travail par une conclusion générale ainsi que des perspectives quant à des calculs que nous envisageons de faire dans un futur proche.

Chapitre I

I-1 qu'est ce qu'un condensat de Bose-Einstein ?

L'apparition d'un condensat de Bose - Einstein est liée à la notion d'indiscernabilité d'un gaz de particules soumis à une très basse température. Historiquement (en 1924), cette découverte, d'un point de vue théorique, revient à A. Einstein qui approfondit la notion d'indiscernabilité des particules que S. Bose avait appliqué aux photons pour décrire la loi de Planck décrivant le spectre du corps noir. Ainsi A. Einstein montra que si l'on abaisse suffisamment la température d'un gaz de particules jusqu'à atteindre un seuil pour lequel la distance d entre particules est égale à la longueur d'onde de De-Broglie $\lambda = h/mv$ (où m la masse de la particule et v sa vitesse) associée à chaque particule, alors une transition de phase correspondant au fait qu'un certain nombre de particules se regroupe dans le même état, se produit et forme un condensat de Bose - Einstein. Ainsi les particules doivent dès cet instant, à l'instar des photons, ne plus suivre la statistique de Maxwell-Boltzmann mais celle que l'on appela la statistique de Bose-Einstein. Cependant, seuls les dénommés bosons, pour lesquels le moment cinétique intrinsèque (spin) total de la particule est multiple pair de $h/4\pi$ peuvent former un tel état. Ceci est réalisé dès lors que la somme du nombre de protons, neutrons de l'atome est paire.

Face à la difficulté technique (atteindre la température pour laquelle $\lambda = d$) et bien que des suspicions d'existence se dégagèrent avec la découverte de la superfluidité de l'hélium liquide en 1938 (Ceci diffère d'un condensat de Bose-Einstein idéal car des fortes interactions entre particules existent dans un liquide), cette prédiction d'A. Einstein n'a pas pu être démontrée avant 1995, date à laquelle les premiers condensats de Bose-Einstein sont formés par E.A Cornell et C.E. Wieman d'une part et W. Ketterle d'autre part, à partir d'un gaz d'atomes de rubidium refroidi comme le montre la figure 2. Le prix Nobel leur fut attribué pour cette découverte en 2001. Ceci ne fut possible sans l'application aux atomes de techniques successives : Le refroidissement au moyen de lasers suivi de refroidissement par évaporation.

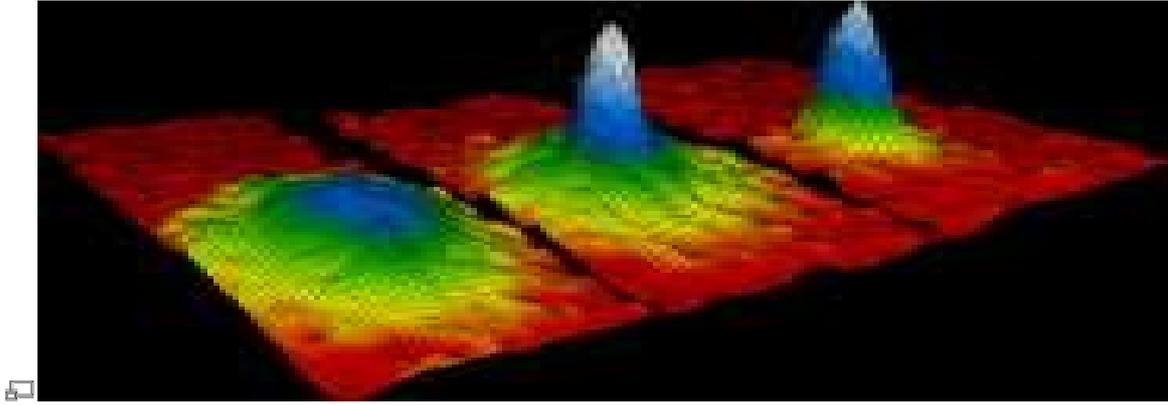


figure 2 : condensat Bose Einstein.jpg-futura-sciences.com

Graphique 3D montrant 3 états successifs : les atomes sont de plus en plus condensés (De la gauche vers la droite)

I.2 Aspects expérimentaux :

Dans un article publié en 1925 [30], A. Einstein démontra une propriété extra ordinaire d'un système de particules matérielles : Si sa densité spatiale est plus grande qu'une certaine valeur critique donnée par :

$$n_c = \frac{0.166}{\hbar^3} (mK_b T)^{\frac{3}{2}} \quad (\text{I.1})$$

Où K_b et \hbar sont les constantes de Boltzmann et Planck, et m la masse des particules. Une formulation équivalente revient à comparer la distance moyenne entre particules, $d = n^{-\frac{1}{3}}$, à la longueur d'onde thermique de De-Broglie

$$\lambda = \sqrt{\frac{2\pi\hbar^2}{mK_b T}} \quad (\text{I.2})$$

Quand d est grande devant λ , le comportement du gaz est voisin de celui prédit par la théorie classique des gaz. En revanche, quand le rapport λ / d croît et devient de l'ordre de l'unité, le phénomène de condensation se produit. Ainsi, quand $\lambda = 2d$, Einstein prédit que les deux tiers des particules du gaz devraient occuper l'état fondamental.

I-3 Techniques de refroidissement pour réaliser un condensat de Bose-Einstein :

De manière simpliste, les techniques de refroidissement laser et de piégeage d'atomes neutres ont été largement étudiées aux cours des dernières années. Les avancées dans ce domaine ont été récompensées par le prix Nobel de physique en 2001 [1,2], consiste à piéger les atomes refroidis par un piège de profondeur donnée puis de laisser s'échapper ceux ayant le plus d'énergie en diminuant la profondeur du piège. Bien que plusieurs méthodes (optique au moyen de lasers désaccordés, magnétique au moyen d'un champ magnétique alternatif.) Existents pour réaliser le piège, la plus efficace est de nature magnétique.

I-3-1. Piégeage magnétique :

Le principe du piégeage magnétique repose sur l'utilisation d'un champ magnétique tournant et exploite le moment magnétique inhérent à chaque atome qui pousse ce dernier à se conduire comme un aimant. En présence d'un champ magnétique, l'atome de moment magnétique u , a une énergie potentielle $E = -uB \cos \theta$ où θ est l'angle entre le moment magnétique et B le champ magnétique. En orientant le moment magnétique u parallèlement mais de sens opposé au champ magnétique, l'énergie potentielle de l'atome est uB et donc il peut être piégé au minimum du champ magnétique.

I-3-2. Refroidissement par évaporation :

Une fois ce piège réalisé le processus de refroidissement par évaporation peut commencer. Pour diminuer la profondeur du piège, la technique la plus employée est celle proposée par l'équipe de D.E.Pritchard et mise en application par celle de B. Davis [30]. Elle consiste à utiliser une onde radiofréquence correspond à cette basculement du moment magnétique des ces atomes de l'état parallèle de même sens à celui de parallèle de sens opposé. Cette modification d'orientation engendre l'expulsion de ces atomes en dehors du piège. En réalisant un balayage en fréquence de l'onde radiofréquence, on abaisse progressivement la température du gaz d'atomes en expulsant les atomes les plus énergétiques jusqu'à obtenir le seuil de dégénérescence quantique. Ainsi les atomes restant dans le piège sont donc de plus en plus froids.

I-4. PERSPECTIVES

Une trentaine de groupes dans le monde disposent désormais de condensats de Bose-Einstein (dont deux en France, à l'ENS et à l'Institut d'optique à Orsay) et les recherches sur ces systèmes se sont fortement diversifiées au cours des dernières années. Une voie d'étude porte sur l'étude du condensat. Un sujet fort débattu à la fois sur le plan théorique et expérimental porte sur l'existence au sein de ces gaz de courants permanents, qui sont une conséquence directe de leur superfluidité. Très récemment, des tourbillons quantiques dans un condensat de rubidium ont été mis évidence au laboratoire Kastler-Brossel de l'ENS (Le gaz est mis en rotation avec un faisceau laser, qui joue un rôle analogue à celui de la cuillère qu'on utilise pour mélanger le sucre dans une tasse de café. Au-dessus d'une fréquence critique de rotation, un ou plusieurs tourbillons apparaissent, puis persistent même si l'on débranche la cuillère laser. Des études sont actuellement en cours pour étudier la nucléation de ces tourbillons, et mesurer le champ de vitesse atomique correspondant. Ces systèmes permettent également de réaliser « un rêve de théoricien » des années 60, qui consiste à superposer des condensats de natures différentes. Pour cela on tire parti du fait que le niveau d'énergie électronique fondamental d'un atome de rubidium ou de sodium est clivé en deux sous-niveaux par l'interaction hyperfine entre les électrons et le noyau. Les chercheurs de Boulder ont ainsi préparé un mélange quantique de condensats en disposant dans le même piège deux assemblées d'atomes de rubidium, correspondant chacune à un des deux sous-niveaux hyperfins. On peut ensuite coupler de manière cohérente ces assemblées grâce à une onde électromagnétique, ce qui présente une analogie profonde avec l'effet Josephson, couplage cohérent de deux supra-conducteurs à travers une jonction isolante. Parmi les multiples champs d'application possibles pour ces condensats, un des plus prometteurs est certainement la génération de jets atomiques cohérents et monomodes, par exemple pour mener des expériences de nano-lithographie atomique. Partant d'un condensat piégé magnétiquement, on utilise l'onde radio du refroidissement évaporatif (avec une intensité très atténuée) pour extraire un filet continu d'atomes du centre du condensat. On guide ensuite ces atomes pour qu'ils se déposent sur une surface de manière à reproduire un motif donné. La parfaite collimation du jet d'atomes - il atteint la limite de résolution fixée par l'inégalité de Heisenberg - en fait un outil très précis pour ces expériences.

On parle de « laser à atomes », pour désigner ce type de jets atomiques, issu d'un condensat. Ils ont en effet des propriétés de cohérence transverse ou longitudinale très voisines des faisceaux lasers lumineux. Malheureusement, le flux d'atomes produits par une expérience de condensation est encore très faible : avec 1 million d'atomes par condensat, et un taux de

répétition de quelques coups par minutes, il faut 30 ans pour déposer une couche atomique sur une surface d'un cm^2 ! Une des voies de recherche actuelles consiste donc à améliorer de manière très significative ce flux. Un autre thème de recherche vise à généraliser le phénomène de condensation à d'autres systèmes, comme des molécules poly atomiques. Même si le refroidissement de tels objets reste encore acrobatique, les perspectives ouvertes par ces recherches sont fascinantes par le pont qu'on pourrait ainsi jeter entre la physique des «gros» objets que sont les édifices moléculaires, et la cohérence quantique macroscopique qui caractérise les condensats de Bose-Einstein.

I-5 Aspects théoriques :

I-5-1 Introduction :

L'étude théorique des gaz piégés a une longue histoire, commençant par l'étude de La fonction d'onde macroscopique pour de tels systèmes. Les dernières années ont vu une augmentation dramatique du nombre d'articles consacrés à la théorie des gaz piégés, soulevant de nombreuses questions non encore résolues, qui attirent l'intérêt de la communauté scientifique.

Comment décrire théoriquement le condensat? Remarquons que pour un gaz avant la condensation, qui est très dilué et donc proche d'un gaz parfait, la description théorique d'un condensat de Bose-Einstein nécessite une prise en compte correcte des interactions entre les atomes. Ces interactions jouent un rôle essentiel pour déterminer les propriétés statiques du condensat (taille, énergie), ainsi que les propriétés dynamiques (modes de vibration, superfluidité). Leur prise en compte semble à priori un problème ardu, car le potentiel d'interaction entre atomes est compliqué : attractif à longue distance, il devient répulsif quand les deux atomes sont suffisamment proches. L'accumulation du condensat au fond du puits de potentiel magnétique conduit à une densité spatiale de l'ordre de 10^{14} atomes/ cm^3 , pour laquelle le modèle du gaz parfait n'est plus valable. Fort heureusement, ces interactions entre atomes condensés sont très bien décrites par une théorie simple de champ moyen. C'est pourquoi l'on peut supposer que tous les atomes sont dans le même état quantique, décrit par une fonction d'onde unique. Cette fonction d'onde du condensat est solution de l'équation de Schrödinger qui fait intervenir l'énergie cinétique des atomes, le potentiel magnétique de confinement, et un terme non linéaire décrivant l'effet des selfs - interactions. Celles - ci peuvent être répulsives ou attractives, selon l'espèce atomique considérée, et ce point joue un rôle essentiel pour le comportement du condensat. A titre d'exemple, pour l'hydrogène, le sodium ou le rubidium, cette interaction est répulsive. On peut alors mettre un nombre

arbitrairement élevé d'atomes dans le condensat, sa taille d'équilibre augmentant avec sa population. Au contraire, pour le lithium 7, les interactions sont attractives ce qui limitent donc le nombre d'atomes condensés. Au-delà d'une certaine valeur, de l'ordre du millier d'atomes, le condensat s'effondre sur lui-même. Des molécules et des agrégats sont formés lors de cet effondrement, et s'échappent du piège magnétique.

I-6 Diverses approximations pour l'étude du condensat :

I-6-1 Approximation de Bogoliubov [23] :

Si l'interaction entre les atomes est faible, ce qui est le cas d'un gaz de bosons idéal, la majorité des atomes se condensent à température nulle dans l'état fondamental.

Pour les densités spatiales relativement élevées des condensats de Bose-Einstein, on ne peut pas ignorer les interactions entre atomes. Ces interactions jouent un rôle essentiel pour déterminer les propriétés statiques du condensat (taille, énergie) ainsi que les propriétés dynamiques. Leur prise en compte semble à priori un problème ardu, car le potentiel d'interaction entre deux atomes $V(\vec{r}_1 - \vec{r}_2)$ est compliqué : attractif à longue distance

($|\vec{r}_1 - \vec{r}_2| > 0.5nm$), il devient répulsif quand les deux atomes sont suffisamment proches car leurs nuages électroniques se recouvrent. Fort heureusement, à très basse température, il n'est pas nécessaire de prendre en compte la forme précise de ce potentiel pour décrire les propriétés du gaz atomique. La relation d'incertitude de Heisenberg nous dit qu'un atome est d'autant plus délocalisé que sa vitesse est bien connue. L'ordre de cette délocalisation quantique est donné par la longueur d'onde thermique λ ; quand celle-ci devient supérieure à la portée du potentiel, on peut ignorer les détails de $V(r_1 - r_2)$ et le caractériser par une seule quantité, appelée longueur de diffusion a . En particulier, deux potentiels ayant même longueur de diffusion ont des effets physiques équivalents.

Pour des interactions répulsives on peut ainsi remplacer le potentiel d'interaction par un potentiel $V(r_1 - r_2)$ beaucoup plus simple.

$$V(r) = g\delta^3(r) \quad ; \quad g = \frac{4\pi\hbar^2}{ma} \quad (\text{I.3})$$

L'Hamiltonien du système se décompose en :

$$H = \sum_K \epsilon_K^0 a_K^+ a_K + \frac{g}{2V} \sum_{K_1 K_2 K_3 K_4} a_{K_1}^+ a_{K_2}^+ a_{K_3} a_{K_4} \delta_{K_1+K_2, K_3 K_4} \quad (\text{I.4})$$

a_k^+ et a_k sont les opérateurs de création et d'annihilation d'une particule dans l'état \vec{K} , obéissant aux relations de commutation usuelles. Le symbole de kroneker δ assure la

conservation de l'impulsion. \tilde{V}_k est la transformée de Fourier du potentiel inter-atomique $V(r)$.

$\varepsilon_k^0 = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$ est l'énergie de chaque particule. Les gaz de bosons imparfaits à basse température ressemblent à un gaz idéal dans l'état stationnaire. A cause des mouvements du condensat et des effets des interactions répulsives, les atomes subissent une transition de l'état fondamental à un autre état avec une impulsion non nulle. L'état fondamental d'un gaz de bosons uniforme et idéal s'écrit dans le formalisme du nombre d'occupation

$$|\Phi_0(N)\rangle = |N, 0, 0\rangle = \frac{(a_0^+)^N |0\rangle}{\sqrt{N!}} \quad (\text{I.5})$$

La densité du condensat est définie par :

$$\frac{\langle \Phi_0 | a_0^+ a_0 | \Phi_0 \rangle}{V} = \frac{N_0}{V} = n_0 \quad (\text{I.6})$$

La prescription de Bogoliubov [31,32] consiste à remplacer a_0^+ et a_0 par $\sqrt{N_0}$. Cette approximation est d'autant plus justifiée lorsque $N_0 \gg 1$. L'Hamiltonien d'interaction devient alors [33] :

$$\hat{H} \cong \frac{g}{2V} \left[N_0^2 + 2N_0 \sum_{k \neq 0} (a_k^+ a_k + a_{-k}^+ a_{-k}) + N_0 \sum_{k \neq 0} (a_k^+ a_{-k}^+ + a_k a_{-k}) \right] \quad (\text{I.7})$$

Les termes qui contiennent sont nuls à cause de la conservation du moment.

$$\hat{N} = \sum_k a_k^+ a_k \approx N_0 + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} (a_k^+ a_k + a_{-k}^+ a_{-k}) \quad (\text{I.8})$$

L'Hamiltonien du système s'écrit finalement sous la forme :

$$\hat{H} = \frac{gnN^2}{2V} + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} \left[(\varepsilon_k^0 + ng) (a_k^+ a_k + a_{-k}^+ a_{-k}) + ng (a_k^+ a_{-k}^+ + a_k a_{-k}) \right] \quad (\text{I.9})$$

Où l'on a supposé qu'à la basse température, le nombre d'atomes non condensés

$N - N_0 = \sum_{k \neq 0} a_k^+ a_k$ est beaucoup plus petit que celui des atomes condensés.

Les termes retenus dans l'Hamiltonien (I.7) sont repris dans le tableau suivant :

terme	signification
$\varepsilon_k^0 a_k^+ a_k$	l'énergie cinétique
$a_0^+ a_0^+ a_0 a_0$	les interactions dans l'état fondamental
$a_0^+ a_k^+ a_k a_0$ et $a_k^+ a_0^+ a_0 a_k$	l'énergie d'une particule non excitée dans l'état fondamental
$a_k^+ a_0^+ a_k a_0$ et $a_0^+ a_k^+ a_0 a_k$	l'énergie d'échange d'une particule dans l'état fondamental
$a_0^+ a_0^+ a_k a_{-k}$ et $a_k^+ a_{-k}^+ a_0 a_0$	l'énergie soit de deux particules initiales, soit deux particules finales dans l'état fondamental

La conservation de l'impulsion exclut l'existence de termes contenant des opérateurs associés à trois particules dans l'état fondamental. L'Hamiltonien du système a une forme quadratique dans les opérateurs de création et d'annihilation. On peut alors le diagonaliser par la transformation canonique suivante [31] :

$$a_k = u_k \alpha_k - v_k \alpha_k \quad (\text{I.10})$$

$$a_{-k}^+ = u_k \alpha_{-k}^+ - v_k \alpha_k \quad (\text{I.11})$$

Les coefficients v_k et u_k sont des fonctions réelles et paires de k et sont liées à la probabilité de trouver une quasi-particule dans l'état k . Ils peuvent être choisis de manière à rendre le commutateur des opérateurs et égal à l'unité (transformation de Bogoliubov). Ces nouveaux opérateurs obéissent aux mêmes relations de commutation usuelles.

$$[\alpha_k, \alpha_k] = [\alpha_k^+, \alpha_k^+] \quad ; \quad [\alpha_k, \alpha_k^+] = 1 \quad (\text{I.12})$$

$$\mu_k^2 - v_k^2 = 1 \quad \text{Pour } k \neq 0$$

Et sont appelés opérateurs de quasi-bosons. Une substitution directe dans l'Hamiltonien (I.9) donne

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{gn^2V}{2} \sum_{K \neq 0} \left[(\varepsilon_k^0 + ng) v_k^2 - 2ng \mu_k v_k \right] \\ & + \frac{1}{2} \sum_{K \neq 0} \left[(\varepsilon_k^0 + ng) (\mu_k^2 + v_k^2) - 2ng \mu_k v_k \right] (\alpha_k^+ \alpha_k + \alpha_{-k}^+ \alpha_{-k}) \\ & + \frac{1}{2} \sum_{K \neq 0} \left[ng (\mu_k^2 + v_k^2) - 2(\varepsilon_k^0 + ng) \mu_k v_k \right] (\alpha_k^+ \alpha_{-k}^+ + \alpha_k \alpha_{-k}) \end{aligned} \quad (\text{I.13})$$

Le premier et le deuxième terme sont diagonaux, mais le troisième ne l'est pas. On peut l'éliminer par un choix convenable des deux fonctions u_k et v_k

$$ng(\mu_k^2 + \vartheta_k^2) = 2(\varepsilon_k^0 + ng)\mu_k\vartheta_k \quad (\text{I.14})$$

$$\mu_k^2 - \vartheta_k^2 = 1$$

On peut alors prendre : $u_k = \cos \theta_k$, $v_k = \sin \theta_k$, $\tan 2\theta_k = \frac{n_g}{\varepsilon_k^0 + n_g}$

Et choisir pour g le signe positif (interaction répulsive) pour éviter la divergence dans

La solution de l'équation (I.12) donne

$$\vartheta_k^2 = \mu_k^2 - 1 = \frac{1}{2} \left(\frac{\varepsilon_k^0 + ng}{E_k} - 1 \right) \quad (\text{I.15})$$

L'énergie d'excitation du système devient alors :

$$E_k = \sqrt{(\varepsilon_k^0 + ng)^2 - (ng)^2} = \sqrt{(\varepsilon_k^0)^2 + 2ng\varepsilon_k^0} \quad (\text{I.16})$$

A partir de (1.13) et (I.14), on obtient une expression simple de l'hamiltonien (I.13) en fonction des nouveaux opérateurs

$$H = \frac{1}{2} gn^2V - \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} (\varepsilon_k^0 + ng - E_k) + \frac{1}{2} \sum_{k \neq 0} E_k (\alpha_k^+ \alpha_k + \alpha_{-k}^+ \alpha_{-k}) \quad (\text{I.17})$$

Dans ce modèle, un seul état k ne peut être occupé que par une seule particule et donc

$$\alpha_k |\Phi_0\rangle = 0 \quad \text{pour } \vec{k} \neq 0$$

L'énergie de l'état fondamental est alors

$$E_g = \Phi_0 | \hat{H} | \Phi_0 = \frac{1}{2} gn^2V - \frac{1}{2} \sum_{K \neq 0} (\varepsilon_k^0 + ng - E_k) = \frac{1}{2} gn^2V - \sum_{K \neq 0} E_k \vartheta_k^2 \quad (\text{I.18})$$

E_k étant l'énergie d'excitation obtenue à partir de l'équation (II-10), c'est-à-dire

$$E_k = \begin{cases} \sqrt{\frac{gn}{m}} \hbar k = \sqrt{\frac{4\pi\hbar^2 an}{m^2}} \hbar k & k \rightarrow 0 \\ \varepsilon_k^0 + \frac{4\pi\hbar^2 an}{m} & k \rightarrow \infty \end{cases} \quad (\text{I.19})$$

Dans la limite de grandes longueurs d'onde $k \rightarrow 0$, les excitations élémentaires sont représentées par la loi de dispersion linéaire des phonons avec une vitesse donnée par

$$\frac{1}{\hbar} \frac{\partial E_k}{\partial k} = \sqrt{\frac{ng}{m}} \quad (\text{I.20})$$

Alors que pour les petites longueurs d'onde, on trouve la loi de dispersion des particules libres

$$\text{plus un autre terme dit Hartree } \varepsilon_k^0 + \frac{4\pi\hbar^2 an}{m}.$$

I-6-2 Approximation de Popov [21,22] :

Il s'agit dans cette approximation d'examiner le comportement thermodynamique d'un système de bosons piégés par un champ magnétique, en utilisant la théorie du champ moyen basée sur l'approximation de Bogoliubov mais à température finie.

Le point de départ est l'Hamiltonien grand canonique en fonction des opérateurs champ

$$\hat{\Psi}(r) \text{ et } \hat{\Psi}^+(r) :$$

$$\hat{K} = \hat{H} - \mu\hat{N} = \int dr \hat{\Psi}^+(r) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} + V_{ext} - \mu \right) \hat{\Psi}(r) + \frac{g}{2} \int dr \hat{\Psi}^+(r) \hat{\Psi}^+(r) \hat{\Psi}(r) \hat{\Psi}(r) \quad (\text{I.21})$$

Où V_{ext} est le potentiel confinant et μ le potentiel chimique des bosons.

En décomposant le système en deux parties : une partie condensée décrite par la valeur moyenne du champ $\Phi(r) = \langle \hat{\Psi}(r) \rangle$ et une partie non condensée décrite par le champ

$$\tilde{\Psi}(r) = \hat{\Psi}(r) - \Phi(r) \quad \text{Tel que : } \langle \tilde{\Psi}(r) \rangle = 0$$

Le terme d'interaction dans l'Hamiltonien (I.19) devient :

$$\begin{aligned} \Psi^+ \Psi^+ \Psi \Psi &= |\Phi|^4 + 2|\Phi|^2 \Phi^* \tilde{\Psi} + 2|\Phi|^2 \Phi \tilde{\Psi}^* + 4|\Phi|^4 \tilde{\Psi}^+ \tilde{\Psi} \\ &+ \Phi^{*2} \tilde{\Psi}^+ \tilde{\Psi} + 4|\Phi|^2 \tilde{\Psi}^+ \tilde{\Psi} + \Phi^* \tilde{\Psi} \tilde{\Psi} + \Phi^2 \tilde{\Psi} \tilde{\Psi} \\ &+ 2\Phi^* \tilde{\Psi}^+ \tilde{\Psi} \tilde{\Psi} + 2\Phi \tilde{\Psi}^+ \tilde{\Psi} \tilde{\Psi} + \tilde{\Psi}^+ \tilde{\Psi} \tilde{\Psi} \tilde{\Psi} \end{aligned} \quad (\text{I.22})$$

Dans l'approximation du champ moyen de Hartree-Fock, on considère que la particule se met sous l'action d'un champ produit par toutes les autres particules, on néglige donc l'effet des corrélations entre les particules. Nous pouvons alors écrire ce champ en fonction de la valeur moyenne du produit $\tilde{\Psi}(r)\tilde{\Psi}^+(r)$, Les trois derniers termes des expressions ci-dessus, s'écrivent alors :

$$\begin{aligned} \tilde{\Psi}^+(r)\tilde{\Psi}(r)\tilde{\Psi}(r) &\cong 2\langle \tilde{\Psi}^+(r)\tilde{\Psi}(r) \rangle \tilde{\Psi}(r) = 2\tilde{n}(r)\tilde{\Psi}(r) \\ \tilde{\Psi}^+(r)\tilde{\Psi}^+(r)\tilde{\Psi}(r) &\cong 2\langle \tilde{\Psi}^+(r)\tilde{\Psi}(r) \rangle \tilde{\Psi}^+(r) = 2\tilde{n}(r)\tilde{\Psi}^+(r) \\ \tilde{\Psi}^+(r)\tilde{\Psi}^+(r)\tilde{\Psi}(r)\tilde{\Psi}(r) &\cong 4\langle \tilde{\Psi}^+(r)\tilde{\Psi}(r) \rangle \tilde{\Psi}^+(r)\tilde{\Psi}(r) = 4\tilde{n}(r)\tilde{\Psi}^+(r)\tilde{\Psi}(r) \end{aligned} \quad (\text{I.23})$$

L'équation dynamique de l'opérateur de fluctuation s'écrit à partir de la relation de commutation de Heisenberg :

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}^+}{\partial t} = [\tilde{\psi}^+, \tilde{K}_2] \quad ; \quad i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = [\tilde{\psi}, \tilde{K}_2] \quad (\text{I.24})$$

La densité de la fraction de bosons non-condensée $\tilde{n}(r)$ est donnée par la moyenne $\langle \tilde{\Psi}^+(r) \tilde{\Psi}(r) \rangle$. Les termes proportionnels à la densité « anormale » $\tilde{m}(r) = \langle \tilde{\Psi}(r) \tilde{\Psi}(r) \rangle$ [31,22] sont négligés. Cette approximation, dite de Popov, est satisfaite à haute température où $\tilde{n}(r) \gg \tilde{m}(r)$. En effet, lorsque la température s'approche de la température critique de condensation (c'est-à-dire la température à partir de laquelle la densité des atomes condensés devient négligeable par rapport à la densité des atomes non-condensés), le terme qui exprime la collision entre les deux phases devient négligeable.

A basse température, on peut ignorer les densités normale et anormale car, selon l'approximation de Bogoliubov, la fraction non-condensée est très faible.

L'Hamiltonien grand canonique de ce système, d'après la décomposition et les propriétés du système atomique à basse température s'écrit :

$$\hat{K} = \hat{K}_0 + \hat{K}_1 + \hat{K}_2$$

Avec :

$$\hat{K}_0 = \int dr \Phi^*(r) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext} - \mu + \frac{g}{2} n_c(r) \right) \Phi(r) \quad (\text{I.25.a})$$

$$\hat{K}_1 = \int dr \tilde{\Psi}(r) \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext} - \mu + g \left(n_c(r) + 2g \tilde{n}(r) \right) \right) \Phi(r) \quad (\text{I.25.b})$$

$$\hat{K}_2 = \int dr \hat{\Psi}^+(r) \mathbf{J} \tilde{\Psi}(r) + \frac{g}{2} \int dr \Phi^2 \hat{\Psi}^+(r) \hat{\Psi}^+(r) + \frac{g}{2} \int dr \Phi^{*2} \hat{\Psi}^+(r) \hat{\Psi}^+(r) \quad (\text{I.25.c})$$

Dans (I.25.a, b et c), nous avons introduit les quantités $\mathbf{J} = -\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext} - \mu + gn(r)$

Et $n(r) = n_c(r) + \tilde{n}(r)$ avec $n_c(r) = |\Phi|^2$

A partir de l'équation de mouvement de l'opérateur champ dans la représentation de Heisenberg :

$$i\hbar \frac{\partial \Psi(r,t)}{\partial t} = [\Psi(r,t), H] = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext} - \mu \right) \hat{\Psi}(r,t) + g \hat{\Psi}^+(r,t) \hat{\Psi}(r,t) \hat{\Psi}(r,t) \quad (\text{I.26})$$

On trouve l'équation de mouvement du condensat :

$$i\hbar \frac{\partial \phi(r,t)}{\partial t} = \left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext}(r) - \mu + gn_c + 2g\tilde{n}(r,t) \right) \phi(r,t) + g\tilde{m}(r,t)\phi^*(r,t) + g\langle \tilde{\psi}^+(r,t)\tilde{\psi}(r,t)\tilde{\psi}(r,t) \rangle \quad (\text{I.27})$$

Si l'on considère une solution statique $\phi(r)$, selon Gross et Pitaevskii [34, 35, 36] de l'équation du condensat précédente (II.18), et après suppression des deux derniers termes, on trouve [37, 38]

$$\left(-\frac{\hbar^2 \nabla^2}{2m} + V_{ext} - \mu + g\left(n_c(r) + 2g\tilde{n}(r) \right) \right) \Phi(r) = [J - gn_c] \Phi(r) \quad (\text{I.28})$$

Cela implique que \hat{K}_1 et \hat{k}_1^+ s'annulent automatiquement.

On peut aussi diagonaliser \hat{K}_2 par la transformation de Bogoliubov suivante :

$$\tilde{\Psi}(r) = \sum_j (\mu_j(r)\alpha_j + v_j^*(r)\alpha_j^+) \quad (\text{I.29.a})$$

$$\tilde{\Psi}^+(r) = \sum_j (\mu_j^*(r)\alpha_j^+ + \vartheta_j(r)\alpha_j) \quad (\text{I.29.b})$$

Avec les propriétés :

$$\int dr [\mu_i^*(r)\mu_j(r) - v_i^*(r)\vartheta_j(r)] = \delta_{ij} \quad (\text{I.30})$$

Les opérateurs des quasi-particules ont une dépendance harmonique en temps et en énergie d'excitation, et peuvent s'écrire sous la forme suivante [39] :

$$\alpha_i(t) = \alpha_i \exp\left(\frac{-i\varepsilon_i t}{\hbar}\right) \quad ; \quad \alpha_i^+(t) = \alpha_i^+ \exp\left(\frac{+i\varepsilon_i t}{\hbar}\right) \quad (\text{I.31})$$

L'Hamiltonien (I.16) dans l'approximation du champ moyen de popov devient :

$$\hat{K}_{popov} = \int dr \Phi^*(r) \left(-\frac{\nabla^2}{2m} + V_{ext}(r) - \mu + \frac{g}{2} n_c(r) \right) \Phi(r) + \sum_j \varepsilon_j \alpha_j^+ \alpha_j \quad (\text{I.32})$$

L'équation dynamique de l'opérateur de fluctuation s'écrit à partir de la relation de commutation de Heisenberg.

$$i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}^+}{\partial t} = [\tilde{\psi}^+, \tilde{K}_2] \quad ; \quad i\hbar \frac{\partial \tilde{\psi}}{\partial t} = [\tilde{\psi}, \tilde{K}_2]$$

Cette équation peut être réécrite sous la forme d'un système d'équations (dit de Bogoliubov couplées) :

$$J\mu_j(r) + gn_c(r)\vartheta_j(r) = \varepsilon_j\mu_j(r) \quad (\text{I.33.a})$$

$$J\vartheta_j(r) + gn_c(r)\mu_j(r) = -\varepsilon_j\vartheta_j(r) \quad (\text{I.33.b})$$

Et on a :

$$\tilde{n} = \sum_j \left(|\mu_j|^2 + |\vartheta_j|^2 \right) \langle \alpha_j^+ \alpha_j \rangle \quad (\text{I.34.a})$$

$$\tilde{m} = 2 \sum_j \mu_j \vartheta_j^* \alpha_j^+ \alpha_j \quad (\text{I.34.b})$$

Il apparait, dans les équations (I.34.a,b), que les coefficients u_i et v_i représentent la probabilité de présence des quasi-particules.

On peut résoudre le système d'équations (I.34.a,b) par l'approximation de la densité locale [39, 40] où l'on pose :

$$\mu_j(r) = \mu(r, p) e^{i\varphi(r)} \quad (\text{I.35.a})$$

$$\vartheta_j(r) \quad \vartheta_j(r) = \vartheta(r, p) e^{i\varphi(r)} \quad (\text{I.35.b})$$

Avec $p = -i\hbar\nabla\varphi$. L'équation (I.33.a,b) devient alors :

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V_{ext}(r) - \mu + \frac{g}{2} n_c(r) \right) \mu(r, p) + g n_c(r) \vartheta(r, p) = \varepsilon(r, p) \mu(r, p) \quad (\text{I.36.a})$$

$$\left(\frac{p^2}{2m} + V_{ext}(r) - \mu + \frac{g}{2} n_c(r) \right) \vartheta(r, p) + g n_c(r) \mu(r, p) = -\varepsilon(r, p) \vartheta(r, p) \quad (\text{I.36.b})$$

L'approximation de Popov apporte des améliorations considérables à l'approximation de Bogoliubov elle tient compte de la fraction non-condensée [41,42], dont la présence seule témoigne des effets thermiques ($\tilde{n} = 0$ à température nulle).

I-6-3 Approximation de Hartree-Fock-Bogoliubov [24]:

Cette approximation consiste à introduire la densité anormale. En effet, alors que le théorème de Hugenholtz-Pines (HP) [43] donne:

$$\mu_{HP} = g(n + \tilde{n} - \tilde{m}) \quad (\text{I.37})$$

L'équation statique de HFB donnée par [44]

$$\left[-\frac{\nabla^2}{2m} + g n_c + 2g\tilde{n} + g\tilde{m} \right] = \sqrt{n_c} = \mu_c \sqrt{n_c} \quad (\text{I.38})$$

Fournit :

$$\mu_c(HFB) = g(n + \tilde{n} - \tilde{m}) \quad (\text{I.39})$$

Ce qui est différent du potentiel chimique de HP donnée par l'équation (I.37). Pour avoir le même potentiel chimique, il faut omettre le terme qui contient \tilde{m} et ne garder que le terme en \tilde{n} dans l'équation (I.38).

Pour pouvoir traiter un gaz de bosons piégés à température finie, il faut faire un calcul général de la fonction de réponse, c'est-à-dire, qu'il faut garder les fluctuations de toutes les densités δn_c , $\delta \tilde{n}$ et $\delta \tilde{m}$ dans les équations de mouvements (I.37).

Dans les trois approximations étudiées, on remarque que cette hypothèse n'est pas utilisée. De ce fait, les résultats obtenus pour la densité du condensat diffèrent des données expérimentales.

L'origine naturelle de ce problème est que bien que \tilde{m} et \tilde{n} fassent partie intégrante de la physique du système, elles ne sont pas traitées sur le même pied d'égalité que n_c .

L'idée serait donc que la dynamique des différentes variables du problème soit issue d'un même principe de départ de sorte à conserver une certaine consistance de l'approche. C'est ce que nous allons présenter au chapitre suivant.

I-6-4 Le principe variationnel de Balian-Vénéroni [26,27]:

L'outil variationnel introduit par Balian et Vénéroni est la fonctionnelle \mathfrak{S} suivante:

$$\mathfrak{S} = \text{Tr} A D(t_1) - \int_{t_0}^{t_1} dt \text{Tr} A(t) \left(\frac{dD(t)}{dt} + i[H, D(t)] \right) \quad (\text{I.40})$$

Dont : le terme entre parenthèse est l'équation de liouville Von Neumann $A(t)$ et $D(t)$ sont deux opérateurs variationnels.

En intégrant par parties l'expression, on obtient:

$$\mathfrak{S} = \text{Tr} A(t_0) D(t_0) + \int_{t_0}^{t_1} dt \text{Tr} D(t) \left\{ \frac{dA(t)}{dt} + i[H, A(t)] \right\} \quad (\text{I.41})$$

Les données qui définissent la mesure, à savoir l'opérateur densité D_0 connu à l'instant initial t_0 , et l'observable au temps t_1 interviennent par les conditions aux limites :

$$D(t_0) = D_0 ; A(t) = A$$

Les variations de (I.40) par rapport à $A(t)$ donnent :

$$\text{Tr} \delta A(t) \left[\frac{dD(t)}{dt} + i[H, D(t)] \right] = 0 \quad (\text{I.42})$$

I-7 Application du principe de Balian-Vénéroni à un système de bosons piégés :

On écrit l'opérateur variationnel linéaire le plus grand $A(t)$ sous la forme

$$A = v_a I + \tilde{\lambda}_a \tau \alpha + \frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau S_a \alpha \quad (\text{I.43})$$

Où interviennent le c-nombre v_a , le vecteur à $2n$ composantes λ_a , et la matrice $(2n \times 2n) S_a$. La forme variationnelle que nous adoptons pour l'opérateur $D(t)$ est l'exponentielle d'une forme quadratique, que nous pouvons écrire sous la forme factorisée:

$$D = \exp(v_a I) \exp(\tilde{\lambda}_a \tau \alpha) \exp\left(\frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau S_a \alpha\right) \quad (\text{I.44})$$

Où v_a , λ_a , et S_a sont des objets du même type que v_a , λ_a , et S_a . Une telle matrice densité correspond à un état non corrélé du problème bosonique à N corps, et décrit un système de particules (ou quasi particules) indépendantes.

L'action réduite de Balian-Vénéroni s'écrit :

$$\mathfrak{S} = \text{Tr}AD \Big|_{t_0}^{t_1} - \int_{t_0}^{t_1} dt \left(\frac{\dot{Z}}{Z} \text{Tr}AD - iZ \left\{ \tilde{L}_a \tau (i \langle \dot{\alpha} \rangle - v) - \frac{1}{2} \text{tr} S_a (i \dot{\rho} - [\rho, h]) \right\} \right) \quad (\text{I.45})$$

Où $h = -2 \frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \rho}$ est l'Hamiltonien «Hartree-Fock»

Pour établir les équations de mouvement de $D(t)$, on varie l'action réduite par rapport à v_a , λ_a (ou de façon équivalente L_a , S_a). Comme $\text{Tr}AD$ est linéaire en v_a , la variation de (I.45) par rapport à v_a est égale à la première équation du mouvement est donc:

$$\dot{Z} = 0 \quad (\text{I.46})$$

La fonction de partition est. Donc conservée. La stationnarité de l'action par rapport à L_a et S_a fournit les deux autres équations de mouvement

$$i \dot{\alpha} = \vartheta \quad (\text{I.47.a})$$

$$i \dot{\rho} = [\rho, h] \quad (\text{I.47.b})$$

Le système (I.47) constitue les équations du champ moyen. Dans la suite de ce travail, nous les désignerons par l'acronyme CMDT, pour (champ moyen dépendant du temps) pour un système de fermions [29], l'équation (I.47.a) n'a évidemment pas d'analogue ; l'équation correspondante à (I.47.b) est l'équation de Hartree - Fock (ou Hartree - Fock - Bogoliubov) dépendant du temps, formellement identique a (I.47.b) à condition de remplacer ε par l'énergie de Hartree-Fock [27]

Chapitre II

II-1 Formalisme général de Balian-Vénéroni :

Le principe variationnel de Balian-Vénéroni [26.27] permet d'obtenir une dynamique approchée en visant à prédire la valeur moyenne d'une observable, une fois que des *ansätze* (espaces d'essai) aient été choisis pour les objets variationnels. Pour évaluer cette valeur moyenne, il faut déterminer l'opérateur densité du système à l'instant final t_1 . Pour cela, on résout l'équation de Liouville-Von-Neumann :

$$i\hbar \frac{dD(t)}{dt} = [H, D(t)] \quad (\text{II.1})$$

Avec la condition initiale $D(t_0) = D_0$. La solution formelle de cette équation est de la forme :

$$D(t) = U^+(t, t_0) D_0 U(t, t_0) \quad (\text{II.2})$$

Où U est l'opération d'évolution vérifiant

$$U(t, t_0) = \exp\left(\frac{-i}{\hbar} H(t - t_0)\right) \quad (\text{II.3})$$

Un système préparé dans un état initial, le résultat cherché est donné par

$$\langle A \rangle_{t_1} = \text{Tr} A D(t_1) = \text{Tr} A U(t_1, t_0) D_0 U(t_0, t_1) \quad (\text{II.4})$$

Pour avoir l'expression de $(A(t))$ dans la représentation de Heisenberg, il suffit d'utiliser la propriété de groupe satisfaite par U et l'invariance cyclique de la trace.

$$\langle A \rangle_{t_1} = \text{Tr} U(t_0, t) A U(t_1, t_0) D(t_0) = \text{Tr} A(t_1, t_0) D(t_1) \quad (\text{II.5})$$

Pour cela, on résout l'équation de Heisenberg pour l'observable $\hat{A}(t_1, t)$

$$i\hbar \frac{d\hat{A}(t_1, t_0)}{dt} = -[\hat{A}(t_1, t_0), H] \quad (\text{II.6})$$

Avec la condition finale $\hat{A}(t_1, t_1) = \hat{A}$

En pratique, pour la majorité des systèmes physiques comprenant de nombreux degrés de liberté, l'équation de Liouville-Von-Neumann (II.1) et celle de Heisenberg (II.6) ne peuvent pas être résolues exactement et l'évaluation exacte de la valeur moyenne (II.4) ou (II.5) est impossible. Par ailleurs, le nombre élevé de degrés de liberté du système entraîne que l'état initial D_0 lui-même peut avoir une forme compliquée qui empêche toute manipulation. De ce fait, le recours à des méthodes d'approximation est inévitable. Ces méthodes poursuivent en général deux objectifs. Tout d'abord, elles visent à réduire le nombre de degrés de liberté. De plus, elles s'attachent à simplifier la description des couplages entre ces degrés de liberté par l'introduction d'hypothèses simplificatrices plausibles (gaz idéal, interactions limitées aux proches voisins,... etc.).

II-1-2 Le principe variationnel de Balian-Vénéroni:

Balian et Vénéroni [26] ont introduit un principe variationnel dépendant du temps, bâti autour de l'équation exacte de Liouville-Von-Neumann.

Lorsque l'on n'introduit aucune restriction sur les espaces variationnels, on retrouve les équations exactes (II.1) et (II.4). Mais pour des espaces variationnels restreints, il permet d'obtenir de façon consistante une approximation au résultat de la mesure en fournissant une évaluation optimale de la valeur moyenne de l'observable considérée.

L'outil variationnel introduit par Balian et Vénéroni est la fonctionnelle \mathfrak{S} [33] suivante:

$$\mathfrak{S} = \text{Tr}AD(t_1) - \int_{t_0}^{t_1} dt \text{Tr}A(t) \left(\frac{dD(t)}{dt} + i[H, A(t)] \right) \quad (\text{II.7})$$

On reconnaît dans le terme entre parenthèses l'équation (II.1) De Liouville-Von-Neumann.

Dans (II.7), il apparaît deux objets variationnels: les opérateurs $A(t)$ et $D(t)$. Le symbole Tr dénotera une trace sur tous les états de l'espace de Fock approprié au système à N-Corps considéré. Les crochets indiquent un commutateur et H est l'Hamiltonien (exact) du système.

Les données qui définissent la mesure, à savoir l'opérateur densité D_0 connu à l'instant initial t_0 , et l'observable A mesurée à l'instant final t_1 interviennent par les conditions aux limites:

$$D(t_0) = D_0 \quad ; \quad A(t_1) = A$$

Les quantités $A(t)$ et $D(t)$ qui rendent \mathfrak{S} stationnaire, sont celles qui fournissent la prédiction optimale, pour un choix donné d'espaces variationnels pour $A(t)$ et $D(t)$, de la valeur moyenne de l'observable A au temps t_1 , à partir de la connaissance de l'état initial du système D_0 à l'instant t_0 . Les variations de (II.6) par rapport à $A(t)$ donnent:

$$\text{Tr} \delta A(t) \left[\frac{dD(t)}{dt} + i[H, D(t)] \right] = 0 \quad (\text{II.9})$$

Tandis que celles par rapport à $D(t)$

$$\text{Tr} \delta D(t) \left[\frac{dA(t)}{dt} + i[A(t), H] \right] = 0 \quad (\text{II.10})$$

Quand les variations $\delta A(t)$ et $\delta D(t)$ ne sont soumises à aucune restriction, c'est-à-dire quand les espaces variationnels sont les plus généraux, on est conduit bien sur aux équations d'évolution exactes (II.1, II.5)

II-2 Application du principe de Balian-Vénéroni à un système de bosons piégés :

Nous nous intéressons, à un système de n bosons en interaction, et nous introduisons les opérateurs de création et d'annihilation de bosons obéissant aux relations de commutation usuelles,

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij} \quad ; \quad [a_i^+, a_j^+] = [a_i, a_j] = 0 \quad ; \quad i, j = 1, \dots, n \quad (\text{II.11})$$

L'espace de Fock associé à notre système est construit au moyen des opérateurs de création $\{a_i^+, i = 1, \dots, n\}$. Il est commode d'introduire les opérateurs α à $2n$ composantes,

$$\alpha = \begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix} \quad (\text{II.12})$$

Pour lesquels les relations de commutation (II.11) s'écrivent:

$$[\alpha_i, \alpha_j] = \tau_{ij} \quad ; \quad \tau = i\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1_n \\ 1_n & 0 \end{pmatrix} \quad ; \quad (1_n) = \delta_{ij} \quad (\text{II.13})$$

II-2-1 Les espaces variationnels :

L'espace variationnel pour $A(t)$ est choisi comme l'extension de l'expression (I.41), contenant l'opérateur à trois bosons (de même que celle des opérateurs $(a^+ a^+ aa)$)

$$A = v_a + \tilde{\lambda}_a \tau \alpha + \frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau S_a \alpha + \frac{1}{3} (P_a)_{ijk} \alpha_i \alpha_j \alpha_k \quad (\text{II.14})$$

Dans cette expression, v_a le c nombre et λ_a le vecteur à $2n$ composantes, S_a la matrice $(2n \times 2n)$, nous avons introduit la matrice τ pour des raisons de commodité. Le signe tilda dénote la transposition matricielle et on ne considère que des matrices symétriques vérifiant

$$\tilde{S}_a = \tau S_a \tau \quad (\text{II.15})$$

Donc on choisit $D(t)$ comme l'exponentielle forme quadratique (E.F.Q) que nous pouvons écrire sous la forme factorisée .

$$D = \exp\left(v_a + \tilde{\lambda}_a \tau \alpha + \frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau S_a \alpha + \frac{1}{6} \Pi_{ijk} \alpha_i \alpha_j \alpha_k \right) \quad (\text{II.16})$$

On pose :

$$D_0 = \exp(v_a) \exp(\tilde{\lambda}_a \tau \alpha) \exp\left(\frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau S_a \alpha\right) \quad (\text{II.17})$$

Comme nous venons de le mentionner, la forme (II.18) est peu pratique, nous allons considérer son développement en puissance de Π , au premier ordre, on obtient l'expression.

$$D \approx D_0 + \frac{1}{6} \Pi_{ijk} \int_0^1 du D_0^u \alpha_i \alpha_j \alpha_k D_0^{1-u} + o(\Pi^2) \quad (\text{II.18})$$

Ou' τ_a, λ_a et S_a sont des objets de même type que v_a, λ_a et S_a sauf S_a est de la classe S matrice densité correspond à un état non-corrélé du problème bosonique à N corps, et décrit un système de particules (ou de quasi - particules) indépendantes. Pour que cet opérateur appartienne à l'espace des matrices densités, il faut que la matrice $\exp(-S_a)$ définisse une transformation de Bogoliubov acceptable (c'est-à-dire que sa trace existe). On suppose que cette propriété est toujours vérifiée.

Ecrivons maintenant l'expression de l'action \mathfrak{S} . Nous commençons par le calcul de $\text{tr} A \frac{dD}{dt}$ on évalue d'abord $\text{Tr}AD$ puis de dériver cette expression par rapport au temps, en gardant constants les paramètres de A .

Pour tout opérateur O , nous utiliserons les notations :

$$\text{Tr}(OD) / \text{Tr}D ; \quad \langle O \rangle_0 = \text{Tr}(OD_0) / \text{Tr}D_0 \quad (\text{II.19})$$

Nous avons :

$$\alpha = \bar{\alpha} + \langle \alpha \rangle \quad (\text{II.20})$$

$$\langle A \rangle = v_a + \tilde{\lambda}_a \tau \langle \alpha \rangle + \frac{1}{2} S_a \rho_{ij} + \frac{1}{2} \tau S_a \langle \tilde{\alpha} \alpha \rangle \quad (\text{II.21})$$

$$+ \frac{1}{3} (P_a)_{ijk} \left(\langle \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k \rangle - 3\tau \rho \langle \alpha \rangle + \langle \alpha_i \rangle \langle \alpha_j \rangle \langle \alpha_k \rangle \right)$$

$$\langle \dot{A} \rangle = (\tilde{L}_a)_I \tau \langle \dot{\alpha} \rangle - \frac{1}{2} (M_a)_{ij} \dot{\rho} + \frac{1}{3} (p_a)_{ijk} \dot{G} \quad (\text{II.22})$$

$$\text{Tr}A\dot{D} = \frac{\dot{Z}}{Z} \text{Tr}AD + Z \left(\tilde{L}_a \tau \langle \dot{\alpha} \rangle - \frac{1}{2} \text{Tr}M_a \dot{\rho} + \frac{1}{3} \text{Tr}P_a \dot{G} \right) \quad (\text{II.23})$$

On sait que $\text{Tr}(\bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k D_0) = 0$

Par ailleurs, au moyen de la relation:

$$\bar{\alpha} D_0^U = D_0^U \left(\frac{\rho}{\rho+1} \right)^U \bar{\alpha} \quad (\text{II.24})$$

On obtient l'expression du cumulants G_{ijk}

$$G_{ijk} \equiv \langle \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k \rangle = \int_0^1 du \left((1+\rho)^u \rho^{1-u} \tau \prod_{ij}^{(1+\rho)^{1-u} \rho^u \tau} \right)^k \quad (\text{II.25})$$

Où l'on a introduit la notation contractée:

$$\left({}_A \Pi_B^C \right)_{ij}^k = A_{im} \Pi_{mnl} B_{nj} C_{lk} \quad (\text{II.26})$$

Les espaces variationnels (II.14) et (II.16) sont maintenant paramétrisés par v_a, λ_a, S_a et P_a pour $A(t)$ et par $Z, \langle \alpha \rangle, \rho$ et G .

Passons maintenant au calcul de $Tr[A, H]D$ sans spécifier la fonction particulière de L'Hamiltonien H . Pour ce faire, on remarque que la variation d'un opérateur exponentiel par rapport à ses paramètres v, λ et S s'écrit comme le produit de cet opérateur par un polynôme du deuxième degré en α , ceci permet d'exprimer la variation de l'énergie $\varepsilon = \langle H \rangle = TrHD / Z$ associée à une variation de D sous la forme :

$$\delta \xi \equiv \tilde{v} \tau \delta \langle \alpha \rangle - \frac{1}{2} Tr h \delta \rho \quad (\text{II.27})$$

Le vecteur v et la matrice h définis par (II.28) sont fournis par les différentielles de l'énergie:

$$v(\langle \alpha \rangle, \rho) = \tau \frac{\partial \xi}{\partial \langle \alpha \rangle} \quad ; \quad h(\langle \alpha \rangle, \rho) = -2 \frac{\partial \xi}{\partial \rho} \quad (\text{II.28})$$

Où l'on introduit la convention:

$$\frac{\partial}{\partial \rho_{ij}} = \left(\frac{\partial}{\partial \rho} \right)_{ji} \quad (\text{II.29})$$

Donc on calcule $Tr[D, A]H$:

Il faut l'écrire sous une forme analogue à (II.23) et faire apparaître les quantités L_a, M_a et P_a

Introduisons d'abord la quantité Γ :

$$\Gamma_{ijk} = \frac{-1}{6} \left[\tau^{-1} G_{\tau(1+\rho)^{-1}} \right]_{ij}^k \quad (\text{II.30})$$

qui est aussi symétrique par rapport à ses trois indices.

Si l'on remarque que pour les choix (II.14) et (II.16), le commutateur $[D, A]$ est aussi le produit d'un polynôme d'ordre 2 en α et de D , on voit que la quantité, peut s'exprimée en fonction de ν et h .

Il se trouve alors que les quantités qui apparaissent dans le problème sont les suivantes:

$$q_i = \Gamma_{lmn} \left\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_i, H] \right\rangle_0 \quad (\text{II.31.a})$$

$$Q_{ij} = -\tau_{ip} \Gamma_{lmn} \left\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, H] \right\rangle_0 \quad (\text{II.31.b})$$

$$\Omega_{ijk} = \left\langle [: \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k :, H] \right\rangle_0 \quad (\text{II.31.c})$$

$$\sum_{ijk} = \Gamma_{lmn} \left\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [: \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k :, H] \right\rangle_0 \quad (\text{II.31.d})$$

Grace aux expressions (II.31), le deuxième terme de l'action BV s'exprime alors simplement par :

$$Tr[A.H]D = -Z \left(\tilde{\nu} \tau L_a - \frac{1}{2} Tr[\rho, S_a] h - \tilde{L}_a \tau (\vartheta + q) + \frac{1}{2} Tr M_a[\rho, h] - Q - \frac{1}{3} Tr P_a(\Omega + \Sigma) \right) \quad (\text{II.32})$$

En rassemblant les expressions, l'action BV réduite s'écrit :

$$\mathfrak{S} = \frac{\dot{Z}}{Z} TrAD - iZ \left(\tilde{L}_a \tau (i \langle \dot{\alpha} \rangle - \vartheta - q) - \frac{1}{2} Tr M_a (i \dot{\rho} - [\rho, h] - Q) + \frac{1}{3} Tr P_a (i \dot{G} - \Omega + \Sigma) \right) \quad (\text{II.33})$$

II-2-2 Les équations du mouvement:

On obtient les équations d'évolution des moments de D , en imposant la stationnarité de l'action BV par rapport aux variations arbitraires de v_a, λ_a et S_a ou par rapport à l_a et S_a , on déduit :

$$i\dot{Z} = 0 \quad (\text{II.34.a})$$

$$i\langle \dot{\alpha} \rangle = \vartheta + q \quad (\text{II.34.b})$$

$$i\dot{\rho} = [\rho, h] + Q \quad (\text{II.34.c})$$

$$i\dot{G} = \Sigma + \Omega \quad (\text{II.34.d})$$

L'équation (II.34.c), gouvernant l'évolution de la matrice densité à un corps ρ , est différente de son analogue CMDT (champ moyen dépend du temps), puisque la présence du terme Q détruit la propriété d'évolution unitaire que l'on a mentionnée à propos de cette dernière. Il s'en suit qu'un état initialement pur, $\rho(t_0)(\rho(t_0) + 1) = 0$ (et $G(t_0) = 0$), va en général évoluer vers un état non pur. Autrement dit, l'entropie de Von-Neumann – $\text{Tr } D \log D$ (que l'on ne peut pas calculer exactement) n'est pas conservée.

Le problème est alors ramené à un système d'équations d'évolution non-linéaires en $\langle \alpha \rangle$ et $\langle \rho \rangle$, ce qui était déjà le cas pour l'approximation CMDT. Ce système est donc du même type que CMDT. Remarquons que la dynamique engendrée par ce système ne garantit pas qu'un opérateur densité défini positif initialement le reste durant l'évolution ultérieure.

Ce problème est difficilement soluble en toute généralité. Dans l'adjonction d'opérateurs à « quatre bosons » (ou plutôt à deux corps) $\alpha_i \alpha_j \alpha_k \alpha_l$ dans les espaces variationnels des opérateurs $A(t)$ et $D(t)$, conduit à la troncature de la hiérarchie exacte à l'ordre suivant. Autrement dit, l'équation d'évolution du cumulante C deviendra à ce niveau (pour l'Hamiltonien cubique). Dans l'équation qui gouverne l'évolution du cumulante suivant, soit $\langle \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k \bar{\alpha}_l \rangle - \langle \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k \bar{\alpha}_l \rangle_0$, les termes non linéaires en C , ainsi que les cumulants d'ordre supérieur seront absents.

Ces équations constituent une extension naturelle des équations CMDT (I.46-47) quand le cumulante à trois bosons G n'est pas identiquement nul. Comme nous l'avons déjà prévu par

des considérations générales, la solution $D(t_0)$ ne dépend ni de A , ni de t_1 . Le calcul de $TrAD(t_1)$ est donc ramené à la résolution d'un problème aux conditions initiales. Celle-ci consistent en l'ensemble des quantités $Z(t_0)$, $\langle \alpha \rangle(t_0)$, $\rho(t_0)$ et $G(t_0)$.

Chapitre III

Les équations de mouvement TDHFB régissent la dynamique d'un système de bosons à température finie. Nous allons exploiter ces résultats pour un système de bosons piégé par un potentiel extérieur $V_{\text{ext}}(\mathbf{r})$. Cela nous permettra de comparer nos résultats avec ceux obtenus par d'autres approximations.

Les équations TDHFB peuvent s'écrire sous une forme plus simple.

$$i\hbar \frac{\partial \langle a \rangle}{\partial t} = \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \langle a^+ \rangle} \quad (\text{III.1.a})$$

$$i\hbar \frac{\partial \langle a^+ \rangle}{\partial t} = -\frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \langle a \rangle} \quad (\text{III.1.b})$$

$$i\hbar \frac{\partial \rho}{\partial t} = -2 \left[\rho, \frac{\partial \mathcal{E}}{\partial \rho} \right] \quad (\text{III.1.c})$$

On définit les composantes de la matrice densité :

$$(1+2\rho)_{ij} = \begin{pmatrix} \langle \bar{a}_i \bar{a}_j^+ + \bar{a}_j^+ \bar{a}_i \rangle & -2 \langle \bar{a}_i \bar{a}_j \rangle \\ -2 \langle \bar{a}_i^+ \bar{a}_j^+ \rangle & -\langle \bar{a}_i^+ \bar{a}_j + \bar{a}_j \bar{a}_i^+ \rangle \end{pmatrix} \quad (\text{III.2})$$

III-1-1 Application à un Hamiltonien quadratique

L'Hamiltonien quadratique le plus général s'écrit:

$$H = \nu_k + \tilde{\lambda}_k \tau \alpha + \frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau S_k \alpha \quad (\text{III.3})$$

où ν_k est un c-nombre, λ_k est un vecteur à 2 composantes et S_k est une matrice symplectique 2×2 .

III-1-1-a Calcul du q_i (Appendice B)

Nous avons l'expression du q_i du chapitre précédent:

$$q_i = \Gamma_{lmn} \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_l, H] \rangle_0 \quad (\text{III.4})$$

On remplace l'opérateur H par son expression (III.3). En utilisant les propriétés suivantes

$$[\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a] = \tau_{ia} \quad \text{et} \quad \langle : \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \rangle = 0$$

On obtient : $q_i = 0$

III-1-1-b Calcul de Q_{ij}

Nous avons l'expression de Q_{ij} suivante

$$Q_{ij} = -\tau_{ip} \Gamma_{lmn} \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, H] \rangle \quad (\text{III.5})$$

On développe le calcul sachant que $\langle \bar{\alpha} \rangle = 0$ cela nous donne aussi

$$Q_{ij} = 0$$

III-1-1-C Calcul de Ω_{ij}

On a défini Ω_{ij} comme suit :

$$\Omega_{ij} = \langle [: \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k : , H] \rangle \quad (\text{III.6})$$

$$\text{Et} \quad \langle : \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \rangle = 0$$

$$\langle : \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k : \bar{\alpha}_a \rangle = 0$$

$$\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : : \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_k : \bar{\alpha}_a \rangle = 0$$

$$\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : : \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_k : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \rangle = 0$$

$$\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b : \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k : \rangle = 0$$

$$\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a : \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k : \rangle = 0$$

Donc :

$$\Omega_{ij} = 0 \quad \text{et} \quad \sum_{ijk} = 0$$

On a donc finalement

$$q_i = 0 ; \quad Q_{ij} = 0 ; \quad \Omega = 0 ; \quad \sum_{ijk} = 0$$

Pour un Hamiltonien quadratique. Il n'y a donc aucun effet du cumulants à trois bosons sur l'Hamiltonien quadratique. Ce résultat est en fait prévisible puisque les équations TDHFB sont exactes dans le cas de l'oscillateur harmonique.

III-1-2 Application à un Hamiltonien quartique

Ecrivons l'Hamiltonien quartique le plus général sous la forme:

$$H = v_k + \tilde{\lambda}_k \tau \alpha_a + \frac{1}{2} \alpha_a \tau S_k \alpha_b + \frac{1}{4!} (g_{abcd}) \alpha_a \alpha_b \alpha_c \alpha_d \quad (\text{III.8})$$

L'énergie s'écrit:

$$\begin{aligned} \langle H \rangle &= \lambda_1 \langle \alpha_2 \rangle + \lambda_2 \langle \alpha_1 \rangle - \frac{1}{2} S_{\ell_2} \rho_{2\ell} + \frac{1}{2} (\tau S) \langle \alpha_2 \rangle^2 \\ &+ \frac{1}{4!} g \left[-\rho_{12} \rho_{21} + 2\rho_{11}^2 + 2G_{221} \langle \alpha_1 \rangle + 2G_{211} \langle \alpha_2 \rangle \right] \\ &+ \rho_{21} \langle \alpha_1 \rangle^2 - 3\rho_{11} \langle \alpha_2 \rangle \langle \alpha_1 \rangle - \rho_{12} \langle \alpha_2 \rangle^2 + \langle \alpha_2 \rangle^2 \langle \alpha_1 \rangle^2 \end{aligned}$$

Où en plus des définitions dans (III.3), nous avons introduit les tenseurs à 3 et 4 indices représentant les interactions à 3 et 4 bosons. Nous supposons une sommation implicite sur les indices répétés. Par ailleurs, et afin de simplifier les calculs et par la même, nous rapprocher de l'Hamiltonien à deux corps utilisé dans les gaz ultra-froids, on ne considèrera désormais que des interactions quartiques du type $a^+ a^+ a a$. Seul le terme g_{2211} est non nul.

III-1-2-a Calcul de q_{ij} , Q_{ij} et Ω_{ij}

On peut commencer par développer les produits suivants :

$$\begin{aligned} \alpha_a \alpha_b \alpha_c \alpha_d &= \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d + \bar{\alpha}_a \langle \alpha \rangle_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \langle \bar{\alpha} \rangle_c \bar{\alpha}_d + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \langle \bar{\alpha} \rangle_d + \langle \bar{\alpha} \rangle_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \\ &+ \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \langle \bar{\alpha} \rangle_c \langle \bar{\alpha} \rangle_d + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \langle \bar{\alpha} \rangle_b \langle \bar{\alpha} \rangle_d + \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \langle \bar{\alpha} \rangle_a \langle \bar{\alpha} \rangle_d + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_d \langle \bar{\alpha} \rangle_b \langle \bar{\alpha} \rangle_c \\ &+ \bar{\alpha}_a \langle \bar{\alpha} \rangle_b \langle \bar{\alpha} \rangle_c \langle \bar{\alpha} \rangle_d + \bar{\alpha}_b \langle \bar{\alpha} \rangle_a \langle \bar{\alpha} \rangle_c \langle \bar{\alpha} \rangle_d + \bar{\alpha}_c \langle \bar{\alpha} \rangle_a \langle \bar{\alpha} \rangle_b \langle \bar{\alpha} \rangle_d + \bar{\alpha}_d \langle \bar{\alpha} \rangle_a \langle \bar{\alpha} \rangle_b \langle \bar{\alpha} \rangle_c \\ &+ \langle \bar{\alpha} \rangle_a \langle \bar{\alpha} \rangle_b \langle \bar{\alpha} \rangle_c \langle \bar{\alpha} \rangle_d \end{aligned}$$

On calcule les différents commutateurs puis on les injecte dans l'expression de q_i sachant que les quantités Γ_{lmn} sont symétriques par rapport à leurs indices. Il faut noter que g_{abcd} n'est pas symétrique (à cause du choix de H en (III.8)). On trouve alors

$$q_i = \frac{1}{24} \Gamma_{lmn} g_{abcd} \left\{ \begin{aligned} &\langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \rangle \tau_{id} + \langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_d \rangle \tau_{ic} \\ &+ \langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \rangle \tau_{ib} + \langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \rangle \tau_{ia} \end{aligned} \right\}$$

On calcule les valeurs moyennes terme par terme sachant que la quantité Γ_{lmn} a été définie comme suit:

$$\Gamma_{ijk} = -\frac{1}{6} \left[\tau^{\tau(1+\rho)^{-1}} G_{\tau(1+\rho)^{-1}} \right]_{ij}^k = -\frac{1}{6} \left(\tau \rho^{-1} \right)_{le} G_{efg} \left(\tau(1+\rho)^{-1} \right)_{fm} \left(\tau(1+\rho)^{-1} \right)_{gn}$$

ce qui donne la forme générale de q_i :

$$q_i = \frac{1}{24} g \left\{ \tau_{i1} G_{221} + \tau_{i1} G_{221} + \tau_{i2} G_{211} + \tau_{i2} G_{211} \right\} \quad (\text{III.9})$$

Ainsi

$$\begin{aligned} q_1 &= \frac{1}{12} g G_{211} \\ q_2 &= -\frac{1}{12} g G_{221} \end{aligned} \quad (\text{III.10})$$

Le calcul de Q_{ij} défini par :

$$Q_{ij} = -\left(\frac{1}{24} \right) \tau_{ip} \Gamma_{lmn} \left\langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \left[\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, H \right] \right\rangle_0$$

S'effectue de la même façon. Le calcul des différents commutateurs donne les valeurs moyennes suivantes :

$$Q_{ij} = -\frac{1}{24} \tau_{ip} \Gamma_{lmn} g_{abcd} \left\langle \alpha_d \right\rangle \tau_{jc} \left\{ \begin{aligned} &\left\langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \right\rangle + \left\langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \right\rangle \tau_{jb} \\ &+ \left\langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \right\rangle \tau_{ja} + \left\langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_j \right\rangle \tau_{pc} \\ &+ \left\langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_j \right\rangle \tau_{pb} + \left\langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_j \right\rangle \tau_{pa} \end{aligned} \right\}$$

On développe le calcul sachant que les indices i et j prennent les valeurs 1 et 2. On obtient finalement les différentes composantes:

$$\mathcal{Q}_{11} = \frac{1}{12} g [G_{221} \langle \alpha \rangle_1 - G_{211} \langle \alpha \rangle_2] \quad (\text{III.11.a})$$

$$\mathcal{Q}_{22} = -\frac{1}{12} g [G_{221} \langle \alpha \rangle_1 - G_{211} \langle \alpha \rangle_2] \quad (\text{III.11.b})$$

$$\mathcal{Q}_{12} = \frac{1}{6} g [-2G_{221} \langle \alpha \rangle_2 - G_{222} \langle \alpha \rangle_1] \quad (\text{III.11.c})$$

$$\mathcal{Q}_{21} = \frac{1}{6} g [-2G_{211} \langle \alpha \rangle_1 - G_{111} \langle \alpha \rangle_2] \quad (\text{III.11.d})$$

Passons maintenant au calcul de Ω_{ij} en remplaçant les indices a, b, c, d par les valeurs 2, 2, 1, 1 et calculons les valeurs moyennes des différents commutateurs qui apparaissent dans l'expression de définition de Ω_{ijk} :

$$\Omega_{ijk} = \langle [:\bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k :, H] \rangle$$

Après développement du calcul, on déduit les expressions de Ω_{ijk}

$$\Omega_{211} = \Omega_{112} = -\frac{1}{6} g \langle \alpha_1 \rangle (\rho_{11} \rho_{22} + \rho_{12} \rho_{21}) \quad (\text{III.12.a})$$

$$\Omega_{122} = \Omega_{221} = \frac{1}{6} g \langle \alpha \rangle_2 (\rho_{11} \rho_{22} + 2\rho_{12} \rho_{21}) \quad (\text{III.12.b})$$

$$\Omega_{111} = -\frac{1}{2} g [\langle \alpha_1 \rangle \rho_{12} (\rho_{22}^2 - \rho_{11}^2) - \langle \alpha_2 \rangle \rho_{12}^2] \quad (\text{III.12.c})$$

$$\Omega_{222} = -\frac{1}{2} g [\langle \alpha_2 \rangle \rho_{21} (\rho_{22}^2 - \rho_{11}^2) + \langle \alpha_1 \rangle \rho_{21}^2] \quad (\text{III.12.d})$$

III-1-2-b Calcul de Σ_{ijk}

La quantité Σ_{ijk} a été définie au chapitre précédent comme suit

$$\Sigma_{ijk} = \Gamma_{lmn} \langle [:\bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [:\bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k :, H]] \rangle_0 \quad (\text{III.13})$$

La contribution de $\bar{\alpha}_a$ et $\bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c$ à Σ_{ijk} est nulle. Par contre celles de $\bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b$ et $\bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d$ doivent être calculées. Ainsi,

$$\langle [:\bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [:\bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k :, \alpha_2 \alpha_2 \alpha_1 \alpha_1]] \rangle + \left(\frac{1}{2} \tau s_k\right) \langle [:\bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [:\bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k :, \bar{\alpha}_2 \bar{\alpha}_2]] \rangle \quad (\text{III.14})$$

Selon l'expression (II.26) de G_{ijk} , les propriétés suivantes sont évidentes pour un opérateur densité hermitien

$$G_{222} = G_{111}^* ; G_{122} = G_{112}^*$$

$$G_{121} = G_{211} = G_{112}$$

$$G_{212} = G_{221} = G_{122}$$

Il suffit donc de calculer juste deux termes, par exemple G_{111} et G_{112} .

$$\Sigma_{111} = G_{111} \left(\frac{1}{2} g \langle \alpha_1 \rangle \langle \alpha_2 \rangle + \frac{13}{6} S_{11} + \frac{1}{4} g + \frac{1}{3} g \rho_{11} + g \rho_{11} \rho_{12} \rho_{21}^{-1} \right) \quad (\text{III.15.a})$$

$$+ G_{112} \left(\frac{-3}{2} S_{12} + \frac{1}{4} g \langle \alpha_1 \rangle^2 - \frac{5}{2} g \rho_{12} + g \rho_{22}^{-1} \rho_{11} \rho_{12} - g \rho_{12} - \frac{1}{4} g \rho_{12} \rho_{21}^{-1} \right)$$

$$+ G_{122} \left(-g \rho_{11} - \frac{1}{4} g \rho_{12} \rho_{22}^{-1} - \frac{1}{4} g \rho_{12} \rho_{11}^{-1} \right)$$

$$+ G_{222} \left(-\frac{1}{4} g \right) - \frac{1}{4} g \left(\rho_{12} \rho_{22}^2 - \rho_{12} \rho_{11}^2 + \rho_{12} \right)$$

$$\Sigma_{112} = G_{111} \left(-\frac{1}{2} S_{21} - \frac{1}{12} g \langle \alpha_2 \rangle^2 + \frac{1}{12} g \rho_{21} + \frac{1}{24} g \rho_{12} \right) \quad (\text{III.15.b})$$

$$+ G_{112} \left(\begin{array}{l} -S_{12} + \frac{1}{6} g \langle \alpha_1 \rangle + \frac{1}{6} g \langle \alpha_1 \rangle \langle \alpha_2 \rangle - \frac{1}{3} g \rho_{22} - \frac{1}{12} g \rho_{21}^{-1} \rho_{12} \rho_{22} \\ -\frac{1}{2} g + \frac{1}{24} g \rho_{12} \rho_{21} (\rho_{22}^{-1} - \rho_{11}^{-1}) \end{array} \right)$$

$$+ G_{122} \left(-\frac{5}{12} g \rho_{12} + \frac{1}{12} g \rho_{11}^{-1} \rho_{12} \rho_{22} - \frac{1}{24} g \rho_{21} \right) + G_{222} \left(\frac{1}{12} g \rho_{22} \right)$$

$$+ \frac{1}{6} g \rho_{11} \left(\langle \alpha_1 \rangle \rho_{22} + \rho_{22} + \frac{1}{2} \rho_{11} + \frac{1}{6} g \langle \alpha_1 \rangle \rho_{12} \rho_{21} \right)$$

En rassemblant les différentes expressions, les équations TDHFB étendues s'écrivent alors:

$$i\hbar\langle\dot{\alpha}_1\rangle = \lambda_1 + \langle\alpha_1\rangle\left(-S_{11} + \frac{1}{6}g\rho_{11}\right) + \langle\alpha_2\rangle\left(-S_{12} - \frac{1}{12}g\rho_{12} + \frac{1}{12}g\langle\alpha_1\rangle^2\right) + \frac{1}{12}gG_{211} \quad (\text{III.16.a})$$

$$i\hbar\langle\dot{\alpha}_2\rangle = \lambda_2 + \langle\alpha_2\rangle\left(-S_{22} - \frac{1}{6}g\rho_{11}\right) + \langle\alpha_1\rangle\left(-S_{21} + \frac{1}{12}g\rho_{21} - \frac{1}{12}g\langle\alpha_2\rangle^2\right) - \frac{1}{12}gG_{221} \quad (\text{III.16.b})$$

Nous avons :

$$\dot{\rho}_{11} = -\dot{\rho}_{22}$$

Et $\dot{\rho}_{12} = \dot{\rho}_{21}^*$

Donc il suffit de calculer $\dot{\rho}_{11}$ et $\dot{\rho}_{12}$

$$i\hbar\dot{\rho}_{11} = \rho_{12}\left(-S_{21} + \frac{1}{12}g\langle\alpha_2\rangle^2\right) + \rho_{21}\left(S_{12} + \frac{1}{12}g\langle\alpha_1\rangle^2\right) + \frac{1}{2}G_{221}\langle\alpha\rangle_1 - \frac{1}{2}G_{211}\langle\alpha\rangle_2 \quad (\text{III.16.c})$$

$$i\hbar\dot{\rho}_{12} = -2S_{11}\rho_{12} + S_{12}(\rho_{11} - \rho_{22}) + \frac{5}{12}g\rho_{11}\rho_{12} + \frac{1}{12}g\rho_{21}\rho_{11} - \frac{1}{12}g\rho_{11}\langle\alpha_1\rangle^2 \quad (\text{III.16.d})$$

$$+ \frac{1}{12}g\rho_{22}\langle\alpha_1\rangle^2 + \frac{1}{3}g\rho_{12}\langle\alpha_1\rangle\langle\alpha_2\rangle - \frac{1}{3}gG_{221}\langle\alpha_2\rangle - \frac{1}{6}gG_{222}\langle\alpha_1\rangle$$

$$i\dot{G}_{111} = G_{111}\left(\frac{1}{2}g\langle\alpha_1\rangle\langle\alpha_2\rangle + \frac{13}{6}S_{11} + \frac{1}{4}g + \frac{1}{3}g\rho_{11} + g\rho_{11}\rho_{12}\rho_{21}^{-1}\right) \quad (\text{III.16.g})$$

$$+ G_{112}\left(\frac{-3}{2}S_{12} + \frac{1}{4}g\langle\alpha_1\rangle^2 - \frac{5}{2}g\rho_{12} + g\rho_{22}^{-1}\rho_{11}\rho_{12} - g\rho_{12} - \frac{1}{4}g\rho_{12}\rho_{21}^{-1}\right)$$

$$+ G_{122}\left(-g\rho_{11} - \frac{1}{4}g\rho_{12}\rho_{22}^{-1} - \frac{1}{4}g\rho_{12}\rho_{11}^{-1}\right)$$

$$+ G_{222}\left(-\frac{1}{4}g\right) - \frac{1}{4}g(\rho_{12}\rho_{22}^2 - \rho_{12}\rho_{11}^2 + \rho_{12})$$

$$\begin{aligned}
i\dot{G}_{112} = & G_{111} \left(-\frac{1}{2} S_{21} - \frac{1}{12} g \langle \alpha_2 \rangle^2 + \frac{1}{12} g \rho_{21} + \frac{1}{24} g \rho_{12} \right) \\
& + G_{112} \left(-S_{12} + \frac{1}{6} g \langle \alpha_1 \rangle + \frac{1}{6} g \langle \alpha_1 \rangle \langle \alpha_2 \rangle - \frac{1}{3} g \rho_{22} - \frac{1}{12} g \rho_{21}^{-1} \rho_{12} \rho_{22} \right) \\
& \left(-\frac{1}{2} g + \frac{1}{24} g \rho_{12} \rho_{21} (\rho_{22}^{-1} - \rho_{11}^{-1}) \right) \\
& + G_{122} \left(-\frac{5}{12} g \rho_{12} + \frac{1}{12} g \rho_{11}^{-1} \rho_{12} \rho_{22} - \frac{1}{24} g \rho_{21} \right) + G_{222} \left(\frac{1}{12} g \rho_{22} \right) \\
& + \frac{1}{6} g \rho_{11} \left(\langle \alpha_1 \rangle \rho_{22} + \rho_{22} + \frac{1}{2} \rho_{11} + \frac{1}{6} \langle \alpha_1 \rangle \rho_{12} \rho_{21} \right)
\end{aligned} \tag{III.16.h}$$

Conclusion :

Dans ce chapitre nous avons appliqué notre formalisme à un Hamiltonien quadratique, cubique et quartique. On notera que les équations TDHFB deviennent formellement exactes dans le cas quadratique car l'opérateur densité gaussien est une solution exacte de l'oscillateur harmonique. Le cumulants est trivial. Par contre, dans le cas d'un Hamiltonien quartique, l'effet du triplet décrit par les quantités $q_i, Q_{ij}, \Omega_{ijk}$ et Σ_{ijk} devient nettement évident dans les équations pour a_i, ρ_{ij} et G_{ijk} .

Il s'agit donc de voir, dans ce qui suit, quels effets aura ce triplet et comment altèrera-t-il la dynamique du système au-delà du champ moyen. Pour ce faire, nous devons comparer nos équations approchées aux équations exactes. Ces équations découleront naturellement du théorème d'Ehrenfest.

Chapitre IV

IV-1 Relations d'Ehrenfest :

Afin de vérifier la validité de nos équations variationnelles, nous allons utiliser le théorème d'Ehrenfest qui décrit l'évolution exacte de la valeur moyenne d'une observable A sous l'effet d'un Hamiltonien H . Ces équations s'écrivent:

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle A \rangle = \langle [H, A] \rangle + i\hbar \left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle \quad (\text{IV.1})$$

Rappelons que nos équations approchées obtenues à partir de l'*ansätze* post-gaussien déterminent l'évolution des trois valeurs moyennes suivantes $\langle \alpha_i \rangle, \langle \alpha_i \alpha_j \rangle, \langle \alpha_i \alpha_j \alpha_k \rangle$

Nous allons de ce fait appliquer le théorème (IV.1) pour $A = \alpha_i, \alpha_i \alpha_j$ et $\alpha_i \alpha_j \alpha_k$. Cela nous permettra de comparer les équations d'évolution variationnelles aux équations exactes et d'en

tirer les conclusions quant à la pertinence de notre choix pour l'*ansätze* post-gaussien pour l'opérateur densité. On notera dans ce cas que les opérateurs considérés ne dépendent pas explicitement du temps, et de ce fait $\left\langle \frac{\partial A}{\partial t} \right\rangle = 0$.

IV-3 Application a un Hamiltonien quartique :

Dans les précédents chapitres, nous avons considéré un Hamiltonien quartique de la forme

$$H = v_H + \tilde{\lambda}_H \tau \alpha + \frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau S_H \alpha + \frac{1}{4!} g_{abcd} \alpha_a \alpha_b \alpha_c \alpha_d \quad (\text{IV.2})$$

Commençons par $A = \alpha_i$.

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \alpha_i \rangle = [\alpha_i, H] \quad (\text{IV.3})$$

On développe le calcul sachant que i prend les valeurs 1 et 2 on obtient les expressions suivantes :

$$i\hbar \langle \dot{\alpha}_1 \rangle = \lambda_1 - S_{11} \langle \alpha_1 \rangle - S_{12} \langle \alpha_2 \rangle - \frac{1}{12} g \rho_{12} \langle \alpha_2 \rangle + \frac{1}{6} g \rho_{11} \langle \alpha_1 \rangle + \frac{1}{12} g \langle \alpha_1 \rangle^2 \langle \alpha_2 \rangle + \frac{1}{12} g G_{211} \quad (\text{IV.4.a})$$

$$i\hbar \langle \dot{\alpha}_2 \rangle = \lambda_2 - S_{22} \langle \alpha_2 \rangle - S_{21} \langle \alpha_1 \rangle - \frac{1}{12} g \rho_{21} \langle \alpha_1 \rangle - \frac{1}{6} g \rho_{11} \langle \alpha_2 \rangle - \frac{1}{12} g \langle \alpha_1 \rangle \langle \alpha_2 \rangle^2 - \frac{1}{12} g G_{221} \quad (\text{IV.4.b})$$

En utilisant

$$i\hbar \frac{d}{dt} \alpha_i \alpha_j = [\alpha_i \alpha_j, H] \quad (\text{IV.5})$$

Cela revient à calculer

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \rangle = \langle [\alpha_i \alpha_j, H] \rangle - i\hbar \frac{d}{dt} \langle \alpha_i \rangle \langle \alpha_j \rangle \quad (\text{IV.6})$$

$$i\dot{\rho}_{ji} = \tau_{im} \left(\langle [\alpha_m \alpha_j, H] \rangle - i \frac{d}{dt} \langle \alpha_m \rangle \langle \alpha_j \rangle \right)$$

Tous calculs faits, on déduit la formule suivante :

$$i\hbar \dot{\rho}_{11} = S_{21} \rho_{12} - S_{12} \rho_{21} + \frac{1}{12} g \rho_{12} \langle \alpha_2 \rangle^2 + \frac{1}{12} g \rho_{21} \langle \alpha_1 \rangle^2 - \frac{1}{12} g G_{211} \langle \alpha_2 \rangle + \frac{1}{12} g G_{221} \langle \alpha_1 \rangle \quad (\text{IV.7.a})$$

$$i\hbar \dot{\rho}_{12} = -2S_{11} \rho_{12} + S_{12} (\rho_{11} - \rho_{22}) + \frac{1}{12} g \langle \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_2 \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \rangle + \frac{1}{12} g \langle \bar{\alpha}_2 \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \rangle$$

(IV.7.b)

$$\begin{aligned} & + \frac{9}{12} g \rho_{11} \langle \alpha_1 \rangle^2 - \frac{8}{12} g \rho_{12} \langle \alpha_1 \rangle \langle \alpha_2 \rangle - \frac{1}{12} g \rho_{22} \langle \alpha_1 \rangle^2 + \frac{1}{3} g \langle \alpha_1 \rangle^3 \langle \alpha_2 \rangle^2 \\ & + \frac{2}{3} g G_{211} \langle \alpha_1 \rangle + \frac{1}{6} g G_{111} \langle \alpha_2 \rangle \end{aligned}$$

L'équation d'évolution de G_{ijk} s'obtient à partir de :

$$i\hbar \frac{d}{dt} \langle \alpha_i \alpha_j \alpha_k \rangle = \langle [\alpha_i \alpha_j \alpha_k, H] \rangle \quad (\text{IV.8})$$

On remarque que : $\langle \alpha_2 \alpha_1 \alpha_1 \rangle = \langle \alpha_1 \alpha_2 \alpha_1 \rangle = \langle \alpha_1 \alpha_1 \alpha_2 \rangle$

$$\text{Et} \quad \langle \alpha_1 \alpha_1 \alpha_1 \rangle = \langle \alpha_2 \alpha_2 \alpha_2 \rangle^*$$

$$\langle \alpha_2 \alpha_1 \alpha_1 \rangle = \langle \alpha_2 \alpha_2 \alpha_1 \rangle^*$$

Donc il suffit de calculer les termes $\langle \alpha_1 \alpha_1 \alpha_1 \rangle$ et $\langle \alpha_1 \alpha_1 \alpha_2 \rangle$ on obtient finalement :

$$i\hbar\dot{G}_{111} = G_{111} \left(-3S_{11} + \frac{5}{2} g \langle \alpha_2 \rangle \langle \alpha_1 \rangle \right) + G_{112} \left(-3S_{12} + \frac{1}{4} g \rho_{12} + \frac{3}{2} g \langle \alpha_1 \rangle^2 \right) \quad (\text{IV.9.a})$$

$$+ \rho_{11} \left(3S_{12} \langle \alpha_1 \rangle + \frac{5}{4} g \langle \alpha_1 \rangle^3 \right) + \rho_{22} \left(3S_{12} - \frac{1}{2} g \langle \alpha_1 \rangle^3 \right)$$

$$+ \rho_{12} \left(-\frac{1}{4} g \langle \alpha_1 \rangle^2 \langle \alpha_2 \rangle - \frac{3}{4} g \rho_{21} \langle \alpha_2 \rangle \right) + g \langle \alpha_2 \rangle \langle \alpha_1 \rangle^4$$

$$+ \frac{1}{4} g \langle \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_2 \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \rangle + g \langle \alpha_1 \rangle \langle \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_2 \bar{\alpha}_1 \rangle + \frac{1}{4} g \langle \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \rangle \langle \alpha_2 \rangle$$

$$i\dot{G}_{112} = G_{111} \left(-S_{21} - \frac{1}{6} g \langle \alpha_2 \rangle^2 \right) + G_{112} \left(-2S_{12} - \frac{1}{12} g \rho_{22} + \frac{2}{3} g \langle \alpha_1 \rangle \langle \alpha_2 \rangle \right) \quad (\text{IV.9.b})$$

$$+ G_{122} \left(-2S_{12} - \frac{3}{2} g \langle \alpha_1 \rangle^2 - \frac{1}{6} g \rho_{12} \right)$$

$$+ \rho_{11} \left(-\frac{1}{6} g \rho_{22} \langle \alpha_1 \rangle - S_{11} \langle \alpha_1 \rangle - \frac{1}{6} g \rho_{12} \langle \alpha_2 \rangle + \frac{1}{12} g \langle \alpha_1 \rangle^2 \langle \alpha_2 \rangle \right)$$

$$+ \rho_{22} \left(-\frac{1}{2} S_{11} \langle \alpha_1 \rangle - \frac{1}{6} g \rho_{12} \langle \alpha_2 \rangle + \frac{1}{2} g \langle \alpha_1 \rangle^2 \langle \alpha_2 \rangle \right)$$

$$+ \rho_{12} \left(-S_{22} \langle \alpha_2 \rangle - 2S_{12} \langle \alpha_2 \rangle - \frac{1}{12} g \rho_{21} \langle \alpha_1 \rangle \right) + \rho_{21} \left(-\frac{1}{6} g \langle \alpha_1 \rangle \langle \alpha_2 \rangle^2 - \frac{1}{6} g \langle \alpha_1 \rangle^3 \right)$$

Conclusion:

Pour un Hamiltonien quartique, l'analyse des résultats obtenus à l'issue du développement du calcul fait ressortir ce qui suit :

Equation (III.16.a)

Rappelons l'équation (III.16.a) de TDHFB :

$$i\hbar\langle \dot{\alpha}_1 \rangle = \lambda_1 - S_{11} \langle \alpha_1 \rangle - S_{12} \langle \alpha_2 \rangle + \frac{1}{6} g \rho_{11} \langle \alpha_1 \rangle - \frac{1}{12} g \rho_{12} \langle \alpha_2 \rangle + \frac{1}{12} g \langle \alpha_1 \rangle^2 \langle \alpha_2 \rangle + \frac{1}{12} g G_{211}$$

et l'équation d'Ehrenfest (IV.4.a)

$$i\hbar\langle \dot{\alpha}_1 \rangle = \lambda_1 - S_{11} \langle \alpha_1 \rangle - S_{12} \langle \alpha_2 \rangle + \frac{1}{6} g \rho_{11} \langle \alpha_1 \rangle - \frac{1}{12} g \rho_{12} \langle \alpha_2 \rangle + \frac{1}{12} g \langle \alpha_1 \rangle^2 \langle \alpha_2 \rangle + \frac{1}{12} g G_{211}$$

Ce qui montre que l'équation TDHFB (III.16.a) est formellement exacte.

Equation (III.16.c)

Rappelons l'équation (III.16.b) de TDHFB :

$$i\hbar\dot{\rho}_{11} = S_{21}\rho_{12} - S_{12}\rho_{21} + \frac{1}{12} g \rho_{12} \langle \alpha_2 \rangle^2 + \frac{1}{12} g \rho_{21} \langle \alpha_1 \rangle^2 - \frac{1}{12} g G_{211} \langle \alpha_2 \rangle + \frac{1}{12} g G_{221} \langle \alpha_1 \rangle$$

Et l'équation d'Ehrenfest (IV.7.a)

$$i\hbar\dot{\rho}_{11} = S_{21}\rho_{12} - S_{12}\rho_{21} + \frac{1}{12}g\rho_{12}\langle\alpha_2\rangle^2 + \frac{1}{12}g\rho_{21}\langle\alpha_1\rangle^2 - \frac{1}{12}gG_{211}\langle\alpha_2\rangle + \frac{1}{12}gG_{221}\langle\alpha_1\rangle$$

Ce qui montre que l'équation TDHFB (III.16.b) est formellement exacte.

Equation (III.16.d)

Rappelons l'équation (III.16.d) de TDHFB :

$$i\hbar\dot{\rho}_{12} = -2S_{11}\rho_{12} + S_{12}(\rho_{11} - \rho_{22}) + A + B + C$$

$$A = +\frac{5}{12}g\rho_{11}\rho_{12} + \frac{1}{12}g\rho_{21}\rho_{11}$$

$$B = -\frac{1}{12}g\rho_{11}\langle\alpha_1\rangle^2 + \frac{1}{12}g\rho_{22}\langle\alpha_1\rangle^2 + \frac{1}{3}g\rho_{12}\langle\alpha_1\rangle\langle\alpha_2\rangle$$

$$C = -\frac{1}{3}gG_{221}\langle\alpha_2\rangle - \frac{1}{6}gG_{222}\langle\alpha_1\rangle$$

Et l'équation d'Ehrenfest (IV.7.b)

$$i\hbar\dot{\rho}_{12} = -2S_{11}\rho_{12} + S_{12}(\rho_{11} - \rho_{22}) + D + E + F$$

$$D = \frac{1}{12}g\langle\bar{\alpha}_1\bar{\alpha}_2\bar{\alpha}_1\bar{\alpha}_1\rangle + \frac{1}{12}g\langle\bar{\alpha}_2\bar{\alpha}_1\bar{\alpha}_1\bar{\alpha}_1\rangle$$

$$E = \frac{9}{12}g\rho_{11}\langle\alpha_1\rangle^2 - \frac{8}{12}g\rho_{12}\langle\alpha_1\rangle\langle\alpha_2\rangle - \frac{1}{12}g\rho_{22}\langle\alpha_1\rangle^2$$

$$F = \frac{1}{12}gG_{211}\langle\alpha_1\rangle + \frac{1}{6}gG_{111}\langle\alpha_2\rangle$$

$$Z = \frac{1}{3}g\langle\alpha_1\rangle^3\langle\alpha_2\rangle$$

Les termes A , B et C étant nuls pour un Hamiltonien quadratique, il ressort de notre équation que ces termes représentent les effets au-delà de un corps. En effet, dans notre approximation, les termes de type D se décomposent soit en produits $\rho\rho$ soit $\langle\alpha\rangle G$ qui sont représentés par les termes A et C .

Equation (III.16.g)

Rappelons l'équation (III.16.g) de TDHFB

$$i\dot{G}_{111} = L + P + R + S$$

$$L = G_{111}\left(\frac{13}{6}S_{11} + \frac{1}{2}g\langle\alpha_1\rangle\langle\alpha_2\rangle + \frac{1}{4}g + \frac{1}{3}g\rho_{11} + g\rho_{11}\rho_{12}\rho_{21}^{-1}\right)$$

$$P = G_{112}\left(\frac{-3}{2}S_{12} - \frac{5}{2}g\rho_{12} + \frac{1}{4}g\langle\alpha_1\rangle^2 + g\rho_{22}^{-1}\rho_{11}\rho_{12} - g\rho_{12} - \frac{1}{4}g\rho_{12}\rho_{21}^{-1}\right)$$

$$R = G_{122} \left(-g \rho_{11} - \frac{1}{4} g \rho_{12} \rho_{22}^{-1} - \frac{1}{4} g \rho_{12} \rho_{11}^{-1} \right)$$

$$S = G_{222} \left(-\frac{1}{4} g \right) - \frac{1}{4} g \left(\rho_{12} \rho_{22}^2 - \rho_{12} \rho_{11}^2 + \rho_{12} \right)$$

Et l'équation d'Ehrenfest (IV.9.a)

$$i\hbar \dot{G}_{111} = U + V + W + X + Y$$

$$U = G_{111} \left(-3S_{11} + \frac{5}{2} g \langle \alpha_2 \rangle \langle \alpha_1 \rangle \right)$$

$$V = G_{112} \left(-3S_{12} + \frac{1}{4} g \rho_{12} + \frac{3}{2} g \langle \alpha_1 \rangle^2 \right)$$

$$W = \rho_{11} \left(3S_{12} \langle \alpha_1 \rangle + \frac{5}{4} g \langle \alpha_1 \rangle^3 \right) + \rho_{22} \left(3S_{12} - \frac{1}{2} g \langle \alpha_1 \rangle^3 \right) + \rho_{12} \left(-\frac{1}{4} g \langle \alpha_1 \rangle^2 \langle \alpha_2 \rangle - \frac{3}{4} g \rho_{21} \langle \alpha_2 \rangle \right)$$

$$X = g \langle \alpha_2 \rangle \langle \alpha_1 \rangle^4$$

$$Y = \frac{1}{4} g \langle \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_2 \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \rangle + g \langle \alpha_1 \rangle \langle \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_2 \bar{\alpha}_1 \rangle + \frac{1}{4} g \langle \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \bar{\alpha}_1 \rangle \langle \alpha_2 \rangle$$

Les termes des cumulants d'ordre 3 (L) représentent le terme U alors que P représentent V .

Les termes de type W , X et Y représentent les effets au-delà de deux corps. Ils sont représentés dans notre approximation par des produits d'effets à 1 corps. Les mêmes observations peuvent être faites pour l'équation gouvernant le cumulant G_{112} .

En particulier, le cumulant d'ordre 5 apparaissant dans l'expression Y ci-dessus est identiquement nul dans notre approximation. Il est évidemment non nul dans le cas exact et l'équation d'Ehrenfest correspondante contiendrait le cumulant d'ordre 6. C'est précisément ce que l'on entendait par hiérarchie infinie. Dans notre approximation TDHFB étendue, on voit bien que les termes d'ordre supérieur à 3 sont soit mis à zéro, soit représentés par des produits de cumulants d'ordre inférieur (par utilisation répétée du théorème de Wick). C'est ce que l'on entend par troncature consistante de la hiérarchie.

Notre approximation TDHFB étendue (ou post-gaussienne) permet donc d'engendrer la hiérarchie BBGKY quantique d'une façon consistante sans annuler brutalement les termes d'ordre supérieur.

Conclusion Générale

Depuis une décennie, le domaine des atomes ultra-froids s'est vu dominé par une multitude d'expériences toutes plus originales les unes que les autres et mettant en lumière une nouvelle physique des basses températures. En effet, à très basse température, un gaz d'atomes devient dégénéré et dominé par les fluctuations quantiques. L'effet cumulé des interactions et des corrélations statistiques conduit à des comportements tout à fait inattendus (du point de vue classique) tels que la superfluidité ou la supraconductivité lors de transition de phase du second ordre. La condensation de Bose-Einstein est certainement l'aspect le plus spectaculaire de ces transitions de phase.

Les théories physiques relatives au problème à N -corps quantique ont pu expliquer une grande partie de ces comportements et ont pu prédire beaucoup de paramètres d'équilibre tels que la fraction condensée, l'extension du condensat, la température de transition, les distributions spatiales des atomes, le spectre d'excitation, etc...

Ces théories, essentiellement de champ moyen, sont bâties autour de l'équation de Gross-Pitaevskii et de ses extensions. Elles considèrent la fonction d'onde macroscopique du système comme un paramètre d'ordre et injectent progressivement des interactions et des corrélations non prises en compte par cette équation. A titre d'illustration, nous pouvons citer les approximations de Bogoliubov, de Popov, de Beliaev et de Hartree - Fock - Bogoliubov (HFB).

Néanmoins, ces méthodes négligent certains effets à N -corps responsables du couplage entre atomes condensés et atomes non condensés. Cela a pour effet non seulement de perdre certains aspects physiques mais en plus la consistance de l'approche est sérieusement altérée. En effet, un certain nombre d'auteurs soulignent des inconsistances dans l'approximation HFB qui ne retient que certains effets à deux corps. En particulier, les corrélations à trois bosons (ou triplet) sont allègrement omises. Or, celui-ci est pour une grande partie responsable des phénomènes de recombinaisons qui induisent des pertes d'atomes condensés une disparition inopinée du condensat.

L'idée de notre travail était de tenter de faire intervenir le triplet dans la dynamique. La méthode habituelle est d'utiliser l'équation de Heisenberg pour le champ, briser la symétrie en introduisant une moyenne non nulle de ce champ (paramètre d'ordre) et ensuite développer les équations en ne gardant que les termes au plus d'ordre 3 dans le champ. Cette méthode,

bien qu'efficace, reste hautement heuristique en ce sens qu'elle ne fait appel à aucune physique sous-jacente. Nous proposons une méthode alternative qui maintient la consistance du formalisme tout au long des calculs. Cette méthode ne peut être que variationnelle.

Le principe variationnel dépendant du temps proposé par Balian et Vénéroni (BV) a pour but de fournir une prédiction optimale de la valeur moyenne d'une observable A mesurée au temps t_1 , à partir de la connaissance de l'état initial du système, décrit par un opérateur densité D_0 au temps t_0 . L'action BV fait intervenir deux opérateurs variationnels qui doivent satisfaire à des conditions aux limites qui reflètent les données caractéristiques du problème. Les conditions de stationnarité de cette action par rapport à $D(t)$ et $A(t)$ déterminent alors l'évolution du système entre t_0 et t_1 .

Le principe variationnel de Balian-Vénéroni a montré son efficacité à plusieurs égards (consistance, invariances,...) tout en permettant d'étendre les approximations précédentes. Il est naturel de choisir l'opérateur $A(t)$ linéaire dans ses paramètres variationnels. Quant au choix de l'état initial, il peut être suggéré par le principe d'entropie maximum. Nous avons donc sélectionné, aussi bien pour l'opérateur densité initial que D_0 pour $D(t)$, la classe des opérateurs exponentiels de formes quadratiques (EFQ) des opérateurs de création et d'annihilation de bosons. Les équations d'évolution des contractions de $D(t)$ sont similaires aux équations TDHF pour les fermions. Nous les avons dénotées par TDHFB pour Time-Dependent-Hartree-Fock-Bogoliubov.

Notre travail consiste à étendre variationnellement l'approximation HFB en injectant les corrélations de hauts ordres dans l'état du système sans s'affranchir complètement de l'approximation gaussienne. En choisissant des espaces d'essai relativement simples, mais physiquement acceptables, nous obtenons un système d'équations dynamiques, tenant compte aussi bien des corrélations à un corps qu'à deux corps d'une façon consistante.

L'application à des hamiltoniens quadratiques redonne les équations exactes tandis que pour des hamiltoniens cubiques ou quartiques, on obtient une version quantique tronquée de la hiérarchie BBGKY. La comparaison avec les équations d'Ehrenfest fournit des expressions *formellement* exacts au moins à l'ordre du cumulatif d'ordre 3.

Nous constatons que notre approximation non seulement maintient la consistance du formalisme, mais satisfait aussi aux lois de conservation du système (énergie, nombre de particules). Par ailleurs, la fermeture des équations est assurée par l'ensemble pertinent des

opérateurs de base que l'on choisit. La dynamique post-gaussienne fait intervenir le triplet dans l'équation de la matrice densité à un corps et dans celle du paramètre d'ordre d'une façon formellement exacte. La dynamique du triplet est quant à elle self-consistante.

L'analyse des différents termes intervenant dans l'équation du triplet montre que notre ansatz variationnel reproduit les ordres les plus bas mais aussi tente de simuler les ordres supérieurs en faisant intervenir au lieu de cumulant d'ordres 4 ou 5, des produits de leurs moyennes reproduisant le nombre d'opérateurs qui interviennent dans ces cumulants. Les coefficients de ces termes ne sont par ailleurs pas exacts. Aussi, pensons-nous que, dès le départ, il faut opter pour un *ansätze* qui contienne les mêmes symétries que l'Hamiltonien de départ. Mais cela constitue un long et vieux débat concernant la pertinence d'introduire les symétries de l'Hamiltonien.

Dans un proche avenir, nous nous consacrerons à procéder à une analyse quantitative de nos résultats en comparant les prédictions de nos équations dans un cas statique par rapport aux équations HFB. Cela nous permettra de vérifier un certain nombre d'affirmations selon lesquelles le triplet intervient pour moins que 1% dans la dynamique du condensat.

Une autre perspective, plus formelle cette fois, est d'étudier comment l'on pourrait engendrer récursivement une hiérarchie infinie et comment l'on pourrait resommer cette hiérarchie. Cette question est fondamentale dans les phénomènes critiques car les diverses théories sont associées à des types d'interactions (ou diagrammes) dont il est tenu compte. Notre approche pourrait s'avérer utile pour améliorer certaines approximations en resommant tous les diagrammes correspondant.

Appendice A

A.1 Le théorème de Wick à température finie

Dans le formalisme à température nulle, Wick a montré comment on peut introduire des contractions associées à un vide de quasi - particules et des produits normaux d'opérateurs. Le théorème de Wick fournit un développement du produit d'opérateurs en une somme de produits normaux. En particulier, comme la valeur moyenne de tout produit normal est nulle, la valeur moyenne d'un produit d'opérateurs est égale à la somme de tous les termes complètement contractés.

A température finie, Gaudin a montré que l'on pouvait encore introduire des contractions associées à un opérateur densité non - corrélé, et que la trace d'un produit d'opérateurs est encore donnée par la somme des termes complètement contractés. On se propose dans cet appendice de compléter ce travail en donnant une définition du produit normal d'opérateurs en mécanique statistique.

Dans cet appendice, nous explicitons la méthode esquissée dans [26]. Nous définissons de façon récursive le produit normal (PN), puis nous montrons que l'on peut construire un développement formellement identique à celui de Wick pour tout produit d'opérateurs. Le PN ainsi défini satisfait aux propriétés usuelles, c'est à dire :

- a) multilinéarité et distributivité,
- b) commutativité des opérateurs élémentaires à l'intérieur du PN (anti - commutativité pour des fermions),
- c) la moyenne d'un PN est nulle.

Une trace dans l'espace de Fock est notée Tr , et la moyenne d'un opérateur A est définie par :

$$\langle A \rangle = Tr(AD) / TrD.$$

On introduit l'opérateur élémentaire α , qui représente soit un opérateur de création a^+ , soit un opérateur d'annihilation a . De plus, on se restreint d'abord au cas d'un opérateur densité D gaussien normalisé tel que $\langle \bar{\alpha} \rangle = 0$.

En conformité avec la notation de Wick, on introduit le produit normal (mis en évidence par le symbole : placé avant et après) d'un opérateur d'ordre 1 ou 2 par :

$$:\alpha_i := \alpha_i \quad ; \quad :\alpha_i \alpha_j := \alpha_i \alpha_j - \langle \alpha_i \alpha_j \rangle \quad (\text{A.1})$$

Dans cette formule, apparaissent les contractions élémentaires

$$\langle \alpha_i \alpha_j \rangle \equiv Tr(\alpha_i \alpha_j D) / Tr(D) \quad (\text{A.2})$$

On étend alors la définition du PN à des opérateurs monomiaux en α d'ordre quelconque au moyen de la relation de récurrence suivante :

$$:\alpha_0 \alpha_1 \dots \alpha_n := \alpha_0 : \alpha_1 \dots \alpha_n : - \sum_{j=1}^n e^{j-1} \alpha_0 \alpha_j : \alpha_1 \alpha_2 \dots (j) \dots \alpha_n : \quad (\text{A.3})$$

Dans (A.3), la notation $:\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_j \dots \alpha_n :$ indique que l'opérateur α_j a été retiré de la suite $\alpha_1 \dots \alpha_n$ du produit original. Par ailleurs, le nombre ϵ vaut +1 pour les bosons et -1 pour les fermions, de sorte que l'on a les relations de commutation suivantes,

$$\left[a_i, a_j^+ \right]_{-\epsilon} = a_i a_j^+ - \epsilon a_j^+ a_i = \delta_{ij} \quad ; \quad \left[a_i, a_j \right]_{-\epsilon} = \left[a_i^+, a_j^+ \right]_{-\epsilon} = 0 \quad (\text{A.4})$$

Généralisation :

Pour généraliser les précédents résultats au cas où $\langle \alpha \rangle \neq 0$, on introduit les opérateurs $\bar{\alpha} = \alpha - \langle \alpha \rangle$ qui obéissent aux mêmes relations de commutation que les α . Toutes les propriétés précédentes restent valables pour les $\bar{\alpha}$. La généralisation aux fermions est simple, quoique quelquefois fastidieuse. En effet, il faut tenir compte cette fois des facteurs de symétrie ϵ^i . Cependant, la transposition s'effectue sans problème car toutes les démonstrations reposent uniquement sur le fait que l'anti-commutateur est un c-nombre.

A.2 Opérateurs Exponentiels de Formes Quadratiques et transformations de Bogoliubov

A.2.1 Opérateurs de bosons

On considère l'espace de Fock engendré par n opérateurs de création de bosons

$\{a_i^+, i = 1 \dots n\}$, vérifiant les règles de commutation usuelles.

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij} ; \quad [a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0 \quad (\text{A.5})$$

Afin d'obtenir des notations plus compactes, on introduit l'opérateur à $2n$ composantes α .

$$\alpha = \begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix} \quad (\text{A.6})$$

En terme des α_i , $\{i = 1 \dots 2n\}$, les relations de commutation s'écrivent :

$$[\alpha_i, \alpha_j] = \tau_{ij} \quad ; \quad \{a_i^+, i = 1 \dots n\} \quad ; \quad \tau = i\sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & 1_n \\ -1_n & 0 \end{pmatrix} \quad (\text{A.7})$$

où, 1_n dénote la matrice identité ($n \times n$) et σ_2 est la deuxième matrice de Pauli à $2n$ dimensions. La matrice τ vérifie donc :

$$\tilde{\tau} = -\tau \quad ; \quad \tau^2 = -1$$

A.2.2 Opérateurs exponentiels :

Afin de considérer des formes quadratiques pour les opérateurs α_i , introduisons la matrice complexe S ($2n \times 2n$) vérifiant :

$$\tilde{S} = \tau S \tau$$

L'opérateur exponentiel de forme quadratique (EFQ) le plus général pour un système de n bosons peut s'écrire.

$$T = \exp(\vartheta) \exp \tilde{\lambda} \tau \alpha \exp\left(\frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau S \alpha\right) \quad (\text{A.8})$$

Dans cette définition, interviennent le c - nombre \square , le vecteur (à $2n$ composantes) λ et la matrice ($2n \times 2n$) S . Nous avons vu que sans restreindre la généralité de \mathcal{T} , on peut considérer des matrices τS symétriques.

L'action de la transformation \mathcal{T} sur les opérateurs α s'écrit,

$$T^{-1} \alpha T \equiv \beta = T \alpha + \lambda \quad (\text{A.9})$$

Avec $T = \exp(-S)$. Les vides $|0\rangle_\beta$ et $|0\rangle_\alpha$ associés sont alors liés par la loi $|0_B\rangle = |0_\alpha\rangle$.

A.2.3 Contractions élémentaires :

Dans tout ce qui suivra, nous noterons Tr une trace dans l'espace de Fock. Sous la condition que $\text{Tr}(\mathcal{T})$ existe et soit non nulle, on peut définir les contractions élémentaires associées à \mathcal{T} ; elles s'écrivent :

$$\langle \alpha_i \rangle \equiv \frac{\text{Tr} \mathcal{T} \alpha_i}{\text{Tr} \mathcal{T}} = \left(\frac{1}{1 - \exp(-s)} \lambda \right)_i = \left(\frac{1}{1 - T} \lambda \right)_i \quad (\text{A.10})$$

$$\langle \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \rangle \equiv \frac{\text{Tr} \mathcal{T} \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j}{\text{Tr} \mathcal{T}} = \left(\frac{1}{1 - \exp(-s)} \tau \right)_{ij} = \left(\frac{1}{1 - T} \tau \right)_{ij} \quad (\text{A.11})$$

où l'on a introduit les opérateurs $\bar{\alpha}$, qui se transforment par l'action de \mathcal{T} comme

$$\mathcal{T}^{-1} \bar{\alpha} \mathcal{T} = T \bar{\alpha} \quad (\text{A.12})$$

Il est plus commode d'introduire la matrice densité à un corps (ou plutôt la matrice des contractions) :

$$\rho_{ij} = \left\langle \left(\tau \bar{\alpha} \tilde{\alpha} \right)_{ij} \right\rangle = \left(\frac{1}{\exp \exp(s) - 1} \right)_{ij} = \left(\frac{T}{1 - T} \right)_{ij} \quad (\text{A.13})$$

Qui satisfait à la propriété,

$$\tilde{\rho} = \tau(1 + \rho)\tau .$$

Appendice B

1-1 Calcul de q_i :

Pour un Hamiltonien quadratique du type $H = \nu_k + \tilde{\lambda}_i \tau \alpha + \frac{1}{2} \tilde{\alpha} \tau s_k \alpha$, nous avons l'expression de q_i .

$$q_i = \Gamma_{lmn} \left\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \left[\bar{\alpha}_i, H \right] \right\rangle_0 \quad (\text{B.1})$$

$$q_i = \Gamma_{lmn} \left\{ \left\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \left[\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a \right] \right\rangle + \langle \alpha \rangle_d \left\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \left[\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \right] \right\rangle_0 \right\}$$

$$[\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a] = \tau_{ia}$$

$$[\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b] = \bar{\alpha}_a [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_b] + [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a] \bar{\alpha}_b = \bar{\alpha}_a \tau_{ib} + \bar{\alpha}_b \tau_{ia}$$

$$\text{Comme : } \langle : \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \rangle = 0$$

On aura:

$$\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a \rangle \tau_{ib} + \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \nu_k \rangle = \tau_{ib} \langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_a \rangle \langle : \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \rangle + 0 = 0$$

1-2 Calcul de Q_{ij} :

Nous avons:

$$Q_{ij} = -\tau_{ip} \Gamma_{lmn} \left\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \left[\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, H \right] \right\rangle_0 \quad (\text{B.2})$$

$$\begin{aligned} \text{Alors : } Q_{ij} = & -\tau_{ip} \Gamma_{lmn} \left\{ \left\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \left[\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, \nu_k \right] \right\rangle_0 + \tilde{\lambda}_i \tau \left\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \left[\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_a \right] \right\rangle_0 \right. \\ & \left. + \frac{1}{2} \tau s_k \left\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \left[\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \right] \right\rangle \right\} \end{aligned}$$

$$\text{Nous avons : } \left[\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \right] = \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \tau_{jb} + \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_b \tau_{ja} + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_j \tau_{pb} + \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_j \tau_{pa}$$

$$\begin{aligned} \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \rangle \tau_{ic} &= \langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_p \rangle \langle \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_p \rangle \langle \bar{\alpha}_n \rangle + \langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_a \rangle \langle \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_p \rangle \langle \bar{\alpha}_n \rangle \\ &+ \langle \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_p \rangle \langle \bar{\alpha}_n \bar{\alpha}_a \rangle \langle \bar{\alpha}_l \rangle \end{aligned}$$

$$\text{Et } \langle \bar{\alpha} \rangle = 0$$

$$\text{Donc : } Q_{ij} = 0$$

1-3 Calcul de Ω_{ij} :

$$\Omega_{ij} = \left\langle \left[: \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k :, H \right] \right\rangle \quad (\text{B.3})$$

$$\text{Et} \quad \left\langle : \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \right\rangle = 0$$

$$\left\langle : \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k : \bar{\alpha}_a \right\rangle = 0$$

$$\left\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n :: \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k : \bar{\alpha}_a \right\rangle = 0$$

$$\left\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n :: \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \right\rangle = 0$$

$$\left\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b : \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k : \right\rangle = 0$$

$$\left\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a : \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_j \bar{\alpha}_k : \right\rangle = 0$$

Donc :

$$\Omega = 0 \quad \text{et} \quad \Sigma = 0$$

2- pour à un Hamiltonien quartique :

On définit l'Hamiltonien quartique:

$$H = \vartheta + \tilde{\lambda} \tau \alpha_a + \frac{1}{2} \alpha_a \tau s_k \alpha_b + \frac{1}{4!} (g_{abc}) \alpha_a \alpha_b \alpha_c \alpha_d \quad (\text{B.4})$$

On ne considère que des interactions quartiques du type $a^+ a^+ a a$. Cela donne $a=b=2$ et $c=d=1$.

2- Calcul de q_i , Q_{ij} et Ω_{ij} :

$$\alpha_a \alpha_b \alpha_c \alpha_d = \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d + \bar{\alpha}_a \langle \alpha \rangle_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \langle \bar{\alpha}_c \rangle \bar{\alpha}_d + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \langle \bar{\alpha}_d \rangle + \langle \bar{\alpha}_a \rangle \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \quad (\text{B.5})$$

$$+ \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \langle \bar{\alpha}_c \rangle \langle \bar{\alpha}_d \rangle + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \langle \bar{\alpha}_b \rangle \langle \bar{\alpha}_d \rangle + \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \langle \bar{\alpha}_a \rangle \langle \bar{\alpha}_d \rangle + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_d \langle \bar{\alpha}_b \rangle \langle \bar{\alpha}_c \rangle$$

$$+ \bar{\alpha}_a \langle \bar{\alpha}_b \rangle \langle \bar{\alpha}_c \rangle \langle \bar{\alpha}_d \rangle + \bar{\alpha}_b \langle \bar{\alpha}_a \rangle \langle \bar{\alpha}_c \rangle \langle \bar{\alpha}_d \rangle + \bar{\alpha}_c \langle \bar{\alpha}_a \rangle \langle \bar{\alpha}_b \rangle \langle \bar{\alpha}_d \rangle + \bar{\alpha}_d \langle \bar{\alpha}_a \rangle \langle \bar{\alpha}_b \rangle \langle \bar{\alpha}_c \rangle$$

$$+ \langle \bar{\alpha}_a \rangle \langle \bar{\alpha}_b \rangle \langle \bar{\alpha}_c \rangle \langle \bar{\alpha}_d \rangle$$

$$q_i = \Gamma_{lmn} \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_i, H] \rangle_0 \quad (\text{B.6})$$

$$q_i = \frac{1}{24} g_{abcd} \Gamma_{lmn} \left(\begin{aligned} & \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] \rangle + \langle \alpha \rangle_d \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c] \rangle_0 \\ & + \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] \rangle \langle \bar{\alpha} \rangle_a + \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] \rangle \langle \bar{\alpha} \rangle_b \\ & + \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_d] \rangle \langle \bar{\alpha} \rangle_c \end{aligned} \right) \quad (\text{B.7})$$

Nous avons :

$$[\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_d] = \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_b \tau_{ic} + \bar{\alpha}_i \bar{\alpha}_c \tau_{ib} + \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \tau_{ia}$$

$$\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \rangle \tau_{ic} = 3 \langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_a \rangle \langle \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_b \rangle \langle : \bar{\alpha}_n : \rangle = 0$$

Puisque : $\langle \bar{\alpha} \rangle = \langle \alpha \rangle - \langle \alpha \rangle = 0$.

$$\langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] \rangle = ?$$

$$\begin{aligned} [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] &= \bar{\alpha}_a [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] + [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a] \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \\ &= \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] + \bar{\alpha}_a [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_b] \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d + [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_a] \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \\ &= \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_d] + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b [\bar{\alpha}_i, \bar{\alpha}_c] \bar{\alpha}_d + \tau_{ib} \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d + \tau_{ib} \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \\ &= \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \tau_{id} + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_d \tau_{ic} + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \tau_{ib} + \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \tau_{ia} \end{aligned}$$

Les quantités Γ_{lmn} sont symétriques par rapport à leurs indices mais g_{abcd} est non symétrique (à cause du choix de H en 3.6). On trouve alors

$$q_i = \frac{1}{24} \Gamma_{lmn} g_{abcd} \left\{ \begin{aligned} & \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \rangle \tau_{id} + \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_d \rangle \tau_{ic} \\ & + \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \rangle \tau_{ib} + \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \rangle \tau_{ia} \end{aligned} \right\} \quad (\text{B.8})$$

On calcule le premier terme : $q_{i1} = \frac{1}{24} g_{abcd} \Gamma_{lmn} \tau_{id} 6 \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_a \rangle \langle \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_b \rangle \langle \bar{\alpha}_n \bar{\alpha}_c \rangle$

La quantité Γ_{lmn} a été définie au chapitre 2 :

$$\Gamma_{ijk} = -\frac{1}{6} \left[\tau \rho^{-1} G_{\tau(1+\rho)^{-1}} \right]_{ij}^k = -\frac{1}{6} (\tau \rho^{-1})_{le} G_{efg} (\tau(1+\rho)^{-1})_{fm} (\tau(1+\rho)^{-1})_{gn}$$

Nous avons:

$$q_{il} = \left(\frac{1}{24}\right) (6) \left(\frac{-1}{6}\right) g_{abcd} \tau_{id} (\rho\tau)_{al} (\rho\tau)_{bm} (\rho\tau)_{cn} G_{efg} (\tau\rho^{-1})_{le} (\tau(1+\rho)^{-1})_{fm} (\tau(1+\rho)^{-1})_{gn}$$

$$(\tau\rho)_{bm} = (\tilde{\rho}\tilde{\tau})_{mb} = (\tau(1+\rho)-1)_{mb}$$

$$(\tau\rho)_{cn} = (\tilde{\rho}\tilde{\tau})_{nc} = (\tau(1+\rho)^{-1})_{nc}$$

$$q_{il} = \left(\frac{1}{24}\right) \tau_{id} g_{abcd} (-\delta)_{ae} (-\delta)_{fb} (-\delta)_{gc} G_{efg}$$

Il ne reste que les valeurs pour lesquelles a = e, f = b et g=c

$$\begin{aligned} q_{il} &= \left(\frac{1}{24}\right) \tau_{id} g_{abcd} G_{abc} \\ &= \frac{1}{24} \delta_{a2} \delta_{b2} \delta_{c1} \delta_{d1} \tau_{id} G_{abc} g_{abcd} \\ q_{il} &= \frac{1}{24} \tau_{il} g_{2211} G_{221} \end{aligned}$$

De la même façon, on calcule les autres termes ce qui donne la forme générale de q_i :

$$q_i = \frac{1}{24} g \{ \tau_{i1} G_{221} + \tau_{i1} G_{221} + \tau_{i2} G_{211} + \tau_{i2} G_{211} \} \quad (\text{B.10})$$

$$\text{D'où} \quad q_1 = \frac{1}{12} g \langle a^+ a a \rangle \quad (\text{B.11})$$

$$q_2 = -\frac{1}{12} g \langle a^+ a^+ a \rangle$$

$$Q_{ij} = -\left(\frac{1}{24}\right) \tau_{ip} \Gamma_{lmn} \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, \mathbf{H}] \rangle_0$$

$$Q_{ij} = -\tau_{ip} \Gamma_{lmn} \{ \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] \rangle_0 + \langle \alpha_d \rangle \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c] \rangle_0 \} \quad (\text{B.12})$$

$$+ \langle \alpha_d \rangle \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c] \rangle_0 + \langle \alpha_a \rangle \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] \rangle_0$$

$$+ \langle \alpha_b \rangle \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] \rangle_0 + \langle \alpha_c \rangle \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : [\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_d] \rangle_0$$

On commence par le premier terme.

$$\begin{aligned}
 [\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] &= \bar{\alpha}_p [\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] + [\bar{\alpha}_p, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] \bar{\alpha}_j \\
 &= \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a [\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] + \bar{\alpha}_p [\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_a] \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \bar{\alpha}_j \\
 &\quad + \bar{\alpha}_a [\bar{\alpha}_p, \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] \bar{\alpha}_j + [\bar{\alpha}_p, \bar{\alpha}_a] \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \bar{\alpha}_j \\
 &= \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b [\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] + \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a [\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_b] \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d + \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \\
 &\quad + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b [\bar{\alpha}_p, \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d] \bar{\alpha}_j + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b [\bar{\alpha}_p, \bar{\alpha}_b] \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \bar{\alpha}_j \\
 &= \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c [\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_d] + \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b [\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_c] \bar{\alpha}_d + \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \tau_{jb} + \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \tau_{ja} \\
 &\quad + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c [\bar{\alpha}_p, \bar{\alpha}_d] \bar{\alpha}_j + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b [\bar{\alpha}_p, \bar{\alpha}_c] \bar{\alpha}_d \bar{\alpha}_j + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \bar{\alpha}_j \tau_{pb} \\
 &= \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \tau_{jd} + \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_d \tau_{jc} + \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \tau_{jb} + \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \tau_{ja} \\
 &\quad + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_j \tau_{pd} + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_d \bar{\alpha}_j \tau_{pc} + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_d \bar{\alpha}_j \tau_{pb}
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \rangle \tau_{jd} &= 7 \langle \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_b \rangle \langle \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_a \rangle \langle \bar{\alpha}_n \bar{\alpha}_b \rangle \langle \bar{\alpha}_c \rangle \\
 &= 0
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 [\bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c] &= \bar{\alpha}_p [\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c] + [\bar{\alpha}_p, \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c] \bar{\alpha}_j \\
 &= \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a [\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c] + \bar{\alpha}_p [\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_a] \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_j \\
 &\quad + \bar{\alpha}_a [\bar{\alpha}_p, \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c] \bar{\alpha}_j + [\bar{\alpha}_p, \bar{\alpha}_a] \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_j \\
 &= \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b [\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_c] + \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a [\bar{\alpha}_j, \bar{\alpha}_b] \bar{\alpha}_c + \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \\
 &\quad + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b [\bar{\alpha}_p, \bar{\alpha}_c] \bar{\alpha}_j + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b [\bar{\alpha}_p, \bar{\alpha}_b] \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_j \\
 &= \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \tau_{jc} + \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \tau_{jb} + \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \tau_{ja} \\
 &\quad + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_j \tau_{pc} + \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_j \tau_{pb} + \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_j \tau_{pa}
 \end{aligned}$$

$$Q_1 = -\frac{1}{24} \tau_{ip} \Gamma_{lmn} g_{abcd} \langle \alpha_d \rangle \tau_{jc} \left\{ \begin{aligned} & \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \rangle + \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \rangle \tau_{jb} \\ & + \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \rangle \tau_{ja} + \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_j \rangle \tau_{pc} \\ & + \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_j \rangle \tau_{pb} + \langle : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_b \bar{\alpha}_c \bar{\alpha}_j \rangle \tau_{pa} \end{aligned} \right\}$$

$$Q_1 = -\frac{1}{24} \tau_{ip} \Gamma_{lmn} g_{abcd} \langle \alpha_d \rangle \tau_{jc} \left\{ : \bar{\alpha}_l \bar{\alpha}_m \bar{\alpha}_n : \bar{\alpha}_p \bar{\alpha}_a \bar{\alpha}_b \right\} \tag{B.13}$$

$$= -\frac{1}{4} \tau_{ip} (6) \left(-\frac{1}{6} \right) h_{abcd} \tau_{jc} (\rho\tau)_{al} (\rho\tau)_{bm} (\rho\tau)_{cn} G_{efg} (\tau\rho^{-1})_{le} (\tau(1+\rho)^{-1})_{fm} (\tau(1+\rho)^{-1})_{gn}$$

$$Q_1 = \frac{1}{4} \tau_{jc} \tau_{ie} g_{abcd} (-\delta)_{fa} (-\delta)_{gb} G_{eab} =$$

$$Q_1 = \frac{1}{4} \tau_{jc} \tau_{ie} g G_{efg}$$

Le calcul de tous les termes donne l'expression finale de Q_{ij} .

Bibliographie

- [1] E.A Cornell and C. E. Wieman. Nobel Lecture: Bose-Einstein condensation in a Dilute gas, Rev. Mod. Phys, vol. Aug (2002).
- [2] Wolfgang Ketterle, Bose-Einstein condensation and the atom laser. Rev. Mod. Phys., vol. 74, no. 4, Nov(2000).
- [3] J.W.Negel and H.Orland, Quantum many particle systems, Frontiers in Physics (1987).
- [4] E.Riessner, J.Math. Phys. 27, 159-160, (1948).
- [5] E.Riessner, J.Math. Phys. 32, 129-135, (1953).
- [6] C. Lanczos, The Variational Principles of Mechanics, Univ. of Toronto (1964).
- [7] J.T.Oden and J.N.Reddy, Variational Methods in Theoretical Mechanics, Springer-Verlag (1976).
- [8] P.O.Lowdin, Chem. Phys. Lett. 14 (1972)1.
- [9] J.Broeckhove, L.Lathouwers and P. Van Leuven, Lecture Note in Physics Springer, Berlin, Vol. 256 (1985).
- [10] J.Broeckhove, L.Lathouwers and P. Van Leuven, J. Phys. A 22 (1989) 4395 ; J.Mol. Struct. (Theochem), 199 (1989) 245.
- [11] R.P.Feynman, Phys .Rev. Mov. 20 (1948) 367.
- [12] J. Schwinger, Phys. Rev.82 (1951) 914.
- [13] R. Jachiw and A.Kerman, Phys. Lett, 71A 2.3 (1979) 158.

-
- [14] R.P.Feynman., Proc. Int.Workshop, Wangerooe, Germany (1987).
- [15] O.Eboli,R. Jackiw and So-Young Pi, Phys. Rev. D37.12(1988) 3557.
- [16] A.Kerman and D. Vautherin, Ann. Phys. 192, 2(1989) 408.
- [17] M.Mitchard, A. Davis and A. Macfarlane, Nucl. Phys B325 (1989) 470.
- [18] J. Wudka, Phys. Rev D39 . 10 (1989) 3000.
- [19] I. Yotsuyanagi, Phys. Rev. D39. 10 (1989) 3034.
- [20] S.Kim, J.yang , K. Soh and J.Yee, Phys. Rev. D40. 8 (1989) 2647.
- [21] V.N. Popov, Sov. Phys, JETP 20 (1964) 1185
- [22] Cambridge University Press, Functional Integrals and Collective Excitations (1987).
- [23] N.N. Bogoliubov, J. Phys. USSR. 11.23 (1947).
- [24] A. Griffin, Combridge University Press, New York. (1993).
- [25] N. P. Proukakis and B Jackson PHD TUTORIAL: Finite-temperature models of Bose–Einstein condensation, J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys. 41 (2008) 203002.
- [26] R. Balian and M.Vénéroni, Phys. Rev. Lett. 47 (1981) 1353, 1765 (E).
- [27] R. Balian and M.Vénéroni, Ann. Phys. (N.Y) 164 (1985) 334.
- [28] M. Benarous, Thèse de doctorat, IPN, Orsay, France, Oct, (1991).
- [29] A.L.Fetter and J.D.Walecka,Quantum Theory of many particle systems (NC Graw-Hill, New york), (1971).
- [30] A.Einstein. Sitzunberg. KG1.press. Akad.Wiss, (1925) 3.
- [31] A.Miller, D. Pines et P. Nozieres. Phys.Rev. 127 (1962) 1452

-
- [32] A.L.Fetter. Ann. Phys. (N.Y.) 70, (1972) 67.
- [33] A.L.Fetter and J.D.Walecka, Quantum Theory of many particle systems (NC Graw- Hill, New york), (1971).
- [34] Allan, Griffin, Cond-mat/9911419, 25 Nov (1999).
- [35] G. Pitaevskii, Cond-mat/9806038, 12 oct, (1998).
- [36] E.P. Gross, Nuovo Cimento 20 (1961) 454;
L.Pitaevskii, Sov. Phys. JETP 13 (1961) 451.
- [37] Pitaevskii, L.P, Phys. Lett. A 221 (1996) 14.
- [38] Pitaevskii, L.P, Phys. L ETT A 229, (1997) 406.
- [39] S. Giorgini, L. Pitaevskii, S. Stringari, Phys. Rev. A54 (1996) 4633
- [40] A.Griffin Phys. Rev, 53 (1996) 14.
- [41] Griffin.A, and E.Zaremba, Phys. Rev. A 56 (1997) 4839
- [42] A. Griffin. Excitations in Bose liquid (Cambridge University Press, N.Y), (1993).
- [43] N. M. Hugenholtz, D. Pines. Phys. Rev. 116 (1959) 489
- [44] Griffin,A., W.-C. Wu and S. Stringari,. Phys. Rev. Lett. 78,18,
University Press,New York, 1997).