République Algérienne Démocratique et Populaire Ministère de l'Enseignement Supérieur et de la Recherche Scientifique Université des Sciences et de la Technologie Houari Boumediene FACULTÉ DE PHYSIQUE



MÉMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de MAGISTER

EN : PHYSIQUE

Spécialité : Physique Théorique des Basses et Moyennes Énergies

Par : BENSMAIA MUSTAPHA KAMEL

Évaluation de quelques observables des noyaux pair-pairs chauds avec conservation du nombre de particules

Soutenu publiquement le 21/09/2011, devant le jury composé de :

Mr. SI AHMED El-Khider	Professeur, à l'USTHB	Président
Mr. FELLAH Mohamed	Professeur, à l'USTHB	Directeur de Mémoire
Mlle. ALLAL Nassima Hosni	Professeur, à l'USTHB	Examinatrice
Mme. FRAHI- AMROUN Akila	Professeur, à l'USTHB	Examinatrice
Mlle. BENHAMOUDA Naziha	<i>Maître de Conférences/ A</i> , à l'USTHB	Examinatrice

 \dot{A} mes parents et à toute ma famille, \dot{A} ma femme.

Remerciements

Ce travail a été réalisé au sein du Laboratoire de Physique Théorique de la Faculté de Physique de l'USTHB. Il a été proposé et dirigé par Mr. M.Fellah, Professeur à l'USTHB. Je tiens à le remercier pour m'avoir accueilli au sein de son équipe, d'avoir mis à ma disposition tous les moyens techniques, sans oublier son aide et ses conseils continus nécessaires à l'accomplissement de ce travail. Pour tout cela je lui adresse mes sincères remerciements

Je remercie Mr. E. Si Ahmed, Professeur à l'USTHB, pour m'avoir fait l'honneur d'accepter la présidence de mon jury.

Je remercie également Mlle N.H.Allal, Professeur à l'USTHB, pour son aide apportée tout au long de l'année. Je la remercie également d'avoir accepté de faire partie du jury.

J'adresse aussi mes remerciements à N.H. Benhamouda, Maître de conférences A à l'US-THB, pour les toutes les discussions scientifiques, pour son aide précieuse et continue, aussi pour avoir accepté de faire partie du jury.

J'adresse également mes remerciements à Mme A.Frahi-Amroun, Professeur à l'USTHB, d'avoir accepté de faire partie du jury.

Je ne saurais oublier Mr. M.R.Oudih Maître de conférences A à l'USTHB, pour toute l'aide que j'ai pu trouver auprès de lui et ses nombreux conseils. Je tiens à remercier aussi tous mes collègues et amis : Mme I. Ami, M. Belabbes, A.Berbiche, M. Douici, A. Haddouche, F. Hammache, Y. Hamza, H. Kadi, Mr. S. Kerrouchi, Mme D. Mokhtari, R. Rezouk et M. Taibeche, pour l'agréable atmosphère de travail qui règne au sein de notre équipe.

Table des matières

In	Introduction 4				
1	Thé	Théorie BCS			
	1.1	Introduction	7		
	1.2	Hamiltonien du système	8		
		1.2.1 Renversement par rapport au sens du temps	9		
		1.2.2 La force d'appariement \ldots	10		
	1.3	La théorie BCS	11		
		1.3.1 Transformation de Bogoliubov-Valatin	12		
		1.3.2 L'Etat BCS	12		
		1.3.3 Diagonalisation de l'hamiltonien	14		
		1.3.4 Les états BCS	17		
2	Mét	hode de projection à température nulle	20		
	2.1	Introduction	20		
	2.2	Projection de l'état BCS	21		
	2.3	Le projecteur dans l'espace nombre d'occupation $\ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots$	24		
	2.4	Projection des états BCS	26		
		2.4.1 Cas d'un système ayant un nombre pair de particules	26		
		2.4.2 Cas d'un système ayant un nombre impair de particules	28		
	2.5	Les états projetés en représentation quasi-particules	29		
	2.6	Propriétés des opérateurs conservant le nombre de particules	30		
	2.7	Effet de la conservation du nombre de particules	32		

	2.8	Energie projetée	35
3	Tra	itement de l'appariement à température finie avec et sans projection	39
	3.1	Introduction	39
	3.2	La théorie BCS à température finie (FTBCS)	40
	3.3	La grande fonction de partition	44
		3.3.1 L'énergie	46
		3.3.2 L'entropie	46
		3.3.3 La capacité calorifique	47
4	Rés	sultats numériques et discussion	50
	4.1	Introduction	50
	4.2	Modèle schématique de Richardson	50
		4.2.1 Energie d'excitation	53
		4.2.2 Entropie	55
		4.2.3 Capacité calorifique	56
	4.3	Cas réaliste	60
		4.3.1 Energie d'excitation	62
		4.3.2 Entropie et capacité calorifique	65
Co	onclu	ision	69
A	nnex	e	72
	.1	Energie	72
	.2	Entropie	74

.3

Table des figures

4-1	Evolution de la demi-largeur du gap Δ en fonction de la température pour des	
	systèmes ayant $N = 8, 10$ et 16 particules respectivement	51
4-2	Variation de l'énergie d'excitation en fonction de la température pour les diffé-	
	rents systèmes considérés et selon les deux approches $FTBCS$ et $FTSBCS. \ . \ .$	54
4-3	Evolution de la demi-largeur du gap Δ , de l'entropie et de la capacité calorifique	
	en fonction de la température pour les trois systèmes considérés	57
4-4	Evolution de la capacité calorifique en fonction de la température pour $N=8$ et	
	différents G et selon les deux approches, $FTBCS$ et $FTSBCS$	58
4-5	Evolution de la capacité calorifique en fonction du rapport $T/Tc~{\rm pour}~N=8$ et	
	différents G et selon les deux approches, $FTBCS$ et $FTSBCS$	59
4-6	Evolution de la demi-largeur du gap Δ , de l'énergie d'excitation $E*$ et de l'énergie	
	d'excitation totale E_T pour les noyaux légers considérés	63
4-7	Même commentaire que la figure $4-6$ pour les noyaux de masse intermédiaire	
	considérés	64
4-8	Evolution de la demi-largeur du gap Δ , de l'entropie S et de la capacité calorifique	
	C en fonction de la température pour les noyaux légers considérés	66
4-9	Même commentaire que la figure $4-8$ pour les noyaux lourds considérés	67
4-10	Comportement de la capacité calorifique en fonction de la température pour le	
	noyau $^{30}_{14}$ Si	68

Liste des tableaux

4.1	Tableau récapitulatif des résultats obtenus pour la résolution du système d'équa-	
	tions (4.1). \ldots	52
4.2	Energie BCS et énergie SBCS du système en fonction du degré d'extraction n	
	des fausses composantes pour N=8, G=0.8 MeV	52
4.3	Même commentaire que dans le tableau 4.2 pour N=10, G=0.4 MeV	52
4.4	Même commentaire que dans le tableau 4.2 pour N=16, G=0.475 MeV	53
4.5	L'écart relatif entre C (évaluée par FTBCS) et C (évaluée par FSTBCS) en	
	fonction de G et du rapport (T/Tc) et pour un nombre de particules N=8. $\ .$	57
4.6	Valeurs expérimentales des paramètres du gap, de la température critique du	
	système et des valeurs des niveaux de Fermi pour le système proton des différents	
	noyaux légers considérés pour une température nulle	61
4.7	Même commentaire que pour le tableau 4-5 pour le système neutrons. \ldots .	61
4.8	Valeurs expérimentales des paramètres du gap, de la température critique du	
	système et des valeurs des niveaux de Fermi pour le système proton des différents	
	noyaux lourds considérés pour une température nulle. \ldots \ldots \ldots \ldots \ldots	61
4.9	Même commentaire que pour le tableau 4-7 pour le système neutrons	62

Introduction

Les dernières avancées technologiques ont conduit à de très grands progrès en physique nucléaire expérimentale. Ainsi, les développements et la production des faisceaux radioactifs ont rendu accessible l'étude des noyaux loin de la vallée de stabilité. Parmi ces noyaux se trouvent ceux qui sont situés aux frontières de la connaissance humaine et qui sont appelés noyaux exotiques.

L'étude de ces derniers offre la possibilité d'accéder à de nouvelles informations dans le domaine de la structure nucléaire, ainsi en confrontant les modèles théoriques établis à des domaines encore inexpliqués, cela permet de préciser davantage notre conception de ce dernier en développant de nouvelles approches théoriques. Il sera alors, plus facile de se pencher sur les différents problèmes incluant des systèmes de nucléons rencontrés dans diverses branches de la Physique, comme l'Astrophysique.

Sans conteste, l'effet des corrélations d'appariement est très important pour les noyaux exotiques [1, 2], il s'avère nécessaire alors, pour une bonne description du système, de les inclure [3]-[5] et jusqu'à aujourd'hui, la théorie *BCS* reste la méthode la plus utilisée pour la prise en compte de ce type d'interaction. Cette dernière a été élaborée par Bardeen, Cooper et Schrieffer [6] pour décrire la supraconductivité en physique du solide. Ce n'est que vers la fin des années cinquante que Bohr, Mottelson et Pines [7] ont suggéré l'hypothèse de la superfluidité des noyaux, afin d'expliquer la différence observée entre les spectres des noyaux pair-pairs et pairimpairs. En effet, un gap est observé dans les noyaux pair-pairs entre l'état fondamental et les premiers états excités et qui ne l'est pas dans les noyaux pair-impairs. Par la suite, Belayev [8] a adapté la théorie *BCS* à la physique nucléaire.

Toutefois, la théorie BCS est bien connue pour briser la symétrie relative au nombre de

particules, ce qui induit des erreurs lors des calculs des observables physiques comme l'énergie. Ce problème est presque aussi vieux que la théorie BCS elle-même et pour palier à cette difficulté, plusieurs méthodes pour restaurer le bon nombre de particules ont été proposées. Les méthodes les plus utilisées peuvent être regroupées selon deux approches [60]. La première est liée au principe variationnel où l'on utilise un opérateur de projection pour projeter l'état BCSsur sa composante physique, la variation peut être effectuée avant ou après projection. Citons comme exemple la méthode FSBCS (projection avant variation) [10]-[12], qui est une méthode de projection exacte mais coûteuse sur le plan numérique et analytique [13], et la méthode PSBCS (projection après variation) [14]-[19], qui est une méthode à la fois exacte et simple à manipuler mais moins rigoureuse que son homologue FSBCS sur le plan mathématique. Dans une même approche, citons aussi des méthodes approximatives et faciles à manipuler, la plus connue et la plus utilisée est la méthode de Lipkin-Nogami (LN) [20]-[23], ou bien encore la méthode de la coordonnée génératrice (GCM) [24]. La deuxième approche consiste à prendre en compte le terme H_{resid} pour se débarrasser des fluctuations du nombre de particules, c'est la méthode RPA (approximation de la phase aléatoire) [24]-[26], ainsi que sa généralisation aux systèmes superfluides, la QRPA (quasiparticule-RPA) [27] et leurs dérivées [28]-[30].

Un des aspects les plus importants de l'étude de la structure nucléaire, est la prise en compte de la température par la théorie BCS à température finie *FTBCS* (Finite Temperature) [31]-[37]. Plusieurs auteurs se sont intéressés à cette dernière afin d'étudier l'effet de la température sur l'appariement nucléaire via différentes grandeurs thermodynamiques, comme l'énergie, l'entropie ou encore la capacité calorifique. Tous les travaux menés jusqu'alors, arrivent à la même conclusion : l'augmentation de la température permet le passage de l'état superfluide à l'état normal de gaz de Fermi, autrement dit, la température a tendance à détruire l'appariement nucléaire. Cependant, on peut distinguer deux idées principales concernant le passage à l'état normal. En effet, plusieurs travaux [33, 34] stipulent que cette transition est brutale. On observe alors une cassure à une température donnée, dite température critique, dans les courbes donnant l'évolution des grandeurs thermodynamiques sus-mentionnées. En revanche, pour d'autres auteurs, le passage est moins rude, refusant ainsi l'idée du passage brut de l'état superfluide à l'état normal. Ce dernier point de vue semble plus en accord avec les données expérimentales[38, 39].

Le but du présent travail est d'étudier l'effet de la restauration du bon nombre de particules

ainsi que l'influence de la température sur les observables nucléaires classiques. Pour ce faire, on commencera par rappeler les grandes lignes de la théorie *BCS* qui fera l'objet du premier chapitre. Dans le second, on rappellera la méthode *SBCS* afin de restaurer la symétrie relative au nombre de particules et qui est brisée par la théorie *BCS*. Dans une troisième étape, nous établirons l'expression de la grande fonction de partition pour un système qui conserve le nombre de particules et à travers laquelle, nous donnerons les différentes expressions des grandeurs thermodynamiques usuelles, à savoir : l'énergie, l'entropie et la capacité calorifique. Enfin, les différentes expressions obtenues seront testées via le modèle schématique de Richardson [40] puis dans le cadre du modèle réaliste de Woods-Saxon [41]. Les résultats numériques obtenus seront présentés et discutés dans le quatrième et dernier chapitre.

Chapitre 1

Théorie BCS

1.1 Introduction

L'étude microscopique de la structure nucléaire nécessite la prise en compte des interactions résiduelles à courte portée en plus des modèles à particules indépendantes[24], qui stipulent que le mouvement de chaque nucléon est indépendant des autres nucléons. En d'autres termes, chaque nucléon se meut dans un potentiel créé par tous les autres nucléons. Plusieurs formes de ce potentiel ont été calculées ou proposées. Citons celui de Hartree-Fock [24], [25] qui est un champ moyen déterminé d'une manière self-consistante, ou encore celui de Nilsson[42], Yukawa[43] et Woods-Saxon[44] qui sont établis de manière phénoménologique.

La plus importante de ces interactions résiduelles est celle dûe aux effets d'appariement des nucléons. Ce type d'interaction a été traité par Bardeen, Cooper et Schrieffer (théorie *BCS*) [6] dans le cadre de la théorie de la supraconductivité en physique du solide en 1957.

En analysant les spectres des noyaux pair-pairs et pair-impairs on constate l'existence d'un gap d'énergie entre l'état fondamental et les premiers états excités pour les noyaux pair-pairs mais pas dans le cas des pair-impairs. Mayer et Jensen [45] ont interprété cette différence entre les deux spectres comme étant dûe à l'existence d'une interaction résiduelle entre les nucléons. On observa ensuite une analogie entre les spectres énergétiques des supraconducteurs et ceux de certains noyaux ce qui poussa Bohr, Mottelson et Pines [7] à développer cette idée en introduisant l'interaction résiduelle d'appariement en s'inspirant de la théorie BCS de la supraconductivité. C'est par la suite que Belyaev en 1959 [8] étendit la théorie BCS à la physique nucléaire pour le cas des noyaux sphériques où il supposa l'existence de l'appariement entre nucléons occupant des états se déduisant l'un de l'autre par renversement du sens du temps.

Toutefois, il est connu que l'approximation BCS présente un défaut majeur qui est la non conservation du nombre de particules, pourtant elle est très souvent utilisée dans le traitement de l'interaction d'appariement pour sa simplicité.

Ce chapitre a pour but de rappeler la théorie BCS.

1.2 Hamiltonien du système

Soit un système ayant un nombre pair de nucléons (protons et neutrons) décrit par l'hamiltonien [41] :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + V \tag{1.1}$$

où \mathcal{H}_0 est le champ moyen du modèle à particules indépendantes. Il existe une base où \mathcal{H}_0 est diagonal et il s'écrit en seconde quantification comme :

$$\mathcal{H}_0 = \sum_{kt} \varepsilon_{kt} a_{kt}^+ a_{kt} \tag{1.2}$$

où t represente la composante du spin isotopique, t = p pour les protons et t = n pour les neutrons. Les opérateurs a_{kt}^+, a_{kt} désignent les opérateurs de création et d'annihilation de particules dans l'état $|kt\rangle$ d'énergie ε_{kt} et satisfont aux relations d'anticommutation de fermions [46] :

$$\left\{ a_{kt}^{+}, a_{jt'}^{+} \right\} = \left\{ a_{kt}, a_{jt'} \right\} = 0 \ \forall \ k, j, t, t'$$

$$\left\{ a_{kt}^{+}, a_{jt'} \right\} = \delta_{kj} \delta_{tt'}$$

$$(1.3)$$

V représente l'interaction résiduelle, qu'on écrit sur la même base de \mathcal{H}_0 sous la forme[47] :

$$V = \frac{1}{4} \sum_{\substack{klmn\\t_1t_2t_3t_4}} \langle kt_1 lt_2 | V | mt_3 nt_4 \rangle a_{kt_1}^+ a_{lt_2}^+ a_{nt_4} a_{mt_3}$$
(1.4)

où les quantités $\langle kt_1 lt_2 | V | mt_3 nt_4 \rangle$ sont les éléments de matrice antisymétrisés de l'interaction résiduelle V. On suppose V invariant par rotation et par renversement du sens du temps.

On se propose de faire ci-dessous un bref rappel de l'opérateur renversement du sens du temps.

1.2.1 Renversement par rapport au sens du temps

Pour un noyau sphérique l'état occupé par un nucléon est décrit par les nombres quantiques habituels :

 $|k\rangle = |n_k j_k m_k\rangle$

où n_k est le nombre quantique principal et j_k , m_k sont respectivement le moment cinétique et sa projection. Son renversé par rapport au sens du temps sera :

$$\begin{split} T \left| k \right\rangle &= \left| \tilde{k} \right\rangle = (-1)^{j_k - m_k} \left| n_k j_k - m_k \right\rangle \text{ où } T \text{ est l'opérateur renversement du sens du temps.} \\ \text{En appliquant l'opérateur } T \text{ une seconde fois, on obtient :} \\ \left| \tilde{\tilde{k}} \right\rangle &= T \left| \tilde{k} \right\rangle = (-1)^{j_k - m_k} (-1)^{j_k + m_k} \left| n_k j_k m_k \right\rangle \\ \left| \tilde{\tilde{k}} \right\rangle &= (-1)^{2j_k} \left| n_k j_k m_k \right\rangle = - \left| n_k j_k m_k \right\rangle = - \left| k \right\rangle, \text{ car } j_k \text{ est demi-entier puisqu'on a affaire à} \end{split}$$

des fermions.

Posons $s_k = (-1)^{j_k - m_k}$. Il vérifie les propriétés suivantes : $\begin{cases}
s_{\tilde{k}} = -s_k \\
s_k^2 = 1
\end{cases}$

Pour les noyaux déformés, l'état $|k\rangle$ peut être développé sur la base des états précédents :

$$\begin{aligned} |k\rangle &= \sum_{n_k j_k m_k} C_{njm}^k |n_k j_k m_k\rangle \text{ et donc :} \\ \left|\tilde{k}\right\rangle &= \sum_{n_k j_k m_k} C_{njm}^k (-1)^{j_k - m_k} |n_k j_k - m_k\rangle \,. \end{aligned}$$

De même, on a $\left|\widetilde{k}\right\rangle &= \sum_{n_k j_k m_k} C_{njm}^k (-1)^{2j_k} |n_k j_k - m_k\rangle = - |k\rangle$
On supposera pour la suite que H est invariant par le represente

On supposera pour la suite que H est invariant par le renversement du sens du temps et par rotation, ce qui entraîne que :

$$\mathcal{H} = T^+ \mathcal{H} T \tag{1.5}$$

et :

$$\langle kl | T^+ VT | mn \rangle = \langle \tilde{m}\tilde{n} | V | \tilde{k}\tilde{l} \rangle$$
(1.6)

$$\langle k | T^{+} \mathcal{H}_{0} T | k \rangle = \left\langle \tilde{k} \middle| H_{0} \middle| \tilde{k} \right\rangle$$
 (1.7)

Ceci induit une dégénéres cence des énergies individuelles : $\varepsilon_k = \varepsilon_{\tilde{k}}$ où $\varepsilon_{\tilde{k}}$ est l'énergie associée à l'état $|\tilde{k}\rangle$.

Notons que T est antiunitaire.

1.2.2 La force d'appariement

L'interaction d'appariement est la plus importante des interactions résiduelles, elle a été introduite par Belyaev pour deux états renversés l'un de l'autre par rapport au sens du temps. Ses éléments de matrice sont définis par :

$$\langle kt_1 lt_2 | V | mt_3 nt_4 \rangle = -4G_{t_1 t_2 t_3 t_4} \delta_{k\tilde{l}} \delta_{m\tilde{n}} \delta_{t_1 t_2} \delta_{t_3 t_4} \delta_{t_1 t_4}$$
(1.8)

où l'interaction d'appariement neutron-proton n'est pas prise en compte et où G est l'intensité de la force d'appariement que l'on suppose constante et positive. Ainsi tous les éléments de matrice de V sont négatifs, l'interaction d'appariement étant attractive.

Compte tenu des équations (1.1), (1.2) et (1.8) on a :

$$\mathcal{H} = \sum_{t=n,p} \left\{ \sum_{k} \varepsilon_{kt} a_{kt}^{+} a_{kt} - G_{tt} \sum_{kl} a_{kt}^{+} a_{\tilde{k}t}^{+} a_{\tilde{l}t} a_{lt} \right\}$$
$$= \sum_{t=n,p} H_{t}$$
(1.9)

Il en résulte que l'hamiltonien du système s'écrit comme la somme de deux hamiltoniens H_p et H_n qui décrivent deux sous-systèmes, neutrons et protons respectivement.

L'état propre de \mathcal{H} s'écrit alors comme produit tensoriel des états propres des sous systèmes :

$$|\Psi\rangle = |\Psi_n\rangle \otimes |\Psi_p\rangle$$
.

Les problèmes aux valeurs propres de H_n et H_p étant similaires, on étudiera par la suite un seul sous-système ce qui conduit à l'expression usuelle de l'hamiltonien :

$$H = \sum_{\nu > 0} \varepsilon_{\nu} (a_{\nu}^{+} a_{\nu} + a_{\tilde{\nu}}^{+} a_{\tilde{\nu}}) - G \sum_{\nu \mu > 0} a_{\nu}^{+} a_{\tilde{\nu}}^{+} a_{\tilde{\mu}} a_{\mu}$$
(1.10)

où l'on a omis d'écrire l'indice t pour alléger l'écriture.

Il s'agit à présent de trouver les fonctions propres communes de l'Hamiltonien H et de l'opérateur nombre de particules N qui est donné par les expressions :

$$N = \sum_{\nu>0} (a_{\nu}^{+} a_{\nu} + a_{\tilde{\nu}}^{+} a_{\tilde{\nu}})$$
(1.11)

$$= \sum_{\nu>0} (n_{\nu} + n_{\tilde{\nu}}) \tag{1.12}$$

et où on a noté par : $n_{\nu} = a_{\nu}^{+} a_{\nu}$ et $n_{\tilde{\nu}} = a_{\tilde{\nu}}^{+} a_{\tilde{\nu}}$ les opérateurs nombres d'occupation des états $|\nu\rangle$ et $|\tilde{\nu}\rangle$.

Ce problème n'admet pas de solution exacte simple, cependant on peut le résoudre par une méthode approximative très connue qui est la théorie BCS.

1.3 La théorie BCS

L'hamiltonien donné par l'expression (1.10) doit décrire un système à n_0 nucléons, il doit donc commuter avec l'opérateur nombre de particules N:

$$[H,N] = HN - NH$$

$$= \sum_{\nu\gamma>0} \varepsilon_{\nu} (a_{\nu}^{+}a_{\nu} + a_{\tilde{\nu}}^{+}a_{\tilde{\nu}})(a_{\gamma}^{+}a_{\gamma} + a_{\tilde{\gamma}}^{+}a_{\tilde{\gamma}}) - G \sum_{\nu\mu\gamma>0} a_{\nu}^{+}a_{\tilde{\nu}}^{+}a_{\tilde{\mu}}a_{\mu} (a_{\gamma}^{+}a_{\gamma} + a_{\tilde{\gamma}}^{+}a_{\tilde{\gamma}})$$

$$- \sum_{\nu\gamma>0} \varepsilon_{\nu} (a_{\gamma}^{+}a_{\gamma} + a_{\tilde{\gamma}}^{+}a_{\tilde{\gamma}})(a_{\nu}^{+}a_{\nu} + a_{\tilde{\nu}}^{+}a_{\tilde{\nu}}) + G \sum_{\nu\mu\gamma>0} (a_{\gamma}^{+}a_{\gamma} + a_{\tilde{\gamma}}^{+}a_{\tilde{\gamma}})a_{\nu}^{+}a_{\tilde{\nu}}^{+}a_{\tilde{\mu}}a_{\mu}$$

$$= 0$$

Dans cette théorie, on choisit un état BCS (qu'on définira par la suite) tel que le nombre de particules est conservé en moyenne, autrement dit :

$$\langle BCS | N | BCS \rangle = n_0 \tag{1.13}$$

où n_0 est le nombre réel de particules du système.

Afin de tenir compte de cette contrainte, on introduit un paramètre de Lagrange λ et on diagonalisera l'hamiltonien auxiliaire :

$$H' = H - \lambda N \tag{1.14}$$

1.3.1 Transformation de Bogoliubov-Valatin

Dans le but de diagonaliser approximativement l'hamiltonien, Bogoliubov et Valatin ont défini les opérateurs α_{ν} et α_{ν}^+ qui sont des combinaisons linéaires des opérateurs de création et d'annihilation de vraies particules :

$$\begin{cases} \alpha_{\nu} = u_{\nu}a_{\nu} - v_{\nu}a_{\tilde{\nu}}^{+} \\ \alpha_{\nu}^{+} = u_{\nu}a_{\nu}^{+} - v_{\nu}a_{\tilde{\nu}} \end{cases}$$
(1.15)

où : α_{ν}^{+} est l'opérateur de création d'une quasiparticule qui est une vraie particule avec une amplitude de probabilité u_{ν} et un vrai trou avec une amplitude de probabilté v_{ν} . Les paramètres u_{ν} et v_{ν} sont des nombres positifs qui satisfont aux conditions :

 $u_{\tilde{\nu}} = u_{\nu}$ et $v_{\tilde{\nu}} = v_{\nu} \quad \forall \nu$, ce qui se traduit par le fait que l'état $|\tilde{\nu}\rangle$ est occupé ou inoccupé avec la même probabilité que l'état $|\nu\rangle$.

Les opérateurs α_{ν} et α_{ν}^{+} satisfont aux règles d'anticommutation de fermions $\{\alpha_{\nu}^{+}, \alpha_{\mu}\} = \delta_{\nu\mu}$ c.à.d que la transformation (1.15) est canonique si et seulement si : $u_{\nu}^{2} + v_{\nu}^{2} = 1$.

La transformation inverse de (1.15) est donnée par :

$$\begin{cases}
 a_{\nu} = u_{\nu}\alpha_{\nu} + v_{\nu}\alpha_{\tilde{\nu}}^{+} \\
 a_{\nu}^{+} = u_{\nu}\alpha_{\nu}^{+} + v_{\nu}\alpha_{\tilde{\nu}}
\end{cases}$$
(1.16)

1.3.2 L'Etat BCS

On peut définir une nouvelle représentation, dite représentation quasiparticule dont le vide sera noté $|BCS\rangle$; il est obtenu par élimination de toutes les quasi-particules du vrai vide de particules $|0\rangle$:

$$|BCS\rangle = \prod_{\nu>0} \alpha_{\nu} \alpha_{\tilde{\nu}} |0\rangle \tag{1.17}$$

D'après les équations (1.15) et (1.17), on obtient, tous calculs faits :

$$|BCS\rangle = \prod_{\nu>0} \left(u_{\nu} + v_{\nu} a_{\nu}^{+} a_{\tilde{\nu}}^{+} \right) |0\rangle$$
 (1.18)

Cette nouvelle représentation est donc complètement définie par le vide de quasi-particules et l'action de ses opérateurs sur ce dernier : $\begin{cases} \alpha_{\nu} |BCS\rangle = 0 \\ \langle BCS | \alpha_{\nu}^{+} = 0 \end{cases} \forall \nu$

On remarque que l'expression (1.18) peut être développée sous la forme suivante :

$$|BCS\rangle = \left(\prod_{\nu>0} u_{\nu}\right) \prod_{\nu>0} \left(1 + \frac{v_{\nu}}{u_{\nu}} a_{\nu}^{+} a_{\tilde{\nu}}^{+}\right) |0\rangle$$
(1.19)

et en développant le produit du second membre :

$$|BCS\rangle = \left(\prod_{\nu>0} u_{\nu}\right) \left\{ |0\rangle + \sum_{\nu>0} \frac{v_{\nu}}{u_{\nu}} a_{\nu}^{+} a_{\tilde{\nu}}^{+} |0\rangle + \frac{1}{2} \sum_{\substack{\nu\mu>0\\\nu\neq\mu}} \frac{v_{\nu} v_{\mu}}{u_{\nu} u_{\mu}} a_{\nu}^{+} a_{\tilde{\nu}}^{+} a_{\mu}^{+} |0\rangle + \dots \right\}$$
$$= \left(\prod_{\nu>0} u_{\nu}\right) \sum_{l=0}^{\Omega} \frac{1}{l!} \left[\sum_{\nu>0} \frac{v_{\nu}}{u_{\nu}} a_{\nu}^{+} a_{\tilde{\nu}}^{+}\right]^{l} |0\rangle$$
$$= \sum_{l=0}^{\Omega} |\Phi_{l}\rangle$$
(1.20)

où Ω représente la dégénéréscence totale de paires et on a noté par :

$$|\Phi_l\rangle = \left(\prod_{\nu>0} u_\nu\right) \frac{1}{l!} \left[\sum_{\nu>0} \frac{v_\nu}{u_\nu} a_\nu^+ a_{\tilde{\nu}}^+\right]^l |0\rangle$$
(1.21)

la composante à l paires de particules qui s'écrit aussi sous la forme :

$$|\Phi_l\rangle = \left(\prod_{\nu>0} u_\nu\right) \frac{1}{l!} \sum_{\nu_1\nu_2\dots\nu_l} \frac{v_{\nu_1}v_{\nu_2}\dots v_{\nu_l}}{u_{\nu_1}u_{\nu_2}\dots u_{\nu_l}} A^+_{\nu_1} A^+_{\nu_2}\dots A^+_{\nu_l} |0\rangle$$
(1.22)

 A_{ν}^+ est l'opérateur de création d'une paire de particules : $A_{\nu}^+=a_{\nu}^+a_{\tilde{\nu}}^+.$

On peut maintenant voir clairement que l'état BCS ne décrit pas l'état d'un système donné, mais il contient des composantes de systèmes ayant différents nombres de particules : $|BCS\rangle = |\Psi\rangle = a_0 |N = 0\rangle + a_2 |N = 2\rangle + a_4 |N = 4\rangle + ...$ Ce sont les composantes autres que celle correspondant à n_0 qu'on appelle fausses composantes ou composantes fantômes. Si dans le cas d'un métal, cette violation du nombre de particules n'a guère d'importance pour des raisons statistiques, en physique nucléaire, le problème est réel, ce qui constitue l'une des grandes différences entre la supraconductivité en physique atomique et l'appariement en physique nucléaire. Ceci constitue le principal défaut de la théorie *BCS* d'où la nécessité de faire appel aux méthodes de projection (voir chapitre 2) afin de conserver le nombre de particules.

1.3.3 Diagonalisation de l'hamiltonien

Comme dit précédemment, pour tenir compte de la contrainte de la conservation du nombre de particules, on utilisera la méthode des multiplicateurs de Lagrange, ce qui nous donne un nouvel hamiltonien auxiliaire H' donné par (1.14), soit :

$$H' = \sum_{\nu>0} (\varepsilon_{\nu} - \lambda) (a_{\nu}^{+} a_{\nu} + a_{\tilde{\nu}}^{+} a_{\tilde{\nu}}) - G \sum_{\nu\mu>0} a_{\nu}^{+} a_{\tilde{\nu}}^{+} a_{\tilde{\mu}} a_{\mu}$$
(1.23)

On se propose d'écrire l'expression de H' dans la représentation quasi-particules en utilisant le théorème de Wick. On peut donc écrire :

$$H' = \sum_{\nu>0} (\varepsilon_{\nu} - \lambda) \left[a_{\nu}^{+\sqcap} a_{\nu} + a_{\widetilde{\nu}}^{+\sqcap} a_{\widetilde{\nu}} + : a_{\nu}^{+} a_{\nu} : + : a_{\widetilde{\nu}}^{+} a_{\widetilde{\nu}} : \right]$$

$$-G \sum_{\nu,\mu>0} \left\{ a_{\nu}^{+\sqcap} a_{\widetilde{\nu}}^{+} a_{\widetilde{\mu}}^{\sqcap} a_{\mu} - a_{\nu}^{+\sqcap} a_{\widetilde{\mu}} a_{\widetilde{\nu}}^{+\sqcap} a_{\mu} + a_{\nu}^{+\sqcap} a_{\mu} a_{\widetilde{\nu}}^{+\sqcap} a_{\widetilde{\mu}} \right.$$

$$+a_{\nu}^{+\sqcap} a_{\widetilde{\nu}}^{+} : a_{\widetilde{\mu}} a_{\mu} : + : a_{\nu}^{+} a_{\widetilde{\nu}}^{+} : a_{\widetilde{\mu}}^{\sqcap} a_{\mu} - a_{\nu}^{+\sqcap} a_{\widetilde{\mu}} : a_{\widetilde{\nu}}^{+} a_{\mu} : \right]$$

$$-: a_{\nu}^{+} a_{\widetilde{\mu}} : a_{\widetilde{\nu}}^{+\sqcap} a_{\mu} + a_{\nu}^{+\sqcap} a_{\mu} : a_{\widetilde{\nu}}^{+} a_{\widetilde{\mu}} : + : a_{\nu}^{+} a_{\mu} : a_{\widetilde{\nu}}^{+\sqcap} a_{\widetilde{\mu}}$$

$$+: a_{\nu}^{+} a_{\widetilde{\nu}}^{+} a_{\widetilde{\mu}} a_{\mu} : \right\}$$

$$(1.24)$$

En utilisant les expressions (1.16), on peut décomposer H' en :

$$H' = E_0 + H_{11} + H_2 + H_{22} + H_3 + H_4 \tag{1.25}$$

où : E_0 est la constante qui contient les termes entièrement contractés.

$$E_0 = 2\sum_{\nu>0} \left(\varepsilon_{\nu} - \lambda - \frac{G}{2} . v_{\nu}^2\right) v_{\nu}^2 - G\left(\sum_{\nu>0} u_{\nu} v_{\nu}\right)^2$$
(1.26)

Les H_{ij} sont les termes contenant i opérateurs de création et j opérateurs d'annihilation de quasi-particules et sont donnés respectivement par :

$$H_{11} = \sum_{\nu > 0} \left\{ \left(\varepsilon_{\nu} - \lambda - G.v_{\nu}^{2} \right) \left(u_{\nu}^{2} - v_{\nu}^{2} \right) + 2Gu_{\nu}v_{\nu} \sum_{\mu > 0} \left(u_{\mu}v_{\mu} \right) \right\} \left(\alpha_{\nu}^{+}\alpha_{\nu} + \alpha_{\tilde{\nu}}^{+}\alpha_{\tilde{\nu}} \right)$$
(1.27)

$$H_2 = H_{20} + H_{02} \tag{1.28}$$

$$H_2 = \sum_{\nu>0} \left[2\left(\varepsilon_{\nu} - \lambda - Gv_{\nu}^2\right) u_{\nu}v_{\nu} - G\left(u_{\nu}^2 - v_{\nu}^2\right) \sum_{\mu} u_{\mu}v_{\mu} \right] \left(\alpha_{\nu}^+ \alpha_{\tilde{\nu}}^+ + \alpha_{\tilde{\nu}}\alpha_{\nu}\right) \quad (1.29)$$

$$H_{22} = -G \sum_{\nu\mu>0} \left\{ \left(u_{\nu}^{2} v_{\mu}^{2} + v_{\nu}^{2} u_{\mu}^{2} \right) \alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\tilde{\nu}}^{+} \alpha_{\tilde{\mu}} \alpha_{\mu} + u_{\nu} v_{\nu} u_{\mu} v_{\mu} \left(\alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\mu}^{+} \alpha_{\mu} \alpha_{\nu} + \alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\mu} \alpha_{\nu} + \alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\mu} \alpha_{\mu} \alpha$$

$$H_{3} = H_{31} + H_{13}$$

$$H_{3} = G \sum_{\nu\mu>0} \left(u_{\nu}^{2} - v_{\nu}^{2} \right) u_{\mu} v_{\mu} \left\{ \alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\tilde{\nu}}^{+} \left(\alpha_{\mu}^{+} \alpha_{\mu} + \alpha_{\tilde{\mu}}^{+} \alpha_{\tilde{\mu}} \right) + \left(\alpha_{\mu}^{+} \alpha_{\mu} + \alpha_{\tilde{\mu}}^{+} \alpha_{\tilde{\mu}} \right) \alpha_{\tilde{\nu}} \alpha_{\nu} \right\} (1.31)$$

$$H_4 = H_{40} + H_{04}$$
(1.32)
$$G \sum_{a} (2, 2, 2, -2, 2) (a + 1, -1, -1, -1)$$
(1.32)

$$H_{4} = \frac{G}{2} \sum_{\nu\mu>0} \left(u_{\nu}^{2} v_{\mu}^{2} + u_{\mu}^{2} v_{\nu}^{2} \right) \left(\alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\tilde{\nu}}^{+} \alpha_{\mu}^{+} \alpha_{\tilde{\mu}}^{+} + \alpha_{\tilde{\mu}} \alpha_{\mu} \alpha_{\tilde{\nu}} \alpha_{\nu} \right)$$
(1.33)

Les paramètres u_{ν} et v_{ν} de la transformation (1.15) sont choisis de manière à minimiser la valeur E_0 , soit :

$$\frac{\partial E_0}{\partial v_{\nu}} = \frac{\partial E_0}{\partial u_{\nu}} = 0 \qquad \forall \nu \qquad (1.34)$$

ou explicitement :

$$4\left(\varepsilon_{\nu}-\lambda\right)v_{\nu}-4Gv_{\nu}^{3}-2G\left(\sum_{\nu>0}u_{\nu}v_{\nu}\right)\left(\frac{\partial}{\partial v_{\nu}}(u_{\nu}v_{\nu})\right)=0\ \forall\nu\tag{1.35}$$

En utilisant le fait que :

$$u_{\nu}^2 + v_{\nu}^2 = 1$$

on a alors

$$\frac{\partial u_\nu}{\partial v_\nu} = -\frac{v_\nu}{u_\nu}$$

et tous calculs faits on trouve :

$$\left. \begin{array}{c} u_{\nu}^{2} \\ v_{\nu}^{2} \end{array} \right\} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\varepsilon_{\nu} - \lambda - G v_{\nu}^{2}}{\sqrt{(\varepsilon_{\nu} - \lambda - G v_{\nu}^{2})^{2} + \Delta^{2}}} \right]$$
(1.36)

En injectant ces expressions dans (1.27), (1.28), on aboutit à la forme :

$$H' = E_0 + H_{11} + H_{res}$$

avec :

$$H_{11} = \sum_{\nu > 0} E_{\nu} \left(\alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\nu} + \alpha_{\tilde{\nu}}^{+} \alpha_{\tilde{\nu}} \right)$$
(1.37)

où on a posé :

$$E_{\nu} = \sqrt{\left(\varepsilon_{\nu} - \lambda - Gv_{\nu}^2\right)^2 + \Delta^2}$$

qui est l'énergie de la quasiparticule occupant l'état $|\nu\rangle$ et

$$\Delta = G \sum_{\nu > 0} u_{\nu} v_{\nu} \tag{1.38}$$

est la demi-largeur du gap,

 et

$$H_{res} = H_{22} + H_3 + H_4 \tag{1.39}$$

Notons le fait que les équations (1.36) annulent le terme H_{20} .

La conservation en moyenne du nombre de particules se traduit par :

$$n_0 = \langle BCS | N | BCS \rangle = 2 \sum_{\nu > 0} v_\nu^2 \tag{1.40}$$

$$=\sum_{\nu>0} \left(1 - \frac{\varepsilon_{\nu} - \lambda - Gv_{\nu}^2}{E_{\nu}}\right) \tag{1.41}$$

En vertu de l'équation (1.36), l'expression (1.38) peut se mettre sous la forme :

$$\frac{2}{G} = \sum_{\nu} \frac{1}{E_{\nu}}$$
 (1.42)

L'approximation des quasi-particules indépendantes consiste à négliger le terme H_{res} pour que l'hamiltonien soit diagonal dans cette nouvelle représentation. On a alors approximativement :

$$H' = E_0 + \sum_{\nu > 0} E_{\nu} \left(\alpha_{\nu}^+ \alpha_{\nu} + \alpha_{\tilde{\nu}}^+ \alpha_{\tilde{\nu}} \right)$$
(1.43)

Les expressions (1.40) et (1.42) sont appelées équations du gap.

1.3.4 Les états BCS

On a déjà défini le vide de la nouvelle représentation quasiparticule représenté par l'état $|\Psi\rangle = |BCS\rangle$ (voir équation (1.18)), on se propose d'expliciter quelques états excités du système de quasi-particules indépendantes :

L'état à une quasiparticule est défini par :

$$|\nu\rangle = \alpha_{\nu}^{+} |\Psi\rangle \tag{1.44}$$

et à l'aide des expressions (1.15) et (1.18) on obtient :

$$|\nu\rangle = a_{\nu}^{+} \prod_{\substack{j>0\\j\neq\nu}} \left(u_{j} + v_{j}a_{j}^{+}a_{\tilde{j}}^{+} \right) |0\rangle \tag{1.45}$$

Un état à deux quasi-particules appariées est donné par :

$$|\nu\tilde{\nu}\rangle = \alpha^+_{\nu}\alpha^+_{\tilde{\nu}} |\Psi\rangle$$

ou explicitement

$$|\nu\tilde{\nu}\rangle = \left(u_{\nu}a_{\nu}^{+}a_{\tilde{\nu}}^{+} - v_{\nu}\right)\prod_{\substack{j>0\\j\neq\nu}} \left(u_{j} + v_{j}a_{j}^{+}a_{\tilde{j}}^{+}\right)|0\rangle$$
(1.46)

L'état à deux quasi-particules non-appariées est donné par :

$$|\nu\mu\rangle = \alpha_{\nu}^{+}\alpha_{\mu}^{+} |\Psi\rangle$$

$$= a_{\nu}^{+}a_{\mu}^{+}\prod_{\substack{j>0\\ j\neq(\nu,\mu)}} \left(u_{j}+v_{j}a_{j}^{+}a_{j}^{+}\right)|0\rangle \qquad (1.47)$$

L'état à trois quasi-particules dont deux appariées et une célibataire est tel que :

$$|\nu\tilde{\nu}\mu\rangle = \alpha_{\nu}^{+}\alpha_{\tilde{\nu}}^{+}\alpha_{\mu}^{+}|\Psi\rangle$$

$$= \left(u_{\nu}a_{\nu}^{+}a_{\tilde{\nu}}^{+}-v_{\nu}\right)a_{\mu}^{+}\prod_{\substack{j>0\\ j\neq(\nu,\mu)}}\left(u_{j}+v_{j}a_{j}^{+}a_{\tilde{j}}^{+}\right)|0\rangle$$
(1.48)

et celui à trois quasi-particules occupant des états différents :

$$|\nu\mu\gamma\rangle = \alpha_{\nu}^{+}\alpha_{\mu}^{+}\alpha_{\gamma}^{+}|\Psi\rangle$$
$$= a_{\nu}^{+}a_{\mu}^{+}a_{\gamma}^{+}\prod_{\substack{j>0\\ j\neq(\nu,\mu,\gamma)}} \left(u_{j}+v_{j}a_{j}^{+}a_{\tilde{j}}^{+}\right)|0\rangle \qquad (1.49)$$

On a de même pour les états à quatre quasi-particules toutes appariées :

$$|\nu\tilde{\nu}\mu\tilde{\mu}\rangle = \alpha_{\nu}^{+}\alpha_{\tilde{\nu}}^{+}\alpha_{\mu}^{+}\alpha_{\tilde{\mu}}^{+}|\Psi\rangle$$

$$= \left(u_{\nu}a_{\nu}^{+}a_{\tilde{\nu}}^{+}-v_{\nu}\right)\left(u_{\mu}a_{\mu}^{+}a_{\tilde{\mu}}^{+}-v_{\mu}\right)\prod_{\substack{j>0\\ j\neq(\nu,\mu)}}\left(u_{j}+v_{j}a_{j}^{+}a_{\tilde{j}}^{+}\right)|0\rangle$$
(1.50)

et l'état à quatre quasi-particules avec une paire appariée et une autre brisée :

$$|\nu\tilde{\nu}\mu\gamma\rangle = \alpha_{\nu}^{+}\alpha_{\tilde{\nu}}^{+}\alpha_{\mu}^{+}\alpha_{\gamma}^{+}|\Psi\rangle$$

$$= \left(u_{\nu}a_{\nu}^{+}a_{\tilde{\nu}}^{+}-v_{\nu}\right)a_{\mu}^{+}a_{\gamma}^{+}\prod_{\substack{j>0\\ j\neq(\nu,\mu,\gamma)}}\left(u_{j}+v_{j}a_{j}^{+}a_{\tilde{j}}^{+}\right)|0\rangle$$

$$(1.51)$$

Efin l'état à quatre quasi-particules toutes distinctes :

$$|\nu\mu\gamma\delta\rangle = \alpha_{\nu}^{+}\alpha_{\mu}^{+}\alpha_{\gamma}^{+}\alpha_{\delta}^{+} |\Psi\rangle$$

$$= a_{\nu}^{+}a_{\mu}^{+}a_{\gamma}^{+}a_{\delta}^{+} \prod_{\substack{j>0\\ j\neq(\nu,\mu,\gamma,\delta)}} \left(u_{j}+v_{j}a_{j}^{+}a_{j}^{+}\right)|0\rangle$$

$$(1.52)$$

Chapitre 2

Méthode de projection à température nulle

2.1 Introduction

La théorie BCS est très souvent utilisée dans l'étude de l'appariement nucléaire pour sa simplicité. Cependant, comme souligné au chapitre précédent, elle présente quelques défauts dont la non conservation du nombre de particules qui peut être sans conséquence pour les systèmes possédant un grand nombre de particules mais qui est de première importance dans l'étude de la structure nucléaire. Dès lors, de nombreuses méthodes de projection ont été proposées comme la méthode de la coordonnée génératrice (GCM) [24] et la méthode de Lipkin-Nogami [20]-[23] qui sont des méthodes de projection approximatives contrairement à la méthode PHFB(Projected-Hartree-Fock-Bogoliubov) [49] qui, est une méthode de projection exacte ou encore la méthode Sharp-BCS (SBCS) [14]-[19]. Pour la suite du travail, le choix s'est porté sur cette dernière qui est simple à manipuler en plus d'être une méthode de projection exacte.

On se propose dans ce présent chapitre de faire un bref exposé sur la méthode de restauration du bon nombre de particules, on s'intéressera à la méthode SBCS, méthode qui a été développée au sein de notre laboratoire. Pour ce faire, nous commencerons par définir l'opérateur de projection suivi de sa discrétisation pour le cas d'un système possédant un nombre pair de particules comme pour un système ayant un nombre impair de particules, à la suite de quoi, nous donnerons les expressions de l'état BCS projeté ainsi que les états excités et nous finirons par le calcul de l'énergie du système.

2.2 Projection de l'état BCS

Si on multiplie les rapports $\frac{v_{\nu}}{u_{\nu}}$ par un nombre complexe non nul α dans l'expression (1.19), la composante à l paires de particules donnée par (1.21) devient multipliée par un facteur α^l . De ce fait, on en déduit que les états de la forme :

$$\alpha^{-P} \prod_{\nu>0} (u_{\nu} + \alpha v_{\nu} A_{\nu}^{+}) \left| 0 \right\rangle \tag{2.1}$$

où P est le nombre de paires de particules, ont la même composante physique que l'état $|BCS\rangle$. En effet, en faisant un développement similaire à (1.20):

$$\alpha^{-P} \left\{ \left(\prod_{\nu>0} u_{\nu} \right) \prod_{\nu>0} \left(1 + \alpha \frac{v_{\nu}}{u_{\nu}} A_{\nu}^{+} \right) \right\} |0\rangle$$

= $\alpha^{-P} \left(\prod_{\nu>0} u_{\nu} \right) \sum_{l=0}^{\Omega} \frac{1}{l!} \left[\sum_{\nu>0} \frac{\alpha v_{\nu}}{u_{\nu}} A_{\nu}^{+} \right]^{l} |0\rangle$ (2.2)

et si on cherche la $P^{i \grave{e} m e}$ composante, l = P, on trouve alors :

$$\alpha^{-P}\left(\prod_{\nu>0}u_{\nu}\right)\frac{\alpha^{P}}{P!}\left[\sum_{\nu>0}\frac{v_{\nu}}{u_{\nu}}A_{\nu}^{+}\right]^{P}|0\rangle = \left(\prod_{\nu>0}u_{\nu}\right)\frac{1}{P!}\left[\sum_{\nu>0}\frac{v_{\nu}}{u_{\nu}}A_{\nu}^{+}\right]^{P}|0\rangle = |\phi_{P}\rangle$$
(2.3)

On retrouve bien la composante à P paires de particules. Ceci montre que les états donnés par (2.1) décrivent le même système physique que l'état $|BCS\rangle$ et que la seule contrainte sur α est : $u_{\nu}^{2} + |\alpha^{2}| v_{\nu}^{2} = 1$ et donc α appartient au cercle de rayon unité dans le plan complexe. C'est ce qui va permettre d'éliminer les fausses composantes.

Pour ce faire, dans une première étape, on se propose de construire l'état $|\psi_1\rangle$, pour $\alpha = \pm 1$ $|\psi_1\rangle = C_1 \left\{ \prod_{\nu>0} (u_\nu + v_\nu A_\nu^+) |0\rangle + (-1)^P \prod_{\nu>0} (u_\nu - v_\nu A_\nu^+) |0\rangle \right\}$ où C_1 est une constante de normalisation. En faisant un développement de l'expression analogue à (1.19), on aboutit à :

$$|\psi_{1}\rangle = C_{1} \left\{ \left(\prod_{\nu>0} u_{\nu}\right) \sum_{l=0}^{\Omega} \frac{1}{l!} \left[1 + (-1)^{P+l}\right] \left[\sum_{\nu>0} \frac{v_{\nu}}{u_{\nu}} A_{\nu}^{+}\right]^{l} |0\rangle \right\}$$
(2.4)

avec $1 + (-1)^{P+l} = 0$ si P + l = impair donc $l = P \pm 1, P \pm 3, P \pm 5, ...$

C'est à dire que tous les termes ayant (P+l) impair sont éliminés.

De même, pour l'état $|\psi_2\rangle$ avec $\alpha=\pm 1,\,\pm i:$

$$|\psi_{2}\rangle = C_{2} \left\{ (1)^{-P} \prod_{\nu>0} (u_{\nu} + v_{\nu}A_{\nu}^{+}) |0\rangle + (-1)^{-P} \prod_{\nu>0} (u_{\nu} + (-1)v_{\nu}A_{\nu}^{+}) |0\rangle + (i)^{-P} \prod_{\nu>0} (u_{\nu} + (1)v_{\nu}A_{\nu}^{+}) |0\rangle + (-i)^{-P} \prod_{\nu>0} (u_{\nu} + (-1)v_{\nu}A_{\nu}^{+}) |0\rangle \right\}$$
(2.5)

il s'ensuit que :

$$\begin{aligned} |\psi_{2}\rangle &= C_{2}\left(\prod_{\nu>0}u_{\nu}\right)\left\{\sum_{l=0}^{\Omega}\frac{1}{l!}\left[1+(-1)^{P+l}\right]\left[\sum_{\nu>0}\frac{v_{\nu}}{u_{\nu}}A_{\nu}^{+}\right]^{l}|0\rangle \right. \\ &\left.+\sum_{l=0}^{\Omega}\frac{1}{l!}\left[(i)^{l-P}+(-i)^{l-P}\right]\left[\sum_{\nu>0}\frac{v_{\nu}}{u_{\nu}}A_{\nu}^{+}\right]^{l}|0\rangle\right\} (2.6)\end{aligned}$$

$$= C_2 \left(\prod_{\nu>0} u_{\nu}\right) \left\{ \sum_{l=0}^{\Omega} \frac{1}{l!} \left[1 + (-1)^{P+l} \right] \left[\sum_{\nu>0} \frac{v_{\nu}}{u_{\nu}} A_{\nu}^+ \right]^l |0\rangle + \sum_{l=0}^{\Omega} \frac{1}{l!} (i)^{l-P} \left[1 + (-1)^{l-P} \right] \left[\sum_{\nu>0} \frac{v_{\nu}}{u_{\nu}} A_{\nu}^+ \right]^l |0\rangle \right\}$$
(2.7)

d'où :

$$|\psi_{2}\rangle = C_{2}\left(\prod_{\nu>0}u_{\nu}\right)\left\{\sum_{l=0}^{\Omega}\frac{1}{l!}\left[1+(-1)^{P+l}\right]\left[1+(i)^{l-P}\right]\left[\sum_{\nu>0}\frac{v_{\nu}}{u_{\nu}}A_{\nu}^{+}\right]^{l}|0\rangle\right\}$$
(2.8)

 $1 + (-i)^{l-P} = 0$ si $l - P = \pm (2 + 4n)$ donc $l = P \pm 2, P \pm 6, P \pm 10...$

C'est à dire que tous les termes de composantes $P \pm 2$, $P \pm 6$, $P \pm 10...$ sont éliminés en plus de ceux exclus dans l'état (2.4).

On réitère le processus jusqu'à extraire toutes les fausses composantes, autrement dit, à l'étape n et en posant $z_k = e^{i\varphi_k}$ où $\varphi_k = \frac{k\pi}{n+1}$, on trouve :

$$|\psi_{n}\rangle = C_{n} \left\{ (1)^{-P} \prod_{\nu>0} (u_{\nu} + v_{\nu}A_{\nu}^{+}) + (-1)^{-P} \prod_{\nu>0} (u_{\nu} + (-1)v_{\nu}A_{\nu}^{+}) + \sum_{k=1}^{n} z_{k}^{-P} \prod_{\nu>0} (u_{\nu} + z_{k}v_{\nu}A_{\nu}^{+}) + c.c \right\} |0\rangle \quad (2.9)$$

sous une forme condensée :

$$|\psi_{n}\rangle = C_{n} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-P} \prod_{\nu>0} \left(u_{\nu} + z_{k} v_{\nu} A_{\nu}^{+} \right) |0\rangle + c.c \right\}$$
(2.10)

avec $\xi_k = \begin{cases} \frac{1}{2} \text{ pour } k = 0 \text{ et } k = n+1 \\ 1 \text{ pour les autres valeurs de } k \\ \text{et où } c.c \text{ désigne le complexe conjugué.} \end{cases}$

On notera aussi le fait que la composante de $|\psi_n\rangle$ correspondant à l paires de particules, peut se mettre sous la forme suivante [13] :

$$|\psi_n\rangle_l = C_n \left(\prod_{\nu>0} u_\nu\right) \prod_{\nu>0}^l \frac{v_\nu}{u_\nu} \sum_{k=0}^{2n+1} \exp(i\varphi_k(l-P)) \prod_{\nu>0}^l A_\nu^+ |0\rangle$$
(2.11)

Sachant que :

$$\sum_{k=0}^{2n+1} \exp(i\varphi_k(l-P)) = \begin{cases} 0 & \text{Si } l-P \neq \pm 2m(n+1) \\ 2(n+1) & \text{Si } l-P = \pm 2m(n+1) \end{cases}$$
(2.12)

où m est un entier positif. On en déduit que les composantes non nulles, sont celles qui correspondent à un nombre de paires égal à $P \pm 2m(n+1)$ et sachant que : $P + 2m(n+1) < \Omega$, il vient que $2(n+1) < \frac{\Omega - P}{m}$. D'autre part, P - 2m(n+1) > 0, il vient alors : $2(n+1) > \frac{P}{m}$. On a finalement l'inégalité suivante :

$$2(n+1) > \max(P, \Omega - P) \tag{2.13}$$

Dès que cette dernière est est vérifiée, L'état $|\psi_n\rangle$ coïncide avec la composante à P paires

de particules.

2.3 Le projecteur dans l'espace nombre d'occupation

L'opérateur de projection sur un état ayant 2P particules (P étant le nombre de paires) est défini par :

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi$$
(2.14)

où : N est l'opérateur nombre de particules défini par l'expression (1.11)

On peut l'écrire aussi sous la forme :

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_0^{\pi} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi + \int_{\pi}^{2\pi} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi \right\}$$
(2.15)

Soit, en posant $\varphi = \Psi + \pi$ dans la deuxième intégrale :

$$\mathcal{P} = \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_0^{\pi} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi + \int_0^{\pi} e^{i(\Psi+\pi)(N-2P)} d\Psi \right\}$$

= $\frac{1}{2\pi} \left\{ \int_0^{\pi} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi + \int_0^{\pi} e^{i\Psi(N-2P)} e^{i\pi(N-2P)} d\Psi \right\}$ (2.16)

Comme les valeurs propres de (N - 2P) sont paires, il vient alors

$$\mathcal{P} = \frac{1}{\pi} \int_0^{\pi} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi$$
(2.17)

L'utilisation de cet opérateur de projection reste assez ardue pour le calcul de certaines grandeurs physiques telle que l'énergie, on se propose alors d'établir l'expression discrétisée du projecteur pour un système ayant un nombre pair de particules. A cet effet, on subdivise l'intervalle $[0, \pi]$ en (2n + 1) sous-intervalles de même longueur $h = \frac{\pi}{2(n+1)}$ à l'aide de (2n + 2)points d'abscisses : $x_k = \frac{k\pi}{2(n+1)}, k = 0, 1, ...2n + 2$. On peut donc écrire :

$$\mathcal{P} = \lim_{n \to \infty} \frac{1}{\pi} \sum_{k=0}^{2n+1} \int_{\frac{k\pi}{2(n+1)}}^{\frac{(k+1)\pi}{2(n+1)}} e^{i\varphi(N-2P)} d\varphi$$
(2.18)

$$\mathcal{P} = \lim_{n \to \infty} \mathcal{P}_n \tag{2.19}$$

en utilisant la somme de Darboux inférieure, on approxime \mathcal{P}_n par :

$$\mathcal{P}_n = \frac{1}{2(n+1)} \sum_{k=0}^{2n+1} e^{\frac{ik\pi}{2(n+1)}(N-2P)}$$
(2.20)

En isolant le terme k = 0, puis en écrivant la somme sur k de 1 jusqu'à 2n + 1 comme deux sommes, de 1 jusqu'à n et de n + 1 jusqu'à 2n + 1, il vient :

$$\mathcal{P}_n = \frac{1}{2(n+1)} \left\{ 1 + \sum_{k=1}^n e^{\frac{ik\pi}{2(n+1)}(N-2P)} + \sum_{k=n+1}^{2n+1} e^{\frac{ik\pi}{2(n+1)}(N-2P)} \right\}$$
(2.21)

En posant : j = 2n + 2 - k dans la seconde somme de l'expression (2.21), il vient alors :

$$\mathcal{P}_{n} = \frac{1}{2(n+1)} \left\{ 1 + \sum_{k=1}^{n} e^{\frac{ik\pi}{2(n+1)}(N-2P)} + \sum_{j=1}^{n} e^{\frac{-i\pi j}{2(n+1)}(N-2P)} + e^{\frac{-i\pi}{2}(N-2P)} \right\}$$
(2.22)

Sachant que l'opérateur (N - 2P) n'a que des valeurs propres paires et entières, ceci implique que l'opérateur $e^{\frac{-i\pi}{2}(N-2P)}$ a des valeurs propres réelles, on peut donc mettre \mathcal{P}_n sous la forme condensée suivante :

$$\mathcal{P}_{n} = \frac{1}{2(n+1)} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} \mathrm{e}^{\frac{ik\pi}{2(n+1)}(N-2P)} + c.c \right\}$$
(2.23)

avec $\xi_k = \begin{cases} \frac{1}{2} \text{ pour } k = 0 \text{ et } k = n+1 \\ 1 \text{ pour les autres valeurs de } k \end{cases}$ En posant $z_k = e^{\frac{ik\pi}{(n+1)}}, \mathcal{P}_n \text{ devient :}$

$$\mathcal{P}_{n} = \frac{1}{2(n+1)} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} \ z_{k}^{-P} \ z_{k}^{\frac{N}{2}} + c.c \right\}$$
(2.24)

En faisant un développement en série de $z_k^{\frac{N}{2}}$ et en utilisant la propriété $n_{\nu}^2 = n_{\nu}$ (où on a noté par : $n_{\nu} = a_{\nu}^+ a_{\nu}$ et $n_{\tilde{\nu}} = a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\nu}}$ les opérateurs nombres d'occupation des états $|\nu\rangle$ et $|\tilde{\nu}\rangle$), on arrive finalement à l'expression suivante :

$$\mathcal{P}_{n} = \frac{1}{2(n+1)} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-P} \prod_{\nu > 0} \left[1 + n_{\nu} \left(\sqrt{z_{k}} - 1 \right) \right] \left[1 + n_{\tilde{\nu}} \left(\sqrt{z_{k}} - 1 \right) \right] + c.c \right\}$$
(2.25)

Pour un système comportant un nombre impair de particules, on aboutit à l'expression discrétisée du projecteur en passant par un calcul analogue à celui décrit plus haut et qui est donnée par :

$$\mathcal{P}_{n} = \frac{1}{2(n+1)} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-(P+\frac{1}{2})} \prod_{\nu>0} \left[1 + n_{\nu} \left(\sqrt{z_{k}} - 1 \right) \right] \left[1 + n_{\tilde{\nu}} \left(\sqrt{z_{k}} - 1 \right) \right] + c.c \right\}$$
(2.26)

2.4 Projection des états BCS

2.4.1 Cas d'un système ayant un nombre pair de particules

Soit un système ayant un nombre pair de particules dont les états sont décrits par les kets : $|\Psi\rangle$, $|\nu\tilde{\nu}\rangle$, $|\nu\mu\rangle$, $|\nu\tilde{\nu}\mu\tilde{\mu}\rangle$, $|\nu\tilde{\nu}\mu\eta\rangle$, $|\nu\mu\gamma\delta\rangle$ etc...

Les états projetés sont obtenus en appliquant le projecteur donné par l'expression (2.25) à ces états.

Le vide projeté est :

$$\left|\Psi_{n}\right\rangle = \mathcal{P}_{n}\left|\Psi\right\rangle \tag{2.27}$$

soit :

$$|\Psi_{n}\rangle = C_{n} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-P} \prod_{j>0} \left(u_{j} + z_{k} v_{j} A_{j}^{+} \right) |0\rangle + c.c \right\}$$
(2.28)

$$= C_n \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k z_k^{-P} |\Psi(z_k)\rangle + c.c \right\}$$
(2.29)

avec

$$|\Psi(z_k)\rangle = \prod_{j>0} \left(u_j + z_k v_j A_j^+ \right) |0\rangle$$
(2.30)

On retrouve bien le résultat mentionné dans (2.10).

L'état à deux quasi-particules appariées projeté est donné par :

$$|(\nu\tilde{\nu})_n\rangle = \mathcal{P}_n |\nu\tilde{\nu}\rangle \tag{2.31}$$

$$= C_n^{\nu\tilde{\nu}} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k z_k^{-P} \left(z_k u_\nu A_\nu^+ - v_\nu \right) \prod_{j \neq \nu} \left(u_j + z_k v_j A_j^+ \right) |0\rangle + c.c \right\}$$
(2.32)

et l'état à deux quasi-particules non-appariées par :

$$|(\nu\mu)_{n}\rangle = \mathcal{P}_{n} |\nu\mu\rangle$$

$$= C_{n}^{\nu\mu} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-P+1} a_{\nu}^{+} a_{\mu}^{+} \prod_{j \neq (\nu,\mu)} \left(u_{j} + z_{k} v_{j} A_{j}^{+} \right) |0\rangle + c.c \right\}$$

$$(2.33)$$

Pour l'état à quatre quasi-particules toutes appariées, il vient :

$$|(\nu\tilde{\nu}\mu\tilde{\mu})_{n}\rangle = \mathcal{P}_{n} |\nu\tilde{\nu}\mu\tilde{\mu}\rangle$$

$$= C_{n}^{\nu\tilde{\nu}\mu\tilde{\mu}} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-P} \left(z_{k} u_{\nu} A_{\nu}^{+} - v_{\nu} \right) \left(z_{k} u_{\mu} A_{\mu}^{+} - v_{\mu} \right) \prod_{j \neq (\nu,\mu)} \left(u_{j} + z_{k} v_{j} A_{j}^{+} \right) |0\rangle + c.c \right\}$$

$$(2.34)$$

et l'état à quatre quasi-particules, deux appariées $(\nu \tilde{\nu})$ et une paire cassée $(\mu \gamma)$ s'écrit :

$$|(\nu\tilde{\nu}\mu\gamma)_{n}\rangle = \mathcal{P}_{n} |\nu\tilde{\nu}\mu\gamma\rangle$$

$$= C_{n}^{\nu\tilde{\nu}\mu\gamma} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-P+1} \left(z_{k} u_{\nu} A_{\nu}^{+} - v_{\nu} \right) a_{\mu}^{+} a_{\gamma}^{+} \prod_{j \neq (\nu,\mu,\gamma)} \left(u_{j} + z_{k} v_{j} A_{j}^{+} \right) |0\rangle + c.c \right\}$$

$$(2.35)$$

Finalement l'état à quatre quasi-particules toutes non-appariées est donné par :

$$|(\nu\mu\gamma\delta)_n\rangle = \mathcal{P}_n |\nu\mu\gamma\delta\rangle$$

$$= C_n^{\nu\mu\gamma\delta} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k z_k^{-P+2} a_\nu^+ a_\mu^+ a_\gamma^+ a_\delta^+ \prod_{j\neq(\nu,\mu,\gamma,\delta)} \left(u_j + z_k v_j A_j^+ \right) |0\rangle + c.c \right\} (2.36)$$

D'une manière générale l'état :

$$\begin{split} |(\nu_{1}\tilde{\nu}_{1}\nu_{2}\tilde{\nu}_{2}...\nu_{r}\tilde{\nu}_{r}\nu_{r+1}\tilde{\nu}_{r+2}...\nu_{r+2d})_{n}\rangle &= \mathcal{P}_{n} \left| (\nu_{1}\tilde{\nu}_{1}\nu_{2}\tilde{\nu}_{2}...\nu_{r}\tilde{\nu}_{r}\nu_{r+1}\nu_{r+2}...\nu_{r+2d}) \right\rangle \\ &= C_{n}^{\nu_{1}\tilde{\nu}_{1}\nu_{2}\tilde{\nu}_{2}...\nu_{r}\tilde{\nu}_{r}\nu_{r+1}\tilde{\nu}_{r+2}...\nu_{r+2d}} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k}z_{k}^{-P+d} \left(z_{k}u_{\nu_{1}}A_{\nu_{1}}^{+} - v_{\nu_{1}} \right) ... \left(z_{k}u_{\nu_{r}}A_{\nu_{r}}^{+} - v_{\nu_{r}} \right) \right. \\ & \left. a_{\nu_{r+1}}^{+}...a_{\nu_{r+2d}}^{+} \prod_{j \neq (\nu_{1},...\nu_{r+2d})} \left(u_{j} + z_{k}v_{j}A_{j}^{+} \right) |0\rangle + c.c \right\} \end{split}$$

où r et d sont des entiers.

décrit un état ayant des paires de particules appariées occupant les états $(|\nu_1\rangle |\tilde{\nu}_1\rangle) \dots$ $(|\nu_r\rangle |\tilde{\nu}_r\rangle)$ et des particules célibataires occupant les états $|\nu_{r+1}\rangle \dots |\nu_{r+2d}\rangle$.

2.4.2 Cas d'un système ayant un nombre impair de particules

Soit un système ayant un nombre impair de particules, l'état utilisé pour décrire ce dernier est un état ayant un nombre impair de quasi-particules, soit $|\nu\rangle$, $|\nu\tilde{\nu}\mu\rangle$, $|\nu\mu\gamma\rangle$, etc...

Les états projetés sont obtenus en appliquant le projecteur pour un système impair de particules donné par l'expression (2.26) :

L'état projeté à une quasiparticule est donné par :

$$|\nu_{n}\rangle = \mathcal{P}_{n} |\nu\rangle$$

$$= \mathcal{P}_{n} \alpha_{\nu}^{+} |\Psi\rangle$$

$$= C_{n}^{\nu} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-(P+\frac{1}{2})} \sqrt{z_{k}} a_{\nu}^{+} \prod_{j \neq \nu} \left(u_{j} + z_{k} v_{j} A_{j}^{+} \right) |0\rangle + c.c \right\}$$

$$= C_{n}^{\nu} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-P} a_{\nu}^{+} \prod_{j \neq \nu} \left(u_{j} + z_{k} v_{j} A_{j}^{+} \right) |0\rangle + c.c \right\}$$
(2.37)

L'état à trois quasi-particules dont deux sont appariées et une célibataire s'écrit :

$$|(\nu\tilde{\nu}\mu)_{n}\rangle = \mathcal{P}_{n} |\nu\tilde{\nu}\mu\rangle$$

$$= C_{n}^{\nu\tilde{\nu}\mu} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-P} \left(z_{k} u_{\nu} A_{\nu}^{+} - v_{\nu} \right) a_{\mu}^{+} \prod_{j \neq (\nu,\mu)} \left(u_{j} + z_{k} v_{j} A_{j}^{+} \right) |0\rangle + c.c \right\} (2.38)$$

et pour l'état à trois quasi-particules non-appariées on trouve :

$$|(\nu\mu\gamma)_{n}\rangle = \mathcal{P}_{n} |\nu\mu\gamma\rangle$$

$$= C_{n}^{\nu\mu\gamma} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-P+1} a_{\nu}^{+} a_{\mu}^{+} a_{\gamma}^{+} \prod_{j \neq (\nu,\mu,\gamma)} \left(u_{j} + z_{k} v_{j} A_{j}^{+} \right) |0\rangle + c.c \right\}$$
(2.39)

D'une manière générale l'état

$$\begin{split} |(\nu_{1}\tilde{\nu}_{1}\nu_{2}\tilde{\nu}_{2}...\nu_{r}\tilde{\nu}_{r}\nu_{r+1}\tilde{\nu}_{r+2}...\nu_{r+2d+1})_{n}\rangle &= \mathcal{P}_{n} \left| (\nu_{1}\tilde{\nu}_{1}\nu_{2}\tilde{\nu}_{2}...\nu_{r}\tilde{\nu}_{r}\nu_{r+1}\tilde{\nu}_{r+2}...\nu_{r+2d+1}) \right\rangle \\ &= C_{n}^{\nu_{1}\tilde{\nu}_{1}\nu_{2}\tilde{\nu}_{2}...\nu_{r}\tilde{\nu}_{r}\nu_{r+1}\tilde{\nu}_{r+2}...\nu_{r+2d+1}} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k}z_{k}^{-P+d} \left(z_{k}u_{\nu_{1}}A_{\nu_{1}}^{+} - v_{\nu_{1}} \right) ... \left(z_{k}u_{\nu_{r}}A_{\nu_{r}}^{+} - v_{\nu_{r}} \right) \right. \\ &\left. a_{\nu_{r+1}}^{+}...a_{\nu_{r+2d+1}}^{+} \prod_{j \neq (\nu_{1},...\nu_{r+2d+1})} \left(u_{j} + z_{k}v_{j}A_{j}^{+} \right) |0\rangle + c.c \right\} \end{split}$$

où r et d sont des entiers.

décrit un état ayant des paires de particules appariées occupant les états $(|\nu_1\rangle |\tilde{\nu}_1\rangle) \dots$ $(|\nu_r\rangle |\tilde{\nu}_r\rangle)$ et des particules célibataires occupant les états $|\nu_{r+1}\rangle \dots |\nu_{r+2d+1}\rangle$.

2.5 Les états projetés en représentation quasi-particules

L'état $|\Psi_n\rangle$ est une combinaison linéaire de différents états qui décrivent différents nombres de paires de quasi-particules. En effet, on peut écrire formellement :

$$|\Psi_n\rangle = \alpha |\Psi\rangle + \sum_{\nu>0} \beta_\nu |\nu\tilde{\nu}\rangle + \sum_{\nu\mu>0} \gamma_{\nu\mu} |\nu\tilde{\nu}\mu\tilde{\mu}\rangle + \dots$$
(2.40)

où les coefficients $\alpha,\,\beta_\nu,\,\gamma_{\nu\mu}$ sont donnés par :

$$\alpha = \langle \Psi | \Psi_n \rangle
= C_n \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k z_k^{-P} \prod_{j>0} \left(u_j^2 + z_k v_j^2 \right) + c.c \right\}$$
(2.41)

$$\beta_{\nu} = \langle \nu \tilde{\nu} | \Psi_n \rangle$$

= $C_n \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k z_k^{-P} \prod_{j \neq \nu} \left(u_j^2 + z_k v_j^2 \right) (z_k - 1) u_{\nu} v_{\nu} + c.c \right\}$ (2.42)

En calculant d'une manière similaire les autres coefficients on écrit finalement l'état $|\Psi_n\rangle$ en représentation quasiparticule comme suit :

$$\begin{split} |\Psi_{n}\rangle &= C_{n} \left(\sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-P} \prod_{j>0} \left(u_{j}^{2} + z_{k} v_{j}^{2} \right) \left\{ 1 + (z_{k} - 1) \sum_{\nu>0} \frac{u_{\nu} v_{\nu}}{u_{\nu}^{2} + z_{k} v_{\nu}^{2}} \alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\tilde{\nu}}^{+} \right. \\ &\left. + \frac{(z_{k} - 1)^{2}}{2!} \sum_{\substack{\nu, \mu > 0 \\ \nu \neq \mu}} \frac{u_{\nu} v_{\nu} u_{\mu} v_{\mu}}{(u_{\nu}^{2} + z_{k} v_{\nu}^{2}) \left(u_{\mu}^{2} + z_{k} v_{\mu}^{2} \right)} \alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\tilde{\nu}}^{+} \alpha_{\mu}^{+} \alpha_{\tilde{\mu}}^{+} + \dots \right\} + c.c \left. \right\} |\Psi\rangle \quad (2.43) \end{split}$$

De même pour l'état $|\nu_n\rangle$ en représentation quasiparticule :

$$|\nu_{n}\rangle = C_{n}^{\nu} \left(\sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-p} \prod_{\substack{j>0\\j\neq\nu}} \left(u_{j}^{2} + z_{k} v_{j}^{2} \right) \left\{ 1 + (z_{k} - 1) \sum_{\mu>0} \frac{u_{\mu} v_{\mu}}{u_{\mu}^{2} + z_{k} v_{\mu}^{2}} \alpha_{\mu}^{+} \alpha_{\tilde{\mu}}^{+} \right. \\ \left. + \frac{(z_{k} - 1)^{2}}{2!} \sum_{\substack{\mu\gamma\\\gamma\neq\mu}} \frac{u_{\gamma} v_{\gamma} u_{\mu} v_{\mu}}{\left(u_{\gamma}^{2} + z_{k} v_{\gamma}^{2}\right) \left(u_{\mu}^{2} + z_{k} v_{\mu}^{2}\right)} \alpha_{\mu}^{+} \alpha_{\tilde{\mu}}^{+} \alpha_{\gamma}^{+} \alpha_{\tilde{\gamma}}^{+} + \ldots \right\} + c.c \right) |\nu\rangle \quad (2.44)$$

2.6 Propriétés des opérateurs conservant le nombre de particules

Soit Θ un opérateur que lconque qui commute avec l'opérateur nombre de particule :

 $[N,\Theta] = 0.$

Tout opérateur vérifiant cette relation de commutation possède la propriété très intéressante suivante :

$$\langle \Psi_n | \Theta | \Psi_n \rangle = 2(n+1)C_n \langle \Psi | \Theta | \Psi_n \rangle$$
(2.45)

En effet, d'après l'expression (1.20), on a :

$$\langle \Psi | \Theta | \Psi_n \rangle = \left(\prod_{\nu > 0} u_\nu \right) \sum_{l=0}^{\Omega} \frac{1}{l!} \sum_{\nu_1 \nu_2 \dots \nu_l} \frac{v_{\nu_1} v_{\nu_2} \dots v_{\nu_l}}{u_{\nu_1} u_{\nu_2} \dots u_{\nu_l}} \langle 0 | A_{\nu_l} \dots A_{\nu_2} A_{\nu_1} \Theta | \Psi_n \rangle.$$
(2.46)

Si la fonction projetée correspond à la $P^{i\grave{e}me}$ composante ce la conduit à :

$$\langle \Psi | \Theta | \Psi_n \rangle = \left(\prod_{\nu > 0} u_\nu \right) \frac{1}{P!} \sum_{\nu_1 \nu_2 \dots \nu_p} \frac{v_{\nu_1} v_{\nu_2} \dots v_{\nu_p}}{u_{\nu_1} u_{\nu_2} \dots u_{\nu_p}} \langle 0 | A_{\nu_p} \dots A_{\nu_2} A_{\nu_1} \Theta | \Psi_n \rangle$$
(2.47)

De même, on peut mettre $|\Psi(z_k)\rangle$ donné par l'expression (2.30) sous la forme suivante :

$$|\Psi(z_k)\rangle = \left(\prod_{\nu>0} u_\nu\right) \prod_{\nu>0} \left(1 + \frac{v_\nu}{u_\nu} z_k A_\nu^+\right) |0\rangle$$
(2.48)

$$= \left(\prod_{\nu>0} u_{\nu}\right) \sum_{l=0}^{\Omega} \frac{1}{l!} \sum_{\nu_{1}\nu_{2}...\nu_{l}} \frac{v_{\nu_{1}}v_{\nu_{2}}...v_{\nu_{l}}}{u_{\nu_{1}}u_{\nu_{2}}...u_{\nu_{l}}} z_{k}^{l} A_{\nu_{1}}^{+} A_{\nu_{2}}^{+}...A_{\nu_{l}}^{+} |0\rangle.$$
(2.49)

On trouve alors :

$$\langle \Psi(z_k) | \Theta | \Psi_n \rangle = \left(\prod_{\nu > 0} u_\nu \right) \frac{1}{P!} \sum_{\nu_1 \nu_2 \dots \nu_p} z_k^P \frac{v_{\nu_1} v_{\nu_2} \dots v_{\nu_p}}{u_{\nu_1} u_{\nu_2} \dots u_{\nu_p}} \langle 0 | A_{\nu_p} \dots A_{\nu_2} A_{\nu_1} \Theta | \Psi_n \rangle = z_k^P \langle \Psi | \Theta | \Psi_n \rangle$$
(2.50)

On déduit finalement :

$$\begin{split} \langle \Psi_n | \Theta | \Psi_n \rangle &= C_n \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k z_k^{-P} \langle \Psi_n | \Theta | \Psi(z_k) \rangle + c.c \right\} \\ &= C_n \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k z_k^{-P} z_k^{P} \langle \Psi_n | \Theta | \Psi \rangle + c.c \right\} \\ &= C_n \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k + c.c \right\} \langle \Psi | \Theta | \Psi_n \rangle \\ &= 2(n+1)C_n \langle \Psi | \Theta | \Psi_n \rangle$$
 (2.51)

Cette propriété est extrêmement utile comme nous le verrons par la suite pour le calcul des valeurs moyennes des observables commutant avec l'opérateur N ou encore pour la détermination de la constante de normalisation. En effet, compte tenu de (2.51) on obtient :

$$\langle \Psi_n | \Psi_n \rangle = 2(n+1)C_n \langle \Psi | \Psi_n \rangle = 1$$

$$= 2(n+1)C_n^2 \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k z_k^{-p} \prod_{j>0} \left(u_j^2 + z_k v_j^2 \right) + c.c \right\} = 1$$

$$(2.52)$$

Un calcul similaire peut être fait pour évaluer les autres constantes de normalisation.

2.7 Effet de la conservation du nombre de particules

Notons le fait que la projection détruit l'orthonormalisation des états projetés :

 $|\Psi_n\rangle, |\mu_n\rangle, |(\nu\mu)_n\rangle, |(\nu\mu\gamma)_n\rangle...$ Il faudra alors construire une nouvelle base d'états projetés à l'aide du procédé de Schmidt par exemple, on donne à titre d'indication :

$$\left|\left(\nu\tilde{\nu}\right)_{n}\right\rangle_{\perp} = C_{\perp}^{\nu\tilde{\nu}}\left\{\left|\left(\nu\tilde{\nu}\right)_{n}\right\rangle - \left\langle\mu_{n}\left|\left(\nu\tilde{\nu}\right)_{n}\right\rangle\right|\mu_{n}\right\rangle - \left\langle\Psi_{n}\left|\left(\nu\tilde{\nu}\right)_{n}\right\rangle\right|\Psi_{n}\right\rangle\right\}$$
(2.53)

où

$$\left\langle \mu_n \left| (\nu \tilde{\nu})_n \right\rangle = 2(n+1)C_n^{\mu} \left\langle \mu \left| (\nu \tilde{\nu})_n \right\rangle \right.$$

A l'aide des expressions (2.37), (2.31), on a :

$$\begin{split} \langle \mu_n \mid (\nu \tilde{\nu})_n \rangle &= 2(n+1) C_n^{\mu} C_n^{\nu \tilde{\nu}} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k \ z_k^{-P} \prod_{j \neq \mu} \langle 0 \mid (u_j + z_k v_j A_j) \ a_\mu \left(u_\nu + z_k v_\nu A_\nu^+ \right) \right. \\ &\left. \prod_{j \neq \nu} \left(u_j + z_k v_j A_j^+ \right) \left| 0 \right\rangle + c.c \right\} = 0 \end{split}$$

 et

$$\langle \Psi_n | (\nu \tilde{\nu})_n \rangle = 2(n+1)C_n \langle \Psi | (\nu \tilde{\nu})_n \rangle$$
(2.54)

En utilisant les expressions (2.29), (2.31), on obtient :

$$\left\langle \Psi_{n} \left| (\nu \tilde{\nu})_{n} \right\rangle = 2(n+1)C_{n}C_{n}^{\nu \tilde{\nu}} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-p} u_{\nu} v_{\nu} \left(z_{k} - 1 \right) \prod_{j \neq \nu} \left(u_{j}^{2} + z_{k} v_{j}^{2} \right) + c.c \right\}$$
(2.55)

et $C_{\perp}^{\nu\tilde{\nu}}$ est la constante de normalisation. Elle est donnée par l'expression suivante :

$$\left(C_{\perp}^{\nu\tilde{\nu}}\right)^{-1} = {}_{\perp} \left\langle \left(\nu\tilde{\nu}\right)_{n} \left| \left(\nu\tilde{\nu}\right)_{n} \right\rangle_{\perp} \right.$$

$$(2.56)$$

$$= \left[\left\langle \left(\nu \tilde{\nu} \right)_n \right| - \left\langle \Psi_n \left| \left(\nu \tilde{\nu} \right)_n \right\rangle \left\langle \Psi_n \right| \right] \left[\left| \left(\nu \tilde{\nu} \right)_n \right\rangle - \left\langle \Psi_n \left| \left(\nu \tilde{\nu} \right)_n \right\rangle \left| \Psi_n \right\rangle \right] \right]$$
(2.57)

De même, on trouve pour l'état correspondant à (2.38)

$$\left|\left(\nu\tilde{\nu}\mu\right)_{n}\right\rangle_{\perp} = \left\{\left|\left(\nu\tilde{\nu}\mu\right)_{n}\right\rangle - \left\langle\mu_{n}\left|\left(\nu\tilde{\nu}\mu\right)_{n}\right\rangle\right|\mu_{n}\right\rangle\right\}C_{\perp}^{\nu\tilde{\nu}\mu}$$
(2.58)
$$\left< \mu_n \left| (\nu \tilde{\nu} \mu)_n \right> = 2(n+1) C_n^{\mu} \left< \mu \left| (\nu \tilde{\nu} \mu)_n \right> \right.$$

A l'aide des expressions (2.37), (2.38), il vient :

$$\left\langle \mu_n \left| (\nu \tilde{\nu} \mu)_n \right\rangle = 2(n+1) C_n^{\mu} C_n^{\nu \tilde{\nu} \mu} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k \ z_k^{-P} u_{\nu} v_{\nu} \left(z_k - 1 \right) \prod_{\substack{j \neq (\nu, \mu) \\ \nu \neq \mu}} \left(u_j^2 + z_k v_j^2 \right) + c.c \right\}$$

et $C_{\perp}^{\nu\tilde{\nu}\mu}~$ est la constante de normalisation donnée par :

$$\left(C_{\perp}^{\nu\tilde{\nu}\mu}\right)^{-1} = \langle (\nu\tilde{\nu}\mu)_n | (\mu\nu\tilde{\nu})_n \rangle_{\perp}$$

$$(2.59)$$

$$= \left[\left\langle \left(\nu \tilde{\nu} \mu \right)_n \right| - \left\langle \mu_n \right| \left\langle \mu_n \left| \left(\nu \tilde{\nu} \mu \right)_n \right\rangle \right] \left[\left| \left(\nu \tilde{\nu} \mu \right)_n \right\rangle - \left\langle \mu_n \left| \left(\nu \tilde{\nu} \mu \right)_n \right\rangle \right| \mu_n \right\rangle \right]$$
(2.60)

On obtient alors la nouvelle base constitué des états orthonormés et projetés :

$$|\Psi_n\rangle, |\nu_n\rangle, |(\nu\tilde{\nu})_n\rangle_{\perp}, |(\nu\mu)_n\rangle, |(\nu\tilde{\nu}\mu)_n\rangle_{\perp}, |(\nu\mu\gamma)_n\rangle, |(\nu\tilde{\nu}\mu\tilde{\mu})_n\rangle_{\perp}, |(\nu\tilde{\nu}\mu\gamma)_n\rangle_{\perp}, |(\nu\mu\gamma\delta)_n\rangle, \dots \dots$$

L'espace des états du système physique étant complet, la somme des projecteurs sur ces états est égale à l'unité. On a donc, en principe :

$$1 = |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| |\Psi_n\rangle \langle \Psi_n| + \sum_{\nu} |\nu_n\rangle \langle \nu_n| |\nu_n\rangle \langle \nu_n| + \sum_{\nu} |(\nu\tilde{\nu})_n\rangle_{\perp \perp} \langle (\nu\tilde{\nu})_n| |(\nu\tilde{\nu})_n\rangle_{\perp \perp} \langle (\nu\tilde{\nu})_n| + \frac{1}{2!} \sum_{\nu \neq \mu} |(\nu\mu)_n\rangle \langle (\nu\mu)_n| |(\nu\mu)_n\rangle \langle (\nu\mu)_n| + \frac{1}{2!} \sum_{\nu \neq \mu} |(\nu\tilde{\nu}\mu)_n\rangle_{\perp \perp} \langle (\nu\tilde{\nu}\mu)_n| |(\nu\tilde{\nu}\mu)_n\rangle_{\perp \perp} \langle (\nu\tilde{\nu}\mu)_n| + \dots$$

Le fait de multiplier l'opérateur hamiltonien à droite et à gauche par la somme des projecteurs

où

ne change en rien ce dernier :

$$1.H'.1 \simeq \left(\left| \Psi_n \right\rangle \left\langle \Psi_n \right| \left| \Psi_n \right\rangle \left\langle \Psi_n \right| + \sum_{\nu} \left| \nu_n \right\rangle \left\langle \nu_n \right| \left| \nu_n \right\rangle \left\langle \nu_n \right| \right. \\ \left. + \sum_{\nu} \left| \left(\nu \tilde{\nu} \right)_n \right\rangle_{\perp \perp} \left\langle \left(\nu \tilde{\nu} \right)_n \right| \left| \left(\nu \tilde{\nu} \right)_n \right\rangle_{\perp \perp} \left\langle \left(\nu \tilde{\nu} \right)_n \right| + \dots \right) H' \\ \left(\left| \Psi_n \right\rangle \left\langle \Psi_n \right| \left| \Psi_n \right\rangle \left\langle \Psi_n \right| \sum_{\mu} \left| \mu_n \right\rangle \left\langle \mu_n \right| \left| \mu_n \right\rangle \left\langle \mu_n \right| + \sum_{\mu} \left| \left(\mu \tilde{\mu} \right)_n \right\rangle_{\perp \perp} \left\langle \left(\mu \tilde{\mu} \right)_n \right| \left| \left(\mu \tilde{\mu} \right)_n \right\rangle_{\perp \perp} \left\langle \left(\mu \tilde{\mu} \right)_n \right| + \dots \right) \right. \right)$$

Comme les calculs deviennent très vite assez lourds, on fera alors l'approximation des quasiparticules projetées indépendantes. Autrement dit, on fait une troncature sur la somme des projecteurs et on écrit que :

$$1.H.1 \simeq \left(\left| \Psi_n \right\rangle \left\langle \Psi_n \right| \left| \Psi_n \right\rangle \left\langle \Psi_n \right| + \sum_{\nu} \left| \nu_n \right\rangle \left\langle \nu_n \right| \left| \nu_n \right\rangle \left\langle \nu_n \right| \right) H' \\ \left(\left| \Psi_n \right\rangle \left\langle \Psi_n \right| \left| \Psi_n \right\rangle \left\langle \Psi_n \right| + \sum_{\mu} \left| \mu_n \right\rangle \left\langle \mu_n \right| \left| \mu_n \right\rangle \left\langle \mu_n \right| \right) \right) H' \right) H'$$

On trouve alors :

$$H' = E_n^0 + \sum_{\nu > 0} E_n^{\nu} (P_n^{\nu} + P_n^{\bar{\nu}})$$
(2.61)

où

$$P_n^{\nu} = |\nu_n\rangle \langle \nu_n| \quad \text{et} \quad P_n^{\tilde{\nu}} = |\tilde{\nu}_n\rangle \langle \tilde{\nu}_n|$$

$$(2.62)$$

Les états $|\nu_n\rangle$ et $|\tilde{\nu}_n\rangle$ étant orthonormés, P_n^{ν} , $P_n^{\tilde{\nu}}$ sont des projecteurs et ont donc pour valeurs propres : 0 et 1.

Dans (2.61) E_n^0 , E_n^{ν} représentent respectivement l'énergie BCS et l'énergie de la quasiparticule projetées, données comme nous le montrerons dans ce qui suit, par :

$$E_n^0 = E_0 + \langle \Psi_n | H_{40} | \Psi_n \rangle = E_0 + E_{40}$$
(2.63)

 et

$$E_n^{\nu} = E_{\nu} + \langle \nu_n | H_{40} | \nu_n \rangle = E_{\nu} + E_{40}^{\nu}$$
(2.64)

2.8 Energie projetée

L'énergie du système lorsqu'il est dans l'état projeté $|\Psi_n\rangle$ est calculée en utilisant l'hamiltonien en représentation quasiparticule donné par l'expression (1.25) et est définie comme :

$$E_{n}^{0} = \langle \Psi_{n} | H' | \Psi_{n} \rangle$$

$$= \langle \Psi_{n} | (E_{0} + H_{11} + H_{2} + H_{22} + H_{3} + H_{4}) | \Psi_{n} \rangle$$

$$= E_{0} + \langle \Psi_{n} | H_{4} | \Psi_{n} \rangle$$
(2.65)
(2.66)

Pour le calcul de la valeur moyenne $\langle \Psi_n | H_4 | \Psi_n \rangle$, on utilisera la propriété des opérateurs conservant le nombre de particules (2.51). Il vient :

$$\langle \Psi_n | H_4 | \Psi_n \rangle = \langle \Psi_n | (H_{40} + H_{04}) | \Psi_n \rangle$$

$$= 2(n+1)C_n \langle \Psi_n | H_{40} | \Psi \rangle$$

$$(2.67)$$

On a :

$$\langle \Psi_{n} | H_{40} | \Psi \rangle = C_{n} \left\{ \frac{G}{2} \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-P} \prod_{j>0} \left(u_{j}^{2} + z_{k} v_{j}^{2} \right) \frac{(z_{k}-1)^{2}}{2!} \sum_{\substack{\nu,\mu>0\\\nu\neq\mu}} \frac{u_{\nu} v_{\nu} u_{\mu} v_{\mu}}{(u_{\nu}^{2} + z_{k} v_{\nu}^{2}) \left(u_{\mu}^{2} + z_{k} v_{\mu}^{2} \right)} \right. \\ \left. \sum_{\gamma,\eta>0} \left(u_{\gamma}^{2} v_{\eta}^{2} + u_{\eta}^{2} v_{\gamma}^{2} \right) \langle \Psi | \alpha_{\tilde{\mu}} \alpha_{\mu} \alpha_{\tilde{\nu}} \alpha_{\nu} \alpha_{\gamma}^{+} \alpha_{\tilde{\gamma}}^{+} \alpha_{\eta}^{+} \alpha_{\tilde{\eta}}^{+} | \Psi \rangle + c.c \right\}$$
(2.68)

En utilisant le théorème de Wick, on trouve :

$$\langle \Psi | \alpha_{\tilde{\mu}} \alpha_{\mu} \alpha_{\tilde{\nu}} \alpha_{\nu} \alpha_{\gamma}^{+} \alpha_{\tilde{\eta}}^{+} \alpha_{\eta}^{+} \alpha_{\tilde{\eta}}^{+} | \Psi \rangle = \delta_{\nu\gamma} \delta_{\mu\eta} + \delta_{\nu\eta} \delta_{\mu\gamma}$$
(2.69)

ce qui nous conduit à :

$$2(n+1)C_{n} \langle \Psi_{n} | H_{40} | \Psi \rangle = 2(n+1)C_{n}^{2} \frac{G}{2} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-P} (z_{k}-1)^{2} \prod_{j>0} \left(u_{j}^{2} + z_{k} v_{j}^{2} \right) \right. \\ \left. \sum_{\substack{\nu,\mu>0\\\nu\neq\mu}} \frac{u_{\nu} v_{\nu} u_{\mu} v_{\mu}}{\left(u_{\nu}^{2} + z_{k} v_{\nu}^{2} \right) \left(u_{\mu}^{2} + z_{k} v_{\mu}^{2} \right)} 2(u_{\nu}^{2} v_{\mu}^{2} + u_{\mu}^{2} v_{\nu}^{2}) + c.c \right\} \\ = 2(n+1)C_{n}^{2}G \sum_{\substack{\nu,\mu>0\\\nu\neq\mu}} u_{\nu}^{3} v_{\nu} u_{\mu} v_{\mu}^{3} \left\{ \sum_{\substack{k=0\\k=0}}^{n+1} \xi_{k} z_{k}^{-P} (z_{k}-1)^{2} \prod_{\substack{j>0\\j\neq(\nu\mu)}} \left(u_{j}^{2} + z_{k} v_{j}^{2} \right) + c.c \right\}$$
(2.70)

Finalement, on trouve :

$$E_n^0 = E_0 + E_{40} \tag{2.71}$$

où on a noté par :

$$E_{40} = \langle \Psi_n | H_{40} | \Psi_n \rangle$$

= $2(n+1)C_n^2 G \sum_{\substack{\nu,\mu>0\\\nu\neq\mu}} u_\nu^3 v_\nu u_\mu v_\mu^3 \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k z_k^{-P} (z_k-1)^2 \prod_{\substack{j>0\\j\neq(\nu\mu)}} (u_j^2 + z_k v_j^2) + c.c \right\} (2.72)$

En utilisant les différents changements de variables :

$$z_{k} = e^{2ix_{k}} \text{ ce qui implique } z_{k} - 1 = \cos 2x_{k} - 1 + i\sin 2x_{k} = 2\sin x_{k}e^{i(x_{k} + \frac{\pi}{2})}$$
$$u_{j}^{2} + z_{k}v_{j}^{2} = \rho_{jk}e^{i(\varphi_{jk} + x_{k})} \text{ avec } x_{k} = \frac{\varphi_{k}}{2} = \frac{k\pi}{2(n+1)}.$$

dans l'expression (2.72), on trouve :

$$E_{40} = 2(n+1)C_n^2 G \sum_{\substack{\nu,\mu>0\\\nu\neq\mu}} u_\nu^3 v_\nu u_\mu v_\mu^3 \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k \exp\left(-2iPx_k\right) \left[4\sin^2 x_k \exp\left(2i(x_k + \frac{\pi}{2})\right) \right] \right.$$
$$\prod_{\substack{j>0\\j\neq(\nu\mu)}} \left[\rho_{jk} \exp\left\{i(\varphi_{jk} + x_k)\right\} \right] + c.c \left. \right\}$$

$$= -8(n+1)C_n^2 G \sum_{\substack{\nu,\mu>0\\\nu\neq\mu}} u_\nu^3 v_\nu u_\mu v_\mu^3 \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k \sin^2 x_k \left(\prod_{\substack{j>0\\j\neq(\nu\mu)}} \rho_{jk} \right) \right\}$$
$$\exp\left\{ i \left(\sum_{\substack{j\neq(\nu\mu)}}^{\Omega} \varphi_{jk} + (\Omega - 2P)x_k \right) \right\} + c.c \right\} \quad (2.73)$$

$$E_{40} = -16(n+1)C_n^2 G \sum_{\substack{\nu,\mu>0\\\nu\neq\mu}} u_\nu^3 v_\nu u_\mu v_\mu^3 \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k \sin^2 x_k R_k^{\nu\mu} \cos \Psi_k^{\nu\mu}$$
(2.74a)

où :
$$R_k = \prod_j \rho_{jk}, \quad R_k^{\nu\mu} = \prod_{j \neq (\nu,\mu)} \rho_{jk}$$

et $\Psi_k = \sum_{j=1}^{\Omega} \varphi_{jk} + (\Omega - 2P)x_k, \quad \Psi_k^{\nu\mu} = \sum_{\substack{j=1\\j \neq (\nu,\mu)}}^{\Omega} \varphi_{jk} + (\Omega - 2P)x_k$

L'expression (2.66) s'écrit finalement comme :

$$E_n^0 = E_0 - 16(n+1)C_n^2 G \sum_{\substack{\nu,\mu>0\\\nu\neq\mu}} u_\nu^3 v_\nu u_\mu v_\mu^3 \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k \sin^2 x_k R_k^{\nu\mu} \cos \Psi_k^{\nu\mu}$$
(2.75)

De même, on a pour l'énergie du système dans l'état projeté $|\nu_n\rangle$:

$$E_n^{\nu} = \langle \nu_n | H' | \nu_n \rangle \tag{2.76}$$

$$E_{n}^{\nu} = \langle \nu_{n} | H' | \nu_{n} \rangle = E_{0} + E_{\nu} + \langle \nu_{n} | H_{40} | \nu_{n} \rangle$$

$$= E_{0} + E_{\nu} - 16(n+1) (C_{n}^{\nu})^{2} G \sum_{\substack{(\gamma,\eta) \neq \nu > 0 \\ \gamma \neq \eta}} u_{\gamma}^{3} v_{\gamma} u_{\eta} v_{\eta}^{3} \sum_{k=0}^{n+1} \xi_{k} \sin^{2} x_{k} R_{k}^{\nu\gamma\eta} \cos \Psi_{k}^{\nu\gamma\eta} (2.77)$$

avec :

$$\langle \nu_n | H_{40} | \nu_n \rangle = E_{40}^{\nu} = -16(n+1) \left(C_n^{\nu} \right)^2 G \sum_{\substack{(\gamma,\eta) \neq \nu > 0 \\ \gamma \neq \eta}} u_{\gamma}^3 v_{\gamma} u_{\eta} v_{\eta}^3 \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k \sin^2 x_k R_k^{\nu\gamma\eta} \cos \Psi_k^{\nu\gamma\eta}$$
(2.78)

où :
$$R_k^{\nu\gamma\eta} = \prod_{j\neq(\nu,\mu,\eta)} \rho_{jk}$$
 et $\Psi_k^{\nu\mu\eta} = \sum_{\substack{j=1\\ j\neq(\nu,\mu\eta)}}^{\Omega} \varphi_{jk} + (\Omega - 2P)x_k$.

Chapitre 3

Traitement de l'appariement à température finie avec et sans projection

3.1 Introduction

Comme on l'a vu au chapitre 1, un des défauts de la théorie BCS est la non conservation du nombre de particules et qui peut être corrigé à l'aide de différentes méthodes de projection [24],[48]-[50] permettant de restaurer le bon nombre de particules. Cependant cette fonction reste encore insuffisante pour décrire un état physique donné vu que la majorité de ces méthodes ne prennent pas en compte les effets de la température. L'effet de cette dernière est très important pour la compréhension du comportement des différentes observables décrivant les noyaux chauds.

La FTBCS, "Finite Temperature BCS" est une théorie très utilisée par les physiciens [31]-[37] pour le traitement de l'interaction d'appariement en présence de la température afin d'étudier le passage de l'état superfluide à l'état normal. Autrement dit, il existe une température dite température critique au dessus de laquelle l'effet d'appariement disparaît et le système tend vers un gaz de Fermi. La FTBCS offre aussi la possibilité de déterminer les différentes grandeurs thermodynamiques à partir de la grande fonction partition pour un ensemble grand canonique qui peut être appliqué à un système dont l'énergie et le nombre de particules sont conservés en moyenne[51]. On pourra alors étudier l'évolution du système via ces grandeurs en fonction de la température.

On s'attellera dans cette partie à la détermination des équations du gap à température finie. Pour ce faire on suivra les grandes lignes de la théorie BCS, autrement dit : on prendra comme point de départ l'hamiltonien usuel en représentation particules du chapitre 1. On réécrira à l'aide de la distribution de Fermi-Dirac, l'hamiltonien dans la représentation quasi-particules, à partir duquel on déduira, de manière analogue à la théorie BCS à température nulle, les équations du gap à température finie. On utilisera la méthode SBCS pour restaurer le bon nombre de particules. On déduira ensuite à l'aide de la grande fonction partition, les différentes expressions des grandeurs thermodynamiques habituelles, à savoir : l'énergie, l'entropie et la capacité calorifique.

3.2 La théorie BCS à température finie (FTBCS)

On considère l'hamiltonien donné par (1.23) et dont nous rappelons l'expression ci-dessous :

$$H = \sum_{\nu > 0} (\varepsilon_{\nu} - \lambda) (a_{\nu}^{+} a_{\nu} + a_{\tilde{\nu}}^{+} a_{\tilde{\nu}}) - G \sum_{\nu, \mu > 0} a_{\nu}^{+} a_{\tilde{\nu}}^{+} a_{\tilde{\mu}} a_{\mu}$$
(3.1)

Lors du passage de la représentation particules à la représentation quasi-particules à l'aide de la transformation inverse de Bogoliubov-Valatin (1.16) ainsi que le théorème de Wick :

$$H' = \sum_{\nu>0} (\varepsilon_{\nu} - \lambda) \left[a_{\nu}^{+\sqcap} a_{\nu} + a_{\widetilde{\nu}}^{+\sqcap} a_{\widetilde{\nu}} + : a_{\nu}^{+} a_{\nu} : + : a_{\widetilde{\nu}}^{+} a_{\widetilde{\nu}} : \right]$$

$$-G \sum_{\nu,\mu>0} \left\{ a_{\nu}^{+\sqcap} a_{\widetilde{\nu}}^{+} a_{\widetilde{\mu}}^{-\square} a_{\mu} - a_{\nu}^{+\sqcap} a_{\widetilde{\mu}} a_{\widetilde{\nu}}^{+\sqcap} a_{\mu} + a_{\nu}^{+\sqcap} a_{\mu} a_{\widetilde{\nu}}^{+\sqcap} a_{\widetilde{\mu}} \right.$$

$$+ a_{\nu}^{+\sqcap} a_{\widetilde{\nu}}^{+} : a_{\widetilde{\mu}} a_{\mu} : - a_{\nu}^{+\sqcap} a_{\widetilde{\mu}} : a_{\widetilde{\nu}}^{+} a_{\mu} : + a_{\nu}^{+\sqcap} a_{\mu} : a_{\widetilde{\nu}}^{+} a_{\widetilde{\mu}} :$$

$$+ : a_{\nu}^{+} a_{\widetilde{\nu}}^{+} : a_{\widetilde{\mu}}^{-\square} a_{\mu} - : a_{\nu}^{+} a_{\widetilde{\mu}} : a_{\widetilde{\nu}}^{+\sqcap} a_{\mu} + : a_{\nu}^{+\square} a_{\mu} : a_{\widetilde{\nu}}^{+\sqcap} a_{\widetilde{\mu}}$$

$$+ : a_{\nu}^{+} a_{\widetilde{\nu}}^{+} a_{\widetilde{\mu}} a_{\mu} : \right\}$$
(3.2)

on remplacera les valeurs moyennes $\langle \alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\mu} \rangle = 0$, et $\langle \alpha_{\nu} \alpha_{\mu}^{+} \rangle = \delta_{\nu\mu}$, par la distribution de Fermi-Dirac :

$$\left\langle \alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\mu} \right\rangle = \frac{1}{1 + \mathrm{e}^{\beta E_{\nu}}} \delta_{\nu\mu} \tag{3.3}$$

$$\left\langle \alpha_{\nu} \alpha_{\mu}^{+} \right\rangle = \left(1 - \frac{1}{1 + \mathrm{e}^{\beta E_{\nu}}} \right) \delta_{\nu\mu}$$
 (3.4)

où $\beta = \frac{1}{K_B T}$, avec K_B : la constante de Boltzmann et T est la température. On donne comme exemple les calculs suivants :

$$\begin{aligned} a_{\nu}^{+\sqcap}a_{\mu} &= \left\langle \left(u_{\nu}\alpha_{\nu}^{+}+v_{\nu}\alpha_{\tilde{\nu}}\right)\left(u_{\mu}\alpha_{\mu}+v_{\mu}\alpha_{\tilde{\mu}}^{+}\right)\right\rangle \\ &= u_{\nu}u_{\mu}\left\langle\alpha_{\nu}^{+}\alpha_{\mu}\right\rangle+v_{\nu}v_{\mu}\left\langle\alpha_{\tilde{\nu}}\alpha_{\tilde{\mu}}^{+}\right\rangle \\ &= u_{\nu}u_{\mu}\frac{1}{1+\mathrm{e}^{\beta E_{\nu}}}\delta_{\nu\mu}+v_{\nu}v_{\mu}\left(1-\frac{1}{1+\mathrm{e}^{\beta E_{\nu}}}\right)\delta_{\nu\mu} \\ a_{\nu}^{+\sqcap}a_{\mu} &= \left[v_{\nu}^{2}+\left(u_{\nu}^{2}-v_{\nu}^{2}\right)\eta_{\nu}\right]\delta_{\nu\mu} \end{aligned}$$

où on a posé :

$$\left\langle \alpha_{\nu}^{+}\alpha_{\mu}\right\rangle = \frac{\delta_{\nu\mu}}{1 + \mathrm{e}^{\beta E_{\nu}}} = \eta_{\nu}\delta_{\nu\mu} \tag{3.5}$$

avec $\eta_{\nu} = \frac{1}{1 + e^{\beta E_{\nu}}}$ la distribution de Fermi-Dirac.

De même :

$$\begin{cases}
 a_{\nu}^{+\sqcap}a_{\mu}^{+} = \left\langle \left(u_{\nu}\alpha_{\nu}^{+} + v_{\nu}\alpha_{\tilde{\nu}}\right)\left(u_{\mu}\alpha_{\tilde{\mu}}^{+} - v_{\mu}\alpha_{\mu}\right)\right\rangle \\
 a_{\nu}^{+\sqcap}a_{\mu}^{+} = u_{\nu}v_{\nu}\left(1 - 2\eta_{\nu}\right)\delta_{\nu\mu} \\
 \dots \\
 \dots$$

On voit bien que lorsque T = 0, β tend vers l' ∞ , on aura donc : $\eta_{\nu} = 0$, on retrouve alors les résultats *BCS* à température nulle.

De manière similaire à ce qui a été présenté au chapitre 1 pour la théorie BCS à température nulle, on décompose H' en :

$$H' = E_0 + H_{11} + H_2 + H_{22} + H_3 + H_4 \tag{3.6}$$

où :

 ${\cal E}_0$ est la constante qui contient les termes entièrement contractés.

so
it :

$$E_{0} = \sum_{\nu} \left\{ 2(\varepsilon_{\nu} - \lambda) \left[v_{\nu}^{2} + (u_{\nu}^{2} - v_{\nu}^{2})\eta_{\nu} \right] - G \left(\sum_{\nu} u_{\nu}v_{\nu}(1 - 2\eta_{\nu}) \right)^{2} - G \left[u_{\nu}^{2}\eta_{\nu} + v_{\nu}^{2}(1 - \eta_{\nu}) \right] \left[u_{\nu}^{2}\eta_{\nu} + v_{\nu}^{2}(1 - \eta_{\nu}) \right] \right\}$$
(3.7)

En négligeant les termes de degré quatre en u_{ν} et v_{ν} , car en principe ils sont très petits devant les termes de puissance deux en u_{ν} et v_{ν} ; il vient pour E_0 l'expression :

$$E_0 = \sum_{\nu} \left\{ 2(\varepsilon_{\nu} - \lambda) \left[v_{\nu}^2 + (u_{\nu}^2 - v_{\nu}^2)\eta_{\nu} \right] - G\left(\sum_{\nu} u_{\nu} v_{\nu} (1 - 2\eta_{\nu}) \right)^2 \right\}$$
(3.8)

Les H_{ij} sont les composantes de H contenant i opérateurs de création et j opérateurs d'annihilation de quasi-particules et sont donnés respectivement par :

$$H_{11} = \sum_{\nu} (\varepsilon_{\nu} - \lambda) (u_{\nu}^{2} - v_{\nu}^{2}) (\alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\nu} + \alpha_{\tilde{\nu}}^{+} \alpha_{\tilde{\nu}}) + G \sum_{\nu\mu} \left\{ u_{\nu} v_{\nu} (1 - 2\eta_{\nu}) u_{\mu} v_{\mu} (\alpha_{\mu}^{+} \alpha_{\mu} + \alpha_{\tilde{\mu}}^{+} \alpha_{\tilde{\mu}}) \right\} \\ + G \sum_{\nu\mu} \left\{ u_{\mu} v_{\mu} (1 - 2\eta_{\mu}) u_{\nu} v_{\nu} (\alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\nu} + \alpha_{\tilde{\nu}}^{+} \alpha_{\tilde{\nu}}) \right\} - G \sum_{\nu} \left[[u_{\nu}^{2} \eta_{\nu} + v_{\nu}^{2} (1 - \eta_{\nu})] (u_{\nu}^{2} - v_{\nu}^{2}) \right] \alpha_{\tilde{\nu}}^{+} \alpha_{\tilde{\nu}} \\ - G \sum_{\nu} \left[[u_{\nu}^{2} \eta_{\nu} + v_{\nu}^{2} (1 - \eta_{\nu})] (u_{\nu}^{2} - v_{\nu}^{2}) \right] \alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\nu}$$

en permutant les indices ν et μ dans le deuxième terme, on peut mettre H_{11} sous la forme :

$$H_{11} = \sum_{\nu} \left\{ (\varepsilon_{\nu} - \lambda)(u_{\nu}^{2} - v_{\nu}^{2}) + 2Gu_{\nu}v_{\nu}\sum_{\mu} u_{\mu}v_{\mu}(1 - 2\eta_{\mu}) -G\left[[u_{\nu}^{2}\eta_{\nu} + v_{\nu}^{2}(1 - \eta_{\nu})](u_{\nu}^{2} - v_{\nu}^{2}) \right] \right\} \left(\alpha_{\nu}^{+}\alpha_{\nu} + \alpha_{\tilde{\nu}}^{+}\alpha_{\tilde{\nu}} \right)$$
(3.9)

Comme pour $E_0,$ on négligera les termes de degré quatre en u_ν et v_ν :

$$H_{11} = \sum_{\nu} \left\{ (\varepsilon_{\nu} - \lambda)(u_{\nu}^2 - v_{\nu}^2) + 2Gu_{\nu}v_{\nu}\sum_{\mu} u_{\mu}v_{\mu}(1 - 2\eta_{\mu}) \right\} \left(\alpha_{\nu}^+ \alpha_{\nu} + \alpha_{\tilde{\nu}}^+ \alpha_{\tilde{\nu}} \right)$$
(3.10)

$$H_{2} = \sum_{\nu} \left\{ \left[2 \left(\varepsilon_{\nu} - \lambda \right) - G \left[(u_{\nu}^{2} - v_{\nu}^{2})(2\eta_{\nu} - 1) + 1 \right] \right] u_{\nu} v_{\nu} - G \left[\sum_{\mu} u_{\mu} v_{\mu} (1 - 2\eta_{\mu}) \right] (u_{\nu}^{2} - v_{\nu}^{2}) \right\} (\alpha_{\nu}^{+} \alpha_{\tilde{\nu}}^{+} + \alpha_{\tilde{\nu}} \alpha_{\nu}) \quad (3.11)$$

Les expressions de H_{22} , H_3 et H_4 sont données respectivement par (1.30), (1.31) et (1.32). Elles restent inchangées car elles sont issues du produit normal de quatre opérateurs.

Comme pour le traitement des noyaux à température nulle, les paramètres u_{ν} et v_{ν} sont choisis de manière à minimiser la valeur de E_0 , soit :

$$\frac{\partial E_0}{\partial v_{\nu}} = \frac{\partial E_0}{\partial u_{\nu}} = 0. \qquad \forall \nu$$
(3.12)

On a donc,

$$\left(\varepsilon_{\nu} - \lambda\right) 4v_{\nu} \left[1 - 2\eta_{\nu}\right] - 2G\left(\sum_{\nu > 0} u_{\nu} v_{\nu} \left(1 - 2\eta_{\nu}\right)\right) \left(1 - 2\eta_{\nu}\right) \left(\frac{\partial}{\partial v_{\nu}} \left(u_{\nu} v_{\nu}\right)\right) = 0 \qquad \forall \nu \quad (3.13)$$

En utilisant le fait que :

$$u_{\nu}^2 + v_{\nu}^2 = 1$$
 ce qui conduit à $\frac{\partial u_{\nu}}{\partial v_{\nu}} = -\frac{v_{\nu}}{u_{\nu}},$

il vient :

$$4v_{\nu}\left(\varepsilon_{\nu}-\lambda\right)\left[1-2\eta_{\nu}\right]-2G\left(\sum_{\nu>0}u_{\nu}v_{\nu}\left(1-2\eta_{\nu}\right)\right)\left(1-2\eta_{\nu}\right)\left(\frac{-v_{\nu}^{2}}{u_{\nu}^{2}}+u_{\nu}\right)=0$$
(3.14)

Soit :

$$4v_{\nu} \left(\varepsilon_{\nu} - \lambda\right) \left[1 - 2\eta_{\nu}\right] - 2\Delta \left(\frac{-v_{\nu}^2}{u_{\nu}^2} + u_{\nu}\right) = 0$$
(3.15)

avec

$$\Delta = G \sum_{\nu > 0} u_{\nu} v_{\nu} \left(1 - 2\eta_{\nu} \right)$$
(3.16)

qui représente la nouvelle expression de la demi-largeur du gap en fonction de la température.

On trouve aussi pour les probabilités d'occupation et d'inoccupation, une forme similaire à celle donnée par (1.36) mais qui dépend de la température :

$$\frac{u_{\nu}^{2}}{v_{\nu}^{2}} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\varepsilon_{\nu} - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)^{2} + \Delta^{2}}} \right]$$
(3.17)

On a négligé dans ces expressions le terme Gv^2 .

En utilisant l'expression (3.17), on peut réécrire H_{11} donné par l'expression (3.10) sous la forme :

$$H_{11} = \sum_{\nu} \left\{ \frac{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)^2}{\sqrt{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)^2 + \Delta^2}} + \frac{\Delta^2}{\sqrt{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)^2 + \Delta^2}} \right\} (\alpha_{\nu}^+ \alpha_{\nu} + \alpha_{\tilde{\nu}}^+ \alpha_{\tilde{\nu}})$$

$$= \sum_{\nu} E_{\nu} (\alpha_{\nu}^+ \alpha_{\nu} + \alpha_{\tilde{\nu}}^+ \alpha_{\tilde{\nu}})$$
(3.18)

où l'on a posé :

$$E_{\nu} = \sqrt{\left(\varepsilon_{\nu} - \lambda\right)^2 + \Delta^2} \tag{3.19}$$

et qui représente l'énergie de la quasiparticule, quantité qui dépend de la température.

De même, les équations du gap données par (1.42) et (1.40), prennent respectivement les formes :

$$\frac{2}{G} = \sum_{\nu} \frac{\operatorname{th}(\frac{\beta E_{\nu}}{2})}{E_{\nu}} \tag{3.20}$$

 et

$$n_0 = \sum_{\nu > 0} \left[1 - \frac{\varepsilon_\nu - \lambda}{E_\nu} \operatorname{th}(\frac{\beta E_\nu}{2}) \right]$$
(3.21)

En utilisant (3.20), on peut aussi mettre E_0 sous la forme :

$$E_0 = \sum_{\nu} \left\{ (\varepsilon_{\nu} - \lambda) - E_{\nu} (1 - 2\eta_{\nu}) \right\} + \frac{\Delta^2}{G}$$
(3.22)

Cette méthode a permis de tenir compte de la température dans les équations du gap.

3.3 La grande fonction de partition

Comme déjà souligné, l'ensemble grand canonique est approprié pour les systèmes dont l'énergie et le nombre de particules sont conservés en moyenne. Ainsi leurs propriétés thermodynamiques peuvent être décrites à l'aide de la grande fonction de partition Z. En effet, on verra par la suite que la connaissance de cette dernière ainsi que ses dérivées est de première importance pour la détermination des grandeurs thermodynamiques du système. Pour ce faire et afin de tenir compte de l'effet de la restauration du bon nombre de particules, on utilisera l'expression (2.61) pour l'hamiltonien H' de quasi-particules projetées indépendantes :

$$Z = \operatorname{Tr} \exp(-\beta H') \tag{3.23}$$

où Tr désigne la trace, calculée généralement à l'aide des états propres de H'.

$$Z = \operatorname{Tr} \exp\left(-\beta \left[E_n^0 + \sum_{\nu>0} E_n^{\nu} (P_n^{\nu} + P_n^{\bar{\nu}})\right]\right)$$
(3.24)

$$= \exp\left(-\beta E_n^0\right) \operatorname{Tr} \exp\left(-\beta \sum_{\nu>0} E_n^{\nu} (P_n^{\nu} + P_n^{\bar{\nu}})\right)$$
(3.25)

Sachant que les seules valeurs propres du projecteur P_n^{ν} , sont 0 ou 1, on trouve alors Ω , qui n'est autre que le logarithme népérien de la grande fonction partition :

$$\Omega = LogZ \tag{3.26}$$

$$\Omega = Log\left(\exp\left(-\beta E_n^0\right) \quad \mathrm{Tr}\left[\prod_{\nu>0}\exp\left(-\beta E_n^{\nu}P_n^{\nu}\right)\exp\left(-\beta E_n^{\nu}P_n^{\bar{\nu}}\right)\right]\right)$$

ce qui conduit à :

$$\Omega = -\beta E_n^0 + 2\sum_{\nu>0} Log(1 + e^{-\beta E_n^\nu}).$$
(3.27)

À partir de cette expression, on pourra définir la plupart des grandeurs thermodynamiques, comme l'énergie du système, l'entropie ainsi que la capacité calorifique¹.

¹Voir l'annexe pour les détails de calculs

3.3.1 L'énergie

L'une des caractéristiques thermodynamiques les plus importantes est l'énergie moyenne du système définie par [52] :

$$\text{Energie} = -\frac{\partial \left[LogZ\right]}{\partial\beta}\Big|_{\alpha=cste}$$
(3.28)

où :
 $\alpha = \lambda\beta$

Il vient alors,

Energie =
$$\frac{\partial(\beta E_n^0)}{\partial\beta} + 2\sum_{\nu>0} \frac{\frac{\partial(\beta E_n^{\nu})}{\partial\beta}e^{-\beta E_n^{\nu}}}{1+e^{-\beta E_n^{\nu}}}$$

Sachant que

$$\frac{2}{1 + e^{\beta E_n^{\nu}}} = 1 - th(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2})$$
(3.29)

on trouve :

Energie =
$$\frac{\partial(\beta E_n^0)}{\partial\beta} + \sum_{\nu>0} \frac{\partial(\beta E_n^{\nu})}{\partial\beta} \left(1 - \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2})\right)$$
 (3.30)

En utilisant, (2.63) et (2.64) et après tous calculs faits, on aboutit à :

Energie =
$$\sum_{\nu>0} \left\{ \varepsilon_{\nu} \left(1 - \frac{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)}{E\nu} \operatorname{th}(\frac{\beta E_{n}^{\nu}}{2}) \right) + E_{40}^{\nu} \left(1 - \operatorname{th}(\frac{\beta E_{n}^{\nu}}{2}) \right) \right\} - \frac{\Delta^{2}}{G} + E_{40} \quad (3.31)$$

3.3.2 L'entropie

L'entropie est interprétée en thermodynamique comme la mesure du degré de désordre d'un système au niveau microscopique par rapport à son état initial, autrement dit, plus l'entropie du système est élevée, moins ses éléments sont ordonnés et liés entre eux, elle est donnée par [34] :

$$S = \Omega - \alpha N + \beta E \tag{3.32}$$

En substituant les expressions (3.27), (3.21) et (3.31) dans (3.32) on trouve :

$$\begin{split} S &= -\beta E_n^0 + 2\sum_{\nu>0} Log(1+e^{-\beta E_n^{\nu}}) \\ &\quad -\lambda\beta\sum_{\nu>0} \left[1 - \frac{\varepsilon_{\nu} - \lambda}{E_{\nu}} \operatorname{th}(\frac{\beta E_{\nu}}{2})\right] \\ &\quad +\beta\sum_{\nu>0} \left\{\varepsilon_{\nu} \left(1 - \frac{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)}{E_{\nu}} \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2})\right) + E_{40}^{\nu} \left(1 - \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2})\right)\right\} - \frac{\Delta^2}{G} + E_{40} \end{split}$$

On a alors :

$$S = -\beta \sum_{\nu>0} (\varepsilon_{\nu} - \lambda - E_{\nu}) - \beta \frac{\Delta^2}{G} + 2 \sum_{\nu>0} Log(1 + e^{-\beta E_n^{\nu}}) - \beta E_{40}^{\nu}$$
$$- \lambda \beta \sum_{\nu>0} \left[1 - \frac{\varepsilon_{\nu} - \lambda}{E_{\nu}} \operatorname{th}(\frac{\beta E_{\nu}}{2}) \right]$$
$$+ \beta \sum_{\nu>0} \left\{ \varepsilon_{\nu} \left(1 - \frac{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)}{E_{\nu}} \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) \right) + E_{40}^{\nu} \left(1 - \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) \right) \right\} - \beta \frac{\Delta^2}{G} + \beta E_{40}$$

En utilisant les équations du gap données par (3.20), (3.21), on aboutit à :

$$S = 2\sum_{\nu>0} Log \left(1 + e^{-\beta E_n^{\nu}}\right) + 2\beta \sum_{\nu>0} \frac{E_n^{\nu}}{1 + e^{\beta E_{\nu}}}$$
(3.33)

Il est intéressant de noter que l'expression donnant l'entropie du système avec conservation du nombre de particules est analogue à celle donnée par Moretto dans le cadre de la théorie FTBCS [34] :

$$S = 2\sum_{\nu>0} Log \left(1 + e^{-\beta E_{\nu}}\right) + 2\beta \sum_{\nu>0} \frac{E_{\nu}}{1 + e^{\beta E_{\nu}}}$$
(3.34)

La différence réside dans le fait de substituer l'énergie de la quasiparticule par son homologue projetée dans le premier terme et le numérateur du second terme.

3.3.3 La capacité calorifique

La capacité calorifique est une grandeur qui renseigne sur la quantité de chaleur à fournir ou à enlever à un système afin que sa température augmente ou diminue d'une unité. Elle est notée C et est donnée par [53] :

$$C = T \frac{dS}{dT} = -\beta \frac{dS}{d\beta} \tag{3.35}$$

Il vient alors :

$$\frac{dS}{d\beta} = 2\sum_{\nu>0} \frac{\frac{\partial(-\beta E_n^{\nu})}{\partial\beta} e^{-\beta E_n^{\nu}}}{(1 + e^{-\beta E_n^{\nu}})} + 2\sum_{\nu>0} \frac{E_n^{\nu}}{1 + e^{\beta E_\nu}} + 2\beta\sum_{\nu>0} \frac{\frac{\partial(E_n^{\nu})}{\partial\beta} \left(1 + e^{\beta E_\nu}\right) - E_n^{\nu} \frac{\partial(\beta E_\nu)}{\partial\beta} e^{\beta E_\nu}}{(1 + e^{\beta E_\nu})^2}$$

En multipliant les deux membres de l'équation par $(-\beta)$ et en utilisant le fait que :

$$\frac{e^{x}}{(1+e^{x})^{2}} = \frac{\left[1+\operatorname{th}\left(\frac{x}{2}\right)\right]\left[1-\operatorname{th}\left(\frac{x}{2}\right)\right]}{4} = \frac{1}{4\operatorname{ch}^{2}\left(\frac{x}{2}\right)}$$
(3.36)

on arrive à l'expression finale :

$$C = \frac{1}{2} \sum_{\nu > 0} \frac{E_n^{\nu} \left[\beta^2 E_{\nu} + \beta^3 \frac{\partial(E_{\nu})}{\partial \beta} \right]}{\operatorname{ch}^2 \left(\frac{\beta E_{\nu}}{2} \right)}$$
(3.37)

où :

$$\frac{\partial \left(E_{\nu}\right)}{\partial \beta} = \frac{\left(\varepsilon_{\nu} - \lambda\right)\lambda + \beta \Delta \frac{\partial \Delta}{\partial \beta}}{E_{\nu}}$$

En dérivant l'équation du gap donnée par (3.20) par rapport à β , on trouve aussi :

$$\frac{\partial \Delta}{\partial \beta} = \frac{\frac{1}{2} \sum_{\nu>0} \frac{1}{\operatorname{ch}^2\left(\frac{\beta E_{\nu}}{2}\right)}}{\sum_{\nu>0} \frac{\Delta}{E_{\nu}^3} \operatorname{th}\left(\frac{\beta E_{\nu}}{2}\right) - \sum_{\nu>0} \frac{\Delta\beta}{2E_{\nu}^2} \frac{1}{\operatorname{ch}^2\left(\frac{\beta E_{\nu}}{2}\right)}}$$
(3.38)

Etant donné que la capacité calorifique n'est autre que la dérivée de l'entropie par rapport à la température, comme on pouvait s'y attendre, son expression donnée par (3.37) pour un système ayant le nombre de particules restauré a la même forme que celle donnée dans le cadre de la théorie FTBCS, [34] :

$$C = \frac{1}{2} \sum_{\nu > 0} \frac{E_{\nu} \left[\beta^2 E_{\nu} + \beta^3 \frac{\partial(E_{\nu})}{\partial \beta} \right]}{\operatorname{ch}^2 \left(\frac{\beta E_{\nu}}{2} \right)}$$
(3.39)

Il suffit alors de remplacer l'énergie de la quasiparticule qui apparait au début de l'expression par l'énergie projetée pour avoir la capacité calorifique d'un système ayant le bon nombre de particules.

L'apport de la projection dans les expressions de l'énergie (3.31), l'entropie (3.33) ainsi que la capacité calorifique(3.37), sera discuté dans le chapitre suivant.

Chapitre 4

Résultats numériques et discussion

4.1 Introduction

Afin d'étudier le comportement des grandeurs thermodynamiques définies précédemment en fonction de la température pour un système avec conservation du nombre de particules, on commencera par s'assurer de la convergence de la méthode SBCS et de la validité des équations données dans le chapitre 3, et ce en utilisant le modèle schématique de Richardson [40]. On envisagera par la suite le cas du modèle réaliste de Woods-Saxon [41] où les noyaux ${}^{30}_{14}$ Si, ${}^{46}_{22}$ Ti, ${}^{60}_{28}$ Ni, ${}^{142}_{60}$ Nd, ${}^{144}_{62}$ Sm et ${}^{146}_{64}$ Gd seront étudiés.

4.2 Modèle schématique de Richardson

Le modèle schématique de Richardson est un modèle simple qui stipule que le spectre d'énergie est un spectre discret où les niveaux sont doublement dégénérés et ont pour énergie $\varepsilon_{\nu} = \nu$ avec $1 \leq \nu \leq \Omega$, où Ω est la dégénérescence totale de paires de particules. On ne considèrera que les cas $\Omega = N$, où N est le nombre de particules.

Les équations du gap généralisées données par les expressions (3.20) et (3.21) se présentent comme un système de deux équations non linéaires où les inconnues sont le niveau de Fermi λ et la demi-largeur du gap Δ :

$$\frac{2}{G} = \sum_{\nu} \frac{\operatorname{th}(\frac{\beta E_{\nu}}{2})}{E_{\nu}}$$

$$n_{0} = \sum_{\nu>0} \left[1 - \frac{\varepsilon_{\nu} - \lambda}{E_{\nu}} \operatorname{th}(\frac{\beta E_{\nu}}{2}) \right]$$

$$(4.1)$$

Un code de calcul a été élaboré pour résoudre ce système par la méthode de Newton en considérant pour le modèle de Richardson les trois cas suivants :

N	8	10	16
G (MeV)	0.800	0.400	0.475

Pour chacun des systèmes (ayant un nombre de particules égal à 8, 10 et 16), on trouve que le niveau de Fermi (λ) garde une valeur pratiquement constante quelle que soit la température, elle est reportée dans le tableau (4.1).

En ce qui concerne la demi-largeur du gap (Δ), on remarque sur la figure (4.1), qu'elle reste relativement constante sur un premier intervalle de température, au-delà de celui-ci, elle chute brusquement pour s'annuler à une température bien précise, dite température critique (T_c). Au-delà de cette dernière, toutes les paires de particules sont détruites. L'appariement disparaît donc et ceci correspond au passage de l'état superfluide à l'état normal du gaz de Fermi.



FIG. 4-1 – Evolution de la demi-largeur du gap Δ en fonction de la température pour des systèmes ayant N = 8, 10 et 16 particules respectivement.

Les résultats de la résolution du système d'équations donné par (4.1), pour les trois systèmes envisagés, sont présentés dans le tableau 4.1 :

TAB. 4.1 – Tableau récapitulatif des résultats obtenus pour la résolution du système d'équations (4.1).

N	G(MeV)	$\lambda(MeV)$	$\Delta_{(T=0)}(MeV)$	$T_c(MeV)$
8	0.800	4.500	2.501	1.335
10	0.400	5.500	0.822	0.466
16	0.475	8.500	1.979	1.105

Par la suite, on s'est assuré de la convergence de la méthode *SBCS*. Pour ce faire, nous avons élaboré un code de calcul afin d'évaluer l'énergie projetée pour les mêmes systèmes.

Les résultats obtenus sont résumés dans les tableaux 4.2 à 4.4 :

TAB. 4.2 – Energie BCS et énergie SBCS du système en fonction du degré d'extraction n des fausses composantes pour N=8, G=0.8 MeV.

n	$E_{BCS}(MeV)$	$E_{SBCS}(MeV)$	$\Delta E(MeV) = E_{SBCS} - E_{BCS}$
0	17.2091	17.1470	-00.06207
1	17.2091	15.8053	-01.40381
2	17.2091	15.7575	-01.45162
3	17.2091	15.7575	-01.45162
4	17.2091	15.7575	-01.45162

TAB. 4.3 – Même commentaire que dans le tableau 4.2 pour N=10, G=0.4 MeV.

n	$E_{BCS}(MeV)$	$E_{SBCS}(MeV)$	$\Delta E(MeV) = E_{SBCS} - E_{BCS}$
0	29.7415	29.4333	-0.3081
1	29.7415	29.1742	-0.5672
2	29.7415	29.1738	-0.5676
3	29.7415	29.1738	-0.5676
4	29.7415	29.1738	-0.5676

n	$E_{BCS}(MeV)$	$E_{SBCS}(MeV)$	$\Delta E(MeV) = E_{SBCS} - E_{BCS}$
0	70.1529	70.0752	-00.0777
1	70.1529	68.8022	-01.3506
2	70.1529	68.7049	-01.4479
3	70.1529	68.7047	-01.4482
4	70.1529	68.7047	-01.4482

TAB. 4.4 – Même commentaire que dans le tableau 4.2 pour N=16, G=0.475 MeV.

De ces tableaux, on constate que l'énergie évaluée par la méthode SBCS est plus basse que l'énergie évaluée à l'approche BCS; l'écart varie selon le système considéré, de 0.5MeV à 1.4MeV. Ceci indique que la contribution des fluctuations du nombre de particules n'est pas négligeable et le recours à une méthode de projection s'avère donc nécessaire. On remarque aussi que la convergence a lieu très rapidement, dès que $n \ge 2$, ce qui montre la puissance de la méthode.

Cependant avant de commencer le traitement des grandeurs thermodynamiques évaluées dans le chapitre 3 en fonction de la température, on notera le fait que la correction apportée par la méthode SBCS (l'écart entre E_{SBCS} et E_{BCS}), a été jusqu'à présent calculée à température nulle, ce qui nous amène à considérer les deux hypothèses suivantes :

1-Maintenir cette correction constante quelle que soit la température du système considérée. Pour ce faire, on évalue les paramètres u_{ν} et v_{ν} à température nulle et on fixe ces derniers sur tout l'intervalle de température.

2–La correction est fonction de la température, autrement dit, il faut réévaluer les paramètres u_{ν} et v_{ν} pour chaque température considérée.

On se propose alors de calculer l'énergie d'excitation du système en considérant les deux hypothèses dans un premier lieu.

4.2.1 Energie d'excitation

L'énergie d'excitation du système est définie comme étant la différence entre l'énergie de ce système à une température donnée et son homologue à température nulle, soit :

$$E^* = \operatorname{Energie}_{(T \neq 0)} \operatorname{-Energie}_{(T=0)}$$

$$= \sum_{\nu > 0} \left\{ \varepsilon_{\nu} \left(1 - \frac{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)}{E\nu} \operatorname{th}(\frac{\beta E_{n}^{\nu}}{2}) \right) + E_{04}^{\nu} \left(1 - \operatorname{th}(\frac{\beta E_{n}^{\nu}}{2}) \right) \right\} - \frac{\Delta^{2}}{G} + E_{04}$$

$$- \sum_{\nu > 0} \left\{ \varepsilon_{\nu} \left(1 - \frac{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)}{E\nu_{(T=0)}} \right) \right\} + \frac{\Delta^{2}_{(T=0)}}{G} - E_{04(T=0)}$$

$$(4.2)$$

La figure (4.3) montre l'allure de l'énergie d'excitation du système en fonction de la température pour les différents systèmes étudiés en considérant les deux hypothèses susmentionnées.



FIG. 4-2 – Variation de l'énergie d'excitation en fonction de la température pour les différents systèmes considérés et selon les deux approches FTBCS et FTSBCS.

Sur cette dernière, on remarque que l'énergie projetée a été abaissée par rapport à l'énergie liée à l'approche FTBCS dans un intervalle de température comprise entre 0 et T_c et ce pour les deux hypothèses, cependant, ce qui est intéressant, c'est de noter le fait que pour des températures supérieures à la température critique, on trouve des valeurs pour l'énergie toujours plus faibles que celles données dans l'approche FTBCS (Fig: 4.3 - a1, a2 et a3) et ce en considérant l'hypothèse (1), ce qui est tout à fait normal, étant donné le fait qu'on a considéré la correction apportée par la projection dans ce cas, est une constante quelle que soit la température, on observe alors tout simplement, une translation des valeurs de l'énergie.

En revanche, pour le deuxième cas considéré (Fig: 4.2 - b1, b2 et b3), on remarque les deux approches, FTBCS et FTSBCS coïncident parfaitement à partir de la température critique.

Il est connu que pour une température supérieure ou égale à la température critique T_c , toutes les paires sont détruites et le système se transforme alors en un gaz de Fermi. On a affaire à un champ moyen de particules indépendantes et il n'est plus nécessaire dans ce cas de parler d'appariement et encore moins de projection ; ce qui explique le fait que les deux courbes se rejoignent dans les figures (4.2 - b1, b2 et b3).

A la lumière de ces deux résultats, le choix se porte tout naturellement sur la deuxième hypothèse, à savoir qu'il faut apporter à une température bien définie, une correction bien précise.

4.2.2 Entropie

Pour l'entropie, on peut voir sur les figures (4.3 - b1), (4.3 - b2) et (4.3 - b3) que dans l'intervalle de températures $0 < T < T_c$ et pour les deux approches *FTBCS* et *FTSBCS*, elle prend des valeurs plus faibles comparées à celles calculées après la température critique T_c ce qui montre que le système est plus ordonné dans l'état supraconducteur et plus précisément, à des températures proches du zéro. Cependant avec l'augmentation de la température, l'entropie croit de manière très rapide indiquant ainsi que le système subit des transformations qui correspondent au passage de l'état supraconducteur à l'état normal, ce qui est en accord avec la chute brutale de la demi-largeur du gap observée pour un même intervalle de température sur les figures (4.3 - a1, a2 et a3). Cette chute indique qu'avec l'augmentation de la température les paires commencent à se briser en raison de la diminution de l'appariement, pour finalement disparaître à la température critique. Alors, le système, qui tend vers un gaz de Fermi, voit l'évolution de son entropie pour des températures supérieures à la température critique, se faire de manière beaucoup plus lente pour atteindre une certaine valeur qui est son entropie maximale. Le système perd alors de sa capacité à évoluer davantage et tend vers une stabilité.

On remarque aussi le fait que son comportement en fonction de la température est analogue à celui de l'énergie d'excitation pour les deux approches, FTBCS et FTSBCS, autrement dit, on notera qu'en dessous qu'avant la température critique T_c , on trouve des valeurs plus faibles dans l'approche FTSBCS, ceci peut être dû à la restauration du nombre de particules, quand on considère le fait que l'entropie est la mesure du degré de désordre du système, autrement dit, plus l'entropie est faible, plus grande est la quantité d'informations sur le système.

4.2.3 Capacité calorifique

L'évolution de cette grandeur pour les trois modèles (nombre de particules égal à 8, 10 et 16), est portée par les figures (4.3 - c1), (4.3 - c2) et (4.3 - c3). On observe dans un premier temps, pour des températures inférieures à la température critique, et ce dans les deux approches, à savoir avec et sans la projection, un accroissement très rapide de la capacité calorifique pour atteindre un maximum à la température critique, s'en suit après une chute brutale lors du passage de l'état superfluide à l'état normal du gaz de Fermi.

On remarque aussi que les valeurs de la capacité calorifique données par l'approche FTSBCSsont inférieures à celles données dans l'approche FTBCS. La projection vient alors corriger les valeurs de la capacité calorifique, ce résultat était prévisible étant donné que la capacité calorifique n'est autre que la dérivée de l'énergie par rapport à la température. Comme mentionné pour les deux autres grandeurs, à savoir l'entropie et l'énergie, les deux courbes donnant la capacité calorifique dans les deux approches FTBCS et FTSBCS, se rejoignent à la température critique pour ensuite évoluer de la même manière, montrant encore une fois qu'à partir de cette température Tc, le système devenant un gaz de Fermi, l'appariement disparaît et la projection n'a plus aucun effet.

On notera aussi le fait que pour un nombre de particules donné, le comportement de la capacité calorifique au-delà de la température critique dépend de la constante G. En effet, comme on peut le voir sur les figures (4.4 - a), (4.4 - b) et (4.4 - c), plus cette dernière diminue et plus la courbe de la capacité calorifique adopte une allure parabolique ayant une pente plus importante avant de continuer à décroitre.

On remarque aussi que pour un nombre de particules fixe et en faisant varier la constante



FIG. 4-3 – Evolution de la demi-largeur du gap Δ , de l'entropie et de la capacité calorifique en fonction de la température pour les trois systèmes considérés.

d'appariement G, l'apport de la projection diminue. En fait, plus la constante d'appariement est élevée et plus la correction apportée par l'approche FTSBCS, est conséquente (voir figures (4.5-a), (4.5-b) et (4.5-c)).On présente aussi l'écart relatif de la capacité calorifique évaluée par les deux approches (FTBCS et FTSBCS) en fonction du rapport ($\frac{T}{T_c}$) dans le tableau 4.5

(1/10) of pour an nombre de particules 10 of					
	T/Tc = 0.35	T/Tc = 0.55	T/Tc = 0.95		
G (MeV)	Ecart relatif	Ecart relatif	Ecart relatif		
0.35	14.55%	13.86%	4.19%		
0.60	33.06%	30.97%	20.37%		
0.80	34.23%	33.43%	31.66%		

TAB. 4.5 - L'écart relatif entre C (évaluée par FTBCS) et C (évaluée par FSTBCS) en fonction de G et du rapport (T/Tc) et pour un nombre de particules N=8.



FIG. 4-4 – Evolution de la capacité calorifique en fonction de la température pour N = 8 et différents G et selon les deux approches, FTBCS et FTSBCS



FIG. 4-5 – Evolution de la capacité calorifique en fonction du rapport T/Tc pour N=8 et différents G et selon les deux approches, FTBCS et FTSBCS

4.3 Cas réaliste

Une fois le code de calcul élaboré et testé dans le cadre du modèle schématique de Richardson, on s'est interessé au cas réaliste. Pour ce faire, on a utilisé les énergies et et états propres d'un champ moyen déformé de Woods-Saxon dont les paramètres sont ceux des références [54], [55]. Il est utile de préciser que lorsque nous nous sommes intéressés au cas réaliste, nous avons effectué une troncature sur la somme des niveaux d'énergie. En effet, les paramètres u_{ν} et v_{ν} prennent respectivement les valeurs 1 et 0 pour des niveaux loin au dessus du niveau de Fermi, la contribution du produit $(u_{\nu}v_{\nu})$ devient négligeable et il n'est plus nécessaire donc de sommer sur tous les niveaux.

Nous avons traité trois noyaux légers $^{30}_{14}$ Si, $^{46}_{22}$ Ti et $^{60}_{28}$ Ni ainsi que trois de masse intermédiaire $^{142}_{60}$ Nd, $^{144}_{62}$ Sm et $^{146}_{64}$ Gd pour lesquels nous avons effectué une étude séparée des deux systèmes : proton et neutron, étant donné que l'appariement neutron-proton n'a pas été pris en considération.

Dans cette partie, nous avons déduit les valeurs de G_p et G_n à partir des valeurs expérimentales des paramètres du gap Δ_p et Δ_n . Ces dernières sont déterminées en calculant les différences de masse pair-impair définies dans la référence [56] :

$$\Delta_p^{\exp} = -\frac{1}{8} \left[M \left(Z + 2, N \right) - 4M \left(Z + 1, N \right) + 6M \left(Z, N \right) - 4M \left(Z - 1, N \right) + M \left(Z - 2, N \right) \right]$$

$$\Delta_n^{\exp} = -\frac{1}{8} \left[M \left(Z, N + 2 \right) - 4M \left(Z, N + 1 \right) + 6M \left(Z, N \right) - 4M \left(Z, N - 1 \right) + M \left(Z, N - 2 \right) \right]$$

$$(4.4)$$

où M(Z, N) est la masse expérimentale d'un noyau contenant Z protons et N neutrons déduite de la table d'Audi [57].

Nous avons reporté dans les tableaux (4-5) et (4-6) la température critique du système ainsi que les valeurs des paramètres du gap Δ_p et Δ_n , les valeurs des niveaux de Fermi ainsi que les constantes d'appariement correspondant aux différents noyaux considérés pour une température nulle.

TAB. 4.6 – Valeurs expérimentales des paramètres du gap, de la température critique du système et des valeurs des niveaux de Fermi pour le système proton des différents noyaux légers considérés pour une température nulle.

Noyaux	$\Delta_{p(T=0)} MeV$	$T_c \ (MeV)$	$\lambda_{p(T=0)} MeV$	$G_p MeV$
$^{30}_{14}{ m Si}$	2.125	1.282	-7.835	0.1833
$^{46}_{22}$ Ti	2.092	1.411	-5.687	0.1560
⁶⁰ ₂₈ Ni	1.663	1.059	-5.397	0.1323

TAB. 4.7 – Même commentaire que pour le tableau 4-5 pour le système neutrons.

Noyaux	$\Delta_{n(T=0)} MeV$	$T_c (MeV)$	$\lambda_{n(T=0)}MeV$	$G_n MeV$
$\begin{bmatrix} 30\\14 \end{bmatrix}$ Si	1.599	0.891	-9.678	0.1752
$\frac{46}{22}$ Ti	1.879	1.143	-10.252	0.1515
$\begin{bmatrix} 60\\28 \end{bmatrix}$ Ni	1.537	0.836	-10.294	0.1239

TAB. 4.8 – Valeurs expérimentales des paramètres du gap, de la température critique du système et des valeurs des niveaux de Fermi pour le système proton des différents noyaux lourds considérés pour une température nulle.

Noyaux	$\Delta_{p(T=0)} MeV$	$T_c \ (MeV)$	$\lambda_{p(T=0)}MeV$	$G_p MeV$
$^{142}_{60}$ Nd	1.229	0.718	-5.209	0.0835
$^{144}_{62}$ Sm	1.253	0.720	-4.194	0.0814
$^{146}_{64}$ Gd	1.419	0.792	-3.293	0.0815

Noyaux	$\Delta_{n(T=0)}MeV$	$T_c (MeV)$	$\lambda_{n(T=0)}MeV$	$G_n MeV$
$^{142}_{60}$ Nd	1.391	0.978	-8.249	0.0826
$^{144}_{62}$ Sm	1.387	0.975	-8.858	0.0828
$^{146}_{64}\mathrm{Gd}$	1.441	1.007	-9.498	0.0834

TAB. 4.9 – Même commentaire que pour le tableau 4-7 pour le système neutrons.

A l'aide de ces valeurs, nous avons obtenus les graphes -figures : (4.6 - a1), (4.6 - a2) et (4.6 - a3)- donnant la variation de la demi-largeur du gap en fonction de la température pour les systèmes neutron et proton des différents noyaux considérés. Nous remarquons que l'allure des courbes est semblable à celle obtenue avec le modèle de Richardson.

Notons cependant le fait que la demi-largeur du gap s'annule plus vite pour les neutrons que pour les protons et ce pour tous les noyaux légers considérés, alors que nous observons la situation inverse pour les noyaux ($^{142}_{60}$ Nd, $^{144}_{62}$ Sm et $^{146}_{64}$ Gd). Ce qui nous indique que pour ces derniers, le passage de l'état supraconducteur à l'état normal du gaz de Fermi pour le système protons nécessite moins d'énergie en comparaison avec le système neutrons.

4.3.1 Energie d'excitation

Les figures (4.6 - b1, b2 et b3), (4.7 - b1, b2 et b3) respectivement, représentent l'évolution de l'énergie d'excitation des noyaux légers et des noyaux de masse intermédiaire considérés en fonction de la température, et ce pour les systèmes protons et neutrons et selon les deux approches *FTBCS* et *FTSBCS*. En revanche, on représente sur les figures (4.6 - c1, c2 etc3) ainsi que (4.7 - c1, c2 et c3), l'évolution de l'énergie totale d'excitation du système en fonction de la température et qui n'est autre que l'énergie d'excitation du système protons augmentée de celle du système neutrons pour chaque noyau considéré.

Ces courbes montrent que l'allure de l'énergie d'excitation (voir figures :(4-6, 7 - b1), (4-6, 7 - b2) et (4-6, 7 - b3)) est semblable à celle obtenue avec le modèle de Richardson, à savoir que l'énergie d'excitation évaluée par l'approche FTSBCS est inférieure à celle donnée par l'approche FTBCS pour un intervalle de température comprise entre 0 et T_c alors que pour des températures supérieures à la température critique, les deux approches coïncident parfaitement. Nous remarquons aussi, à partir de ces courbes que pour l'état supraconducteur ($T < T_c$), l'énergie d'excitation pour les neutrons est plus importantes que celle pour les protons lors du



FIG. 4-6 – Evolution de la demi-largeur du gap Δ , de l'énergie d'excitation E* et de l'énergie d'excitation totale E_T pour les noyaux légers considérés.



FIG. 4-7 – Même commentaire que la figure 4 – 6 pour les noyaux de masse intermédiaire considérés.

traitement des noyaux ${}^{30}_{14}$ Si, ${}^{142}_{60}$ Nd, ${}^{144}_{62}$ Sm et ${}^{146}_{64}$ Gd. Une situation inverse est observée pour les noyaux ${}^{46}_{22}$ Ti et ${}^{60}_{28}$ Ni. On remarque aussi, sur les figures donnant l'énergie totale d'excitation du système (4.6, 7 - c1), (4.6, 7 - c2) et (4.6, 7 - c3), la présence de deux cassures qui correspondent aux deux températures critiques des deux systèmes proton et neutron et au-delà des-quelles, tout le système perd l'appariement et tend vers l'état normal de gaz de Fermi.

4.3.2 Entropie et capacité calorifique

Les figures (4.8 - b1, b2 et b3), (4.9 - b1, b2 et b3), montrent que l'évolution de l'entropie en fonction de la température est similaire à celle observée dans le modèle schématique de Richardson. Cependant, on notera le fait que les neutrons atteignent l'état d'équilibre avant les protons dans les noyaux légers et inversement pour les noyaux de masse intermédiaire. On notera aussi le fait que pour les noyaux légers le système protons est plus ordonné dans l'état supraconducteur que le système neutrons et que la situation s'inverse pour le reste des noyaux considérés. Ces résultats sont en accord avec les observations faites sur les figures (4.8 - a1, a2et a3), (4.9 - a1, a2 et a3), à savoir que $T_{cn} > T_{cp}$, ainsi que celles obtenues lors de l'étude de l'énergie d'excitation et l'énergie totale du système. Ceci s'explique par le fait que les neutrons perdent leur appariement avant les protons et ce pour les noyaux légers et inversement pour les noyaux de masse intermédiaire.

On remarque aussi sur les figures (4.8 - c1, c2 et c3) ainsi que les figures (4.9 - c1, c2 et c3) que la théorie *FTBCS* surestime la transition de phase pour les deux systèmes proton et neutron et ce pour les différents noyaux considérés. En effet, on peut clairement voir que l'approche *FTSBCS* abaisse les valeurs de la capacité calorifique liées à l'approche *FTBCS*. On remarque aussi pour les noyaux légers figures (4.8 - c1, c2 et c3), que le pic pour la température critique, est plus important pour les protons que celui des neutrons. Ceci indique que pour les noyaux légers, l'énergie nécessaire pour casser toutes les paires de protons est plus grande comparée à celle qui est requise pour casser toutes les paires de neutrons alors que la situation inverse est observée pour les noyaux $^{142}_{60}$ Nd, $^{144}_{64}$ Sm et $^{146}_{64}$ Gd (voir figures [4.9 - c1, c2 et c3]). On notera aussi le fait que pour un même intervalle de température (Voir figure 4 - 10), la capacité calorifique ne diminue pas comme cela a pu être observé dans le modèle de Richardson. Pour observer une allure similaire, il faut aller jusqu'à des températures très élevées (de l'ordre de 30



FIG. 4-8 – Evolution de la demi-largeur du gap Δ , de l'entropie S et de la capacité calorifique C en fonction de la température pour les noyaux légers considérés.



FIG. 4-9 – Même commentaire que la figure 4 - 8 pour les noyaux lourds considérés.

MeV pour le noyau silicium ³⁰₁₄Si). Il est bien connu que pour des température de l'ordre de 5 MeV, l'approximation faite pour les niveaux d'énergies qui sont indépendants de la température n'est plus valable [58]. On peut aussi émettre des doutes sur l'existence du système sous forme de gaz. Nous en concluons donc, qu'il n'est pas nécessaire d'aller jusqu'à des températures aussi élevées. Nous pouvons alors dire que contrairement au modèle schématique de Richardson, la capacité calorifique ne diminue pas du fait que la constante d'appariement soit petite.



FIG. 4-10 – Comportement de la capacité calorifique en fonction de la température pour le noyau $^{30}_{14}{\rm Si.}$
Conclusion

Dans le présent travail, nous avons étudié l'effet de la restauration du bon nombre de particules dans les systèmes nucléaires sur différentes grandeurs thermodynamiques, à savoir : l'énergie, l'entropie et la capacité calorifique.

Pour ce faire, nous avons commencé par rappeler la théorie BCS adaptée à l'étude de la structure nucléaire à température nulle, dans laquelle il a été mis en évidence un de ses défauts majeur qui est la brisure de symétrie relative au nombre de particules, ceci conduit à des fonctions d'ondes donnant une mauvaise description de l'énergie du fondamental et par conséquent du spectre d'excitation.

Il est alors naturel d'avoir recours aux méthodes de projection qui restaurent cette symétrie brisée en projetant l'état décrivant le système sur l'espace nombre d'occupation. Ceci a fait l'objet du deuxième chapitre, où on rappelle la méthode Sharp - BCS (projection après variation), qui présente l'avantage d'être une méthode à la fois discrète et exacte, autrement dit, une méthode maniable sur le plan mathématique et facile pour le calcul numérique.

Dans la troisième partie, nous avons établi les équations du gap généralisées dans le cadre de l'approche FTBCS (BCS à température finie) et on a fait l'approximation de les utiliser dans la méthode FTSBCS (méthode FTBCS avec projection), étant donné que nous avons considéré la projection après variation. Par la suite nous avons déterminé la grande fonction de partition de cette dernière approche, à partir de laquelle, nous avons explicité différentes grandeurs thermodynamiques classiques et qui sont : l'énergie, l'entropie et la capacité calorifique. Ces dernières ont fait l'objet d'une comparaison avec leurs homologues obtenues par l'approche FTBCS dans la dernière partie de ce travail. Nous avons pour cela élaboré notre propre code de calcul afin de résoudre les équations du gap généralisées et étudier l'évolution des différentes grandeurs thermodynamiques dans les deux approches FTBCS et FTSBCS.

Nous avons appliqué ces équations au modèle schématique de Richardson et après s'être assuré de la convergence de la méthode SBCS, nous avons comparé le comportement des grandeurs thermodynamiques en fonction de la température avec et sans projection. Ainsi, nous avons constaté qu'avec l'augmentation de la température, l'appariement avait tendance à diminuer jusqu'à disparaître pour une température bien précise, dite température critique. Pour un intervalle de températures inférieures à cette dernière, nous avons émis deux hypothèses en ce qui concerne la correction qu'apporte l'approche FTSBCS par rapport à l'approche sans projection, à savoir, celle apportée par la méthode de projection et qui est évaluée à température nulle et doit rester constante quelles que soient les températures considérées, ou au contraire, on doit apporter une correction bien précise à une température donnée. Après avoir observé les courbes donnant l'évolution de l'énergie d'excitation en fonction de la température pour les deux hypothèses sus-mentionnées, nous sommes arrivés à la conclusion que la correction dépend de la température considérée. Nous avons tracé les courbes relatives aux différentes grandeurs thermodynamiques et constaté que l'approche FTBCS surestime les valeurs de ces dernières qui sont évaluées pour des températures inférieures à la température critique. Cependant, les deux approches coïncident parfaitement à partir de la température critique, montrant ainsi que la correction apportée par la méthode de projection disparaît avec l'appariement à la température critique, le système tend alors vers l'état normal du gaz de Fermi et on a donc affaire à un champ moyen de particules indépendantes. Il n'est plus utile dans ce cas de parler d'appariement et encore moins de projection.

Enfin nous avons étudié l'effet de la température avec conservation du nombre de particules sur les systèmes neutrons et protons des noyaux $^{30}_{14}$ Si, $^{46}_{22}$ Ti, $^{60}_{28}$ Ni, $^{142}_{60}$ Nd, $^{124}_{62}$ Sm et $^{146}_{64}$ Gd en utilisant les énergies et états propres d'un champ moyen déformé de Woods-Saxon. Ceci nous a montré que le système neutrons nécessite moins d'énergie en comparaison avec le système protons, pour passer de l'état supraconducteur à celui du gaz de Fermi, et ce pour les noyaux légers considérés : $^{30}_{14}$ Si, $^{46}_{22}$ Ti et $^{60}_{28}$ Ni. En revanche, nous observons la situation inverse pour les noyaux de masse intermédiaire : $^{142}_{60}$ Nd, $^{124}_{62}$ Sm et $^{146}_{64}$ Gd. De façon générale, le comportement des grandeurs thermodynamiques évaluées est identique à celui obtenu dans le modèle de Richardson. En conclusion, l'approche FTSBCS apporte des corrections aux valeurs des différentes grandeurs thermodynamiques évaluées par l'approche FTBCS dans l'état supraconducteur, alors qu'elle est en parfait accord avec cette dernière pour des températures supérieures à la température critique, autrement dit, dans l'état normal du gaz de Fermi. Notons cependant que ces résultats peuvent être grandement améliorés en utilisant l'approche FSBCS (projection après variation) qui est une méthode plus rigoureuse que son homologue PSBCS en lieu et place de cette dernière. Un autre chemin consisterait à reprendre les idées développées par certains auteurs, à savoir que la chute de la demi-largeur du gap ne doit pas s'effectuer de façon brutale comme le prévoit l'approche FTBCS, ainsi que l'utilisation de l'ensemble canonique dans le traitement des noyaux chauds avec restauration du bon nombre de particules, l'utilisation de l'ensemble canonique (où les systèmes n'échangent que l'énergie avec le « réservoir ») semble être plus approprié que l'ensemble grand canonique (qui autorise l'échange d'énergie mais également des particules avec le « réservoir »). en plus de l'approche FSBCS, qui dans des travaux antérieurs [59, 60], s'est révélée être le meilleur moyen pour restaurer la symétrie, relative au nombre de particules, brisée dans la théorie BCS.

Annexe Calcul des grandeurs statistiques

.1 Energie

A partir de l'expression (3.27) donnant Ω et en la dérivant par rapport à la température,

$$\Omega = -\beta E_n^0 + 2\sum_{\nu>0} Log(1 + e^{-\beta E_n^\nu})$$

on aboutit à :

Energie =
$$-\frac{\partial \left[LogZ\right]}{\partial \beta}\Big|_{\alpha=cste}$$

Energie =
$$-\frac{\partial\Omega}{\partial\beta}\Big|_{\alpha=cste}$$

= $\frac{\partial(\beta E_n^0)}{\partial\beta} + 2\sum_{\nu>0} \frac{\frac{\partial(\beta E_n^{\nu})}{\partial\beta}e^{-\beta E_n^{\nu}}}{1+e^{-\beta E_n^{\nu}}}$

où les expressions E_n^0 et E_n^ν sont données respectivement par :

$$E_n^0 = E_0 + E_{40}$$

 et

$$E_n^{\nu} = E_{\nu} + E_{40}^{\nu}$$

Il vient alors que :

$$\frac{\partial(\beta E_n^0)}{\partial\beta} = \frac{\partial(\beta E_0)}{\partial\beta} + \frac{\partial(\beta E_{40})}{\partial\beta}$$

 et

$$\frac{\partial(\beta E_n^{\nu})}{\partial\beta} = \frac{\partial(\beta E_{\nu})}{\partial\beta} + \frac{\partial(\beta E_{40}^{\nu})}{\partial\beta}$$

Où

$$\begin{aligned} \frac{\partial \left(\beta E_{40}\right)}{\partial \beta} &= E_{40} + \beta \frac{\partial E_{40}}{\partial \beta} \\ &= E_{40} + 2(n+1)C_n^2 G \left\{ \sum_{\eta,\gamma} 3u_\eta v_\gamma \left[u_\gamma^2 v_\eta^3 \frac{\partial u_\gamma}{\partial \beta} + u_\gamma^3 v_\eta^2 \frac{\partial v_\eta}{\partial \beta} \right] \\ &+ u_\gamma^3 v_\eta^3 \frac{\partial \left(u_\eta v_\gamma\right)}{\partial \beta} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k z_k^{-p} (z_k - 1)^2 \prod_{j \neq (\eta,\gamma)} (u_j^2 + z_k v_j^2) + c.c \right\} \\ &+ \sum_{\eta,\gamma} u_\gamma^3 u_\eta v_\eta^3 v_\gamma \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k z_k^{-p} (z_k - 1)^2 2 \sum_l^j (u_l \frac{\partial u_l}{\partial \beta} + z_k v_l \frac{\partial v_l}{\partial \beta}) \prod_{\substack{j \neq (\eta,\gamma) \\ j \neq l}} (u_j^2 + z_k v_j^2) + c.c \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial \left(\beta E_{40}^{\nu}\right)}{\partial \beta} &= E_{40}^{\nu} + \beta \frac{\partial E_{40}^{\nu}}{\partial \beta} \\ &= 2(n+1)C_n^2 G \left\{ \sum_{\eta,\gamma} 3u_\eta v_\gamma \left[u_\gamma^2 v_\eta^3 \frac{\partial u_\gamma}{\partial \beta} + u_\gamma^3 v_\eta^2 \frac{\partial v_\eta}{\partial \beta} \right] \\ &+ u_\gamma^3 v_\eta^3 \frac{\partial \left(u_\eta v_\gamma\right)}{\partial \beta} \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k z_k^{-p} (z_k - 1)^2 \prod_{j \neq (\nu, \eta, \gamma)} (u_j^2 + z_k v_j^2) + c.c \right\} \\ &+ \sum_{\eta,\gamma} u_\gamma^3 u_\eta v_\eta^3 v_\gamma \left\{ \sum_{k=0}^{n+1} \xi_k z_k^{-p} (z_k - 1)^2 2 \right\} \\ &= \sum_{l}^{j} (u_l \frac{\partial u_l}{\partial \beta} + z_k v_l \frac{\partial v_l}{\partial \beta}) \prod_{\substack{j \neq (\nu, \eta, \gamma) \\ j \neq l}} (u_j^2 + z_k v_j^2) + c.c \right\} \end{aligned}$$

Les tests numériques montrent que les termes $\frac{\partial E_{40}}{\partial \beta}$ et $\frac{\partial E_{40}^{\nu}}{\partial \beta}$ sont négligeables. Ceci conduit à :

$$\frac{\partial(\beta E_n^0)}{\partial\beta} = \frac{\partial(\beta E_0)}{\partial\beta} + E_{40}$$

de même :

$$\frac{\partial(\beta E_n^{\nu})}{\partial\beta} = \frac{\partial(\beta E_{\nu})}{\partial\beta} + E_{40}^{\nu}$$

On trouve alors

$$\begin{split} \text{Energie} &= \frac{\partial(\beta E_n^0)}{\partial \beta} + 2\sum_{\nu>0} \frac{\frac{\partial(\beta E_n^{\nu})}{\partial \beta} e^{-\beta E_n^{\nu}}}{1 + e^{-\beta E_n^{\nu}}} \\ &= E_{40} + \sum_{\nu>0} \left\{ \varepsilon_{\nu} - \frac{\partial(\beta E_{\nu})}{\partial \beta} + 2\frac{\frac{\partial(\beta E_{\nu})}{\partial \beta} + E_{40}^{\nu}}{1 + e^{\beta E_n^{\nu}}} \right\} + \frac{\Delta^2}{G} + \frac{2\beta}{G} \frac{\Delta \partial \Delta}{\partial \beta} \\ &= E_{40} + \sum_{\nu>0} \left\{ \varepsilon_{\nu} - \frac{\partial(\beta E_{\nu})}{\partial \beta} \left(1 - \frac{2}{1 + e^{\beta E_n^{\nu}}} \right) + 2\frac{E_{40}^{\nu}}{1 + e^{\beta E_n^{\nu}}} \right\} + \frac{\Delta^2}{G} + \frac{2\beta}{G} \frac{\Delta \partial \Delta}{\partial \beta} \\ &= E_{40} + \sum_{\nu>0} \left\{ \varepsilon_{\nu} - \left(\frac{(\varepsilon_{\nu} - \lambda) \varepsilon_{\nu}}{E_{\nu}} + \frac{\beta \frac{\Delta \partial \Delta}{\partial \beta}}{E_{\nu}} + \frac{\Delta^2}{E_{\nu}} \right) \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) + 2\frac{E_{40}^{\nu}}{1 + e^{\beta E_n^{\nu}}} \right\} \\ &+ \frac{\Delta^2}{G} + \frac{2\beta}{G} \frac{\Delta \partial \Delta}{\partial \beta} \\ &= E_{40} + \sum_{\nu>0} \left\{ \varepsilon_{\nu} \left(1 - \frac{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)}{E_{\nu}} \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) \right) + 2\frac{E_{40}^{\nu}}{1 + e^{\beta E_n^{\nu}}} \right\} \\ &+ \frac{\Delta^2}{G} - \sum_{\nu>0} \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) \frac{\Delta^2}{E_{\nu}} - \sum_{\nu>0} \frac{\beta \frac{\Delta \partial \Delta}{\partial \beta}}{E_{\nu}} \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) + \frac{2\beta}{G} \frac{\Delta \partial \Delta}{\partial \beta} \\ &= E_{40} + \sum_{\nu>0} \left\{ \varepsilon_{\nu} \left(1 - \frac{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)}{E_{\nu}} \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) \right) + 2\frac{E_{40}^{\nu}}{E_{\nu}} \right\} \\ &+ \Delta^2 \left(\frac{1}{G} - \sum_{\nu>0} \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) \frac{1}{E_{\nu}} \right) + \beta \frac{\Delta \partial \Delta}{\partial \beta} \left[\frac{2}{G} - \sum_{\nu>0} \frac{1}{E_{\nu}} \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) \right] \end{split}$$

En faisant l'approximation d'utiliser les équations du gap généralisées données par (3.20) et (3.21), on abouti à :

Energie =
$$E_{40} + \sum_{\nu>0} \left\{ \varepsilon_{\nu} \left(1 - \frac{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)}{E_{\nu}} \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) \right) + 2 \frac{E_{40}^{\nu}}{1 + e^{\beta E_n^{\nu}}} \right\} - \frac{\Delta^2}{G}$$

.2 Entropie

On prendra comme point de départ, l'expression donnant l'entropie (3.33) :

$$S = \Omega - \alpha N + \beta E$$

en remplacant les expressions (3.27), (3.21) et (3.31) dans (3.33), on trouve :

$$S = -\beta E_n^0 + 2 \sum_{\nu>0} Log(1 + e^{-\beta E_n^{\nu}}) -\lambda\beta \sum_{\nu>0} \left[1 - \frac{\varepsilon_{\nu} - \lambda}{E_{\nu}} \operatorname{th}(\frac{\beta E_{\nu}}{2}) \right] +\beta \sum_{\nu>0} \left\{ \varepsilon_{\nu} \left(1 - \frac{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)}{E_{\nu}} \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) \right) + E_{40}^{\nu} \left(1 - \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) \right) \right\} - \beta \frac{\Delta^2}{G} + \beta E_{40}$$

qu'on peut mettre sous la forme :

$$S = 2\sum_{\nu>0} Log(1 + e^{-\beta E_n^{\nu}}) + \sum_{\nu>0} (-\beta \varepsilon_{\nu} + \beta \lambda + \beta E_{\nu}) - \beta \frac{\Delta^2}{G} + \sum_{\nu>0} \left[-\lambda\beta + \lambda\beta \frac{\varepsilon_{\nu} - \lambda}{E_{\nu}} th(\frac{\beta E_{\nu}}{2}) \right] + \sum_{\nu>0} \left\{ \left(\beta \varepsilon_{\nu} - \frac{\beta \varepsilon_{\nu} (\varepsilon_{\nu} - \lambda)}{E_{\nu}} th(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) \right) + \beta E_{40}^{\nu} \left(1 - th(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) \right) \right\} - \beta \frac{\Delta^2}{G}$$

ce qui conduit à

$$\begin{split} S &= 2\sum_{\nu>0} Log(1+e^{-\beta E_n^{\nu}}) \\ &+ \sum_{\nu>0} \beta E_{\nu} - 2\beta \frac{\Delta^2}{G} \\ &-\beta \sum_{\nu>0} \left(\frac{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)^2}{E_{\nu}} \mathrm{th}(\frac{\beta E_{\nu}}{2}) \right) \\ &+ \sum_{\nu>0} \beta E_{40}^{\nu} \left(1 - \mathrm{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) \right) \end{split}$$

En ajoutant et retranchant Δ^2 dans le troisième terme

$$S = 2\sum_{\nu>0} Log(1 + e^{-\beta E_n^{\nu}}) + \sum_{\nu>0} \beta E_{\nu} - 2\beta \frac{\Delta^2}{G} -\beta \sum_{\nu>0} \left(\frac{(\varepsilon_{\nu} - \lambda)^2 + \Delta^2 - \Delta^2}{E_{\nu}} \operatorname{th}(\frac{\beta E_{\nu}}{2}) \right) + \sum_{\nu>0} \beta E_{40}^{\nu} \left(1 - \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2}) \right)$$

L'expression de l'entropie peut se mettre alors sous la forme suivante :

$$S = 2\sum_{\nu>0} Log(1 + e^{-\beta E_n^{\nu}})$$

+
$$\sum_{\nu>0} \beta E_{\nu} - 2\beta \frac{\Delta^2}{G}$$

-
$$\beta \sum_{\nu>0} E_{\nu} \operatorname{th}(\frac{\beta E_{\nu}}{2}) + \beta \Delta^2 \sum_{\nu>0} \frac{\operatorname{th}(\frac{\beta E_{\nu}}{2})}{E_{\nu}}$$

+
$$\sum_{\nu>0} \beta E_{40}^{\nu} \left(1 - \operatorname{th}(\frac{\beta E_n^{\nu}}{2})\right)$$

De même, en utilisant les équations du gap généralisées données par (3.20) et (3.21):

$$S = 2\sum_{\nu>0} Log(1 + e^{-\beta E_n^{\nu}}) + \beta \sum_{\nu>0} [E_{\nu} + E_{40}^{\nu}] \left(1 - \operatorname{th}(\frac{\beta E_{\nu}}{2})\right)$$
$$S = 2\sum_{\nu>0} Log(1 + e^{-\beta E_n^{\nu}}) + \beta \sum_{\nu>0} E_n^{\nu} \left(1 - \operatorname{th}(\frac{\beta E_{\nu}}{2})\right)$$

On about it finalement à l'expression suivante :

$$S = 2\sum_{\nu>0} Log(1 + e^{-\beta E_n^{\nu}}) + 2\beta \sum_{\nu>0} \frac{E_n^{\nu}}{1 + e^{\beta E_\nu}}$$

.3 Capacité calorifique

En ce qui concerne la capacité calorifique, elle est donnée par l'expression suivante :

$$C = -\beta \frac{dS}{d\beta}$$

le calcul de la dérivée conduit a l'expression suivante,

$$\frac{dS}{d\beta} = 2\sum_{\nu>0} \frac{\frac{\partial(-\beta E_n^{\nu})}{\partial\beta} \mathrm{e}^{-\beta E_n^{\nu}}}{(1 + \mathrm{e}^{-\beta E_n^{\nu}})} + 2\sum_{\nu>0} \frac{E_n^{\nu}}{1 + \mathrm{e}^{\beta E_\nu}} + 2\beta\sum_{\nu>0} \frac{\frac{\partial(E_n^{\nu})}{\partial\beta} \left(1 + \mathrm{e}^{\beta E_\nu}\right) - E_n^{\nu} \frac{\partial(\beta E_\nu)}{\partial\beta} \mathrm{e}^{\beta E_\nu}}{(1 + \mathrm{e}^{\beta E_\nu})^2}$$

ou encore à

$$\begin{aligned} \frac{dS}{d\beta} &= -2\sum_{\nu>0} \frac{E_n^{\nu}}{1 + \mathrm{e}^{\beta E_n^{\nu}}} - 2\beta \sum_{\nu>0} \frac{\frac{\partial E_n^{\nu}}{\partial \beta}}{1 + \mathrm{e}^{\beta E_n^{\nu}}} + 2\sum_{\nu>0} \frac{E_n^{\nu}}{1 + \mathrm{e}^{\beta E_\nu}} \\ &+ 2\beta \sum_{\nu>0} \frac{\frac{\partial (E_n^{\nu})}{\partial \beta} \left(1 + \mathrm{e}^{\beta E_\nu}\right) - E_n^{\nu} \frac{\partial (\beta E_\nu)}{\partial \beta} \mathrm{e}^{\beta E_\nu}}{\left(1 + \mathrm{e}^{\beta E_\nu}\right)^2} \\ &- \beta \frac{dS}{d\beta} = 2\beta^2 \sum_{\nu>0} \frac{E_n^{\nu} \left(E_\nu + \beta \frac{\partial (E_\nu)}{\partial \beta}\right) \mathrm{e}^{\beta E_\nu}}{\left(1 + \mathrm{e}^{\beta E_\nu}\right)^2} \end{aligned}$$

Sachant que :

$$\frac{\mathrm{e}^{\beta E_{\nu}}}{\left(1+\mathrm{e}^{\beta E_{\nu}}\right)^{2}} = \frac{\left(1+th\left(\frac{\beta E_{\nu}}{2}\right)\right)\left(1-th\left(\frac{\beta E_{\nu}}{2}\right)\right)}{4} = \frac{1}{4\mathrm{ch}^{2}\left(\frac{\beta E_{\nu}}{2}\right)}$$

En multipliant les deux membres de l'égalité par $-\beta,$ il vient que :

$$-\beta \frac{dS}{d\beta} = \frac{\beta^2}{2} \sum_{\nu>0} \frac{E_n^{\nu} \left(E_{\nu} + \beta \frac{\partial(E_{\nu})}{\partial\beta} \right)}{\operatorname{ch}^2 \left(\frac{\beta E_{\nu}}{2} \right)}$$

on trouve finalement :

$$C = \frac{1}{2} \sum_{\nu > 0} \frac{E_n^{\nu} \left[\beta^2 E_{\nu} + \beta^3 \frac{\partial(E_{\nu})}{\partial \beta} \right]}{\operatorname{ch}^2 \left(\frac{\beta E_{\nu}}{2} \right)}$$

Bibliographie

- [1] E. Teran, V. E. Oberacker and A. S. Umar, Phys. Rev. C67, 064314 (2003).
- [2] A. Blazkiewicz, V.E. Oberacker and A.S. Umar, Phys. Rev. C71, 054321 (2005).
- [3] K. Kaneko and M. Hasegawa, Phys. Rev. C72, 031302(R) (2005).
- [4] S. Kerrouchi, D. Mokhtari, N. H. Allal and M. Fellah, Int. J. Mod. Phys.E18, 141 (2009).
- [5] N. H. Allal, M. Fellah, M. R. Oudih and N. Benhamouda, Eur. Phys. JA27, S01 (2006).
- [6] J. Bardeen, L.N. Cooper and J.R. Schrieffer, Phys. Rev. 180, 1175 (1957).
- [7] A.Bohr, B.R.Mottelson and D.Pines, Phys. Rev.110, 936 (1958)
- [8] S.T. Belayev, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selsk. 31, 11 (1959).
- [9] M.R. Oudih, Thèse de Doctorat, (U.S.T.H.B 2003).
- [10] M. Fellah, N.H. Allal, M.R. Oudih and N. Benhamouda, Alg. Rev. Nucl. Sc. 2, 59 (1998).
- [11] N. Benhamouda, N.H. Allal, M. Fellah and M.R. Oudih, in Nuclear Structure, Proc. Conf. Bologna 2000-Structure of the Nucleus at the Dawn of the Century, Eds. G. C. Bonsignori and al, p.139 (World Scientific, Singapore, 2000).
- [12] N. Benhamouda, M.R. Oudih, N.H. Allal, and M. Fellah, Nucl. Phys. A690, 219 (2001).
- [13] M.R. Oudih, Thèse de Magister, (U.S.T.H.B 1999).
- [14] M. Fellah and T. F. Hammann, Phys. Rev. C20, 4 (1979).
- [15] M. Fellah, T. F. Hammann and D. E. Medjadi, Phys. Rev. C8, 5 (1973).
- [16] N. H. Allal and M. Fellah, Phys. Rev. C43, 2648 (1991).
- [17] M. R. Oudih, N. Benhamouda, N. H. Allal and M. Fellah, Acta Phys. Hung. A : Heav. Ion Phys.19, 217 (2004).

- [18] N. Benhamouda, M. R. Oudih, N. H. Allal and M. Fellah, Acta Phys. Hung. A : Heav. Ion Phys.19, 191 (2004).
- [19] N. Benhamouda, M. R. Oudih, N. H. Allal and M. Fellah, Nucl. Phys.A690, 219 (2001).
- [20] H.J. Lipkin, Ann. Phys. (N.Y.) 12, 425 (1960).
- [21] Y. Nogami, Phys. Rev., 134, B313 (1964).
- [22] Y. Nogami and I. J. Zucker, Nucl. Phys. 60, 203 (1964).
- [23] H.C. Pradhan, Y. Nogami and J. Law, Nucl. Phys. A201, 357 (1973).
- [24] P. Ring and P. Schuck, The Nuclear Many-Body Problem, Springer, New York (1980).
- [25] D.J. Rowe, Nuclear collective motion, Methuen, London (1970)
- [26] Y.R. Shimizu and R.A. Broglia, Nucl. Phys. A515, 38 (1990).
- [27] K. Hagino and G.F. Bertsch, Nucl. Phys. A679, 163 (2000).
- [28] M. Sambataro and N. Dinh Dang, Phys. Rev. C 59, 1422 (1999).
- [29] F. Simkovic, A.A. Raduta, M. Veselský, and Amand Faessler, Phys. Rev. C 61, 044319 (2000).
- [30] A. Rabhi, P. Schuck, R. Bennaceur, G. Chanfray, and J. Dukelsky, nucl-th/0106064;
 A.Rabhi, R. Bennaceur, G. Chanfray, P. Schuck, Phys.Rev. C 66, 064315 (2002).
- [31] N. Sandulescu, R. Rossignoli and R. J. Liotta, Phys. Rev. C61, 044317 (2000).
- [32] O. Civitarese, G. G. Dussel and R. P. J. Perazzo, Nucl. Phys. A404, 15 (1983).
- [33] L. G. Moretto, Phys. Lett. B35, 379. (1971).
- [34] L. G. Moretto, Nucl. Phys. A185, 145 (1972).
- [35] A. Goodman, Nucl. Phys. A352, 30. (1981).
- [36] N. H. Allal, M. Fellah, N. Benhamouda and M. R. Oudih, Phys. Rev C77, 054310 (2008).
- [37] M. Sano and S. Yamasaki, Prog. Theor. Phys. 29, 397 (1963).
- [38] N. Quang Hung and N. Dinh Dang, Phys. Rev C 79, 054328 (2009).
- [39] N. Quang Hung and N. Dinh Dang, Phys. Rev C81, 057302 (2010).
- [40] R.W. Richardson and N. Sherman, Nucl. Phys. 52, 221 (1964).

- [41] S. G. Nilsson and I. Ragnarsson, Shapes and Shells in Nuclear Structure, Cambridge University Press (1995).
- [42] R. Bengtsson, J. Dudek, W. Nazarewicz, and P Olanders, Physica scripta 39, 196.(1989).
- [43] C. C. Tannoudji, B. Diu et F. Laloe, Mécanique Quantique, Hermann, Paris (1977).
- [44] Z. Lojewski and J. Dudek, Acta Phys Pol. B29, 407 (1998).
- [45] O.Haxel, J. H. D. Jensen and H. E. Suess, Phys. Rev. 75, 1766 (1949); M. G. Mayer, Phys. Rev. 78, 16 (1950).
- [46] J. C. Parikh, Nucl. Phys. 63, 214 (1965).
- [47] A. L. Goodman, Phy. Rev. C60, 014311 (1999).
- [48] R. Capote and A. Gonzalez, Phys. Rev. C59, 6 (1999).
- [49] J. A. Sheikh, P. Ring, E. Lopes and R. Rossignoli, Phys. Rev. C66, 044318 (2002).
- [50] M. Kyotoku, Phys. Rev. C37, 5 (1987).
- [51] C. Ngô, H. Ngô, Physique Statistique, MASSON, Paris (1995)
- [52] A. Lagoutine, Eléments de statistique quantique, O.P.U, Alger (1985).
- [53] J-L. Hwang, J.Chi. Phys.3, 35 (1965).
- [54] N. H. Allal and M. Fellah, Phys. Rev. C48, 1656 (1993).
- [55] N. H. Allal and M. Fellah, Phys. Rev. C50, 1404 (1994).
- [56] F. Šimkovic, Ch. C. Moustakidis, L. Pacearescu and A. Faessler, Phys. Rev. C68, 054319 (2003).
- [57] G. Audi and A.H. Wapstra, Nucl. Phys. A595, 409 (1995).
- [58] M.Brack and P. Quentin, Phys. Lett. 52B, 159 (1974); P. Bonche, S.Levit and D. Vautherin, Nucl. Phys. A427, 278 (1984).
- [59] B. Siad, Thèse de Magister, (U.S.T.H.B 2004).
- [60] M. R. Oudih, M. Fellah, N. H. Allal et N. Benhamouda, Phys. Rev. C76, 047307 (2007).