

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



MEMOIRE

Présenté pour l'obtention du diplôme de **MAGISTER**

EN : PHYSIQUE

Spécialité : Physique Théorique des Basses et Moyennes Energies

Par : KADI Hocine

Thème

***Etude des noyaux chauds dans le cadre de
l'approche MBCS***

Soutenue publiquement le : 06 / 03 / 2012, Devant le jury composé de :

<i>Mlle. MELIANI Zohra</i>	<i>Professeur</i>	<i>à l'U.S.T.H.B</i>	<i>Présidente</i>
<i>Mlle. BENHAMOUDA Naziha</i>	<i>Maitre de Conférences (A)</i>	<i>à l'U.S.T.H.B</i>	<i>Directrice de Mémoire</i>
<i>Mr. OUDIH Mohamed Réda</i>	<i>Professeur</i>	<i>à l'U.S.T.H.B</i>	<i>Examineur</i>
<i>Mme. HAMICI Amel Hiba</i>	<i>Maitre de Conférences (A)</i>	<i>à l'U.S.T.H.B</i>	<i>Examinatrice</i>
<i>Mr. BOUZID Boualem</i>	<i>Maitre de Conférences (A)</i>	<i>à l'U.S.T.H.B</i>	<i>Examineur</i>

Table des matières

Introduction	4
1 Traitement des noyaux chauds par la méthode FTBCS	9
1.1 Introduction	9
1.2 Effet d'appariement	11
1.2.1 Hamiltonien en seconde quantification	11
1.2.2 La force d'appariement	11
1.2.3 Hamiltonien du système	12
1.3 La théorie BCS à température nulle	13
1.3.1 Transformation de Bogoliubov-Valatin	13
1.3.2 Equations du gap à température nulle	15
1.4 La théorie BCS à température finie	18
1.4.1 Opérateur densité et grand potentiel thermodynamique	19
1.4.2 Approximation des quasiparticules indépendantes QPI	20
1.4.3 Equations du gap à température finie	23
1.5 Grandeurs thermodynamiques et grande fonction de partition	26
1.5.1 L'entropie	26
1.5.2 L'énergie interne	27
1.5.3 La capacité calorifique	27
1.5.4 La grande fonction de partition	28
2 Traitement des noyaux chauds par le formalisme de l'intégrale fonctionnelle	30
2.1 Introduction	30

2.2	La grande fonction de partition	31
2.3	Transformation de Hubbard Stratonovich	34
2.4	Approximation du chemin statique	37
2.5	Diagonalisation de l'hamiltonien H''	38
2.6	Approximation du point de selle et équations du gap	45
2.7	Grandeurs thermodynamiques du système	46
3	Traitement des noyaux chauds par la méthode MBCS	49
3.1	Introduction	49
3.2	Brisure de symétries	50
3.2.1	Violation des relations unitaires	50
3.2.2	Brisure de symétrie liée à la non conservation du nombre de particules . .	53
3.3	Restauration des symétries brisées	55
3.3.1	La théorie MBCS à température finie	55
3.3.2	La méthode de Lipkin Nogami modifiée (MLN)	63
3.4	Grandeurs thermodynamiques et grande fonction de partition	68
3.4.1	L'entropie	69
3.4.2	L'énergie interne	69
3.4.3	La capacité calorifique	70
3.4.4	La grande fonction de partition	72
4	Resultats numériques et discussions	73
4.1	Le cas schématique	73
4.1.1	Le paramètre du gap	74
4.1.2	Energie interne	88
4.1.3	Capacité calorifique	89
4.1.4	Entropie	91
4.2	Le cas réaliste	94
4.2.1	Le paramètre du gap	95
4.2.2	Energie d'excitation	106
4.2.3	Capacité calorifique	107

4.2.4	Entropie	108
	Conclusion	116
	Annexe	119

Introduction

L'exploration intensive effectuée ces dernières années en physique nucléaire expérimentale, a rendue la physique nucléaire théorique très attractive, car elle lui permet une confrontation effective des modèles théoriques élaborés sur des hypothèses plus au moins étayées, avec des données expérimentales de plus en plus précises et nombreuses. Cette confrontation a pour but in fine de confirmer ou d'infirmer ces hypothèses, et ainsi améliorer considérablement les prévisions des modèles théoriques.

Les approches théoriques élaborées pour décrire le noyau atomique, s'articulent sur des modélisations, plus ou moins justifiées, des interactions entre les nucléons, une résolution approximative de l'équation de Schrödinger, puis une intégration des interactions dites résiduelles pour améliorer les prévisions des modèles. L'une des plus importantes, est sans doute, l'interaction d'appariement, qui permet aux fermions possédant des projections de spin opposées, de se condenser en formant des paires.

Cette interaction a été introduite historiquement, pour rendre compte de la phase supraconductrice des métaux à basse température, dans la théorie de Bardeen Cooper et Schrieffer (BCS)[1], puis étendue à la physique nucléaire pour expliquer les différences observées entre les spectres d'énergies des noyaux pair pairs, pair impairs et impair impairs, où on observe un gap entre l'état fondamental et les premiers états excités, de nature non collective, dans les noyaux pairs, ce qui n'est pas le cas des noyaux impairs.

Dans le noyau, on parle de la phase superfluide, un phénomène moins spectaculaire que celui de la supraconductivité, car contrairement aux électrons supraconducteurs qui sont très nombreux, et qui ont une masse très faible et obéissent à la force de coulomb, les nucléons qui s'apparient sont en petit nombre, appartiennent à une même couche ou sous couche du noyau,

sont beaucoup plus massifs et sont soumis essentiellement à l'interaction forte. Ce que les deux systèmes ont en commun, ce sont la statistique de Fermi-Dirac et la possibilité de réaliser un gain énergétique par l'appariement. Pour ces raisons, l'interaction d'appariement dans les noyaux reste encore mal déterminée, notamment dans le cas des noyaux chauds. La notion de noyau chaud, se heurte à deux problématiques fondamentales, l'une est d'ordre technique à savoir, comment amener un système fini à une température donnée, avec la possibilité de mesurer des grandeurs thermodynamiques habituellement définies pour les systèmes dits infinis. L'autre est une difficulté théorique, qui réside dans le choix de l'ensemble le plus approprié pour le traitement de ce genre de systèmes, à savoir microcanonique, canonique ou grand canonique[2].

L'ensemble microcanonique, considère le système comme fermé et isolé, dont l'énergie interne et le nombre de particules sont constants à une température donnée. Dans l'ensemble canonique, le système est plongé dans un réservoir avec lequel il est en équilibre thermique, il ne peut échanger avec le réservoir que de l'énergie, alors que le nombre de particules composant le système est conservé. Enfin dans l'ensemble grand canonique, le système échange de l'énergie et des particules avec le réservoir, ces deux dernières sont des grandeurs qui ne sont conservées qu'en moyenne.

Pour les faibles énergies d'excitations, le noyau peut être vu comme un système fermé et isolé avec une énergie et un nombre de particules inchangés. Toutefois, comme le système est fermé, l'ensemble microcanonique qui s'avère le plus approprié à l'étude de ce genre de système, pose un problème conceptuel inhérent, qui devient très compliqué à résoudre pour les systèmes finis possédant un petit nombre de particules. En effet l'énergie échangée avec l'appareil de mesure permettant de déterminer la température du système est du même ordre de grandeur que l'énergie d'excitation de ce dit système[3].

Expérimentalement, on obtient un noyau chaud, en faisant des collisions de noyaux de tailles comparables, ou en les faisant bombarder par exemple avec des neutrons ou des noyaux d' ^3He ou encore avec des particules α , et en se désexcitant il émet un rayonnement gamma. On extrait ensuite la densité de niveaux nucléaire, à partir du spectre des gammas. La densité de niveaux ainsi déterminée, permet de calculer les grandeurs thermodynamiques liées au système en utilisant les définitions de l'un ou de l'autre des ensembles définis plus haut.

Ces procédures expérimentales, suggèrent à priori qu'il est préférable de traiter les noyaux chauds dans le cadre de l'ensemble canonique, du moins, il offre l'avantage de permettre une classification des transitions de phases. S'appuyant sur la classification moderne, elle-même inspirée par celle d'Ehrenfest, deux types de transitions de phases sont principalement discutées dans la littérature. La première, dite transition de phase de première ordre, rapportée à une multi fragmentation du noyau à hautes énergies d'excitations[4][5], caractérisée par des branches négatives de la capacité calorifique, celle-ci n'est pas dérivée directement de l'énergie interne mais de la valeur moyenne des fluctuations de cette dernière. A la limite thermodynamique, ce phénomène peut être assimiler à une transition liquide gaz.

Le second type est la transition de phase de second ordre, correspondant au passage du noyau d'un état avec appariement à un autre sans, on parle alors de la transition de phase superfluide normal (SN). Ce type de transitions est étudié habituellement, dans le cadre de la théorie BCS à température finie FTBCS [6]-[8]. Les résultats de cette méthode, montrent un effondrement rapide du gap à une température caractéristique dite critique, reflétant une transition (SN) abrupte, et signalée par des discontinuités dans les courbes de la capacité calorifique. Des faits expérimentaux montrent que la capacité calorifique des métaux à basses températures présente effectivement ce comportement. Les études expérimentales récentes sur les nanoparticules et le noyau atomique montrent une forme lissée de la capacité, au lieu des discontinuités, appelée forme «S»[9].

L'explication de cette différence vient du fait que la théorie BCS brise la symétrie relative au nombre de particules, induisant ainsi des fluctuations quantiques, et à température finie la méthode FTBCS ne prend pas en compte les fluctuations d'origine statistique. L'ensemble de ces fluctuations disparaît quand le nombre de particules est très important, le cas des électrons de conduction dans les métaux, mais devient invalidant pour les systèmes finis comme les nanoparticules et le noyau atomique.

Les fluctuations quantiques ont comme origine le fait que l'état BCS n'est pas état propre de l'opérateur nombre de particules. Diverses techniques ont été développées pour conserver strictement ou approximativement le nombre de particules. Les plus utilisées sont par exemple la méthode Sharp BCS (SBCS)[10][11], celle de Lipkin Nogami (LN)[12]-[16], l'approximation de la phase aléatoire des quasiparticules (QRPA) [17]-[20], la méthode de la coordonnée génératrice

(GCM)[21].

L'élimination des fluctuations quantiques améliore considérablement les résultats de la théorie BCS à basses températures, mais s'avère insuffisante pour expliquer la persistance de l'appariement au delà de la température critique, et la transition de phase (SN) progressive non abrupte.

Moretto[22] en utilisant la théorie macroscopique des transitions de phases de Landau, montre en incluant les fluctuations statistiques au niveau macroscopique, que le paramètre gap persiste au-delà de la température critique. Goodman [23], en s'appuyant sur le formalisme d'Hartree Fock Bogoliubov (HFB), démontre que ce dernier et sa limite, la théorie BCS, négligent les fluctuations statistiques, causant ainsi l'effondrement du gap. Par la suite, d'innombrables travaux ont traité les fluctuations thermiques, et tous montrent une forme lissée de la capacité calorifique des noyaux atomiques, signature d'une transition de phase (SN) "douce". Citons la méthode du modèle en couches Monté Carlo (SMMC)[24]-[28], l'approximation du chemin statistique (SPA)[29]-[34], à qui on a apporté des modifications pour inclure les effets quantiques aux basses températures, dans le cadre des méthodes (NSPA)[36] et (RPA+SPA)[37]-[39], ou encore la théorie du champ moyen relativiste[40][41].

Récemment une nouvelle méthode a été proposée par Dinh Dang et al [42]-[47] pour inclure les effets statistiques au niveau microscopique, nommée HFB modifiée (MHFB), et sa limite BCS modifiée(MBCS). Intégrant l'analyse de Goodman du formalisme HFB, ses auteurs établissent une nouvelle transformation canonique dans laquelle ils ont inclu les effets thermiques. Cette méthode a été ensuite adaptée pour éliminer les fluctuations du nombre de particules en utilisant la méthode de Lipkin Nogami, dans le cadre de ce qu'ils appellent la méthode MLN[48].

Nous nous proposons dans le présent travail, de traiter les noyaux chauds dans le cadre des méthodes MBCS et MLN, ces méthodes servent à pallier aux défauts de la théorie BCS, en incluant les fluctuations quantiques et statistiques. Pour cela nous suivrons le plan suivant :

- Dans le premier chapitre, nous rappellerons la théorie BCS à température nulle, puis à température finie, avec laquelle on déterminera les équations du gap, ainsi que les grandeurs thermodynamiques définies dans l'ensemble grand canonique.
- Une méthode alternative du traitement des corrélations d'appariement, basée sur le formalisme de l'intégrale fonctionnelle sera exposée dans le second chapitre, dans le but de

montrer la nature des approximations introduites par la méthode FTBCS, et comment celle ci néglige les fluctuations d'origine quantique et statistique.

- Les symétries brisées dans le cadre de la théorie BCS, seront restaurées au moyen des méthodes MBCS et MLN, dans le chapitre 3. Les expressions des grandeurs thermodynamiques, seront aussi établies dans le cadre de ces nouvelles méthodes.
- Le dernier chapitre, sera consacré à la résolution numérique des équations du gap établies par les différentes méthodes à savoir FTBCS, MBCS, et MLN, et au calcul des grandeurs thermodynamiques. Ces calculs se feront dans un modèle schématique, puis dans le cas réaliste où on utilisera les énergies du champ moyen déformé de Wood Saxon. On conclura par une discussion des résultats et les perspectives très ouvertes des transitions de phases dans les noyaux chauds.

Chapitre 1

Traitement des noyaux chauds par la méthode FTBCS

1.1 Introduction

Des observations ont montré que les noyaux ayant un nombre de protons et (ou) de neutrons égal à 2, 8, 20, 28, 50, 82 et 126 présentent une plus grande stabilité comparés à leurs proches voisins. Depuis, on les nomme nombres magiques. En effet, on observe que si un noyau a un nombre magique de protons, il faut beaucoup d'énergie pour lui en extraire un, alors que si le noyau a un proton de plus, cette énergie de séparation est beaucoup moins importante.

L'existence de ces nombres fait naître l'idée que les états d'énergie des nucléons se groupent en couches, une situation semblable à celle de l'atome. On a tenté à partir de cette constatation de bâtir des modèles nucléaires similaires. L'hypothèse fondamentale de ces modèles est l'approximation de particules indépendantes, selon laquelle dans le noyau, les nucléons évoluent indépendamment les uns des autres sous l'influence d'un potentiel moyen qu'ils créent collectivement tels des électrons " tournant " autour du noyau sous l'effet d'un potentiel coulombien créé par les protons de ce dernier.

Ce champ moyen peut être déterminé soit d'une manière auto-cohérente (self-consistante), comme dans la méthode d'Hartree-Fock [1][17] ou bien à l'aide d'un potentiel phénoménologique du type de Nilsson [49] ou de Woods-Saxon [50] par exemple.

Dans ce type de méthodes en plus de la résolution du problème du champ moyen, on corrige

ce dernier par l'ajout de termes correctifs correspondant à des interactions résiduelles. Une des plus importantes est l'interaction d'appariement. On constate que les noyaux pair-pairs sont les plus stables contrairement aux noyaux impair-impairs. Aussi, on observe expérimentalement, un gap important dans les noyaux pair-pairs entre l'état fondamental et les premiers états excités ce qui n'est pas le cas des noyaux impairs.

La méthode de Bardeen, Cooper et Schrieffer (BCS) [1] est la méthode standard pour inclure les effets d'appariement dans le formalisme du champ moyen. Historiquement, cette méthode a été développée pour expliquer le phénomène de supraconductivité dans les métaux, ensuite elle a été adaptée au noyau atomique par Belayev [51], après que Bohr, Mottelson et Pines[52] ont suggéré l'hypothèse de la superfluidité des noyaux pour expliquer les effets d'appariement.

Pour rendre compte de la phase supraconductrice, d'un gaz d'électrons dans un métal, par exemple, il faut abaisser la température de ce dernier au-dessous d'une certaine température dite température critique T_c , à partir de laquelle les électrons vont être condensés sous l'effet de l'interaction résiduelle d'appariement. Un raisonnement analogue est tenu pour le noyau, à une différence près qu'on considère le noyau ayant "naturellement" une température absolue nulle. Cette hypothèse, permet d'introduire l'interaction d'appariement dans le hamiltonien du noyau, et de le traiter comme une interaction résiduelle.

Dans le présent chapitre, on se propose d'utiliser la théorie BCS pour traiter l'interaction d'appariement. Dans le cadre de cette approche, les équations du gap à température nulle seront établies. L'adaptation de cette théorie dans le cas des noyaux chauds sera considérée dans la seconde partie du chapitre.

La méthode BCS appliquée à ces systèmes, permet de les considérer comme des systèmes dont l'énergie et le nombre de particules sont conservées en moyenne, alors il s'avère intéressant d'intégrer cette méthode dans le formalisme de l'ensemble grand canonique.

Aussi les équations du gap à température finie FTBCS seront établies, ainsi que les expressions des grandeurs thermodynamiques liées au noyau : énergie interne, entropie, grande fonction de partition et capacité calorifique.

1.2 Effet d'appariement

1.2.1 Hamiltonien en seconde quantification

Dans la description du noyau atomique, le formalisme du champ moyen permet d'écrire le hamiltonien d'une espèce de nucléons (neutrons ou protons), comme l'addition d'un hamiltonien H_0 d'un ensemble de particules indépendantes interagissant avec un champ moyen, et d'une interaction résiduelle H_1 [21].

$$H = H_0 + H_1 \quad (1.1)$$

H_0 est le hamiltonien du champ moyen, il définit une base de représentation pour les états sur lesquels il est diagonal.

Dans le formalisme de la seconde quantification il s'écrit

$$H_0 = \sum_k \varepsilon_k a_k^+ a_k \quad (1.2)$$

où a_k^+ et a_k représentent respectivement les opérateurs de création et d'annihilation de l'état $|k\rangle$, et satisfont aux règles d'anticommutation des fermions :

$$\{a_k^+, a_j^+\} = \{a_k, a_j\} = 0, \forall k, j \quad (1.3)$$

$$\{a_k^+, a_j\} = \delta_{kj} \quad (1.4)$$

sur la même base, les termes de l'interaction résiduelle s'écrivent :

$$H_1 = \frac{1}{4} \sum_{klmn} \langle kl | H_1 | mn \rangle a_k^+ a_l^+ a_n a_m \quad (1.5)$$

où les $\langle kl | H_1 | mn \rangle$ sont les éléments de la matrice antisymétrique de l'interaction résiduelle.

1.2.2 La force d'appariement

Pour rendre compte de l'effet d'appariement, Belyaev [51] a introduit la notion d'interaction résiduelle entre deux états renversés l'un de l'autre par rapport au sens du temps[53]. Ceci

signifie simplement, que les nucléons qui s'apparient ont des projections de spin opposées.

Cette interaction est définie par ces éléments de matrice :

$$\langle kl | H_1 | mn \rangle = -4G \delta_{k\bar{l}} \delta_{m\bar{n}} \quad (1.6)$$

avec G constante positive dite d'appariement. Le signe moins signifie qu'elle est attractive.

1.2.3 Hamiltonien du système

Soit un système de particules identiques (neutrons ou protons) décrit par l'hamiltonien qui suit :

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1 \\ &= \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k + \frac{1}{4} \sum_{klmn} \langle kl | H_1 | mn \rangle a_k^\dagger a_l^\dagger a_n a_m \\ &= \sum_k \varepsilon_k a_k^\dagger a_k + \frac{1}{4} \sum_{klmn} (-4G \delta_{k\bar{l}} \delta_{m\bar{n}}) a_k^\dagger a_l^\dagger a_n a_m \\ &= \sum_k \varepsilon_k (a_k^\dagger a_k) - G \sum_{k,l>0} a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger a_{\bar{l}} a_l \end{aligned} \quad (1.7)$$

On considère également que H_0 est invariant par renversement du sens du temps, ce qui entraîne

$$\varepsilon_{\bar{k}} = \varepsilon_k$$

ce qui permet d'écrire l'hamiltonien définitif pour une espèce de nucléons :

$$H = \sum_{k>0} \varepsilon_k (a_k^\dagger a_k + a_{\bar{k}}^\dagger a_{\bar{k}}) - G \sum_{k,l>0} a_k^\dagger a_{\bar{k}}^\dagger a_{\bar{l}} a_l \quad (1.8)$$

Il s'agit à présent de trouver les états propres de cet hamiltonien, et qui doivent être en même temps états propres de l'opérateur nombre de particules N défini comme suit :

$$N = \sum_{k>0} (a_k^\dagger a_k + a_{\bar{k}}^\dagger a_{\bar{k}}) \quad (1.9)$$

Ce problème n'admet pas de solution exacte simple dans le cas le plus général, mais pour autant,

il a été résolu approximativement par Bardeen, Cooper et Schrieffer (BCS) [1] dans le cadre de la théorie de la supraconductivité, et adaptée à la physique nucléaire par Bohr, Mottelson et Pines [52].

1.3 La théorie BCS à température nulle

La théorie BCS repose sur le principe variationnel. On fait le choix d'un ensemble d'états propres $|\Psi\rangle$ de l'hamiltonien H , qui sont fonctions de paramètres variationnels déterminés en minimisant l'énergie du système calculée sur cette base.

L'inconvénient majeur de ces états est qu'ils ne sont pas états propres de l'opérateur nombre de particules.

Le nombre réel N_0 de particules n'est conservé qu'en moyenne :

$$\langle \Psi | N | \Psi \rangle = N_0 \quad (1.10)$$

Pour tenir compte de cette contrainte, on introduit un paramètre de Lagrange λ , ce qui nous permet d'établir l'hamiltonien auxiliaire H' avec :

$$H' = H - \lambda N \quad (1.11)$$

1.3.1 Transformation de Bogoliubov-Valatin

Afin de diagonaliser H' , Bogoliubov et Valatin ont défini les opérateurs α_ν^+ et α_ν , opérateurs de création et d'annihilation de quasiparticules qui sont combinaisons linéaires des opérateurs a_ν^+ et a_ν :

$$\begin{cases} \alpha_\nu = u_\nu a_\nu - v_\nu a_\nu^+ \\ \alpha_\nu^+ = u_\nu a_\nu^+ - v_\nu a_\nu \end{cases} \quad (1.12)$$

Les paramètres u_ν et v_ν sont des nombres réels, positifs et satisfont aux conditions suivantes : $u_{\tilde{\nu}} = u_\nu$ et $v_{\tilde{\nu}} = v_\nu ; \forall \nu$

D'autre part, les opérateurs α_ν^+ et α_ν étant encore des opérateurs de création et d'annihilation de fermions, ils satisfont aux mêmes relations d'anticommutation que a_ν^+ et a_ν :

$$\{\alpha_\nu^+, \alpha_\mu^+\} = \{\alpha_\nu, \alpha_\mu\} = 0, \forall \nu, \mu \quad (1.13)$$

$$\{\alpha_\nu^+, \alpha_\mu\} = \delta_{\nu\mu} \quad (1.14)$$

Cette transformation peut se mettre sous la forme matricielle suivante [21] :

$$\begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U^+ & V^+ \\ V^T & U^T \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix} = W^+ \begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix} \quad (1.15)$$

Où U et V sont des blocs de matrices (2×2) , correspondant aux états $|\nu\rangle$ et son renversé par rapport au sens du temps $|\tilde{\nu}\rangle$.

le symbole $(^T)$ dénote le transposé de la matrice, avec la propriété : $(U^T)^* = U^+$

le symbole $(^*)$ est le complexe conjugué.

avec les définitions de U et V suivantes [46] :

$$U_\nu = \begin{pmatrix} u_\nu & 0 \\ 0 & u_\nu \end{pmatrix} \quad (1.16)$$

$$V_\nu = \begin{pmatrix} 0 & v_\nu \\ -v_\nu & 0 \end{pmatrix} \quad (1.17)$$

Dans le formalisme de la théorie BCS, les paramètres u_ν et v_ν étant réels $U = U^*$ et $V = V^*$.

de manière explicite, la relation (1.15) peut se mettre pour les états $|\nu\rangle$, $|\tilde{\nu}\rangle$ sous la forme suivante :

$$\begin{pmatrix} \alpha_\nu \\ \alpha_{\tilde{\nu}} \\ \alpha_\nu^+ \\ \alpha_{\tilde{\nu}}^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} u_\nu & 0 & 0 & -v_\nu \\ 0 & u_\nu & v_\nu & 0 \\ 0 & -v_\nu & u_\nu & 0 \\ v_\nu & 0 & 0 & u_\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_\nu \\ a_{\tilde{\nu}} \\ a_\nu^+ \\ a_{\tilde{\nu}}^+ \end{pmatrix} = W_\nu^+ \begin{pmatrix} a_\nu \\ a_{\tilde{\nu}} \\ a_\nu^+ \\ a_{\tilde{\nu}}^+ \end{pmatrix}$$

W est donc unitaire :

$$W.W^+ = W^+.W = 1 \quad (1.18)$$

Et en particulier pour l'état $|\nu\rangle$:

$$u_\nu^2 + v_\nu^2 = 1 \quad (1.19)$$

On définit la transformation inverse :

$$\begin{cases} a_\nu = u_\nu \alpha_\nu + v_\nu \alpha_\nu^+ \\ a_\nu^+ = u_\nu \alpha_\nu^+ + v_\nu \alpha_\nu \end{cases} \quad (1.20)$$

Qu'on écrit sous sa forme matricielle comme suit :

$$\begin{pmatrix} a \\ a^+ \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} U & V^* \\ V & U^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^+ \end{pmatrix} = W \begin{pmatrix} \alpha \\ \alpha^+ \end{pmatrix} \quad (1.21)$$

On a défini ainsi une nouvelle représentation, appelée "représentation quasiparticules" dont le vide sera noté $|\Psi\rangle$, et sera déterminé au moyen de :

$$\alpha_\nu |\Psi\rangle = 0, \quad (\langle \Psi | \alpha_\nu^+ = 0) \quad \forall \nu \quad (1.22)$$

On établit $|\Psi\rangle$ par élimination de toutes les quasiparticules du vrai vide de particules $|0\rangle$:

$$|\Psi\rangle = \prod_{j>0} \alpha_j \alpha_j^+ |0\rangle \quad (1.23)$$

En tenant compte du fait que les états $|\Psi\rangle$ doivent être "orthonormalisés", on obtient :

$$|\Psi\rangle = \prod_{j>0} (u_j + v_j a_j^+ a_j^+) |0\rangle \quad (1.24)$$

1.3.2 Equations du gap à température nulle

L'hamiltonien auxiliaire H' s'écrit :

$$H' = \sum_{\nu>0} (\varepsilon_\nu - \lambda) (a_\nu^+ a_\nu + a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}) - G \sum_{\nu, \mu>0} a_\nu^+ a_\nu^+ a_{\bar{\mu}} a_\mu \quad (1.25)$$

On lui applique le théorème de Wick :

$$\begin{aligned}
H' = & \sum_{\nu > 0} (\varepsilon_\nu - \lambda) [a_\nu^{+\square} a_\nu + a_{\tilde{\nu}}^{+\square} a_{\tilde{\nu}} + : a_\nu^+ a_\nu : + : a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\nu}} :] \\
& - G \sum_{\nu, \mu > 0} a_\nu^{+\square} a_{\tilde{\nu}}^+ a_\mu^\square - a_\nu^{+\square} a_\mu^\square a_{\tilde{\nu}}^{+\square} + a_\nu^{+\square} a_\mu a_{\tilde{\nu}}^{+\square} a_\mu^\square \\
& + a_\nu^{+\square} a_{\tilde{\nu}}^+ : a_\mu^\square a_\mu : - a_\nu^{+\square} a_\mu^\square : a_{\tilde{\nu}}^+ a_\mu : + a_\nu^{+\square} a_\mu : a_{\tilde{\nu}}^+ a_\mu^\square : \\
& + : a_\nu^+ a_{\tilde{\nu}}^+ : a_\mu^\square a_\mu - : a_\nu^+ a_\mu^\square : a_{\tilde{\nu}}^{+\square} a_\mu + : a_\nu^+ a_\mu : a_{\tilde{\nu}}^{+\square} a_\mu^\square \\
& + : a_\nu^+ a_{\tilde{\nu}}^+ a_\mu^\square a_\mu :
\end{aligned} \tag{1.26}$$

Et en utilisant la transformation (1.20) on peut mettre l'hamiltonien H' sous cette forme :

$$H' = E'_0 + H_{11} + H_{20} + H_{02} + H_{22} + H_{30} + H_{03} + H_{40} + H_{04} \tag{1.27}$$

où E'_0 représente les termes complètement contractés.

$$E'_0 = 2 \sum_{\nu > 0} \left(\varepsilon_\nu - \lambda - \frac{G}{2} v_\nu^2 \right) v_\nu^2 - G \left(\sum_{\nu > 0} u_\nu v_\nu \right)^2 \tag{1.28}$$

Après un réarrangement adéquat, les différents termes H_{ij} avec i opérateur de création, j opérateur d'annihilation de quasiparticules sont donnés par [8],[43] :

$$H_{11} = \sum_{\nu} \left\{ (\varepsilon_\nu - \lambda - G v_\nu^2) (u_\nu^2 - v_\nu^2) + 2G u_\nu v_\nu \sum_{\mu} (u_\mu v_\mu) \right\} \hat{n}_\nu \tag{1.29}$$

$$H_{20} + H_{02} = \sum_{\nu > 0} \left[2 (\varepsilon_\nu - \lambda - G v_\nu^2) u_\nu v_\nu - G (u_\nu^2 - v_\nu^2) \left(\sum_{\mu > 0} u_\mu v_\mu \right) \right] (A_\nu^+ + A_\nu) \tag{1.30}$$

$$H_{22} = -G \sum_{\nu, \mu > 0} \{ (u_\nu^2 v_\mu^2 + v_\nu^2 u_\mu^2) A_\nu^+ A_\mu + u_\nu v_\nu u_\mu v_\mu (A_{\nu\mu}^+ A_{\nu\mu} + A_{\tilde{\nu}\tilde{\mu}}^+ A_{\tilde{\nu}\tilde{\mu}} + 2\hat{n}_{\tilde{\nu}} \hat{n}_{\tilde{\mu}}) \} \tag{1.31}$$

$$H_{31} + H_{13} = G \sum_{\nu, \mu > 0} (u_\nu^2 - v_\nu^2) u_\mu v_\mu \{ A_\nu^+ \hat{n}_\mu + A_\nu^+ \hat{n}_{\tilde{\mu}} + A_\nu \hat{n}_\mu + A_\nu \hat{n}_{\tilde{\mu}} \} \tag{1.32}$$

$$H_{40} + H_{04} = \sum_{\nu, \mu > 0} \frac{G}{2} (u_\nu^2 v_\mu^2 + u_\mu^2 v_\nu^2) \{A_\nu^+ A_\mu^+ + A_\nu A_\mu\} \quad (1.33)$$

avec :

$$\left\{ \begin{array}{l} \hat{n}_{\nu\mu} = \alpha_\nu^+ \alpha_\mu \\ A_{\nu\mu}^+ = \alpha_\nu^+ \alpha_\mu^+ \\ A_{\nu\mu} = \alpha_\mu \alpha_\nu \end{array} \right. \quad \text{et en particulier} \quad \left\{ \begin{array}{l} \hat{n}_\nu = \alpha_\nu^+ \alpha_\nu \\ A_\nu^+ = \alpha_\nu^+ \alpha_\nu^+ \\ A_\nu = \alpha_\nu \alpha_\nu \end{array} \right. \quad (1.34)$$

La première équation du gap s'obtient en minimisant la valeur moyenne de l'hamiltonien auxiliaire $\langle H' \rangle$ par rapport aux paramètres variationnels u_ν et v_ν avec comme condition de stationnarité :

$$\frac{\partial \langle H' \rangle}{\partial v_\nu} = \frac{\partial \langle H' \rangle}{\partial u_\nu} = 0. \quad \forall \nu \quad (1.35)$$

avec

$$\langle H' \rangle = E'_0 \quad (1.36)$$

car à $T = 0$, $|\Psi\rangle$ est le vide des quasiparticules et satisfait à l'équation (1.22)

on se retrouve avec les deux équations :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E'_0}{\partial v_\nu} = \frac{\partial E'_0}{\partial u_\nu} = 0. \forall \nu \\ u_\nu^2 + v_\nu^2 = 1 \implies \frac{\partial u_\nu}{\partial v_\nu} = -\frac{v_\nu}{u_\nu}. \forall \nu \end{array} \right. \quad (1.37)$$

après dérivation on trouve :

$$\left\{ \begin{array}{l} 2(\varepsilon_\nu - \lambda - G v_\nu^2) u_\nu v_\nu = \Delta (u_\nu^2 - v_\nu^2) \\ \Delta = G \sum_{\nu > 0} u_\nu v_\nu \end{array} \right. \quad \forall \nu \quad (1.38)$$

Qu'on résout afin de déterminer les expressions de u_ν et v_ν :

$$\left. \begin{matrix} u_\nu^2 \\ v_\nu^2 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2}{\sqrt{(\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2)^2 + \Delta^2}} \right] \quad (1.39)$$

Par ailleurs la condition de conservation du nombre de particules, qui permettra d'établir la seconde équation du gap s'écrit :

$$\begin{aligned} N &= \sum_{\nu>0} \{a_\nu^{+\square} a_\nu + a_{\tilde{\nu}}^{+\square} a_{\tilde{\nu}}\} \\ &= 2 \sum_{\nu>0} v_\nu^2 \end{aligned} \quad (1.40)$$

En remplaçant (1.39) dans (1.38) et (1.40) on trouve

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{2}{G} = \sum_{\nu>0} \frac{1}{E_\nu} \\ N = \sum_{\nu>0} \left(1 - \frac{\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2}{E_\nu} \right) \end{array} \right. \quad (1.41)$$

avec E_ν l'énergie d'une quasiparticule :

$$E_\nu = \sqrt{(\varepsilon_\nu - \lambda - Gv_\nu^2)^2 + \Delta^2} \quad (1.42)$$

1.4 La théorie BCS à température finie

Parler d'appariement dans les noyaux chauds, c'est habituellement introduire la température dans le formalisme de la BCS développé précédemment. Plusieurs méthodes, ont été historiquement exploitées. Nous allons adopter dans cette section une approche [23] utilisant les propriétés de la théorie BCS, à savoir que les états BCS $|\Psi\rangle$ ne sont ni états propres de l'hamiltonien ni de l'opérateur nombre de particules, les observables se rapportant à ces opérateurs étant conservées qu'en moyenne. Ainsi cette approche considère le noyau chaud comme un système thermodynamique ayant une énergie et un nombre de nucléons conservées en moyenne, ce type de systèmes est traité dans le cadre de l'ensemble grand canonique. On commencera par définir l'opérateur densité qui permet de calculer n'importe quelle grandeur thermodynamique en équilibre avec le système, puis on montrera qu'on est amené à faire l'approximation

des quasiparticules indépendantes pour rendre cet opérateur utilisable. Dans le cadre de cette approximation, les équations du gap à température finie, dites équations du gap FTBCS seront déduites.

1.4.1 Opérateur densité et grand potentiel thermodynamique

L'état d'un système thermodynamique traité dans le cadre de l'ensemble grand canonique est déterminé par la donnée de l'opérateur densité D . Cet opérateur, par définition, est hermitique défini positif et sa trace est égale à l'unité [23] :

$$Tr(D) = 1 \quad (1.43)$$

Où Tr dénote la trace.

A une température finie T , la condition pour laquelle le système est en équilibre thermique et du même fait détermine l'opérateur densité D , est donnée par la minimisation du grand potentiel Ω , qui est donnée par l'expression suivante [54] :

$$\Omega = E - TS - \lambda N_0 \quad (1.44)$$

Où E est l'énergie interne du système, S son entropie, N_0 le nombre moyen de particules dans le système, et λ est le potentiel chimique, sa valeur détermine alors le nombre moyen de particules à une température donnée.

Bien que l'hamiltonien H commute avec l'opérateur nombre de particules N , on admet que le nombre de particules peut fluctuer autour de sa valeur moyenne N_0 .

Pour des valeurs données de T et de λ , D est déterminé par l'équation fonctionnelle [23] :

$$\delta\Omega/\delta D = 0 \quad (1.45)$$

Cette dernière équation admet comme solution exacte :

$$D = Z^{-1} e^{[-\beta(H-\lambda N)]} \quad (1.46)$$

Avec

$$Z = Tr(e^{[-\beta(H-\lambda N)])} \quad (1.47)$$

Où Z est la grande fonction de partition, et $\beta = \frac{1}{T}$ l'inverse de la température.

L'opérateur densité D , permet de calculer la valeur moyenne de tout opérateur $\hat{O}$, définit pour le système :

$$\langle \hat{O} \rangle = Tr(D\hat{O}) \quad (1.48)$$

Et en particulier, l'énergie interne, l'entropie, et le nombre de particules sont définies par :

$$E = Tr(DH) \quad (1.49)$$

$$S = -Tr(D \ln D) \quad (1.50)$$

$$N_0 = Tr(DN) \quad (1.51)$$

Il est clair que tout calcul à partir de l'expression exacte de D , équation (1.46), dépend de la structure de l'hamiltonien H . En particulier, la forme de l'équation (1.8), montre que c'est difficile d'effectuer des calculs à partir de l'expression de D ainsi obtenue.

Pour y remédier, on choisira une forme approchée de l'hamiltonien, qui permettra d'obtenir une expression simple de D . Cette approximation, est l'approximation des quasiparticules indépendantes.

1.4.2 Approximation des quasiparticules indépendantes QPI

Cette approximation, consiste à considérer l'hamiltonien H' , comme celui d'un ensemble de quasiparticules indépendantes :

$$H - \lambda N \approx H_{QPI} = E_0 + \sum_{\nu} E_{\nu} \alpha_{\nu}^+ \alpha_{\nu} \quad (1.52)$$

où E_0 est l'énergie du vide de quasiparticules, E_{ν} est l'énergie d'une quasiparticule.

L'opérateur densité d'quasiparticules indépendantes est obtenu en substituant (1.52) dans (1.46) et (1.47) :

$$D_{QPI} = Z_{QPI}^{-1} \exp(-\beta \sum_{\nu} E_{\nu} \hat{n}_{\nu}) \quad (1.53)$$

et

$$Z_{QPI} = Tr \left[\exp(-\beta \sum_{\nu} E_{\nu} \hat{n}_{\nu}) \right] \quad (1.54)$$

avec

$$Tr(D_{QPI}) = 1 \quad (1.55)$$

La grande fonction de partition Z_{QPI} (1.54) est évaluée comme suit :

$$Z_{QPI} = \sum_{\{n_{\alpha}\}} \left\langle \{n_{\alpha}\} \left| \exp(-\beta \sum_{\nu} E_{\nu} \hat{n}_{\nu}) \right| \{n_{\alpha}\} \right\rangle \quad (1.56)$$

où $\{n_{\alpha}\}$ est une base complète des états nombre d'occupation de quasiparticules $n_1 n_2 n_3 \dots$. leurs seuls valeurs possibles sont 0 ou 1. L'expression (1.56) devient :

$$\begin{aligned} Z_{QPI} &= \prod_{\nu} \sum_{\{n_{\alpha}\}} \langle \{n_{\alpha}\} | \exp(-\beta E_{\nu} \hat{n}_{\nu}) | \{n_{\alpha}\} \rangle \\ &= \prod_{\nu} \sum_{n_{\nu}=0,1} \exp(-\beta E_{\nu} n_{\nu}) \\ &= \prod_{\nu} (1 + e^{-\beta E_{\nu}}) \end{aligned} \quad (1.57)$$

On remplace Z_{QPI} par la dernière expression et en développant les exponentielles on trouve :

$$D_{QPI} = \prod_{\nu} [n_{\nu} \hat{n}_{\nu} + (1 - n_{\nu})(1 - \hat{n}_{\nu})] \quad (1.58)$$

avec

$$n_{\nu} = \frac{1}{1 + e^{\beta E_{\nu}}} \quad (1.59)$$

Le facteur n_{ν} représente la distribution de Fermi-Dirac pour les fermions à une temperature donnée T.

L'énergie d'une quasiparticule E_ν qui apparait dans ce facteur est déterminée après résolution des équations du gap à température finie, qui seront établies par la suite.

L'expression de D ¹ équation (1.58) permet de calculer les valeurs moyennes suivantes :

$$q_{\nu\mu} = \langle \alpha_\mu^+ \alpha_\nu \rangle = Tr(D \alpha_\mu^+ \alpha_\nu) = n_\nu \delta_{\nu\mu} \quad (1.60)$$

et en particulier

$$\langle \hat{n}_\nu \rangle = Tr(D \hat{n}_\nu) = n_\nu \quad (1.61)$$

Le résultat de l'équation (1.60) définit la matrice densité d'une quasiparticule $q_{\nu\mu}$, par conséquent n_ν représente la probabilité d'occupation de cette quasiparticule d'énergie E_ν . A température nulle ($\beta \rightarrow \infty$) n_ν tend vers zéro, et $|\Psi\rangle$ représente le vide de quasiparticules.

On a aussi [8]

$$\langle A_\nu A_\mu^+ \rangle = Tr(D A_\nu A_\mu^+) = n_\nu^2 \delta_{\nu\mu} \quad (1.62)$$

$$\langle \hat{n}_\nu \hat{n}_\mu \rangle = 2n_\nu \delta_{\nu\mu} + (2n_\nu)^2 - 2n_\nu^2 \delta_{\nu\mu} \quad (1.63)$$

On définit en plus, le tenseur d'appariement d'une quasiparticule $t_{\nu\mu}$:

$$t_{\nu\mu} = \langle \alpha_\mu \alpha_\nu \rangle = Tr(D \alpha_\mu \alpha_\nu) \quad (1.64)$$

avec l'approximation (1.52) $t_{\nu\mu}$ est nulle

$$t_{\nu\mu} = 0 \quad (1.65)$$

De la même manière, on définit la matrice densité d'une particule $\rho_{\nu\mu}$ et le tenseur d'appariement d'une particule $\tau_{\nu\mu}$ comme

¹Dans la suite du chapitre on se placera dans le cas où D est un opérateur densité de quasiparticules indépendantes et pour des raisons de simplicité nous écrirons tout simplement D .

$$\rho_{\nu\mu} = \langle a_\mu^+ a_\nu \rangle = Tr(Da_\mu^+ a_\nu) \quad (1.66)$$

$$\tau_{\nu\mu} = \langle a_\mu a_\nu \rangle = Tr(Da_\mu a_\nu) \quad (1.67)$$

et en introduisant la transformation (1.20) :

$$\begin{aligned} \rho_{\nu\mu} &= \langle (u_\mu \alpha_\mu^+ + v_\mu \alpha_{\bar{\mu}}) (u_\nu \alpha_\nu + v_\nu \alpha_{\bar{\nu}}^+) \rangle \\ &= [v_\nu^2 + (u_\nu^2 - v_\nu^2) n_\nu] \delta_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (1.68)$$

à température nulle elle devient :

$$\rho_{0\nu\mu} = v_\nu^2 \delta_{\nu\mu} \quad (1.69)$$

De même,

$$\begin{aligned} \tau_{\nu\mu} &= \langle (u_\mu \alpha_\mu + v_\mu \alpha_\mu^+) (u_\nu \alpha_\nu + v_\nu \alpha_{\bar{\nu}}^+) \rangle \\ &= u_\nu v_\nu (1 - 2n_\nu) \delta_{\nu\mu} \end{aligned} \quad (1.70)$$

qui se réduit à température nulle :

$$\tau_{0\nu\mu} = u_\nu v_\nu \delta_{\nu\mu} \quad (1.71)$$

1.4.3 Equations du gap à température finie

A température finie, l'ensemble statistique d'excitations de quasiparticules prend place, et le vide $|\Psi\rangle$ de quasiparticules ne peut plus servir comme état de référence pour la définition des produits normaux. Le théorème de Wick n'est plus applicable pour eux, toutefois, il reste valable pour les valeurs moyennes [23].

On a montré que les valeurs moyennes (1.61), (1.62) et (1.63) ne sont pas nulles, ce qui amène à considérer la contribution de H_{11} et H_{22} [8], [23] et [55] :

$$E'(T) = \text{Tr}(DH') \quad (1.72)$$

$$\begin{aligned} &= \text{Tr} \left[D(E'_0 + H_{11} + H_{22}) \right] \\ &= 2 \sum_{\nu > 0} (\varepsilon_\nu - \lambda) (v_\nu^2 + (u_\nu^2 - v_\nu^2)n_\nu) - G \sum_{\nu > 0} [(v_\nu^2 + (u_\nu^2 - v_\nu^2)n_\nu)]^2 \\ &\quad - G \left[\sum_{\nu > 0} u_\nu v_\nu (1 - 2n_\nu) \right]^2 \end{aligned} \quad (1.73)$$

et en considérant les définitions (1.68),(1.70) et la définition suivante :

$$\Delta_T = G \sum_{\nu > 0} \tau_\nu \quad (1.74)$$

On peut mettre l'équation (1.73) sous la forme [46][47] :

$$\begin{aligned} E'(T) &= \text{Tr}(DH') \\ &= 2 \sum_{\nu > 0} \left[((\varepsilon - \lambda) - \frac{G}{2} \rho_\nu) \rho_\nu - \frac{1}{2} \Delta_T \tau_\nu \right] \end{aligned} \quad (1.75)$$

Dans la théorie BCS standard la contribution du potentiel $G\rho_\nu$, qui apporte la correction self-énergie $-G \sum_\nu v_\nu^4$ à l'énergie interne, est négligée [13]. On aboutit finalement à :

$$E'(T) = 2 \sum_{\nu > 0} (\varepsilon_\nu - \lambda) \rho_\nu - \frac{\Delta_T^2}{G} \quad (1.76)$$

$$= 2 \sum_{\nu > 0} (\varepsilon_\nu - \lambda) (v_\nu^2 + (u_\nu^2 - v_\nu^2)n_\nu) - \frac{\Delta_T^2}{G} \quad (1.77)$$

Ce dernier résultat permet l'établissement des équations du gap à température finie, en adoptant les même étapes qu'à température nulle, et avec la même condition de stationnarité (1.35),

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial E'(T)}{\partial v_\nu} = \frac{\partial E'(T)}{\partial u_\nu} = 0; \quad \forall \nu \\ u_\nu^2 + v_\nu^2 = 1 \implies \frac{\partial u_\nu}{\partial v_\nu} = -\frac{v_\nu}{u_\nu}; \quad \forall \nu \end{array} \right. \quad (1.78)$$

on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} 2(\varepsilon_\nu - \lambda)u_\nu v_\nu = \Delta_T(u_\nu^2 - v_\nu^2); \quad \forall \nu \\ \Delta_T = G \sum_{\nu > 0} u_\nu v_\nu (1 - 2n_\nu) \end{array} \right. \quad (1.79)$$

leur resolution donne :

$$\left. \begin{array}{l} u_\nu^2 \\ v_\nu^2 \end{array} \right\} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\varepsilon_\nu - \lambda}{\sqrt{(\varepsilon_\nu - \lambda)^2 + \Delta_T^2}} \right] \quad (1.80)$$

La condition de conservation du nombre de particules donnée par l'équation (1.51), devient :

$$\begin{aligned} N_0 &= \text{Tr}(DN) \\ &= 2 \sum_{\nu > 0} \rho_\nu \\ &= 2 \sum_{\nu > 0} (v_\nu^2 + (u_\nu^2 - v_\nu^2)n_\nu) \end{aligned} \quad (1.81)$$

Ainsi, lorsqu'on remplace les expressions de u_ν et v_ν (1.80) dans (1.79) et (1.81) on obtient :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{2}{G} = \sum_{\nu > 0} \frac{1}{E_\nu} \text{th}\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right) \\ N_0 = \sum_{\nu > 0} \left(1 - \frac{\varepsilon_\nu - \lambda}{E_\nu} \text{th}\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right)\right) \end{array} \right. \quad (1.82)$$

avec

$$E_\nu = \sqrt{(\varepsilon_\nu - \lambda)^2 + \Delta_T^2} \quad (1.83)$$

Les équations (1.82) représentent les équations du gap à température finie. Il apparait clairement

que pour $(T \rightarrow 0)$, ce qui revient à faire tendre $(\beta \rightarrow \infty)$, que l'on retrouve les équations du gap habituelles à $T = 0$ équations (1.41).

1.5 Grandeurs thermodynamiques et grande fonction de partition

1.5.1 L'entropie

L'entropie S d'un système est une grandeur qui permet de caractériser sa capacité à subir des transformations spontanées. Plus grande est la valeur de l'entropie, plus faible est sa capacité à se transformer. Le second principe de la thermodynamique précise que l'entropie d'un système fermé ne peut qu'augmenter au cours du temps. Cela signifie qu'en évoluant le système perd nécessairement de sa capacité à évoluer d'avantage. Un système fermé tend donc, naturellement, vers un état d'entropie maximale, dans lequel toute transformation spontanée lui deviendra impossible. L'entropie d'un système est donc une grandeur qui mesure le degré de désordre d'un système par rapport à son état initial.

Dans le cas présent, elle est définie par l'équation (1.50) , on a alors :

$$\begin{aligned}
S &= -\langle \ln D \rangle = -Tr(D \ln D) \\
&= -Tr \left[\left(\prod_{\nu} [n_{\nu} \hat{n}_{\nu} + (1 - n_{\nu})(1 - \hat{n}_{\nu})] \right) \ln \left(\prod_{\nu} [n_{\nu} \hat{n}_{\nu} + (1 - n_{\nu})(1 - \hat{n}_{\nu})] \right) \right] \\
&= - \sum_{\{n_{\alpha}\}} \left\langle \{n_{\alpha}\} \left| \left(\prod_{\nu} [n_{\nu} \hat{n}_{\nu} + (1 - n_{\nu})(1 - \hat{n}_{\nu})] \right) \sum_{\nu} \ln [n_{\nu} \hat{n}_{\nu} + (1 - n_{\nu})(1 - \hat{n}_{\nu})] \right| \{n_{\alpha}\} \right\rangle
\end{aligned} \tag{1.84}$$

la même considération sur les états $\{n_{\alpha}\}$ prise lors du calcul Z_{QPI} , est tenue pour le calcul de la trace précédente, et on aboutit au résultat suivant :

$$S = -2 \sum_{\nu \succ 0} [n_{\nu} \ln n_{\nu} + (1 - n_{\nu}) \ln(1 - n_{\nu})] \tag{1.85}$$

en remplaçant n_{ν} par son expression équation (1.59), on obtient :

$$S = 2 \sum_{\nu > 0} \left[\ln(1 + e^{-\beta E_\nu}) \right] + 2 \sum_{\nu > 0} \left[\frac{\beta E_\nu}{1 + e^{\beta E_\nu}} \right] \quad (1.86)$$

1.5.2 L'énergie interne

L'énergie interne d'un système est le contenu en énergie de ce système. Chaque système est une collection d'objets tels par exemple les nucléons. Ces particules sont toujours animées de mouvements incessants et aléatoires. A ces mouvements microscopiques des nucléons est associée de l'énergie cinétique. De plus, entre ces nucléons existe des forces d'interaction auxquelles on associe une énergie potentielle.

A l'échelle microscopique, l'énergie interne E du système est définie comme la somme des énergies cinétiques et potentielles de toutes les particules formant le système.

L'énergie interne de notre système est donnée par l'équation (1.49), qui se déduit des résultats précédents (1.73), en omettant le terme λN , on a :

$$\begin{aligned} E &= Tr(DH) \\ &= 2 \sum_{\nu > 0} \varepsilon_\nu \rho_\nu - \frac{\Delta_T^2}{G} \end{aligned} \quad (1.87)$$

$$= 2 \sum_{\nu > 0} \varepsilon_\nu (v_\nu^2 + (u_\nu^2 - v_\nu^2)n_\nu) - \frac{\Delta_T^2}{G} \quad (1.88)$$

après avoir remplacé par les équations (1.80), on a :

$$E = \sum_{\nu > 0} \varepsilon_\nu \left(1 - \frac{\varepsilon_\nu - \lambda}{E_\nu} th\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right) \right) - \frac{\Delta_T^2}{G} \quad (1.89)$$

1.5.3 La capacité calorifique

La capacité calorifique d'un corps est une grandeur permettant de quantifier la possibilité qu'a ce corps d'absorber ou de restituer de l'énergie par échange thermique au cours d'une transformation pendant laquelle sa température varie.

Elle est définie comme :

$$C = \frac{dE}{dT} = -\beta^2 \frac{dE}{d\beta} \quad (1.90)$$

$$= T \frac{dS}{dT} = -\beta \frac{dS}{d\beta} \quad (1.91)$$

Tout calcul fait, on trouve :

$$C = \frac{1}{2} \sum_{\nu > 0} \left\{ E_\nu \sec h^2\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right) \left(\beta^2 E_\nu + \beta^3 \frac{dE_\nu}{d\beta} \right) \right\} \quad (1.92)$$

avec

$$\frac{dE_\nu}{d\beta} = \frac{\Delta_T}{E_\nu} \frac{d\Delta_T}{d\beta} \quad (1.93)$$

et

$$\frac{d\Delta_T}{d\beta} = \frac{\frac{1}{2} \sum_{\nu > 0} \sec h^2\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right)}{\sum_{\nu > 0} \frac{\Delta_T}{E_\nu^3} th\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right) - \frac{1}{2} \sum_{\nu > 0} \frac{\Delta_T \beta}{E_\nu^2} \sec h^2\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right)} \quad (1.94)$$

1.5.4 La grande fonction de partition

La grande fonction de partition équation (1.47) est d'une importance capitale en physique statistique, elle permet de déterminer toutes les quantités thermodynamiques du système.

On définit son logarithme népérien par l'équation suivante :

$$\ln(Z) = \Phi = \ln \left[Tr(e^{[-\beta(H-\lambda N)])} \right] \quad (1.95)$$

Dans ce cas, on utilise une autre définition [54] :

$$\Phi = -\beta\Omega \quad (1.96)$$

où Ω est le grand potentiel défini par l'équation (1.44) et en remplaçant par les équations (1.89), (1.86) et (1.82) :

$$\begin{aligned}
\Phi &= -\beta(E - TS - \lambda N_0) \\
&= -\beta \left\{ \sum_{\nu > 0} \varepsilon_\nu \left(1 - \frac{\varepsilon_\nu - \lambda}{E_\nu} th\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right) \right) - \frac{\Delta_T^2}{G} \right. \\
&\quad \left. - \beta^{-1} \left(2 \sum_{\nu > 0} \left[\ln(1 + e^{-\beta E_\nu}) \right] + 2 \sum_{\nu > 0} \left[\frac{\beta E_\nu}{1 + e^{\beta E_\nu}} \right] \right) \right. \\
&\quad \left. - \lambda \left(\sum_{\nu > 0} \left(1 - \frac{\varepsilon_\nu - \lambda}{E_\nu} th\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right) \right) \right) \right\}
\end{aligned} \tag{1.97}$$

et après calcul on obtient :

$$\Phi = -\beta \sum_{\nu > 0} (\varepsilon_\nu - \lambda - E_\nu) + 2 \sum_{\nu > 0} \left[\ln(1 + e^{-\beta E_\nu}) \right] - \beta \frac{\Delta_T^2}{G} \tag{1.98}$$

Chapitre 2

Traitement des noyaux chauds par le formalisme de l'intégrale fonctionnelle

2.1 Introduction

Le formalisme du champ moyen développé dans l'étude du problème à N corps, a eu un retentissant succès. Il permet de traiter l'interaction d'appariement, rendant compte de la tendance des fermions à se grouper par paires (BCS)[1], comme une interaction résiduelle. Son application aux noyaux chauds permet d'établir les équations du gap dépendantes de la température[7][23], de concevoir un comportement microscopique des noyaux chauds en présence de l'appariement, et de déterminer l'évolution de cette interaction en fonction de la température.

Nous proposons dans ce chapitre, d'exposer une méthode alternative basée sur le formalisme de l'intégrale fonctionnelle. Ce formalisme a été développé par R.Feynman [56], à partir de l'opérateur d'évolution de la mécanique quantique, et en s'appuyant sur le principe de moindre action. Cette méthode a vu son domaine d'application s'étendre à tous les problèmes de la physique, et en particulier ceux de la physique nucléaire.

Pour le calcul de la grande fonction de partition, on fera appel à la transformation d'Hubbard Stratonovich [57] qui permet de remplacer l'interaction à deux corps, par l'interaction d'un corps

avec un champ externe dépendant de la température.

La difficulté de ce calcul sera résolue dans le cadre de l'approximation du chemin statique [58][59], qui nous permettra d'établir l'énergie libre du système, et qui sera évaluée ensuite au point de selle [7]. Ainsi les équations du gap et les grandeurs thermodynamiques liées au système seront établies.

2.2 La grande fonction de partition

Soit l'hamiltonien auxiliaire suivant :

$$H' = H'_0 + H_1 \quad (2.1)$$

avec :

$$H'_0 = \sum_{\nu} (\varepsilon_{\nu} - \lambda) a_{\nu}^{\dagger} a_{\nu} \quad (2.2)$$

et

$$H_1 = -G \sum_{\nu, \mu > 0} a_{\nu}^{\dagger} a_{\bar{\nu}}^{\dagger} a_{\bar{\mu}} a_{\mu} \quad (2.3)$$

La grande fonction de partition est définie par :

$$Z = Tr(e^{[-\beta H']}) \quad (2.4)$$

Où Tr dénote la trace :

Cette trace ne peut être calculée directement car H' n'est pas diagonale, pour cette raison on est amené à développer une méthode basée sur la théorie des perturbations.

Le terme qui cause la non diaganolisation de H' , est le terme à deux corps H_1 qui est présenté dans le formalisme du champ moyen comme une interaction résiduelle, et sera traité dans ce chapitre comme une perturbation.

Comme H'_0 et H_1 ne commutent pas, on ne peut les séparer sous forme de produit d'exponentielles, alors on est obligé de passer par une étape intermédiaire.

On commence par définir la matrice densité non normalisée $\rho_{H'}$ suivante :

$$\rho_{H'} = e^{(-\beta H')} \quad (2.5)$$

qu'on peut écrire comme

$$\begin{aligned} \rho_{H'} &= \rho_{H'_0} S(\beta) \\ &= e^{(-\beta H'_0)} S(\beta) \end{aligned} \quad (2.6)$$

avec :

$$S(\beta) = e^{(\beta H'_0)} e^{(-\beta H')} \quad (2.7)$$

La grande fonction de partition peut s'écrire maintenant :

$$Z = Tr \left\{ e^{(-\beta H'_0)} S(\beta) \right\} \quad (2.8)$$

soit alors :

$$Z = Tr \left\{ e^{(-\beta H'_0)} \right\} \frac{Tr \left\{ e^{(-\beta H'_0)} S(\beta) \right\}}{Tr \left\{ e^{(-\beta H'_0)} \right\}} \quad (2.9)$$

on a donc :

$$Z = Z_0 \langle S(\beta) \rangle_0 \quad (2.10)$$

avec :

$Z_0 = Tr \left\{ e^{(-\beta H'_0)} \right\}$ est la grande fonction de partition du système de particules indépendantes.

et $\langle S(\beta) \rangle_0 = \frac{Tr \left\{ e^{(-\beta H'_0)} S(\beta) \right\}}{Tr \left\{ e^{(-\beta H'_0)} \right\}}$ est la valeur moyenne de l'opérateur $S(\beta)$ dans l'ensemble grand canonique décrit par l'hamiltonien H'_0 .

L'équation d'évolution de $S(\beta)$, qui s'obtient par dérivation par rapport à β :

$$\begin{aligned}
\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta} &= H'_0 S(\beta) - e^{(\beta H'_0)} H' S(\beta) \\
&= e^{(\beta H'_0)} (H'_0 - H') e^{(-\beta H'_0)} S(\beta) \\
&= - \left(e^{(\beta H'_0)} H_1 e^{(-\beta H'_0)} \right) S(\beta)
\end{aligned} \tag{2.11}$$

avec

$$H_1(\beta) = e^{(\beta H'_0)} H_1 e^{(-\beta H'_0)} \tag{2.12}$$

qui n'est autre que la représentation de Heisenberg [60] de l'opérateur H_1 .

L'équation précédente devient :

$$\frac{\partial S(\beta)}{\partial \beta} = -H_1(\beta) S(\beta) \tag{2.13}$$

C'est une équation différentielle qu'on résoud par intégration entre 0 et β , avec la condition initiale $S(0) = 1$:

$$S(\beta) = 1 - \int_0^\beta H_1(\tau) S(\tau) d\tau \tag{2.14}$$

Où 1 est l'opérateur identité.

Tous calcul fait, on obtient ¹ :

$$S(\beta) = T_\tau \left\{ \exp \left[- \int_0^\beta H_1(\tau) d\tau \right] \right\} \tag{2.15}$$

Ce qui nous donne l'expression suivante :

$$\rho_{H'} = e^{(-\beta H'_0)} T_\tau \left\{ \exp \left[- \int_0^\beta H_1(\tau) d\tau \right] \right\} \tag{2.16}$$

Remplaçant à présent, l'intégrale sur τ par une sommation discrète, en partageant l'intervalle $[0, \beta]$ en M intervalles égaux, puis en faisant tendre M vers l'infini :

¹Pour le détail du calcul voir annexe

$$\int_0^\beta H_1(\tau) d\tau = \lim_{M \rightarrow \infty} \frac{\beta}{M} \sum_{i=1}^M H_1(\tau_i) \quad (2.17)$$

Tenant compte de (2.17), l'expression (2.16) devient :

$$\rho_{H'} = e^{(-\beta H'_0)} T_\tau \lim_{M \rightarrow \infty} \exp \left[-\frac{\beta}{M} \sum_{i=1}^M H_1(\tau_i) \right] \quad (2.18)$$

qui s'écrit également :

$$\rho_{H'} = e^{(-\beta H'_0)} T_\tau \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^M \exp \left[-\frac{\beta}{M} H_1(\tau_i) \right] \quad (2.19)$$

Par conséquent, la fonction de partition sera donnée par :

$$Z = Tr \left\{ e^{(-\beta H'_0)} T_\tau \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^M \exp \left[-\frac{\beta}{M} H_1(\tau_i) \right] \right\} \quad (2.20)$$

A présent, on se placera, dans le cas où H_1 est de la forme (2.3), une interaction résiduelle d'appariement.

$$H_1 = -G \sum_{\nu\mu>0} a_\nu^+ a_\nu^+ a_{\tilde{\mu}} a_\mu \quad (2.21)$$

en remplaçant (2.3) dans (2.20), on trouve :

$$Z = Tr \left\{ e^{(-\beta H'_0)} T_\tau \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^M \exp \left[\beta G \sum_{\nu\mu>0} \frac{a_\nu^+ a_\nu^+ a_{\tilde{\mu}} a_\mu}{M} \right] \right\} \quad (2.22)$$

2.3 Transformation de Hubbard Stratonovich

Comme on l'a signalé précédemment, le calcul de cette trace n'est pas possible à cause de H_1 qui n'est pas diagonal, toute fois ce problème est résolu par l'introduction de la transformation de Hubbard Stratonovich [57], qui permet de remplacer l'interaction à deux corps, par l'interaction d'un corps avec un champ externe :

$$e^{\theta^2} = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-\pi x^2 - 2\sqrt{\pi} x \theta} dx \quad (2.23)$$

Où θ est un opérateur hermitique et borné, et x est un champ externe.

On fera à présent, l'hypothèse que $H(\tau_i)$ figurant dans l'équation (2.20), peut se mettre sous la forme suivante :

$$H(\tau_i) = \theta_1(\tau_i)\theta_2(\tau_i) \quad (2.24)$$

Afin d'appliquer la transformation (2.23), il est nécessaire de réécrire l'équation précédente comme suit :

$$\theta_1\theta_2 = \frac{(\theta_1 + \theta_2)^2}{4} - \frac{(\theta_1 - \theta_2)^2}{4} \quad (2.25)$$

Avec la condition que les opérateurs θ_1 et θ_2 commutent, ce qui entraîne :

$$e^{-\frac{\theta_1\theta_2}{M}} = e^{-\frac{(\theta_1+\theta_2)^2}{4M}} e^{\frac{(\theta_1-\theta_2)^2}{4M}} \quad (2.26)$$

A partir de cette dernière équation, on peut appliquer la transformation de Hubbard Stratonovich pour chacun des deux termes, en introduisant deux champs externes, $x(\tau_i)$ et $y(\tau_i)$ associés respectivement aux termes $\left[(\theta_1 - \theta_2)^2\right]$ et $\left[(\theta_1 + \theta_2)^2\right]$, ainsi :

$$e^{\frac{(\theta_1(\tau_i) - \theta_2(\tau_i))^2}{4M}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dx_i e^{-\pi x_i^2} e^{-\sqrt{\frac{\pi}{M}} x_i (\theta_1(\tau_i) - \theta_2(\tau_i))} \quad (2.27)$$

et

$$e^{-\frac{(\theta_1(\tau_i) + \theta_2(\tau_i))^2}{4M}} = \int_{-\infty}^{+\infty} dy_i e^{-\pi y_i^2} e^{-i\sqrt{\frac{\pi}{M}} y_i (\theta_1(\tau_i) + \theta_2(\tau_i))} \quad (2.28)$$

On fait les changements de variables suivants : $X_i = \sqrt{M}x_i$ et $Y_i = \sqrt{M}y_i$ qu'on remplace dans les équations (2.27) et (2.28) respectivement, et on aboutit à :

$$e^{\frac{(\theta_1(\tau_i) - \theta_2(\tau_i))^2}{4M}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dX_i}{\sqrt{M}} e^{-\pi \frac{X_i^2}{M}} e^{-\frac{\sqrt{\pi}}{M} X_i (\theta_1(\tau_i) - \theta_2(\tau_i))} \quad (2.29)$$

et

$$e^{-\frac{(\theta_1(\tau_i) + \theta_2(\tau_i))^2}{4M}} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dY_i}{\sqrt{M}} e^{-\pi \frac{Y_i^2}{M}} e^{-i\frac{\sqrt{\pi}}{M} Y_i (\theta_1(\tau_i) + \theta_2(\tau_i))} \quad (2.30)$$

On substitue ces deux dernières équations dans l'expression de Z (2.20) :

$$Z = Tr \left\{ e^{(-\beta H'_0)} T_\tau \left[\lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^M \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dX_i}{\sqrt{M}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dY_i}{\sqrt{M}} e^{-\frac{\pi\beta}{M}(X_i^2+Y_i^2)} e^{-\frac{\sqrt{\pi}\beta}{M}[(X_i+iY_i)\theta_1(\tau_i)-(X_i-iY_i)\theta_2(\tau_i)]} \right] \right\} \quad (2.31)$$

Pour alléger cette expression, on introduit l'écriture symbolique suivante :

$$\int DX = \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^M \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dX_i}{\sqrt{M}} \quad (2.32)$$

et

$$\int DY = \lim_{M \rightarrow \infty} \prod_{i=1}^M \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dY_i}{\sqrt{M}} \quad (2.33)$$

On porte (2.32) et (2.33) dans (2.31), et on remplace les sommations discrètes par des intégrales continues, l'équation (2.31) se réduit à :

$$Z = Tr \left\{ e^{(-\beta H'_0)} \int DX DY e^{-\frac{\pi\beta}{M}(X_i^2+Y_i^2)} T_\tau \left[e^{-\frac{\sqrt{\pi}\beta}{M}[(X_i+iY_i)\theta_1(\tau_i)-(X_i-iY_i)\theta_2(\tau_i)]} \right] \right\} \quad (2.34)$$

Cette équation devient, en introduisant le champ complexe :

$$z(\tau) = X(\tau) + iY(\tau) \quad (2.35)$$

avec

$$\int Dz = \int DX DY \quad (2.36)$$

et

$$z^2(\tau) = X^2(\tau) + Y^2(\tau) \quad (2.37)$$

comme suit :

$$Z = Tr \left\{ e^{(-\beta H'_0)} \int Dz e^{-\pi\beta z^2(\tau)} T_\tau \left[e^{-\int_0^\beta d\tau \sqrt{\pi} [z(\tau)\theta_1(\tau_i) - z^*(\tau)\theta_2(\tau_i)]} \right] \right\} \quad (2.38)$$

L'équation (2.38) est une intégrale fonctionnelle représentant la fonction de partition d'un système à particules indépendantes interagissant avec un champ complexe $z(\tau)$.

2.4 Approximation du chemin statique

L'intégrale figurant dans l'équation (2.38) porte sur l'ensemble des fonctions $z(\tau)$. Le calcul de la fonction de partition Z serait donc exact, si l'on tient compte de toutes les fonctions complexes $z(\tau)$. Cependant, vu la complexité des calculs, il est nécessaire d'utiliser certaines approximations, notamment l'approximation du chemin statique [20][21], qui consiste à supposer que les champs $X(\tau)$ et $Y(\tau)$ et par conséquent $z(\tau)$ sont indépendantes du paramètre τ .

Ceci simplifie considérablement le calcul de la fonction de partition qui devient ainsi :

$$Z = Tr \left\{ e^{(-\beta H'_0)} \int Dz e^{-\pi\beta |z|^2} \left[e^{-\beta \sqrt{\pi} [z\theta_1 - z^*\theta_2]} \right] \right\} \quad (2.39)$$

Pour une interaction du type (2.3), on écrit les opérateurs θ_1 et θ_2 comme suit :

$$\theta_1 = -\sqrt{G} \sum_{\nu > 0} a_\nu^+ a_\nu^+ \quad (2.40)$$

et

$$\theta_2 = \sqrt{G} \sum_{\nu > 0} a_{\bar{\nu}} a_\nu \quad (2.41)$$

soit, alors :

$$Z = \int Dz e^{-\pi\beta |z|^2} Tr \left\{ e^{\left(-\beta H'_0 + \beta \sqrt{\pi G} \sum_{\nu > 0} (z a_\nu^+ a_\nu^+ + z^* a_{\bar{\nu}} a_\nu) \right)} \right\} \quad (2.42)$$

qui peut s'écrire également :

$$Z = \int Dz e^{-\pi\beta|z|^2} \text{Tr} \left\{ e^{-\beta H^n} \right\} \quad (2.43)$$

avec

$$H'' = H'_0 - \sqrt{\pi G} \sum_{\nu>0} (z a_\nu^+ a_{\tilde{\nu}}^+ + z^* a_{\tilde{\nu}} a_\nu) \quad (2.44)$$

2.5 Diagonalisation de l'hamiltonien H''

Dans le but de calculer la trace figurant dans l'équation (2.43), on est amené à diagonaliser l'hamiltonien H'' [61][62] :

$$H'' = \sum_{\nu>0} \tilde{\varepsilon}_\nu (a_\nu^+ a_\nu + a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\nu}}) - \sqrt{\pi G} \sum_{\nu>0} (z a_\nu^+ a_{\tilde{\nu}}^+ + z^* a_{\tilde{\nu}} a_\nu) \quad (2.45)$$

pour ce faire, on définit les opérateurs vectoriels suivants :

$$\varphi_\nu^+ = (a_\nu^+, -a_{\tilde{\nu}}) \quad ; \quad \varphi_\nu^- = \begin{pmatrix} a_\nu \\ -a_{\tilde{\nu}}^+ \end{pmatrix} \quad (2.46)$$

et la matrice :

$$A(\nu) = \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon}_\nu & \sqrt{\pi G} z \\ \sqrt{\pi G} z^* & -\tilde{\varepsilon}_\nu \end{pmatrix} \quad (2.47)$$

On a :

$$\begin{aligned} \varphi_\nu^+ A(\nu) \varphi_\nu^- &= (a_\nu^+, -a_{\tilde{\nu}}) \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon}_\nu & \sqrt{\pi G} z \\ \sqrt{\pi G} z^* & -\tilde{\varepsilon}_\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_\nu \\ -a_{\tilde{\nu}}^+ \end{pmatrix} \\ &= \tilde{\varepsilon}_\nu (a_\nu^+ a_\nu + a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\nu}}) - \sqrt{\pi G} (z a_\nu^+ a_{\tilde{\nu}}^+ + z^* a_{\tilde{\nu}} a_\nu) - \tilde{\varepsilon}_\nu \end{aligned} \quad (2.48)$$

Ainsi :

$$H'' = \sum_{\nu \succ 0} [\varphi_\nu^+ A(\nu) \varphi_\nu^- + \tilde{\varepsilon}_\nu] \quad (2.49)$$

Et en le remplaçant dans la seconde partie de Z , l'équation (2.44) :

$$Tr \left\{ e^{-\beta H''} \right\} = e^{-\beta \sum_{\nu \succ 0} \tilde{\varepsilon}_\nu} Tr \left\{ e^{-\beta \sum_{\nu \succ 0} [\varphi_\nu^+ A(\nu) \varphi_\nu^-]} \right\} \quad (2.50)$$

Afin de calculer cette dernière trace, qui est par principe indépendante de la base utilisée, on a à choisir la base qui diagonalise la matrice $A(\nu)$, en procédant comme suit :

Les valeurs propres sont obtenues en résolvant le déterminant suivant :

$$\det (A(\nu) - \mu I) = 0 \quad (2.51)$$

soit :

$$\begin{vmatrix} \tilde{\varepsilon}_\nu - \mu & \sqrt{\pi G} z \\ \sqrt{\pi G} z^* & -\tilde{\varepsilon}_\nu - \mu \end{vmatrix} = 0 \quad (2.52)$$

qui implique :

$$-(\tilde{\varepsilon}_\nu - \mu)(\tilde{\varepsilon}_\nu + \mu) - \pi G z z^* = 0$$

et

$$\mu^2 = \tilde{\varepsilon}_\nu^2 + \pi G |z|^2 \quad (2.53)$$

et les solutions de cette équation sont :

$$\mu_1 = \sqrt{\tilde{\varepsilon}_\nu^2 + |\Delta|^2} = E_\nu \quad (2.54)$$

$$\mu_2 = -\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\nu^2 + |\Delta|^2} = -E_\nu \quad (2.55)$$

où :

$$|\Delta|^2 = \pi G |z|^2 \quad (2.56)$$

Passant, aux vecteurs propres de la matrice $A(\nu)$ correspondant aux valeurs propres précédentes :

Soit $V_1 = \begin{pmatrix} x_\nu \\ y_\nu \end{pmatrix}$ le vecteur propre normalisé, associé à la valeur propre E_ν , et qui satisfait aux relations :

$$|x_\nu|^2 + |y_\nu|^2 = 1 \quad (2.57)$$

et

$$A(\nu)V_1 = E_\nu V_1 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon}_\nu & \Delta \\ \Delta^* & -\tilde{\varepsilon}_\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_\nu \\ y_\nu \end{pmatrix} = E_\nu \begin{pmatrix} x_\nu \\ y_\nu \end{pmatrix} \quad (2.58)$$

Ce qui conduit au système d'équations suivant :

$$\begin{cases} (E_\nu - \tilde{\varepsilon}_\nu) x_\nu = \Delta y_\nu \\ (E_\nu + \tilde{\varepsilon}_\nu) y_\nu = \Delta^* x_\nu \end{cases} \quad (2.59)$$

Dont on tire :

$$y_\nu = \frac{(E_\nu - \tilde{\varepsilon}_\nu)}{\Delta} x_\nu \quad (2.60)$$

et en tenant compte de la relation (2.57), on trouve :

$$|x_\nu| = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\tilde{\varepsilon}_\nu}{E_\nu} \right)} \quad (2.61)$$

La composante x_ν du vecteur V_1 s'écrit donc, en posant :

$$u_\nu = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 + \frac{\tilde{\varepsilon}_\nu}{E_\nu} \right)} \quad (2.62)$$

$$x_\nu = u_\nu e^{i\varphi_\nu} \quad (2.63)$$

Le module de la composante y_ν se déduit directement :

$$|y_\nu|^2 = 1 - |x_\nu|^2 \quad (2.64)$$

et ainsi :

$$|y_\nu| = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tilde{\varepsilon}_\nu}{E_\nu} \right)} \quad (2.65)$$

y_ν se déduit de l'équation (2.60), en remplaçant Δ par : $\Delta = |\Delta| e^{i\alpha}$, on trouve :

$$y_\nu = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tilde{\varepsilon}_\nu}{E_\nu} \right)} e^{i(\varphi_\nu - \alpha)} \quad (2.66)$$

En posant le module de y_ν :

$$|y_\nu| = v_\nu = \sqrt{\frac{1}{2} \left(1 - \frac{\tilde{\varepsilon}_\nu}{E_\nu} \right)} \quad (2.67)$$

Le vecteur V_1 s'écrit :

$$V_1 = \begin{pmatrix} u_\nu e^{i\varphi_\nu} \\ v_\nu e^{i(\varphi_\nu - \alpha)} \end{pmatrix} \quad (2.68)$$

On procédera de la même manière avec le second vecteur propre $V_2 = \begin{pmatrix} x'_\nu \\ y'_\nu \end{pmatrix}$ associé à la valeur propre $(-E_\nu)$, avec les deux conditions :

$$x_\nu'^2 + y_\nu'^2 = 1 \quad (2.69)$$

$$A(\nu)V_2 = -E_\nu V_2 \Leftrightarrow \begin{pmatrix} \tilde{\varepsilon}_\nu & \Delta \\ \Delta^* & -\tilde{\varepsilon}_\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x'_\nu \\ y'_\nu \end{pmatrix} = -E_\nu \begin{pmatrix} x'_\nu \\ y'_\nu \end{pmatrix} \quad (2.70)$$

Ce qui conduit au système d'équations :

$$\begin{cases} (E_\nu + \tilde{\varepsilon}_\nu) x'_\nu = -\Delta y'_\nu \\ (\tilde{\varepsilon}_\nu - E_\nu) y'_\nu = \Delta^* x'_\nu \end{cases} \quad (2.71)$$

On remarque que si x'_ν est remplacé par y_ν et y'_ν par $-x_\nu$ dans le système (2.71). On retombe sur le système (2.59), et par conséquent le vecteur V_2 se déduit directement du vecteur V_1 :

$$V_2 = \begin{pmatrix} v_\nu e^{i(\varphi_\nu - \alpha)} \\ -u_\nu e^{i\varphi_\nu} \end{pmatrix} \quad (2.72)$$

On exprime maintenant la matrice $A(\nu)$ en fonction de sa matrice diagonale :

$$A(\nu) = T_\nu^{-1} D(\nu) T_\nu \quad (2.73)$$

où

$$D(\nu) = \begin{pmatrix} E_\nu & 0 \\ 0 & -E_\nu \end{pmatrix} \quad (2.74)$$

et

$$T_\nu = \begin{pmatrix} u_\nu e^{i\varphi_\nu} & v_\nu e^{i(\varphi_\nu - \alpha)} \\ v_\nu e^{i(\varphi_\nu - \alpha)} & -u_\nu e^{i\varphi_\nu} \end{pmatrix} \quad (2.75)$$

Pour retrouver les équations du gap habituelles, posons $\varphi_\nu = 0$ et $\alpha = 0$. La matrice T_ν devient alors :

$$T_\nu = \begin{pmatrix} u_\nu & v_\nu \\ v_\nu & -u_\nu \end{pmatrix} \quad (2.76)$$

On calcule alors :

$$\varphi_\nu^+ A(\nu) \varphi_\nu^- = \varphi_\nu^+ T_\nu^{-1} D(\nu) T_\nu \varphi_\nu^- \quad (2.77)$$

$$= (a_\nu^+, -a_{\tilde{\nu}}) \begin{pmatrix} u_\nu & v_\nu \\ v_\nu & -u_\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} E_\nu & 0 \\ 0 & -E_\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\nu & v_\nu \\ v_\nu & -u_\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_\nu \\ -a_{\tilde{\nu}}^+ \end{pmatrix} \quad (2.78)$$

$$= (u_\nu a_\nu^+ - v_\nu a_{\tilde{\nu}}^- ; v_\nu a_\nu^+ + u_\nu a_{\tilde{\nu}}^-) \begin{pmatrix} E_\nu & 0 \\ 0 & -E_\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} u_\nu a_\nu - v_\nu a_{\tilde{\nu}}^+ \\ v_\nu a_\nu + u_\nu a_{\tilde{\nu}}^+ \end{pmatrix} \quad (2.79)$$

La dernière équation nous permet de définir la transformation unitaire suivante :

$$\begin{cases} \alpha_\nu^+ = u_\nu a_\nu^+ - v_\nu a_{\tilde{\nu}}^- \\ \alpha_\nu = u_\nu a_\nu - v_\nu a_{\tilde{\nu}}^+ \end{cases} \quad (2.80)$$

Les opérateurs α_ν^+ et α_ν ne sont autres que les opérateurs de création et d'annihilation de quasiparticules. La transformation (2.80) n'est autre que celle de Bogoliubov-Valatin, définie au chapitre précédent équations (1.12).

On peut mettre l'équation (2.77) comme suit :

$$\begin{aligned} \varphi_\nu^+ A(\nu) \varphi_\nu^- &= \varphi_\nu^+ T_\nu^{-1} D(\nu) T_\nu \varphi_\nu^- \\ &= \Psi_\nu^+ D(\nu) \Psi_\nu^- \end{aligned} \quad (2.81)$$

avec :

$$\Psi_\nu^+ = (\alpha_\nu^+ ; \alpha_{\tilde{\nu}}^-) \quad (2.82)$$

et

$$\Psi_\nu^- = \begin{pmatrix} \alpha_\nu \\ \alpha_{\tilde{\nu}}^+ \end{pmatrix} \quad (2.83)$$

On remplace les expressions (2.82) et (2.83) dans (2.81) :

$$\begin{aligned}
\Psi_\nu^+ D(\nu) \Psi_\nu^- &= (\alpha_\nu^+; \alpha_{\tilde{\nu}}) \begin{pmatrix} E_\nu & 0 \\ 0 & -E_\nu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \alpha_\nu \\ \alpha_{\tilde{\nu}}^+ \end{pmatrix} \\
&= E_\nu (\alpha_\nu^+ \alpha_\nu + \alpha_{\tilde{\nu}}^+ \alpha_{\tilde{\nu}}) - E_\nu
\end{aligned} \tag{2.84}$$

On remplace (2.81) dans (2.50) et on trouve :

$$Tr \left\{ e^{-\beta H^n} \right\} = e^{-\beta \sum_{\nu>0} \tilde{\epsilon}_\nu} Tr \left\{ e^{-\beta \sum_{\nu>0} [\Psi_\nu^+ D(\nu) \Psi_\nu^-]} \right\} \tag{2.85}$$

Et (2.81) dans (2.50) :

$$Tr \left\{ e^{-\beta H^n} \right\} = e^{-\beta \sum_{\nu>0} \tilde{\epsilon}_\nu} e^{\beta \sum_{\nu>0} E_\nu} Tr \left\{ e^{-\beta \sum_{\nu>0} E_\nu (\alpha_\nu^+ \alpha_\nu + \alpha_{\tilde{\nu}}^+ \alpha_{\tilde{\nu}})} \right\} \tag{2.86}$$

Ce qui implique :

$$\begin{aligned}
Tr \left\{ e^{-\beta H^n} \right\} &= e^{-\beta \sum_{\nu>0} (\tilde{\epsilon}_\nu - E_\nu)} \prod_{\nu>0} (1 + e^{-\beta E_\nu})^2 \\
&= e^{-\beta \sum_{\nu>0} (\tilde{\epsilon}_\nu - E_\nu)} \frac{\ln \prod_{\nu>0} (1 + e^{-\beta E_\nu})^2}{e} \\
&= e^{-\beta \sum_{\nu>0} (\tilde{\epsilon}_\nu - E_\nu)} \frac{2 \sum_{\nu>0} \ln(1 + e^{-\beta E_\nu})}{e}
\end{aligned} \tag{2.87}$$

$$= e^{-\beta \sum_{\nu>0} \left(\tilde{\epsilon}_\nu - E_\nu - \frac{2}{\beta} \ln(1 + e^{-\beta E_\nu}) \right)} \tag{2.88}$$

On remplace (2.88) dans (2.43) :

$$Z = \int Dz e^{-\beta \left[\pi |z|^2 + \sum_{\nu>0} \left(\tilde{\epsilon}_\nu - E_\nu - \frac{2}{\beta} \ln(1 + e^{-\beta E_\nu}) \right) \right]}$$

soit donc :

$$Z = \int Dz e^{-\beta\Omega(z)} \quad (2.89)$$

avec :

$$\Omega(z) = \pi |z|^2 + \sum_{\nu>0} \left(\tilde{\varepsilon}_\nu - E_\nu - \frac{2}{\beta} \ln \left(1 + e^{-\beta E_\nu} \right) \right) \quad (2.90)$$

Il apparait que cette dernière fonction n'est autre que le grand potentiel du système en fonction du champ complexe z .

2.6 Approximation du point de selle et équations du gap

L'approximation au point selle [7], permet d'obtenir la contribution dominante de la grande fonction de partition. En effet, la solution au point de selle est déterminée par la valeur minimale que peut prendre l'exposant dans l'équation (2.89) , le grand potentiel dans notre cas, soit alors :

$$\begin{aligned} \frac{\partial\Omega(z)}{\partial z^*} &= 2\pi z - \sum_{\nu>0} \left(\frac{\partial E_\nu}{\partial z^*} - \frac{2 \frac{\partial E_\nu}{\partial z^*}}{(1 + e^{\beta E_\nu})} \right) \\ &= 2\pi z - \sum_{\nu>0} \frac{\partial E_\nu}{\partial z^*} \left(1 - \frac{2}{(1 + e^{\beta E_\nu})} \right) \end{aligned} \quad (2.91)$$

comme

$$|\Delta|^2 = \pi G |z|^2 \quad (2.92)$$

et

$$E_\nu = \sqrt{\tilde{\varepsilon}_\nu^2 + |\Delta|^2} \quad (2.93)$$

on obtient :

$$\frac{\partial E_\nu}{\partial z^*} = \frac{\partial}{\partial z^*} \sqrt{\tilde{\varepsilon}_\nu^2 + \pi G |z|^2} = \frac{\pi G z}{E_\nu} \quad (2.94)$$

on remplace (2.94) dans (2.91), on trouve :

$$\frac{\partial \Omega(z)}{\partial z^*} = 2\pi z - \sum_{\nu>0} \frac{\pi G z}{E_\nu} \left(1 - \frac{2}{(1 + e^{\beta E_\nu})} \right) \quad (2.95)$$

L'approximation du point selle consiste en :

$$\frac{\partial \Omega(z)}{\partial z^*} = 0 \quad (2.96)$$

ce qui implique :

$$2\pi z - \sum_{\nu>0} \frac{\pi G z}{E_\nu} \left(1 - \frac{2}{(1 + e^{\beta E_\nu})} \right) = 0 \quad (2.97)$$

et comme z est indépendant de la somme :

$$2 - \sum_{\nu>0} \frac{G}{E_\nu} \left(1 - \frac{2}{(1 + e^{\beta E_\nu})} \right) = 0 \quad (2.98)$$

et avec :

$$1 - \frac{2}{(1 + e^{\beta E_\nu})} = th\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right) \quad (2.99)$$

qu'on remplace dans (2.98) et on trouve :

$$2 - \sum_{\nu>0} \frac{G}{E_\nu} th\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right) = 0 \quad (2.100)$$

ce qui implique :

$$\frac{2}{G} = \sum_{\nu>0} \frac{th\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right)}{E_\nu} \quad (2.101)$$

qui n'est autre que la première équation du gap, définie au chapitre précédent équation (1.82).

2.7 Grandeurs thermodynamiques du système

La valeur z_0 qui minimise $\Omega(z)$ est donnée par $|\Delta|^2 = \pi G |z_0|^2$ et la grande fonction de partition prend la forme suivante :

$$Z = e^{-\beta\Omega(z_0)} = e^{\Phi} \quad (2.102)$$

avec :

$$\Phi = -\beta\Omega(z_0) \quad (2.103)$$

ce qui implique :

$$\Phi = -\beta \sum_{\nu>0} (\varepsilon_\nu - \lambda - E_\nu) + 2 \sum_{\nu>0} \ln \left(1 + e^{-\beta E_\nu} \right) - \beta \frac{|\Delta|^2}{G} \quad (2.104)$$

La connaissance de la grande fonction de partition permet d'établir toutes les grandeurs thermodynamiques qui se rapportent au système, énergie interne, nombre de particules, et l'entropie avec les définitions prises au point de selle :

$$\begin{aligned} E &= \frac{\partial \Phi}{\partial \beta} \\ &= \sum_{\nu>0} \varepsilon_\nu \left(1 - \frac{\varepsilon_\nu - \lambda}{E_\nu} \text{th} \left(\frac{\beta E_\nu}{2} \right) \right) - \frac{\Delta^2}{G} \end{aligned} \quad (2.105)$$

et

$$\begin{aligned} N_0 &= \frac{\partial \Phi}{\beta \partial (\lambda)} \\ &= \sum_{\nu>0} \left(1 - \frac{\varepsilon_\nu - \lambda}{E_\nu} \text{th} \left(\frac{\beta E_\nu}{2} \right) \right) \end{aligned} \quad (2.106)$$

de plus

$$\begin{aligned} S &= \Phi - \beta \lambda N_0 + \beta E \\ S &= 2 \sum_{\nu>0} \left[\ln(1 + e^{-\beta E_\nu}) \right] + 2 \sum_{\nu>0} \left[\frac{\beta E_\nu}{1 + e^{\beta E_\nu}} \right] \end{aligned} \quad (2.107)$$

Les expressions (2.105), (2.106) et (2.107), sont formellement identiques à celles définies dans le chapitre précédent.

Cette méthode dite formalisme de l'intégrale fonctionnelle, permet de retrouver les équations du gap, ainsi que les expressions des grandeurs thermodynamiques semblables à celles calculées par le formalisme de la BCS à température finie. Pour ce faire, un ensemble d'approximations ont été utilisées à différentes étapes lors du calcul de la grande fonction de partition. Comme les résultats sont identiques, une analyse de ces approximations permet de saisir la nature des approximations utilisées dans la méthode FTBCS.

La linéarisation de l'hamiltonien par la transformation d'Hubbard Stratonovich, n'est possible que si on suppose que les paires de fermions appariées sont des bosons, à savoir que leur commutateur est nul. Cette démarche est semblable à celle de l'approximation des quasiparticules indépendantes utilisée lors du calcul de l'opérateur densité D .

L'approximation du chemin statique, qui permet de rendre l'intégrale fonctionnelle en une intégrale simple, en considérant seulement la contribution du chemin statique, ce qui néglige les effets quantiques prédominant à basse température. Ces deux approximations ressemblent dans leurs effets au fait que les états BCS ne sont pas états propres de l'opérateur nombre de particules.

La dernière, est l'approximation au point de selle, où l'on ne prend en compte que la valeur qui minimise le grand potentiel, se faisant on réduit l'intégrale sur tous les champs complexes z , à la valeur au point de selle, causant ainsi la négligence des effets des fluctuations statistiques des champs complexes sur la valeur de la grande fonction de partition.

On montrera dans le prochain chapitre, plus en détail, les brisures de symétrie dans la méthode FTBCS liées aux approximations introduites, et comment peut-on y remédier.

Chapitre 3

Traitement des noyaux chauds par la méthode MBCS

3.1 Introduction

Les deux méthodes développées aux chapitres précédents, permettent l'établissement des équations du gap à température finie, décrivant l'évolution du gap en fonction de la température.

Moretto en 1972 [22], puis Goodman en 1981 [23], montrèrent que la résolution de ces équations dites FTBCS, donnent un effondrement rapide du gap. Ce fait a été expliqué initialement, comme une transition de phase de l'état superfluide à l'état normal, en référence aux observations faites sur les métaux. Du point de vue théorique, Goodman après une comparaison des matrices densités particules et quasiparticules à température nulle et à température finie, arrive à la conclusion que le comportement observé du gap est causé par la violation des relations unitaires à température finie par la méthode FTBCS, car le formalisme ainsi développé ne prend pas en compte les fluctuations statistiques des quasiparticules.

Historiquement, plusieurs méthodes ont été développées afin de traiter ces fluctuations, l'une d'elles propose d'introduire ces fluctuations de manière macroscopique en les traitant dans l'ensemble grand canonique[22][23], un exposé sur cette méthode sera présenté dans le chapitre résultats numériques et discussion.

Une autre est récente, proposée par N.Dinh Dang et al [42]-[47] appelée MBCS pour BCS modifiée, tente d'inclure les effets thermiques de manière microscopique, en introduisant les

fluctuations des quasiparticules au niveau de chaque état. Basée sur une nouvelle transformation unitaire dite seconde transformation de Bogoliubov-Valatin, elle permet de restaurer les relations unitaires violées par l'approche FTBCS.

Il a été signalé précédemment, que les états BCS, ne sont pas états propres de l'opérateur nombre de particules, leur nombre n'est conservé qu'en moyenne. Ce défaut de la méthode entache ces résultats, concernant le paramètre gap, ainsi que les grandeurs sensibles aux effets d'appariement. Pour y remédier des méthodes exactes [10][11] ou approximatives [12]-[21] de projection sur le bon nombre de particules ont été développées.

Dans ce chapitre, nous allons dans une première partie exposer la méthode MBCS en se référant aux articles de N.Dinh Dang [43][46], en montrant objectivement son apport du point de vue théorique, et les résultats auxquels elle aboutit. Pour pallier au second défaut de la théorie BCS, à savoir la non conservation du nombre de particules, nous nous proposons d'utiliser la méthode Lipkin Nogami [12]-[16] qui est une méthode simple de projection sur l'espace nombre d'occupation, bien qu'approximative elle permet d'obtenir des résultats appréciables.

La seconde partie du chapitre, sera consacrée au rappel de la méthode de Lipkin Nogami. Cette dernière sera ensuite utilisée et adaptée dans le cadre du formalisme de la méthode MBCS.

Les expressions des grandeurs thermodynamiques seront établies dans le cadre des deux approches.

3.2 Brisure de symétries

3.2.1 Violation des relations unitaires

On définit les matrices densités généralisées de quasiparticules Q et celle de particules R comme [63] :

$$Q = \begin{pmatrix} \langle \alpha^+ \alpha \rangle & \langle \alpha \alpha \rangle \\ \langle \alpha^+ \alpha^+ \rangle & \langle \alpha \alpha^+ \rangle \end{pmatrix} \quad (3.1)$$

$$R = \begin{pmatrix} \langle a^+ a \rangle & \langle a a \rangle \\ \langle a^+ a^+ \rangle & \langle a a^+ \rangle \end{pmatrix} \quad (3.2)$$

Et en utilisant les résultats (1.60) (1.64), (1.66) et (1.67) on trouve :

$$Q = \begin{pmatrix} q & t \\ -t & 1 - q \end{pmatrix} \quad (3.3)$$

$$R = \begin{pmatrix} \rho & \tau \\ -\tau & 1 - \rho \end{pmatrix} \quad (3.4)$$

Il est clair qu'on peut déduire l'une des matrices à partir de l'autre en utilisant les transformations (1.15) et (1.21)

$$R = W^+ Q W \quad (3.5)$$

$$Q = W R W^+ \quad (3.6)$$

Comparons ces matrices à température nulle, et à température finie.

Les résultats (1.60) et (1.65) donnent la forme de la matrice Q à $(T = 0)$ qu'on désignera par Q_0 :

$$Q_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.7)$$

et il est clair que :

$$Q_0^2 = Q_0 \quad (3.8)$$

Calculons aussi R_0 , la matrice généralisée de particules à $(T = 0)$:

$$R_0 = W^+ Q_0 W \quad (3.9)$$

$$= W^+ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} W \quad (3.10)$$

$$= \begin{pmatrix} \rho_0 & \tau_0 \\ -\tau_0 & 1 - \rho_0 \end{pmatrix} \quad (3.11)$$

et ainsi on peut calculer R_0^2 :

$$\begin{aligned}
R_0^2 &= W^+ Q_0 W W^+ Q_0 W \\
&= W^+ Q_0 Q_0 W \\
&= W^+ Q_0 W \\
&= R_0
\end{aligned} \tag{3.12}$$

Ce dernier résultat n'est que la confirmation du théorème, selon lequel toute matrice de la forme (3.4), où ρ est une matrice hermitique et τ une matrice antisymétrique, et qui satisfait à l'équation $R^2 = R$ correspond à un vide de quasiparticules [63], et à température nulle ce théorème est effectivement vérifié.

A température finie, la matrice Q devient :

$$Q_T = \begin{pmatrix} n & 0 \\ 0 & 1 - n \end{pmatrix} \tag{3.13}$$

et ainsi Q_T^2 :

$$\begin{aligned}
Q_T^2 &= \begin{pmatrix} n^2 & 0 \\ 0 & (1 - n)^2 \end{pmatrix} \\
&\neq Q_T
\end{aligned} \tag{3.14}$$

ce qui implique automatiquement que :

$$R_T^2 \neq R_T \tag{3.15}$$

Il y a violation de la relation d'idempotence de R à $T \neq 0$ [23] .

Calculons à présent :

$$Tr(R_T - R_T^2) = Tr(Q_T - Q_T^2) \quad (3.16)$$

$$= 2 \sum_{\nu > 0} n_\nu (1 - n_\nu) \quad (3.17)$$

$$\equiv 2(\delta N)^2 \neq 0 \quad (3.18)$$

La quantité $(\delta N)^2 = \sum_{\nu > 0} n_\nu (1 - n_\nu)$ n'est autre que les fluctuations du nombre de quasiparticules. En effet on a :

$$(\delta N)^2 = \langle \hat{n}^2 \rangle - \langle \hat{n} \rangle^2 \quad (3.19)$$

$$\begin{aligned} &= \left\langle \sum_{\nu > 0} \hat{n}_\nu + \sum_{\nu \neq \mu} \hat{n}_\nu \hat{n}_\mu \right\rangle - \sum_{\nu > 0} n_\nu^2 - \sum_{\nu \neq \mu} n_\nu n_\mu \\ &= \sum_{\nu > 0} n_\nu (1 - n_\nu) \\ &= \sum_{\nu > 0} \delta N_\nu^2 \end{aligned} \quad (3.20)$$

où

$$\delta N_\nu^2 = n_\nu (1 - n_\nu) \quad (3.21)$$

On voit que la violation des relations unitaires (3.15) pour la matrice densité généralisée de particules R qui survient à $T \neq 0$, est causée par l'approximation d'QPI de l'opérateur densité D_{QPI} qu'on a introduit dans l'équation (1.52) et qui exclut les fluctuations du nombre de quasiparticules.

3.2.2 Brisure de symétrie liée à la non conservation du nombre de particules

Contrairement à la première brisure de symétrie exposée dans la section précédente, qui ne survient qu'à température finie, un autre défaut apparaît dans la théorie BCS même à température nulle, qu'est la non conservation du nombre de particules.

En effet l'état BCS, $|\Psi\rangle$ est une superposition d'états correspondant à différents nombres de paires de particules :

$$|\Psi\rangle = \prod_{\nu > 0} (u_\nu + v_\nu a_\nu^+ a_\nu^+) |0\rangle$$

$$\begin{aligned}
&= \left(\prod_{\nu>0} u_\nu \right) \prod_{\nu>0} \left(1 + \frac{v_\nu}{u_\nu} a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+ \right) |0\rangle \\
&= \left(\prod_{\nu>0} u_\nu \right) \left[1 + \sum_{\nu>0} \frac{v_\nu}{u_\nu} a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+ |0\rangle + \frac{1}{2} \sum_{\nu,\mu>0} \frac{v_\nu v_\mu}{u_\nu u_\mu} a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+ a_\mu^+ a_{\bar{\mu}}^+ |0\rangle + \dots \right] \\
&= \sum_{P=0}^{\Omega} |\Psi_P\rangle
\end{aligned} \tag{3.22}$$

où

$$|\Psi_P\rangle = \left(\prod_{\nu>0} u_\nu \right) \frac{1}{P!} \left[\frac{v_\nu}{u_\nu} a_\nu^+ a_{\bar{\nu}}^+ \right]^P |0\rangle \tag{3.23}$$

Ω est la dégénérescence totale des paires.

Le nombre de particules du système étant fixé, toutes les composantes correspondant à un nombre de paires différent de celui du système sont des composantes non physiques.

Ces fausses composantes sont les fluctuations du nombre de particules, qui n'ont pas une grande influence en physique du solide où le nombre de particules est grand, par contre en physique nucléaire où N_0 est de l'ordre des dizaines, ces fluctuations provoquent des erreurs lors du calcul de certaines grandeurs physiques sensibles aux effets d'appariement, et rendent dans ces cas la théorie BCS insuffisante.

Le calcul de ces fluctuations $(\Delta N)^2$ se fait par le calcul de la variance :

$$\begin{aligned}
(\Delta N)^2 &= \langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2 \\
&= \left\langle \left(\sum_{\nu>0} (a_\nu^+ a_\nu + a_{\bar{\nu}}^+ a_{\bar{\nu}}) \right) \left(\sum_{\mu>0} (a_\mu^+ a_\mu + a_{\bar{\mu}}^+ a_{\bar{\mu}}) \right) \right\rangle - \left\langle \sum_{\nu>0} (a_\nu^+ a_\nu + a_{\bar{\nu}}^+ a_{\bar{\nu}}) \right\rangle^2 \\
&= (\Delta N_{FQ})^2 + (\Delta N_{FS})^2
\end{aligned} \tag{3.24}$$

où

$$(\Delta N_{FQ})^2 = 4 \sum_{\nu>0} u_\nu^2 v_\nu^2 (1 - 2n_\nu) \tag{3.25}$$

et

$$(\Delta N_{FS})^2 = 2 \sum_{\nu>0} (u_\nu^2 - v_\nu^2)^2 n_\nu (1 - n_\nu) + 8 \sum_{\nu>0} u_\nu^2 v_\nu^2 n_\nu^2 \tag{3.26}$$

On remarque que les fluctuations du nombre de particules peuvent s'écrire comme la contribution de deux termes, due à deux effets d'origine différente.

L'un est d'origine quantique $(\Delta N_{FQ})^2$, et l'autre d'origine statistique $(\Delta N_{FS})^2$.

A $T = 0$ la probabilité d'occupation d'une quasiparticule n_ν tend vers zéro, et les effets liés à la température n'existent pas ce qui fait disparaître automatiquement les fluctuations statistiques $(\Delta N_{FS})^2$, et ne subsiste que les fluctuations d'origine quantique.

Quand la température augmente $(\Delta N_{FQ})^2$ s'estompent jusqu'à disparaître complètement, et $(\Delta N_{FS})^2$ augmentent avec la température.

Pour comprendre l'importance de ces fluctuations en physique nucléaire, prenant un exemple simple, qui est le cas d'un spectre d'énergies complètement dégénéré avec $\varepsilon_\nu = 0 \ \forall \ \nu$ avec $\Omega = N_0$, et à la limite quand $T \rightarrow 0$,

$$(\Delta N)^2 = 4 \sum_{\nu > 0} u_\nu^2 v_\nu^2 = \sum_{\nu > 0} \frac{\Delta^2}{E_\nu^2}, \quad (3.27)$$

et dans ce cas précis $E_\nu^2 = \Delta^2$, ce qui implique que $(\Delta N)^2 = \sum_{\nu > 0} 1 = N_0$, et les fluctuations relatives qui sont définies comme suit :

$$\frac{\sqrt{(\Delta N)^2}}{N_0} = \frac{\sqrt{N_0}}{N_0} = \frac{1}{\sqrt{N_0}} \quad (3.28)$$

Il est clair qu'en physique du solide, cette grandeur tend vers zéro, car N_0 est très grand, contrairement à la physique nucléaire où le nombre de particules reste relativement petit, et les fluctuations relatives restent toujours finies, ce qui impose de développer des méthodes pour les éliminer.

3.3 Restauration des symétries brisées

3.3.1 La théorie MBCS à température finie

Restauration des relations unitaires

Pour restaurer les relations unitaires précédentes, on introduit un nouvel opérateur densité modifié $\overline{D}$. La valeur moyenne de n'importe quel opérateur $\hat{O}$ en équilibre avec le système

devient [46] :

$$\langle\langle\hat{O}\rangle\rangle = Tr(\overline{D}\hat{O}) \quad (3.29)$$

Avec cette nouvelle représentation¹ on définit les matrices densités généralisées de quasiparticules et de particules modifiées $\overline{Q}$ et $\overline{R}$ avec :

$$\overline{Q} = \begin{pmatrix} \overline{q} & \overline{t} \\ -\overline{t} & 1 - \overline{q} \end{pmatrix} \quad (3.30)$$

et

$$\overline{R} = \begin{pmatrix} \overline{\rho} & \overline{\tau} \\ -\overline{\tau} & 1 - \overline{\rho} \end{pmatrix} \quad (3.31)$$

avec

$$\overline{q}_{\nu\mu} = \langle\langle\alpha_\mu^+\alpha_\nu\rangle\rangle = \overline{n}_\nu\delta_{\nu\mu} \quad (3.32)$$

$$\overline{t}_{\nu\mu} = \langle\langle\alpha_\mu\alpha_\nu\rangle\rangle \quad (3.33)$$

$$\overline{\rho}_{\nu\mu} = \langle\langle a_\mu^+a_\nu\rangle\rangle \quad (3.34)$$

$$\overline{\tau}_{\nu\mu} = \langle\langle a_\mu a_\nu\rangle\rangle \quad (3.35)$$

Où $\overline{n}_\nu$ est la probabilité d'occupation d'une quasiparticule calculée dans la nouvelle représentation (3.29).

Lors de l'établissement de la matrice Q , on a montré que le tenseur d'appariement $t_{\nu\mu}$ est nul. Pour restaurer la brisure de symétrie (3.15), on considère ici que $\overline{t}_{\nu\mu}$ est différent de zéro, pour tenir compte des corrélations thermiques qui sont maintenant incluses dans $\overline{D}$. Il est obtenu avec la condition d'idempotence de $\overline{Q}$:

$$\overline{Q}^2 = \overline{Q} \quad (3.36)$$

ce qui permettra ainsi de restaurer la relation :

$$\overline{R}^2 = \overline{R} \quad (3.37)$$

¹L'utilisation des doubles crochets signifie simplement que les calculs de valeurs moyennes se font dans la nouvelle représentation en différenciation de la définition (1.48)

soit l'équation (3.36) sous une forme explicite :

$$\begin{pmatrix} \bar{q}^2 - \bar{t}\bar{t} & \bar{q}\bar{t} + \bar{t}(1 - \bar{q}) \\ -\bar{q}\bar{t} - \bar{t}(1 - \bar{q}) & -\bar{t}\bar{t} + (1 - \bar{q})^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{q} & \bar{t} \\ -\bar{t} & 1 - \bar{q} \end{pmatrix} \quad (3.38)$$

ce qui implique :

$$\bar{q}^2 - \bar{t}\bar{t} = \bar{q} \Rightarrow -\bar{t}\bar{t} = \bar{q} - \bar{q}^2 \quad (3.39)$$

on remplace par l'équation (3.32), et on trouve :

$$\bar{t} = \left[\sqrt{\bar{n}(1 - \bar{n})} \right] \quad (3.40)$$

et en tenant compte de la forme de la matrice (3.32), la matrice $\bar{t}$ se met pour l'état $|\nu\rangle$ comme suit :

$$\bar{t}_\nu = \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{\bar{n}_\nu(1 - \bar{n}_\nu)} \\ \sqrt{\bar{n}_\nu(1 - \bar{n}_\nu)} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.41)$$

Ce dernier résultat correspond aux fluctuations du nombre de quasiparticules δN_ν

On définit les opérateurs de création et d'annihilation de quasiparticules modifiées $\bar{\alpha}_\nu^+$ et $\bar{\alpha}_\nu$, qui auraient le même comportement que α_ν^+ et α_ν à température nulle c'est à dire :

$$\langle \langle \bar{\alpha}_\nu^+ \bar{\alpha}_\mu \rangle \rangle = \langle \langle \bar{\alpha}_\nu^+ \bar{\alpha}_\mu^+ \rangle \rangle = \langle \langle \bar{\alpha}_\nu \bar{\alpha}_\mu \rangle \rangle = 0 \quad (3.42)$$

et qui sont des combinaisons linéaires des opérateurs α_ν^+ et α_ν et peuvent être obtenus par la transformation suivante :

$$\begin{pmatrix} \bar{\alpha}^+ \\ \bar{\alpha} \end{pmatrix} = Z \begin{pmatrix} \alpha^+ \\ \alpha \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

avec Z unitaire :

$$ZZ^+ = 1 \quad (3.44)$$

A partir des équations (3.42) on obtient la matrice densité de quasiparticules modifiées $\bar{Q}_0$:

$$\bar{Q}_0 = \begin{pmatrix} \langle \langle \bar{\alpha}^+ \bar{\alpha} \rangle \rangle & \langle \langle \bar{\alpha} \bar{\alpha} \rangle \rangle \\ \langle \langle \bar{\alpha}^+ \bar{\alpha}^+ \rangle \rangle & \langle \langle \bar{\alpha} \bar{\alpha}^+ \rangle \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

et ainsi

$$\overline{Q}_0^2 = \overline{Q}_0 \quad (3.46)$$

La matrice Z est obtenue avec la relation suivante :

$$\overline{Q} = Z^+ \overline{Q}_0 Z \quad (3.47)$$

et en utilisant les définitions (3.30), (3.32) et (3.40) :

$$\overline{Q} = \begin{pmatrix} \overline{n} & \sqrt{\overline{n}(1-\overline{n})} \\ -\sqrt{\overline{n}(1-\overline{n})} & 1-\overline{n} \end{pmatrix} = Z^+ \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} Z \quad (3.48)$$

Après identification des blocs de matrice on trouve :

$$Z = \begin{pmatrix} \sqrt{1-\overline{n}} & \sqrt{\overline{n}} \\ \sqrt{\overline{n}} & \sqrt{1-\overline{n}} \end{pmatrix} \quad (3.49)$$

avec la définition suivante des matrices $\sqrt{1-\overline{n}}$ et $\sqrt{\overline{n}}$:

$$(\sqrt{1-\overline{n}})_\nu = \begin{pmatrix} \sqrt{1-\overline{n}_\nu} & 0 \\ 0 & \sqrt{1-\overline{n}_\nu} \end{pmatrix} \quad (3.50)$$

et

$$(\sqrt{\overline{n}})_\nu = \begin{pmatrix} 0 & -\sqrt{\overline{n}_\nu} \\ \sqrt{\overline{n}_\nu} & 0 \end{pmatrix} \quad (3.51)$$

A partir de ces derniers résultats, cherchant à écrire les opérateurs a_ν^+ et a_ν en fonction des opérateurs $\overline{\alpha}_\nu^+$ et $\overline{\alpha}_\nu$, sachant que :

$$\begin{aligned} \overline{R} &= \overline{W}^+ \overline{Q} \overline{W} \\ &= W^+ Z^+ \overline{Q}_0 Z W \end{aligned} \quad (3.52)$$

avec

$$\overline{W} = ZW \quad (3.53)$$

on remplace par les relations (3.49) et (1.21) :

$$\overline{W} = \begin{pmatrix} \sqrt{1-\overline{n}}U + \sqrt{\overline{n}}V & \sqrt{1-\overline{n}}V + \sqrt{\overline{n}}U \\ \sqrt{\overline{n}}U + \sqrt{1-\overline{n}}V & \sqrt{\overline{n}}V + \sqrt{1-\overline{n}}U \end{pmatrix} \quad (3.54)$$

Qu'on peut écrire sous la forme suivante :

$$\overline{W} = \begin{pmatrix} \overline{U} & \overline{V} \\ \overline{V} & \overline{U} \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

Et à partir des relations (1.16),(1.17) et (3.50) , (3.51) on établit les blocs de matrices modifiées $\overline{U}$ et $\overline{V}$ pour l'état $|\nu\rangle$:

$$\overline{U}_\nu = \begin{pmatrix} u_\nu\sqrt{1-\overline{n}_\nu} + v_\nu\sqrt{\overline{n}_\nu} & 0 \\ 0 & u_\nu\sqrt{1-\overline{n}_\nu} + v_\nu\sqrt{\overline{n}_\nu} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \bar{u}_\nu & 0 \\ 0 & \bar{u}_\nu \end{pmatrix} \quad (3.56)$$

et

$$\overline{V}_\nu = \begin{pmatrix} 0 & v_\nu\sqrt{1-\overline{n}_\nu} - u_\nu\sqrt{\overline{n}_\nu} \\ -(v_\nu\sqrt{1-\overline{n}_\nu} - u_\nu\sqrt{\overline{n}_\nu}) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \bar{v}_\nu \\ -\bar{v}_\nu & 0 \end{pmatrix} \quad (3.57)$$

La seconde transformation de Bogoliubov Valatin

Les relations précédentes (3.56) et (3.57) déterminent les matrices de passage de la représentation particules à celle de quasiparticules modifiées, et permettent l'établissement de la seconde transformation de Bogoliubov-Valatin qui relie les opérateurs particules a_ν^+ et a_ν à ceux de quasiparticules modifiées $\overline{\alpha}_\nu^+$ et $\overline{\alpha}_\nu$:

$$\begin{cases} a_\nu^+ = \bar{u}_\nu\overline{\alpha}_\nu^+ + \bar{v}_\nu\overline{\alpha}_\nu \\ a_\nu = \bar{u}_\nu\overline{\alpha}_\nu + \bar{v}_\nu\overline{\alpha}_\nu^+ \end{cases} \quad (3.58)$$

et à partir des résultats (3.56) et (3.57) :

$$\begin{cases} a_\nu^+ = (u_\nu\sqrt{1-\overline{n}_\nu} + v_\nu\sqrt{\overline{n}_\nu}) \overline{\alpha}_\nu^+ + (v_\nu\sqrt{1-\overline{n}_\nu} - u_\nu\sqrt{\overline{n}_\nu}) \overline{\alpha}_\nu \\ a_\nu = (u_\nu\sqrt{1-\overline{n}_\nu} + v_\nu\sqrt{\overline{n}_\nu}) \overline{\alpha}_\nu + (v_\nu\sqrt{1-\overline{n}_\nu} - u_\nu\sqrt{\overline{n}_\nu}) \overline{\alpha}_\nu^+ \end{cases} \quad (3.59)$$

L'avantage de cette nouvelle représentation est qu'elle inclut les fluctuations thermiques, ce qui apparait dans les facteurs $\sqrt{1-\overline{n}_\nu}$ et $\sqrt{\overline{n}_\nu}$, mais aussi posséder la caractéristique d'être un vrai vide de quasiparticules modifiées (3.42), et ainsi retrouver une ressemblance formelle avec

la transformation de quasiparticules à température nulle (1.22), lui permettant de restaurer les relations unitaires.

Equations du gap MBCS

On établit la matrice densité d'une particule $\bar{\rho}_{\nu\mu}$ et le tenseur d'appariement d'une particule $\bar{\tau}_{\nu\mu}$ dans la représentation quasiparticules modifiées avec la définition (3.29) :

$$\bar{\rho}_{\nu\mu} = \langle\langle a_\mu^+ a_\nu \rangle\rangle = Tr(\bar{D}a_\mu^+ a_\nu) \quad (3.60)$$

et

$$\bar{\tau}_{\nu\mu} = \langle\langle a_\mu a_\nu \rangle\rangle = Tr(\bar{D}a_\mu a_\nu) \quad (3.61)$$

on remplace par les équations (3.59) :

$$\bar{\rho}_\nu = Tr(\bar{D}a_\nu^+ a_\nu) = \langle\langle (\bar{u}_\nu \bar{\alpha}_\nu^+ + \bar{v}_\nu \bar{\alpha}_\nu) (\bar{u}_\nu \bar{\alpha}_\nu + \bar{v}_\nu \bar{\alpha}_\nu^+) \rangle\rangle \quad (3.62)$$

et

$$\bar{\tau}_\nu = Tr(\bar{D}a_\nu a_\nu) = \langle\langle (\bar{u}_\nu \bar{\alpha}_\nu + \bar{v}_\nu \bar{\alpha}_\nu^+) (\bar{u}_\nu \bar{\alpha}_\nu + \bar{v}_\nu \bar{\alpha}_\nu^+) \rangle\rangle \quad (3.63)$$

et en considérant l'équation (3.42) on trouve :

$$\bar{\rho}_\nu = \bar{v}_\nu^2 \quad (3.64)$$

$$= (u_\nu \sqrt{1-n_\nu} + v_\nu \sqrt{n_\nu})^2 \quad (3.65)$$

$$= (v_\nu^2 + (u_\nu^2 - v_\nu^2)n_\nu - 2u_\nu v_\nu \sqrt{n_\nu(1-n_\nu)}) \quad (3.66)$$

et

$$\bar{\tau}_\nu = \bar{u}_\nu \bar{v}_\nu \quad (3.67)$$

$$= (u_\nu \sqrt{1-n_\nu} + v_\nu \sqrt{n_\nu}) (v_\nu \sqrt{1-n_\nu} - u_\nu \sqrt{n_\nu}) \quad (3.68)$$

$$= u_\nu v_\nu (1 - 2n_\nu) - (u_\nu^2 - v_\nu^2) \sqrt{n_\nu(1-n_\nu)} \quad (3.69)$$

et à partir des définitions (1.51) et (1.74) on établit les équations du gap MBCS :

$$\begin{aligned}
\overline{\Delta} &= G \sum_{\nu > 0} \bar{\tau}_\nu \\
&= G \sum_{\nu > 0} \bar{u}_\nu \bar{v}_\nu \\
&= G \sum_{\nu > 0} \left(u_\nu v_\nu (1 - 2n_\nu) - (u_\nu^2 - v_\nu^2) \sqrt{n_\nu (1 - n_\nu)} \right)
\end{aligned} \tag{3.70}$$

et

$$\begin{aligned}
N_0 &= Tr(\overline{D}N) \\
&= 2 \sum_{\nu > 0} \bar{\rho}_\nu \\
&= 2 \sum_{\nu > 0} \bar{v}_\nu^2 \\
&= 2 \sum_{\nu > 0} \left(v_\nu^2 + (u_\nu^2 - v_\nu^2) n_\nu - 2u_\nu v_\nu \sqrt{n_\nu (1 - n_\nu)} \right)
\end{aligned} \tag{3.71}$$

On remarque que l'équation (3.70), est la somme de deux termes, dont le premier est formellement identique à celui de la méthode FTBCS, qu'on peut considérer comme la partie quantique Δ_Q du gap modifié, et le second contient les fluctuations du nombre de quasiparticules δN_ν , c'est sa partie thermique qu'on note $\delta\Delta$, ainsi pour faciliter la discussion qui sera apportée ci dessous on le réécrit comme suit :

$$\overline{\Delta} = \Delta_Q + \delta\Delta \tag{3.72}$$

A la différence de la méthode FTBCS, qui s'appuie sur un principe variationnel dans la détermination des paramètres u_ν et v_ν , la méthode MBCS [46], [64] propose directement de remplacer λ et Δ_T est ainsi E_ν dans les équations (1.80) par $\bar{\lambda}$ et $\overline{\Delta}$ est ainsi $\overline{E}_\nu$ qui sont le potentiel chimique modifié, le paramètre du gap modifié et l'énergie d'une quasiparticule modifiée :

$$\left. \begin{matrix} u_\nu^2 \\ v_\nu^2 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\varepsilon_\nu - \bar{\lambda}}{\sqrt{(\varepsilon_\nu - \bar{\lambda})^2 + \overline{\Delta}^2}} \right] \tag{3.73}$$

et

$$\overline{E}_\nu = \sqrt{(\varepsilon_\nu - \overline{\lambda})^2 + \overline{\Delta}^2} \quad (3.74)$$

Et la probabilité d'occupation d'une quasiparticule modifiée est identique à (1.59) en remplaçant E_ν par $\overline{E}_\nu$:

$$n_\nu = \frac{1}{1 + e^{\beta \overline{E}_\nu}} \quad (3.75)$$

On injecte les équations (3.73) et (3.74) (3.75) dans les équations (3.70) et (3.71) :

$$N_0 = \sum_{\nu > 0} \left(1 - \frac{\varepsilon_\nu - \overline{\lambda}}{\overline{E}_\nu} \text{th}\left(\frac{\beta \overline{E}_\nu}{2}\right) - \frac{\overline{\Delta}}{\overline{E}_\nu} \sec h\left(\frac{\beta \overline{E}_\nu}{2}\right) \right) \quad (3.76)$$

et

$$\overline{\Delta} = \frac{G}{2} \sum_{\nu > 0} \left(\frac{\overline{\Delta}}{\overline{E}_\nu} \text{th}\left(\frac{\beta \overline{E}_\nu}{2}\right) - \frac{\varepsilon_\nu - \overline{\lambda}}{\overline{E}_\nu} \sec h\left(\frac{\beta \overline{E}_\nu}{2}\right) \right) \quad (3.77)$$

Les deux dernières équations (3.76) et (3.77) sont les équations du gap MBCS.

Calcul des fluctuations du nombre de particules avec l'approche MBCS

Pour apprécier l'apport de la méthode MBCS, il est utile de calculer les fluctuations du nombre de particules, ce qui permettra d'avoir un élément de comparaison avec la méthode FTBCS, pour se faire, on utilisera la définition (3.29), lors du calcul des valeurs moyennes.

La variance dans la nouvelle représentation vaut :

$$\begin{aligned} \Delta N^2 &= \langle \langle N^2 \rangle \rangle - \langle \langle N \rangle \rangle^2 \\ &= \left\langle \left\langle \left(\sum_{\nu > 0} (a_\nu^+ a_\nu + a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\nu}}) \right) \left(\sum_{\mu > 0} (a_\mu^+ a_\mu + a_{\tilde{\mu}}^+ a_{\tilde{\mu}}) \right) \right\rangle \right\rangle - \left\langle \left\langle \sum_{\nu > 0} (a_\nu^+ a_\nu + a_{\tilde{\nu}}^+ a_{\tilde{\nu}}) \right\rangle \right\rangle^2 \end{aligned} \quad (3.78)$$

et comme le calcul de cette valeur se fait dans la nouvelle représentation qui possède la caractéristique d'être un vrai vide de quasiparticules modifiées (3.42), alors elle se réduit simplement à :

$$\Delta N^2 = 4 \sum_{\nu > 0} \bar{u}_\nu^2 \bar{v}_\nu^2 \quad (3.79)$$

Cette dernière équation montre que les fluctuations du nombre de particules calculées dans

l'approche MBCS sont formellement identiques à celles de la théorie BCS habituelle à température nulle. En effet il apparait que les fluctuations du nombre de particules d'origine thermique disparaissent, et il reste seulement celles d'origine quantique.

L'approche MBCS permet d'éliminer, dans la forme, les fluctuations statistiques et elle les conserve implicitement dans les expressions de $\bar{u}_\nu, \bar{v}_\nu$ et de $\bar{\Delta}$.

3.3.2 La méthode de Lipkin Nogami modifiée (MLN)

Cette méthode est bâtie sur deux niveaux. En première étape, la méthode habituelle de Lipkin Nogami sera utilisée pour éliminer les fluctuations du nombre de particules induites par la BCS à température nulle, et comme principal résultat de cette méthode une renormalisation des densités de probabilités d'occupation des quasiparticules u_ν et v_ν est effectuée. La seconde étape consiste à remplacer les nouvelles expressions de u_ν et v_ν , ainsi renormalisées dans les expressions des équations du gap modifiées (3.70) et (3.71).

Principe de la méthode de Lipkin Nogami à T=0

Comme il a été déjà montré plus haut l'état BCS $|\Psi\rangle$ est une superposition d'états ayant un nombre pair de particules :

$$|\Psi\rangle = \sum_p C_p |\Phi_p\rangle \quad (3.80)$$

Soit $|\Phi_n\rangle$ l'état projeté correspondant au vrai nombre de particules avec :

$$\begin{cases} N |\Phi_n\rangle = N_0 |\Phi_n\rangle \\ H |\Phi_n\rangle = E_n |\Phi_n\rangle \end{cases} \quad (3.81)$$

Supposant que l'énergie projetée E_n peut être approximée par un polynôme de degré M en N_0 :

$$E_n = \langle \Phi_n | H | \Phi_n \rangle = \lambda_0 + \lambda_1 N_0 + \lambda_2 N_0^2 + \dots + \lambda_M N_0^M \quad (3.82)$$

où $\lambda_0, \lambda_1, \lambda_2, \dots, \lambda_M$ sont les coefficients du développement.

On introduit l'opérateur $\mathcal{H}$ qui est fonction de l'hamiltonien H et dont la forme est la suivante :

$$\mathcal{H} = H - \lambda_1 N - \lambda_2 N^2 - \dots - \lambda_M N^M \quad (3.83)$$

et en calculant sa valeur moyenne sur l'état BCS on obtient :

$$\langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle = \sum_n |C_n|^2 \langle \Phi_n | \mathcal{H} | \Phi_n \rangle \quad (3.84)$$

$$\begin{aligned} &= \sum_n |C_n|^2 \langle \Phi_n | H - \lambda_1 N - \lambda_2 N^2 - \dots - \lambda_M N^M | \Phi_n \rangle \\ &= \sum_n |C_n|^2 \langle \Phi_n | (\lambda_0 + \lambda_1 N_0 + \lambda_2 N_0^2 + \dots + \lambda_M N_0^M) - \lambda_1 N - \lambda_2 N^2 - \dots - \lambda_M N^M | \Phi_n \rangle \\ &= \lambda_0 \sum_n |C_n|^2 \\ &= \lambda_0 \end{aligned} \quad (3.85)$$

on remplace (3.85) dans (3.82) et on trouve :

$$E_n = \langle \Phi_n | H | \Phi_n \rangle = \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle + \lambda_1 N_0 + \lambda_2 N_0^2 + \dots + \lambda_M N_0^M \quad (3.86)$$

Cette dernière équation montre que la valeur moyenne de l'hamiltonien H dans la base des états projetés est fonction de la valeur moyenne de l'opérateur $\mathcal{H}$ calculée sur l'état $|\Psi\rangle$, ainsi l'énergie projetée peut être obtenue sans faire appel à une méthode de projection explicite .

La méthode de Lipkin Nogami est bâtie sur la base de ce principe, toute fois elle est considérée comme une méthode approximative du fait que pour calculer l'énergie projetée, il faut opérer une troncature dans le développement précédent. Une troncature d'ordre 2 s'avère satisfaisante, et ainsi les développements (3.83) et (3.86) deviennent :

$$\mathcal{H} = H - \lambda_1 N - \lambda_2 N^2 \quad (3.87)$$

$$E_n = \langle \Psi | \mathcal{H} | \Psi \rangle + \lambda_1 N_0 + \lambda_2 N_0^2 \quad (3.88)$$

La méthode est définitivement probante en déterminant les coefficients λ_1 et λ_2 .

Equations du gap

La ressemblance formelle entre la méthode MBCS et celle de la BCS à température nulle nous permet d'appliquer l'approche Lipkin Nogami à température nulle.

Les équations du gap dans cette approche s'obtiennent on minimisant l'énergie E_n par rap-

port aux paramètres variationnels u_ν et v_ν , et qui s'effectue en utilisant l'équation au variation suivante :

$$\delta E_n = \delta \langle \mathcal{H} \rangle = 0 \quad (3.89)$$

et comme

$$\langle \mathcal{H} \rangle = \langle H \rangle - \lambda_1 \langle N \rangle - \lambda_2 \langle N^2 \rangle \quad (3.90)$$

avec

$$\begin{aligned} E = \langle H \rangle &= 2 \sum_{\nu > 0} \left(\varepsilon_\nu - \frac{G}{2} v_\nu^2 \right) v_\nu^2 - \frac{\Delta^2}{G} \\ N_0 = \langle N \rangle &= 2 \sum_{\nu > 0} v_\nu^2 \end{aligned} \quad (3.91)$$

$$\langle N^2 \rangle = 4 \left(\sum_{\nu > 0} v_\nu^2 \right)^2 + 4 \sum_{\nu > 0} u_\nu^2 v_\nu^2 \quad (3.92)$$

Il reste à résoudre les équations permettant de déterminer les paramètres u_ν et v_ν :

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial v_\nu} = \frac{\partial \langle \mathcal{H} \rangle}{\partial u_\nu} = 0. \quad \forall \nu \\ u_\nu^2 + v_\nu^2 = 1 \implies \frac{\partial u_\nu}{\partial v_\nu} = -\frac{v_\nu}{u_\nu} \quad \forall \nu \end{array} \right. \quad (3.93)$$

Ce qui donne :

$$\left\{ \begin{array}{l} 2(\varepsilon_\nu - \lambda_{LN} + (4\lambda_2 - G)v_\nu^2)u_\nu v_\nu = \Delta(u_\nu^2 - v_\nu^2) \quad \forall \nu \\ \Delta = G \sum_{\nu > 0} u_\nu v_\nu \end{array} \right. \quad (3.94)$$

et où, on a posé :

$$\lambda_{LN} = \lambda_1 + 2\lambda_2(N_0 + 1) \quad (3.95)$$

On trouve après résolution :

$$\left. \begin{array}{l} u_\nu^2 \\ v_\nu^2 \end{array} \right\} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\varepsilon_\nu - \lambda_{LN} + (4\lambda_2 - G)v_\nu^2}{\sqrt{(\varepsilon_\nu - \lambda_{LN} + (4\lambda_2 - G)v_\nu^2)^2 + \Delta^2}} \right] \quad (3.96)$$

qu'on peut écrire en posant

$$\tilde{\varepsilon}_\nu = \varepsilon_\nu - \lambda_{LN} + (4\lambda_2 - G)v_\nu^2 \quad (3.97)$$

$$\left. \begin{matrix} u_\nu^2 \\ v_\nu^2 \end{matrix} \right\} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\tilde{\varepsilon}_\nu}{\sqrt{\tilde{\varepsilon}_\nu^2 + \Delta^2}} \right] \quad (3.98)$$

Ce dernier résultat montre que cette méthode conduit à une renormalisation des probabilités d'occupation expressions (3.96). On note l'apparition du terme $4\lambda_2 v_\nu^2$, et la modification du paramètre λ nommé à présent λ_{LN} .

Détermination du coefficient λ_2

Les coefficients λ_0, λ_1 et λ_2 sont déterminés au moyen de la méthode des approximations successives :

$$\left\langle \left[H - \sum_{m \geq 0}^M \lambda_m \Delta N^m \right] \Delta N^k \right\rangle = 0 \quad k = 0, 1 \text{ et } 2 \quad (3.99)$$

ce qui entraîne :

$$\langle H \rangle = \lambda_0 + 0 + \lambda_2 \langle \Delta N^2 \rangle \quad (3.100)$$

$$\langle H \Delta N \rangle = 0 + \lambda_1 \langle \Delta N^2 \rangle + \lambda_2 \langle \Delta N^3 \rangle \quad (3.101)$$

$$\langle H \Delta N^2 \rangle = \lambda_0 \langle \Delta N^2 \rangle + \lambda_1 \langle \Delta N^3 \rangle + \lambda_2 \langle \Delta N^4 \rangle \quad (3.102)$$

C'est un système de trois équations, qu'on résoud comme suit :

$$\lambda_0 = \langle H \rangle - \lambda_2 \langle \Delta N^2 \rangle \quad (3.103)$$

$$\lambda_1 = \frac{\langle H \Delta N \rangle + \lambda_2 \langle \Delta N^3 \rangle}{\langle \Delta N^2 \rangle} \quad (3.104)$$

$$\lambda_2 = \frac{\langle (H - \langle H \rangle) \Delta N^2 \rangle \langle \Delta N^2 \rangle - \langle H \Delta N \rangle \langle \Delta N^3 \rangle}{\left(\langle \Delta N^2 \rangle^2 - \langle \Delta N^4 \rangle \right) \langle \Delta N^2 \rangle + \langle \Delta N^3 \rangle^2} \langle \Delta N^2 \rangle \quad (3.105)$$

à T=0, après calcul de ces valeurs moyennes, ce paramètre vaut [65] :

$$\lambda_2 = \frac{G}{4} \frac{\left\{ \left(\sum_{\nu > 0} u_\nu^3 v_\nu \right) \left(\sum_{\nu > 0} u_\nu v_\nu^3 \right) - \left(\sum_{\nu > 0} u_\nu^4 v_\nu^4 \right) \right\}}{\left\{ \left(\sum_{\nu > 0} u_\nu^2 v_\nu^2 \right)^2 - \sum_{\nu > 0} u_\nu^4 v_\nu^4 \right\}} \quad (3.106)$$

Méthode de Lipkin Nogami à température finie FTLN

La méthode de Lipkin Nogami a été développée initialement, pour corriger le défaut de la BCS, qui ne tient pas compte des fluctuations du nombre de particules. Comme ces fluctuations dépendent de la température (équations (3.25), (3.26)), il faut adapter cette méthode à température finie, ce qu'on va nommer dans la suite du chapitre, la méthode FTLN.

Equations du gap FTLN Un moyen simple sera adopté, dans ce chapitre, afin d'établir les équations du gap FTLN², et leur modifiée MLN.

On utilisera les équations du gap FTBCS, qui sont fonction des paramètres u_ν et v_ν , qu'on remplacera par les nouvelles expressions renormalisées par la méthode LN à T=0, et on trouve le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \Delta = G \sum_{\nu > 0} u_\nu v_\nu (1 - 2n_\nu) \\ N_0 = 2 \sum_{\nu > 0} (v_\nu^2 + (u_\nu^2 - v_\nu^2)n_\nu) \end{cases} \quad (3.107)$$

$$\begin{cases} \begin{aligned} u_\nu^2 \\ v_\nu^2 \end{aligned} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\varepsilon_\nu - \lambda_{LN} + (4\lambda_2 - G)v_\nu^2}{\sqrt{(\varepsilon_\nu - \lambda_{LN} + (4\lambda_2 - G)v_\nu^2)^2 + \Delta^2}} \right] \\ \lambda_{LN} = \lambda_1 + 2\lambda_2(N_0 + 1) \end{cases} \quad (3.108)$$

Le calcul des valeurs moyennes dans l'expression (3.105), devient difficile à température finie, alors on est amené à tirer l'expression de λ_2 à partir de la seconde partie de l'Eq (3.108) [8] :

$$\begin{aligned} \lambda_2 = \frac{1}{2} \frac{d\lambda_{LN}}{dN_0} &= \left[\sum_{\nu > 0} E_\nu^{-3} f(\beta, E_\nu) \right] \\ & \quad \left[\Delta_T^2 \left[\sum_{\nu > 0} E_\nu^{-3} f(\beta, E_\nu) \right]^2 + \left[\sum_{\nu > 0} (\varepsilon_\nu - \lambda_{LN}) E_\nu^{-3} f(\beta, E_\nu) \right]^2 + \right. \\ & \quad \left. \frac{1}{2} \beta \left[\sum_{\nu > 0} \sec h^2 \left(\frac{\beta E_\nu}{2} \right) \right] \left[\sum_{\nu > 0} E_\nu^{-3} f(\beta, E_\nu) \right]^2 \right]^{-1} \end{aligned} \quad (3.109)$$

avec $f(\beta, E_\nu)$ est définit comme suit :

²Un exposé plus détaillé est développé dans les références [8][66]

$$f(\beta, E_\nu) = \tanh\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right) - \frac{1}{2}\beta E_\nu \sec h^2\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right) \quad (3.110)$$

Méthode de Lipkin Nogami modifiée Elle s'appuie sur la même procédure que celle exposée plus haut, pour la méthode FTLN [48], à savoir qu'on injecte les expressions de u_ν et v_ν renormalisées par la méthode Lipkin Nogami, dans les équations du gap MBCS (3.70) (3.71), et on obtient le système d'équations suivant :

$$\begin{cases} \bar{\Delta} = G \sum_{\nu>0} \left(u_\nu v_\nu (1 - 2n_\nu) - (u_\nu^2 - v_\nu^2) \sqrt{n_\nu (1 - n_\nu)} \right) \\ N_0 = 2 \sum_{\nu>0} \left(v_\nu^2 + (u_\nu^2 - v_\nu^2) n_\nu - 2u_\nu v_\nu \sqrt{n_\nu (1 - n_\nu)} \right) \end{cases} \quad (3.111)$$

$$\begin{cases} \begin{aligned} u_\nu^2 \\ v_\nu^2 \end{aligned} = \frac{1}{2} \left[1 \pm \frac{\varepsilon_\nu - \lambda_{LN} + (4\lambda_2 - G)v_\nu^2}{\sqrt{(\varepsilon_\nu - \lambda_{LN} + (4\lambda_2 - G)v_\nu^2)^2 + \bar{\Delta}^2}} \right] \\ \lambda_{LN} = \lambda_1 + 2\lambda_2(N_0 + 1) \end{cases} \quad (3.112)$$

La ressemblance formelle de la méthode MBCS avec la BCS à $T=0$, permet un calcul facile de λ_2 , qui vaut :

$$\lambda_2 = \frac{G}{4} \frac{\sum_{\nu>0} (1 - \bar{\rho}_\nu) \bar{\tau}_\nu \sum_{\mu>0} \bar{\rho}_\mu \bar{\tau}_\mu - \sum_{\nu>0} (1 - \bar{\rho}_\nu)^2 \bar{\rho}_\nu^2}{[\sum_{\nu>0} (1 - \bar{\rho}_\nu) \bar{\rho}_\nu]^2 - \sum_{\nu>0} (1 - \bar{\rho}_\nu)^2 \bar{\rho}_\nu^2} \quad (3.113)$$

avec les expressions $\bar{\rho}_\nu, \bar{\tau}_\nu$ définies par (3.66) et (3.69).

3.4 Grandeurs thermodynamiques et grande fonction de partition

Les définitions des grandeurs thermodynamiques définies au premier chapitre restent valables dans celui-ci, et on utilisera les mêmes en prenant la précaution de tenir compte de la nouvelle représentation.

Le calcul des grandeurs thermodynamiques dans la représentation des quasiparticules modifiées, permettra d'avoir un élément de comparaison et de vérification des résultats de la méthode MBCS, et son apport à celui de la méthode FTBCS

3.4.1 L'entropie

L'expression de l'entropie est donnée par l'équation (1.50) calculée dans la nouvelle représentation :

$$\overline{S} = -Tr(\overline{D} \ln \overline{D})$$

la matrice densité d'une quasiparticule modifiée étant donnée par (3.32) qui est semblable à celle de quasiparticule (1.60) l'expression de l'entropie $\overline{S}$ est la même que (1.86) en remplaçant E_ν par $\overline{E}_\nu$:

$$\overline{S} = 2 \sum_{\nu > 0} \left[\ln(1 + e^{-\beta \overline{E}_\nu}) \right] + 2 \sum_{\nu > 0} \left[\frac{\beta \overline{E}_\nu}{1 + e^{\beta \overline{E}_\nu}} \right]$$

Cette dernière expression sera utilisée dans le cadre de la méthode MBCS, ainsi que dans celle de MLN, avec la différence de la valeur de $\overline{E}_\nu$. Notons, toutefois que $\overline{E}_\nu$ dépendra de l'approche considérée.

3.4.2 L'énergie interne

Dans le cadre de la méthode MBCS

L'énergie interne est calculée dans la représentation de quasiparticules modifiées en utilisant l'équation (1.87) en remplaçant ρ_ν par $\overline{\rho}_\nu$ et Δ_T par $\overline{\Delta}$, on a :

$$\overline{E} = Tr(\overline{D}H) \quad (3.114)$$

$$\overline{E} = 2 \sum_{\nu > 0} \left(\varepsilon_\nu - \frac{G}{2} \overline{\rho}_\nu \right) \overline{\rho}_\nu - \frac{\overline{\Delta}^2}{G} \quad (3.115)$$

et en négligeant le terme $G\overline{\rho}_\nu$ et en remplaçant $\overline{\rho}_\nu$ par son expression on obtient :

$$\overline{E} = 2 \sum_{\nu > 0} \varepsilon_\nu \left(v_\nu^2 + (u_\nu^2 - v_\nu^2) n_\nu - 2u_\nu v_\nu \sqrt{n_\nu (1 - n_\nu)} \right) - \frac{\overline{\Delta}^2}{G} \quad (3.116)$$

Dans le cadre de la méthode Lipkin Nogami

La méthode de Lipkin Nogami opère une correction à l'énergie du fondamental, ainsi selon l'équation (3.88) et en remplaçant $\mathcal{H}$ par son expression on trouve pour chaque méthode, à savoir FTLN et MLN :

avec la méthode FTLN :

$$E_{LN} = E - \lambda_2 \Delta N^2 \quad (3.117)$$

$$= \sum_{\nu > 0} \varepsilon_\nu \left(1 - \frac{\varepsilon_\nu - \lambda}{E_\nu} \text{th} \left(\frac{\beta E_\nu}{2} \right) \right) - \frac{\Delta_T^2}{G} - \lambda_2 \Delta N^2 \quad (3.118)$$

avec l'expression de ΔN^2 donnée par les résultats (3.24), (3.25) et (3.26).

avec la méthode MLN :

$$\begin{aligned} \overline{E}_{LN} &= \langle \langle H \rangle \rangle - \lambda_2 \langle \langle \Delta N^2 \rangle \rangle \\ &= 2 \sum_{\nu > 0} \varepsilon_\nu \left(v_\nu^2 + (u_\nu^2 - v_\nu^2) n_\nu - 2u_\nu v_\nu \sqrt{n_\nu (1 - n_\nu)} \right) - \frac{\overline{\Delta}^2}{G} - 4\lambda_2 \sum_{\nu > 0} \bar{u}_\nu^2 \bar{v}_\nu^2 \end{aligned} \quad (3.119)$$

La correction en énergie par l'approche Lipkin Nogami apparait dans la contribution du terme $\lambda_2 \Delta N^2$.

3.4.3 La capacité calorifique

Dans le cadre de la méthode MBCS

Elle est définie comme dans le premier chapitre :

$$\overline{C} = \frac{d\overline{E}}{dT} = -\beta^2 \frac{d\overline{E}}{d\beta} \quad (3.120)$$

$$= T \frac{d\overline{S}}{dT} = -\beta \frac{d\overline{S}}{d\beta} \quad (3.121)$$

et on trouve :

$$\overline{C} = \frac{1}{2} \sum_{\nu > 0} \left\{ \overline{E}_\nu \sec^2 h^2 \left(\frac{\beta \overline{E}_\nu}{2} \right) \left(\beta^2 \overline{E}_\nu + \beta^3 \frac{d\overline{E}_\nu}{d\beta} \right) \right\} \quad (3.122)$$

avec :

$$\frac{d\overline{E}_\nu}{d\beta} = \frac{\overline{\Delta}}{\overline{E}_\nu} \frac{d\overline{\Delta}}{d\beta} \quad (3.123)$$

et

$$\frac{d\bar{\Delta}}{d\beta} = \frac{\frac{1}{2} \sum_{\nu>0} \bar{\Delta} A_\nu - \frac{1}{2} \sum_{\nu>0} (\varepsilon_\nu - \bar{\lambda}) C_\nu}{\frac{2}{G} - \beta \sum_{\nu>0} \left\{ \frac{B_\nu}{\beta \bar{E}_\nu} + \bar{\Delta}^2 \left(\frac{A_\nu}{2\bar{E}_\nu^2} - \frac{B_\nu}{\beta \bar{E}_\nu^3} \right) \right\} - \bar{\Delta} \sum_{\nu>0} \left\{ (\varepsilon_\nu - \bar{\lambda}) \left(\frac{\beta}{2\bar{E}_\nu^2} C_\nu + \frac{\sqrt{A_\nu}}{\bar{E}_\nu^3} \right) \right\}} \quad (3.124)$$

où

$$\begin{aligned} A_\nu &= \sec h^2(x_\nu), & B_\nu &= th(x_\nu), & C_\nu &= \sec h(x_\nu) th(x_\nu) \\ x_\nu &= \frac{\beta \bar{E}_\nu}{2} \end{aligned} \quad (3.125)$$

Dans le cadre de la méthode Lipkin Nogami

Avec la méthode FTLN, La contribution de cette méthode réside dans le terme $-\lambda_2 \Delta N^2$ à l'énergie, alors la dérivée de cette dernière se fait par l'addition de l'expression de la capacité calorifique calculée dans le cadre des méthodes FTBCS et MBCS, et de la variation du terme $-\lambda_2 \Delta N^2$ en fonction de la température i.e :

$$\begin{aligned} C_{LN} &= \frac{dE_{LN}}{dT} = \frac{d}{dT} (E - \lambda_2 \Delta N^2) \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\nu>0} \left\{ E_\nu \sec h^2\left(\frac{\beta E_\nu}{2}\right) \left(\beta^2 E_\nu + \beta^3 \frac{dE_\nu}{d\beta} \right) \right\} - \lambda_2 \frac{d\Delta N^2}{dT} - \Delta N^2 \frac{d\lambda_2}{dT} \end{aligned} \quad (3.126)$$

A partir de l'expression de λ_2 (3.109) et (3.113), il est clair que ce terme dépend de la température, mais il est noté dans les références[8][66], que ce paramètre varie peu avec la température, ce qui permet en amont de négliger le dernier terme de l'expression (3.126).

Avec la méthode MLN Dans le cadre de la méthode MLN, elle est formellement identique à celle calculée par la méthode MBCS diminuée de la dérivée du dernier terme qui apparait dans l'expression de l'énergie :

$$\bar{C} = \frac{1}{2} \sum_{\nu>0} \left\{ \bar{E}_\nu \sec h^2\left(\frac{\beta \bar{E}_\nu}{2}\right) \left(\beta^2 \bar{E}_\nu + \beta^3 \frac{d\bar{E}_\nu}{d\beta} \right) \right\} - 4 \frac{d}{dT} \left(\lambda_2 \sum_{\nu>0} \bar{u}_\nu^2 \bar{v}_\nu^2 \right) \quad (3.127)$$

En raison de la complexité de l'expression de λ_2 , la contribution du dernier terme sera évaluée numériquement.

3.4.4 La grande fonction de partition

On établit la nouvelle expression de la grande fonction de partition à partir de l'expression (1.98) on a donc :

$$\bar{\Phi} = -\beta \sum_{\nu \succ 0} (\varepsilon_\nu - \bar{\lambda} - \bar{E}_\nu) + 2 \sum_{\nu \succ 0} \left[\ln(1 + e^{-\beta \bar{E}_\nu}) \right] - \beta \frac{\bar{\Delta}^2}{G} \quad (3.128)$$

Chapitre 4

Resultats numériques et discussions

Dans ce chapitre, nous allons entreprendre de résoudre numériquement, les équations du gap établies aux chapitres précédents, correspondantes à chaque méthode à savoir la méthode FTBCS, MBCS, FTLN et MLN, et une comparaison sera faite systématiquement entre les méthodes.

Il est toujours intéressant, en première approche de tester ces méthodes avec des modèles schématiques, qui permettent d’avoir une idée sur leur fiabilité et leur consistance.

Le modèle schématique qu’on a utilisé dans nos calculs est celui de Richardson [68]-[73], qui représente un spectre d’énergies individuelles, uniformément espacé.

En second étape, nous allons exposer les résultats obtenus dans le cas réaliste, où on a utilisé les énergies du champ moyen de Wood-Saxon, pour le modèle à particules indépendantes.

Pour chaque étape, nous avons calculé les grandeurs thermodynamiques, dont on a établi les expressions aux chapitres précédents, à savoir l’énergie interne dans le cas schématique, l’énergie d’excitation pour le cas réaliste, la capacité calorifique ainsi que l’entropie, et ce pour chaque méthode.

4.1 Le cas schématique

Le modèle schématique dit de Richardson, consiste à considérer un spectre d’énergies doublement dégénéré et équidistant, où l’énergie de chaque niveau vaut $\epsilon_\nu = \nu \text{ MeV}$, et la différence d’énergie entre deux niveaux successifs est de 1 MeV , voir figure (4 – 1).

Habituellement, ce modèle est considéré de manière à ce que le nombre de paticules, soit égale à la dégénérescence totale des niveaux $N_0 = \Omega$, mais pour montrer la sensibilité de la méthode MBCS à la configuration du spectre d'énergies, ce qui correspond plus, au cas réaliste où la dégénérescence totale des niveaux est beaucoup plus importante que le nombre de particules, on est amené également à étudier le cas $N_0 \neq \Omega$ en seconde étape.

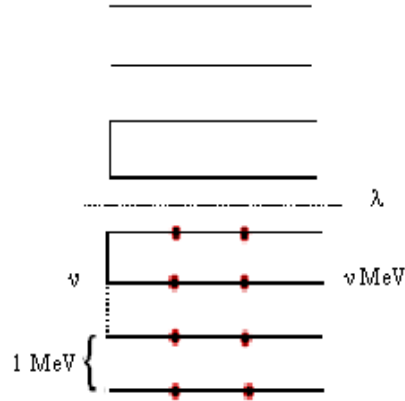


FIG. 4-1 – Les niveaux d'énergies dans le modèle schématique de Richardson.

4.1.1 Le paramètre du gap

Le cas $N_0 = \Omega$

Dans le cas où $N_0 = \Omega$, la moitié des niveaux est occupée par les N_0 particules en plaçant deux particules dans chaque niveau, et l'autre moitié est vide on parle d'états trous, donc les niveaux de 1 à Ω_p sont occupés, et de $(\Omega_p + 1)$ à Ω_t , sont vides, et dans le cas où $N_0 = \Omega$, on a $\Omega_p = \Omega_t = \frac{N_0}{2}$.

En se plaçant dans ce cas, nous avons résolu numériquement les équations du gap correspon-

dantes à chaque méthode en l'occurrence, FTBCS, MBCS, FTLN et MLN.

Nous avons étudié quatre systèmes avec $N_0 = 10, 14, 30$ et 50 , où on a pris les valeurs de la constante d'appariement G , de manière à obtenir une valeur de Δ de 1MeV pour $T=0$, ce qui amène à prendre $G = 0.435, 0.38, 0.295$, et 0.256 MeV pour les quatre systèmes respectivement.

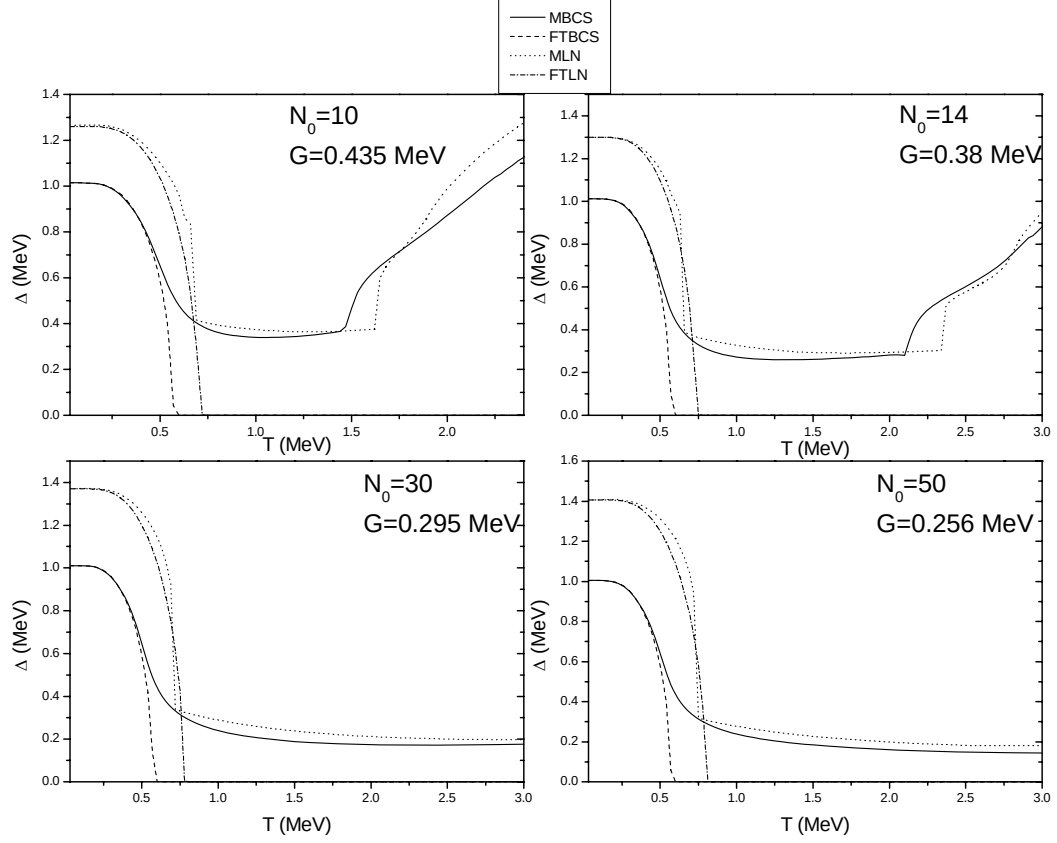


FIG. 4-2 – Variation du paramètre du gap en en fonction de la température, calculée dans le cadre des méthodes FTBCS, MBCS, FTLN et MLN et ce pour quatre systèmes dont $N_0 = 10, 14, 30$ et 50 .

Le gap en énergie calculé avec la méthode FTBCS figure (4 – 2), présente un plateau où il varie peu avec la température suivie d'une chute brutale, jusqu'à annulation à une température T_c dite température critique. Cette chute brutale est due au terme $th(\frac{\beta E_\nu}{2})$, de l'équation

(1.82), voir figure (4 – 3), qui diminue rapidement avec la température. Nous remarquons que la température critique est de l'ordre de $T_c = 0.57 MeV$ pour les quatre cas. Cette température a été expliquée initialement comme l'existence d'une transition de phase de l'état superfluide à un état normal. En effet, la principale prévision de la théorie BCS est l'existence d'un gap entre l'état fondamental et les premiers états excités, expliquée comme une condensation de paires de fermions sous l'effet de l'interaction d'appariement, et avec l'élévation de la température ces paires se brisent progressivement, ce qui entraîne la disparition du gap observé à T_c , et le système devient un gaz de fermi à particules indépendantes. Pour des systèmes dont le nombre de particules est très important comme les électrons de conduction dans les métaux, les effets quantiques et thermiques s'évanouissent rapidement avec la température, et de façon brutale. Dans le cas des systèmes finis tels les noyaux atomiques, les fluctuations thermiques ne peuvent être négligées (voir figure 4-4) et elles restent toujours finies, et la probable transition de phase survient à une température supérieure à celle prévue par la méthode FTBCS. La méthode MBCS développée au chapitre 3, propose une manière d'inclure les effets thermiques au niveau microscopique, et on obtient comme résultat, la décroissance progressive du paramètre au voisinage T_c (4 – 2), ce qui entraîne l'inexistence de la transition de phase abrupte. Ce résultat est dû au second terme du gap modifié $\delta\Delta$ Eq (3.72), à savoir sa partie thermique, qui augmente progressivement avec la température et entraîne l'adoucissement de la pente. Nous remarquons aussi, que pour les systèmes possédant un petit nombre de particules $N_0 = 10$ ou 14 , le gap augmente brusquement à partir d'une certaine température nommée T_M par les auteurs [47], et elle vaut $T_M = 1,55 MeV, 2,4 MeV$ respectivement, cette remarque ne signifie pas que pour les systèmes possédant N_0 élevé, exemple de $N_0 = 30, 50$, que la température T_M n'existe pas, mais simplement qu'elle est supérieure à $3 MeV$ (voir figure 4-6). Les raisons de l'apparition de cette température seront discutées ci-dessous.

Les méthodes LN, FTLN et leur modifiée MLN, sont des méthodes approximatives pour inclure les fluctuations du nombre de particules dans les approches BCS, les courbes en pointillés, et en points tirets représentent l'évolution du gap en énergie en fonction de la température, dans le cadre des méthodes MLN et FTLN respectivement. Nous observons que la valeur du gap à $T = 0$ est supérieure à celle calculée par les méthodes BCS, un écart de l'ordre de 23,08% pour $N_0 = 14$ par exemple, et dans le cadre de la méthode FTLN, on note une chute brutale

semblable aux courbes de la méthode FTBCS, mais s'annule à une température critique T_{cLN} plus importante que celle de la méthode FTBCS, ce qui indique l'importance d'éliminer les fluctuations du nombre de particules à basse température.

Dans les courbes correspondantes à la méthode MLN, le gap a les mêmes valeurs que celles calculées dans le cadre de la méthode FTLN, à basse température, et ce dans les quatre systèmes, puis chute au voisinage de la température critique T_{cLN} , alors qu'à haute température, il présente un comportement similaire à celui de la méthode MBCS, et on peut même signaler qu'au-delà de T_{cLN} les deux courbes convergent.

Il est intéressant de noter, que l'inclusion des fluctuations du nombre de particules ne se fait que dans l'intervalle $[0, T_c]$, ce qui explique que les deux courbes se rejoignent pour les hautes températures.

La figure (4 – 3), représente l'évolution des densités de probabilités u_ν et v_ν calculées par l'approche FTBCS, ainsi que leur produit, et la $th(\frac{\beta E_\nu}{2})$, en fonction de la température, pour $N_0 = 14$ et $G = 0.38 MeV$.

En l'absence d'appariement les paramètres u_ν et v_ν , possèdent une solution triviale de la forme suivante :

$$u_\nu^2 = \begin{matrix} 0 & \epsilon_\nu \prec \lambda \\ 1 & \epsilon_\nu \succ \lambda \end{matrix} \quad \text{et} \quad v_\nu^2 = \begin{matrix} 1 & \epsilon_\nu \prec \lambda \\ 0 & \epsilon_\nu \succ \lambda \end{matrix} \quad (4.1)$$

Les états au-dessous du niveau de Fermi sont entièrement occupés avec une probabilité 1, et les états au-dessus du niveau de Fermi sont vides. Sous l'effet de l'appariement, les valeurs de u_ν et v_ν , sont déterminés avec les expressions (1.39), et ils présentent une croissance ou décroissance progressive pour les états proches du niveau de Fermi.

De la figure(4 – 3), nous notons qu'au voisinage du niveau de Fermi à savoir $\nu = 7$ et 8 , lorsque $T \prec 0.5 MeV$, les amplitudes de probabilités u_ν et v_ν varient faiblement en fonction de la température, leur produit atteint sa valeur maximale de l'ordre de $u_\nu v_\nu = 0.40$, de même pour la $th(\frac{\beta E_\nu}{2})$ qui est de l'ordre de 0.8. Ceci explique la présence du plateau dans la courbe du paramètre gap.

Quand, on compare les valeurs de u_ν et v_ν pour les températures $T = 0.5$ et $0.6 MeV$, un écart important est noté, en effet leur évolution est progressive pour $T \preceq 0.5 MeV$, mais il

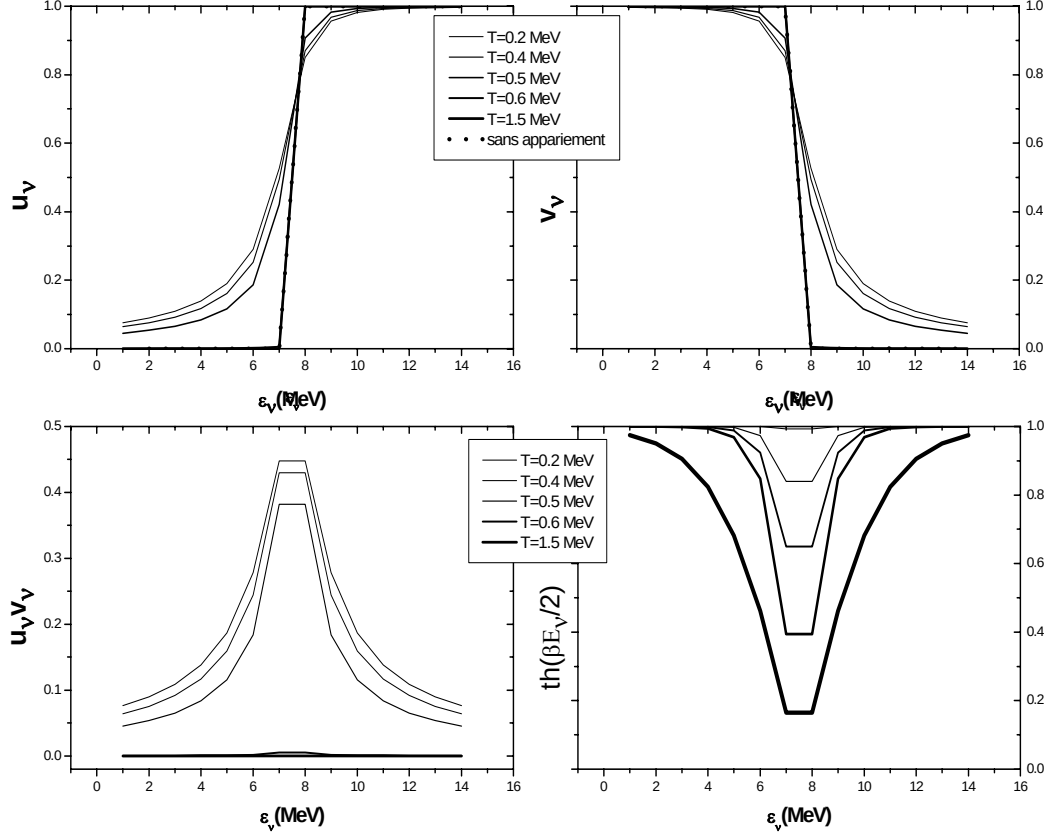


FIG. 4-3 – Variation des paramètres u_ν et v_ν , leurs produit $u_\nu v_\nu$ et $th(\frac{\beta E_\nu}{2})$ apparaissant dans les équations du gap FTBCS, en fonction du spectre des énergies et pour $T = 0.2, 0.4, 0.5, 0.6$ et $1.5 MeV$.

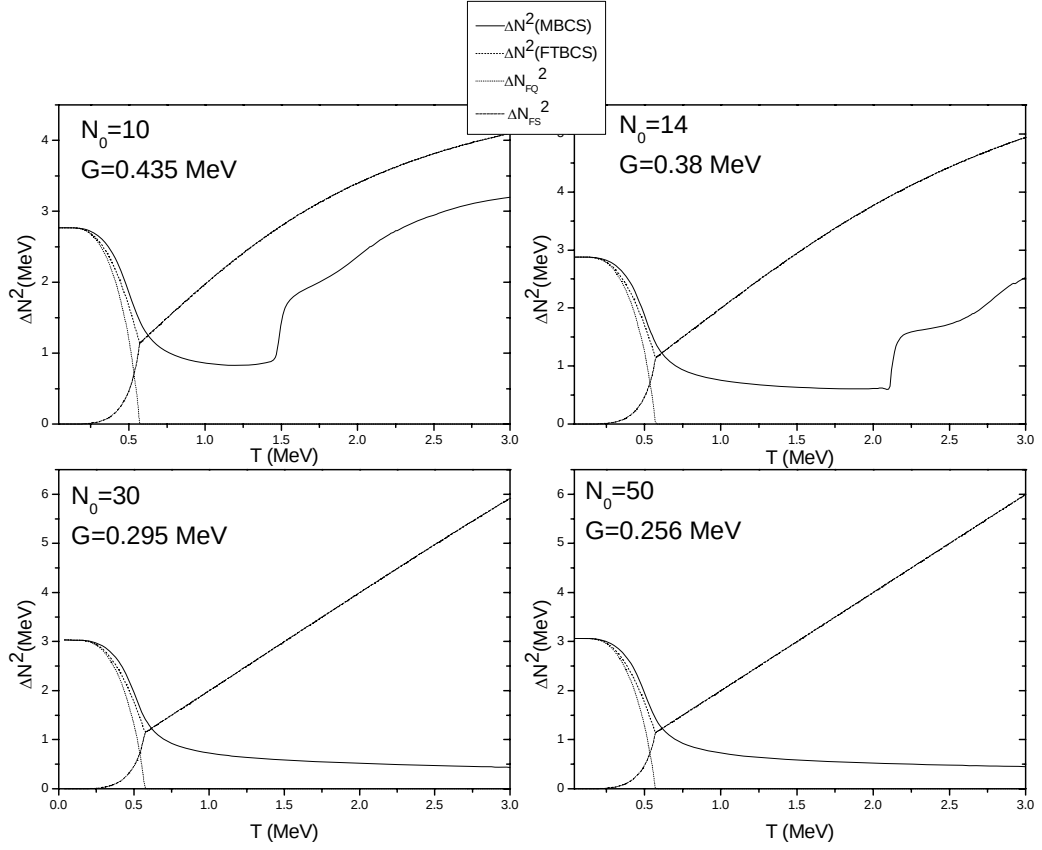


FIG. 4-4 – Variation des fluctuations du nombre de particules, en fonction de la température dans le cadre des méthodes FTBCS et MBCS.

est complètement différent pour $T = 0.6 \text{ MeV}$, et présente un comportement semblable aux expressions (4.1), en l'absence d'appariement, et le produit $u_\nu v_\nu$ devient nul. Ainsi un passage brusque s'est produit entre un état en présence d'appariement vers un état sans appariement, ce qu'on nomme habituellement la transition de phase superfluide-normal.

Afin de saisir l'apport de l'approche MBCS, on a rapporté sur la figure (4 – 5) le comportement des paramètres u_ν et v_ν (4-5-a) propre à la méthode MBCS, leur produit $u_\nu v_\nu$ (4-5-b), la quantité $th(\frac{\beta E_\nu}{2})$ (4-5-c), la différence $(u_\nu^2 - v_\nu^2)$ (4-5-e) propre à la méthode MBCS et également $sec h(\frac{\beta E_\nu}{2})$ (4-5-c). La figure (4-5-d) représente l'évolution de la distribution de Fermi

en fonction de la température et du spectre des énergies.

Leur variation en fonction de la température se fait d'une manière semblable à celle de la méthode FTBCS, à savoir, les paramètres u_ν et v_ν tendent vers la solution (4.1), leur produit diminue, mais à la différence de la méthode FTBCS, toutes ces quantités évoluent progressivement en fonction de température, sans effet brusque.

Nous remarquons aussi, l'augmentation de la valeur du terme $\sec h(\frac{\beta E_\nu}{2})$ présent dans $\delta\Delta$, en fonction de la température, qui dépend rappelons le, des fluctuations du nombre de quasi-particules, et ce qui induit une décroissance progressive $\overline{\Delta}$ au-delà de la température critique.

Dans la figure (4 – 5), on remarque que toutes les courbes en très gras représentent les quantités discutées ci dessus, à la température $T = 3MeV$, présentent une asymétrie par rapport au niveau de Fermi, ce qui explique l'apparition de la température T_M , qui vaut dans ce cas précis $T_M = 2.43MeV$.

L'apparition de la température T_M , a donné lieu à beaucoup de critiques par les auteurs [64][74]. On note qu'elle augmente linéairement avec le nombre de particules, elle vaut environ $0.7MeV$, pour $N_0 = 6$, et à peu près $23.6MeV$ pour $N_0 = 100$, voir figure (4 – 6).

N_0	G (Mev)	T_M (Mev)
6	0.55	0.70
8	0.48	0.88
10	0.435	1.55
12	0.403	1.99
14	0.38	2.43
16	0.361	2.90
18	0.346	3.35
20	0.334	3.78

N_0	G (Mev)	T_M (Mev)
30	0.295	6.13
40	0.272	7.91
50	0.256	11.0
60	0.2445	13.49
70	0.236	15.97
80	0.2285	18.52
90	0.223	21.04
100	0.2175	23.60

Il reste que sa systématique quelque que soit le nombre de particules N_0 , pose beaucoup d'interrogations, sur sa nature, et la justification théorique de sa survenance.

Il est à noter aussi que cette température, reste élevée en fonction du nombre de particules, en effet si on s'accorde à dire que la transition de phase est un phénomène qui survient naturellement avec la température, alors pour un système par exemple possédant $N_0 = 50$, la température T_M vaut $11MeV$, et à cette température, il est difficile de parler d'un système de 50 particules qui

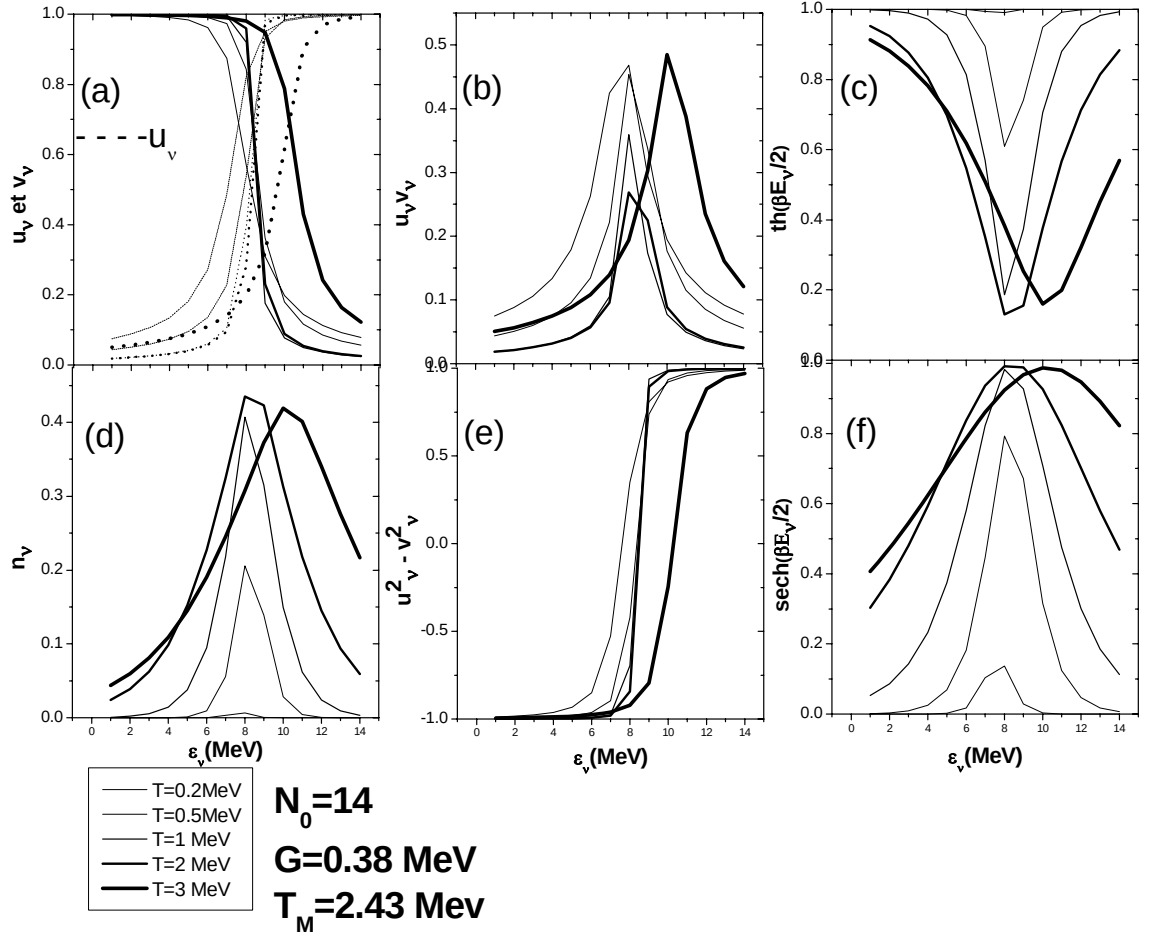


FIG. 4-5 – Variation des paramètres u_ν et v_ν , leurs produit $u_\nu v_\nu$, $th(\frac{\beta E_\nu}{2})$, $(u_\nu^2 - v_\nu^2)$, $sech(\frac{\beta E_\nu}{2})$ et $\bar{n}_\nu$ dans le cas de la méthode MBCS, en fonction du spectre des énergies et pour $T = 0.2, 0.5, 1, 2$ et 3 MeV .

reste uni, alors on pourra toujours définir un intervalle de validité de la méthode MBCS $[0, T]$ avec $T \prec T_M$.

Sensibilité de la méthode MBCS à la configuration du spectre des énergies, le cas $N_0 \neq \Omega$

En 2006, N.Dinh Dang [47] montre que si on fait le choix de $\Omega = N_0 + 1$, la température T_M disparaît et le gap retrouve un comportement lissé sans présence de cassure ou d'augmentation brusque. Ce choix a incité à tester la méthode pour des valeurs de $N_0 \neq \Omega$, et ce dans le but d'expliquer pourquoi elle est aussi efficace pour $\Omega = N_0 + 1$.

Dans le cas où $N_0 \neq \Omega$, les N_0 particules se placent sur les $\frac{N_0}{2}$ premiers niveaux, et les $\Omega - \frac{N_0}{2}$ se trouvent vides, où $\Omega_p = \frac{N_0}{2} \neq \Omega_t$. Pour étudier ce cas nous avons choisi de traiter le cas $N_0 = 14$, et $\Omega = N_0 + k$ ou $k = -4, -3, \dots, 100$ et avec la constante d'appariement G prise chaque fois pour avoir $\Delta(T = 0) = 1MeV$.

La figure (4 – 7) montre trois scénarios possibles pour le paramètre du gap en fonction de la valeur de k .

Pour $k \leq 0$, le gap possède toujours une température T_M qui survient de plus en plus tôt, quand la $|k|$ augmente.

Pour $k = 1$, le lissage du gap se fait quelque soit la température, et il n'y'a plus de T_M , et le gap se stabilise autour d'une valeur d'environ $\Delta = 0.18MeV$.

Pour $k \succ 1$, un autre comportement est observé, à savoir que le gap diminue progressivement, jusqu'à une température se trouvant au-delà de la température critique, environ $T = 1.2MeV$ pour $k = 2$, et à partir de laquelle il chute vers les valeurs négatives. Cette température diminue avec l'augmentation de k .

L'apport de la méthode MBCS, comme cela a déjà été dit, se concrétise par la contribution à l'expression de $\overline{\Delta}$ d'un terme $\delta\Delta$ incluant les fluctuations thermiques des quasiparticules, en effet la partie quantique Δ_Q diminue rapidement à partir de T_c . Pour comprendre ces différents résultats selon la valeur de k analysons plus en détails ce terme :

$$\delta\Delta = G \sum_{\nu \succ 0} (v_\nu^2 - u_\nu^2) \delta N_\nu \quad (4.2)$$

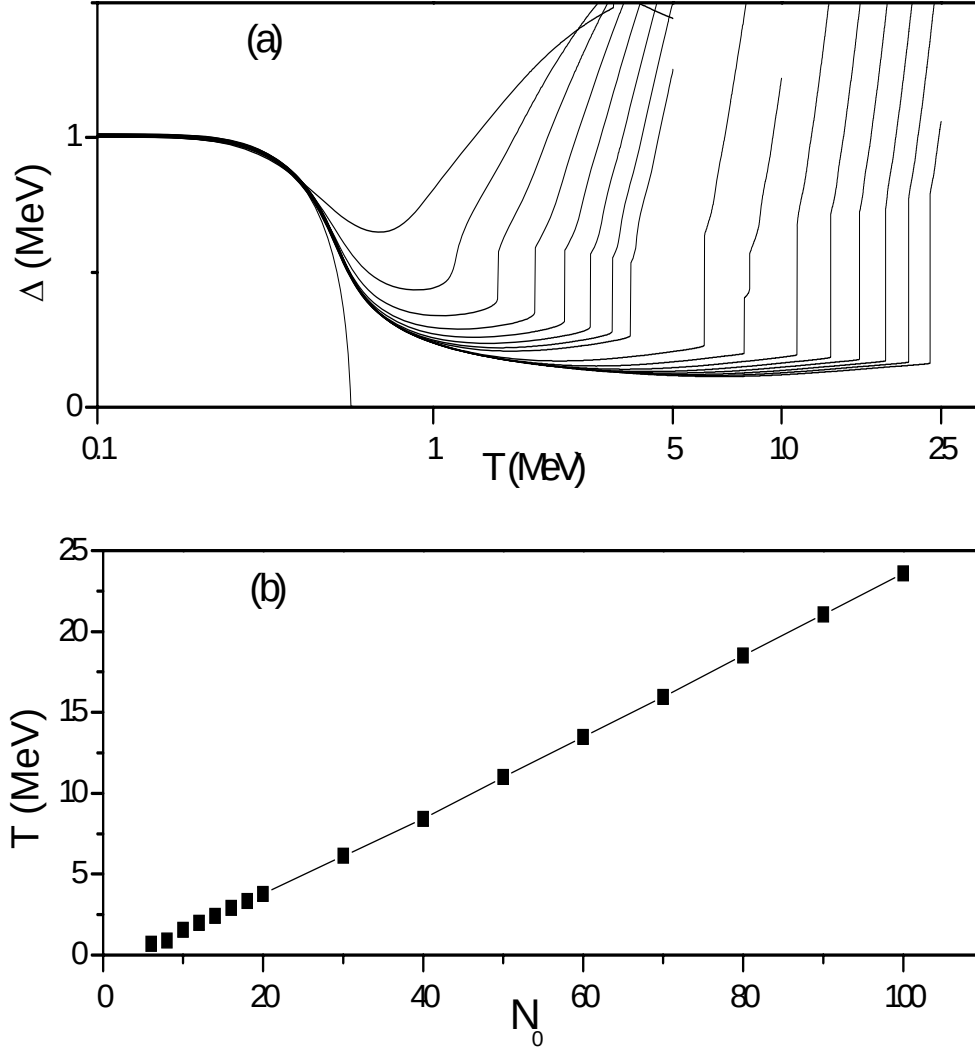


FIG. 4-6 – (a) Variation du gap en fonction de la température, dans le cadre de la méthode MBCS, pour $N_0 = 6, 8, 10, 12, 14, 16, 18, 20, 30, 40, 50, 60, 70, 80, 90$ et 100 (b) Variation de la température limite T_M en fonction du nombre de particules N_0 .

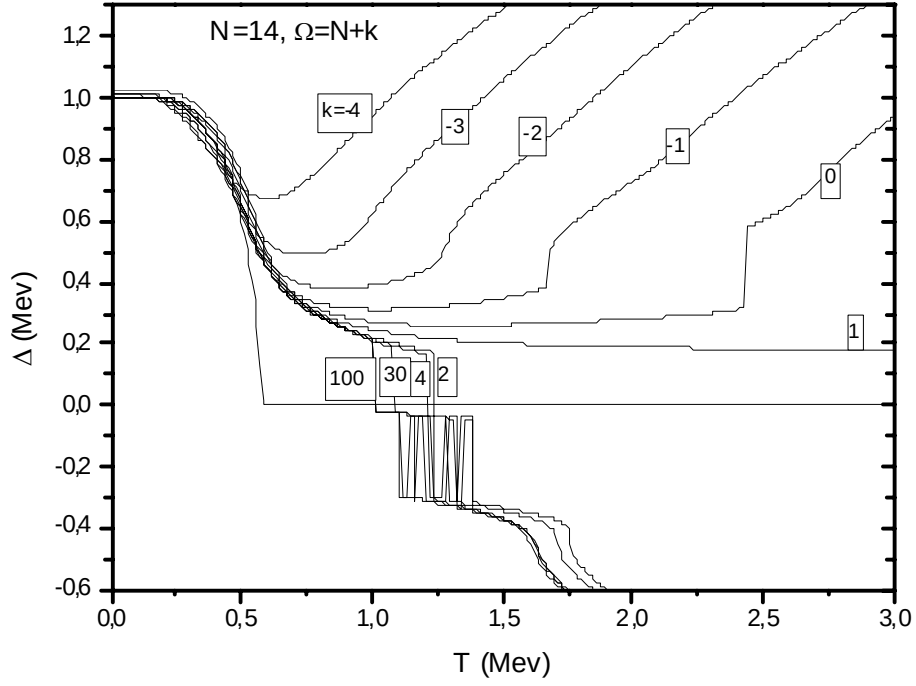


FIG. 4-7 – Variation du paramètre gap en fonction de la température, dans le cadre de la méthode MBCS, où $N_0 = 14$ et $\Omega = 14 + k$, $k = -4, \dots, 100$.

qu'on peut écrire comme la somme des contributions des états particules, et celle des états trous :

$$\delta\Delta_p = G \sum_{\nu \succ 0}^{\Omega_p} (v_\nu^2 - u_\nu^2) \delta N_\nu \quad , \quad \succeq 0 \quad , \quad (v_\nu^2 \succeq u_\nu^2) \text{ états particules} \quad (4.3)$$

$$\delta\Delta_t = G \sum_{\nu \succ 0}^{\Omega_t} (v_\nu^2 - u_\nu^2) \delta N_\nu \quad , \quad \preceq 0 \quad , \quad (v_\nu^2 \preceq u_\nu^2) \text{ états trous} \quad (4.4)$$

La figure (4 – 5), montre une certaine symétrie pour δN_ν , par rapport au niveau de Fermi, dans le modèle standard de Richardson où $N_0 = \Omega$, et comme $(v_\nu^2 - u_\nu^2)$ change de signe passant

de positif à négatif, il se crée un certain équilibre $\delta\Delta_p$ et $\delta\Delta_t$ qui permet au $\overline{\Delta}$ d'être stable. La figure montre aussi que à $T = 3MeV$ une asymétrie est constatée, et la partie positive $\delta\Delta_p$ prend le dessus, ce qui rompt l'équilibre entre ces deux parties causant ainsi l'augmentation brusque observée à T_M .

Aussi dans le cas où $k < 0$, la contribution de $\delta\Delta_t$ est diminuée ce qui favorise la contribution de $\delta\Delta_p$ et la température T_M , survient plus rapidement. Dans le cas $k = 1$, un équilibre subtil se crée, permettant à $\overline{\Delta}$ d'avoir le comportement lissé qu'on constate figure(4 – 7). Toute valeur de k supérieure à un, engendre un déséquilibre vers la partie $\delta\Delta_t$, la partie négative de $\delta\Delta$, faisant que le gap chute vers les valeurs négatives.

Pour montrer l'influence de $\delta\Delta$, sur le comportement du gap modifié $\overline{\Delta}$, nous avons porté sur la figure (4 – 8) l'évolution du gap, en fonction de la température, pour quatre systèmes avec le nombre de particules est le même $N_0 = 14$, mais avec des nombres d'états différents $\Omega = 13, 14, 15$ et 16 . On remarque que le comportement du gap modifié à haute température est systématiquement similaire à celui de $\delta\Delta$, et comme ce dernier est sensible au spectre des énergies, alors le paramètre du gap modifié l'est aussi.

Ces constatations, suggèrent que l'applicabilité de la méthode est restreinte, et surtout dans les cas qui nous intéressent, à savoir les cas réalistes, où le nombre d'états trous est beaucoup plus important que les états particules.

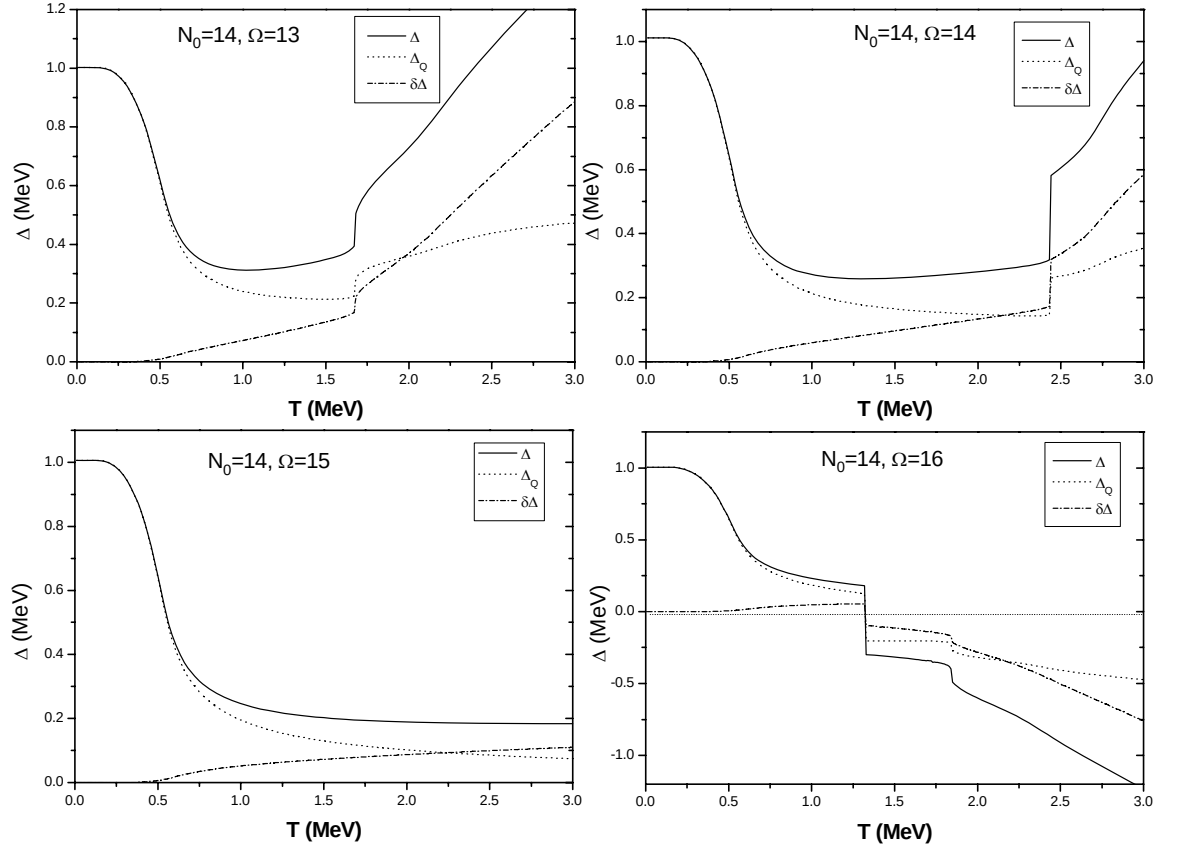


FIG. 4-8 – Variation du paramètre gap, sa partie quantique, et sa partie statistique, en fonction de la température, pour $N_0 = 14$ et $\Omega = 13, 14, 15$ et 16 .

Traitement macroscopique des fluctuations thermiques :

La valeur du paramètre gap calculée par la méthode FTBCS, est interprétée comme la valeur la plus probable. Le gap est une grandeur macroscopique reflétant le comportement microscopique des nucléons sous l'effet de l'appariement, son calcul a été effectué dans l'ensemble grand canonique, où il est admis que les valeurs les plus probables coïncident avec leurs valeurs moyennes, de ce fait on a négligé que ces grandeurs fluctuent sous l'effet de la température. Pour les grands systèmes, cette hypothèse est acceptable, car les fluctuations thermiques engendrées s'évanouissent sous l'effet du nombre important de particules, contrairement aux systèmes finies possédant un petit nombre de particules, comme les noyaux atomiques, alors la valeur la plus probable diffère de la valeur moyenne, et cette différence augmente avec la température.

Pour tenir compte de ces fluctuations, Moretto [22], se basant sur la théorie des transitions de phases de Landau [76], définit la distribution isothermique des probabilités du paramètre du gap comme :

$$P(\Delta) \propto \exp \{ \Phi(\beta, \Delta) \} \quad (4.5)$$

$\Phi(\beta, \Delta)$ est la grande fonction de partition expression (1.98). Le calcul de la valeur moyenne du gap est donnée par :

$$\langle \Delta \rangle = \frac{\int_0^\infty \Delta P(\Delta) d\Delta}{\int_0^\infty P(\Delta) d\Delta} \quad (4.6)$$

où on a admis, que cette distribution néglige les effets d'origine quantique¹.

Pour effectuer ce calcul on considère $\Phi(\beta, \Delta)$ comme une fonction indépendante du paramètre Δ . On présente les résultats obtenus pour $N_0 = 14$, $G = 0.38 \text{ MeV}$.

La figure(4 – 9), représente une comparaison entre la méthode MBCS, qui traite les fluctuations thermiques de manière microscopique, et la valeur moyenne du gap, qui les traite de façon macroscopique. On remarque que dans les deux cas, il n'y a pas de chute brutale du para-

¹A très basse température, ou pour les systèmes hors d'équilibre qui varie rapidement avec le temps, les effets quantiques dominent, et tout calcul avec l'expression précédente devient invalide.

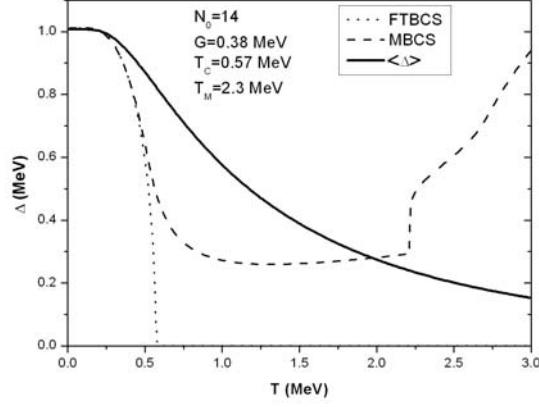


FIG. 4-9 – Variatirion du paramètre gap en fonction de la température, dans le cadre des méthodes de traitement macroscopique et microscopique des fluctuations thermiques, pour $N_0 = 14$, $G = 0.38 \text{ MeV}$.

mètre gap, sa pente est lissée, et on conclut à l'absence de transition de phase à la température critique T_c prévue par la méthode FTBCS. Dans les deux types de traitement, nous avons montré l'insuffisance de chacune des méthodes, la sensibilité de la méthode MBCS à la configuration du spectre des énergies, et l'existence d'une certaine valeur T_M , et pour le traitement macroscopique, la non inclusion des fluctuations quantiques qui ont leurs importance à l'échelle microscopique, surtout pour les systèmes finis, et qui dominant aux basses températures.

4.1.2 Energie interne

Nous avons porté sur la figure (4 – 10), les résultats obtenus à partir des expressions de l'énergie interne, établies dans le cadre des différentes méthodes FTBCS, MBCS, FTLN et MLN, et ce pour les quatre systèmes choisis précédemment c'est à dire $N_0 = 10, 14, 30$ et 50 .

Les résultats courbes obtenues par la méthode FTBCS, pour les différentes valeurs de N_0 , se présentent en deux parties caractérisées par des taux de variations différents qui se rejoignent à la température critique T_c . Aux basses températures, l'énergie varie peu, puis elle augmente rapidement jusqu'à T_c , où une partie d'elle sert à briser les paires de nucléons appariés.

Dans l'intervalle $[T_c, T]$, la pente de la courbe est moins importante, le système étant devenu un gaz de Fermi, l'énergie est une fonction quadratique en fonction de la température (*Eq9 – 73*)

de la référence [2].

Avec la méthode MBCS, l'énergie interne a un comportement identique aux basses températures que la première courbe, puis elle varie progressivement en s'écartant de la courbe FTBCS. Ceci s'explique par le terme $\left(-\frac{\bar{\Delta}^2}{G}\right)$ présent dans l'expression de l'énergie MBCS (3.116), qui persiste au-delà de T_c . Pour les systèmes légers $N_0 = 10$ et 14 , à cause de la température T_M , la courbe de l'énergie présente une cassure, en effet à cette température le gap modifié augmente brusquement, et la présence du terme $\left(-\frac{\bar{\Delta}^2}{G}\right)$ fait chuter rapidement l'énergie.

Les méthodes de projection utilisées, à savoir FTLN et MLN permettent de corriger l'énergie du terme $-4\lambda_2\Delta N^2$, correspondant aux fluctuations du nombre de particules, ainsi l'énergie à $T = 0$, est abaissée.

Au delà de cette remarque les deux courbes se comportent qualitativement, de manière similaire, les courbes tracées dans le cadre de la méthode FTLN présentent les deux parties avant et après T_c correspondantes aux états superfluide et normal. Quant à la méthode MLN, la courbe ressemble à celle de la méthode FTLN aux basses températures, puis augmente rapidement au voisinage de T_{cLN} , pour rejoindre les courbes tracées dans le cadre de la méthode MBCS à haute température.

4.1.3 Capacité calorifique

Nous avons porté les résultats obtenus pour la capacité calorifique, et ce pour les quatre systèmes étudiées précédemment dans la figure (4 – 11). Avant d'entamer la discussion à propos de la capacité calorifique, faisant un bref rappel de la définition de la transition de phase.

La transition de phase se traduit par le changement abrupt d'une propriété du système, cela se produit lorsqu'il existe une discontinuité dans une fonction thermodynamique du système ou dans des dérivées de celle ci [2].

Nous remarquons que les deux courbes tracées dans le cadre de la méthode FTBCS et la méthode FTLN, et ce pour chaque système, et malgré un léger décalage, présentent un pique aux températures critiques T_c et T_{cLN} . Comme les taux de variation de l'énergie constatés à la section précédente, sont différents avant et après la température critique, une discontinuité est observée pour ces températures, et selon la définition rappelée plus haut, on dit que le système subit une transition de phase, qui s'explique en amont par la chute brutale du gap

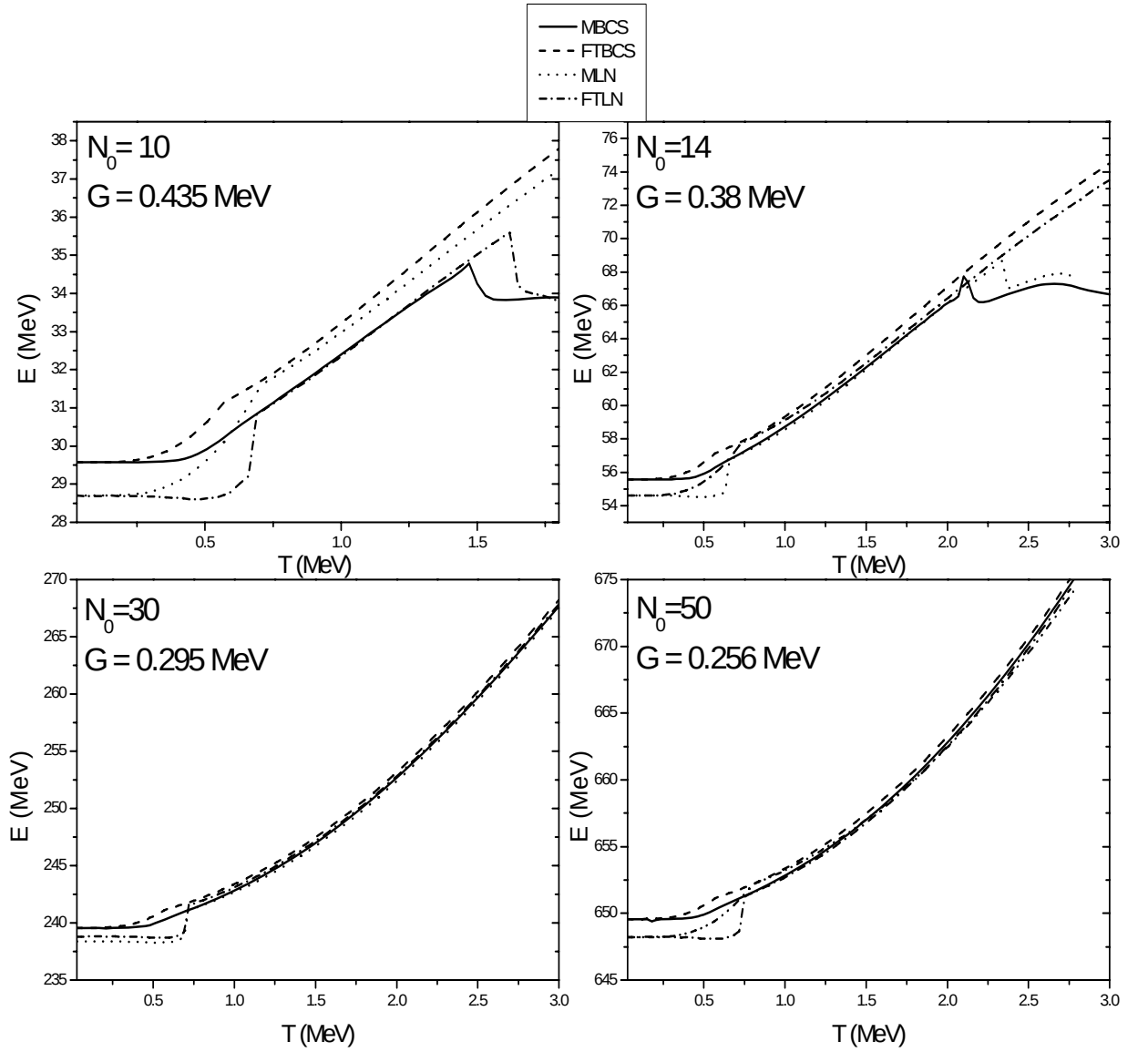


FIG. 4-10 – Variation de l'énergie interne en fonction de la température, calculée dans le cadre des méthodes FTBCS, MBCS, FTLN et MLN, et ce pour quatre systèmes dont $N_0 = 10, 14, 30$ et 50.

calculé dans le cadre de ces deux approches. Au-delà de cette température le système devient un gaz de Fermi, et comme nous l'avons signalé dans la section précédente, l'énergie est une fonction quadratique de la température, alors sa dérivée c'est à dire la capacité calorifique est une fonction linéaire de la température.

L'inclusion des fluctuations thermiques dans le formalisme MBCS, prévient la transition de phase abrupte, ce qui nous permet d'obtenir un comportement sans discontinuité pour les courbes de la capacité calorifique .

Nous notons une augmentation rapide des courbes MLN, au voisinage des températures critiques T_{cLN} , causée par la chute du paramètre gap pour ces températures.

Pour les systèmes à faible nombre de particules $N_0 = 10$ et 14 , à la température T_M la capacité calorifique présente un pic très prononcé, causé par la variation rapide du gap à cette température.

4.1.4 Entropie

D'après le troisième principe de la thermodynamique [76], l'entropie d'un système est nulle à $T = 0$. On constate que dans toutes les courbes figure (4 – 12), et pour toutes les méthodes, l'entropie est nulle dans un intervalle de $T = 0 MeV$ à une valeur de l'ordre de $T \simeq 0.2 MeV$, correspondant au palier que présente le gap dans cet intervalle.

L'élévation de la température engendre des excitations statistiques, qui font varier les probabilités d'occupation des niveaux causant l'augmentation de l'entropie. Comme les méthodes FTBCS et FTLN, prévoient l'effondrement du gap juste après un palier, alors le passage d'un état macroscopique du système ordonné sous l'effet de l'appariement, vers un état moins ordonné cause l'augmentation de l'entropie, observée au voisinage de la température critique.

Dans le cadre de la méthode MBCS, l'augmentation est toujours progressive, ce qui indique une transition de phase douce. La chute du gap à la température critique T_{cLN} , constatée dans les courbes de la méthode MLN, fait abaisser la valeur de l'entropie, à haute température.

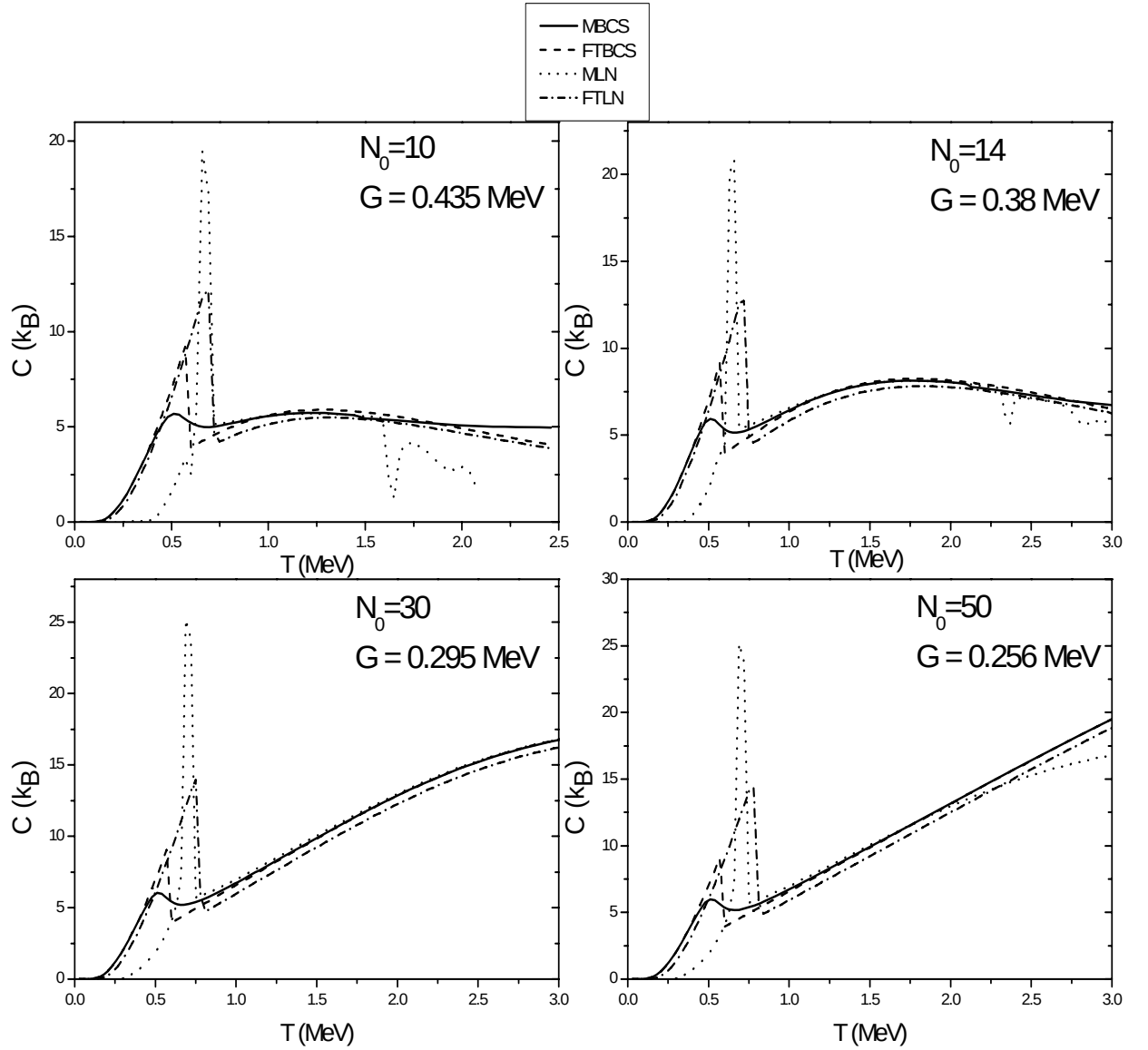


FIG. 4-11 – Variation de la capacité calorifique en fonction de la température, calculée dans le cadre des méthodes FTBCS, MBCS, FTLN et MLN et ce pour quatre systèmes dont $N_0 = 10, 14, 30$ et 50 .

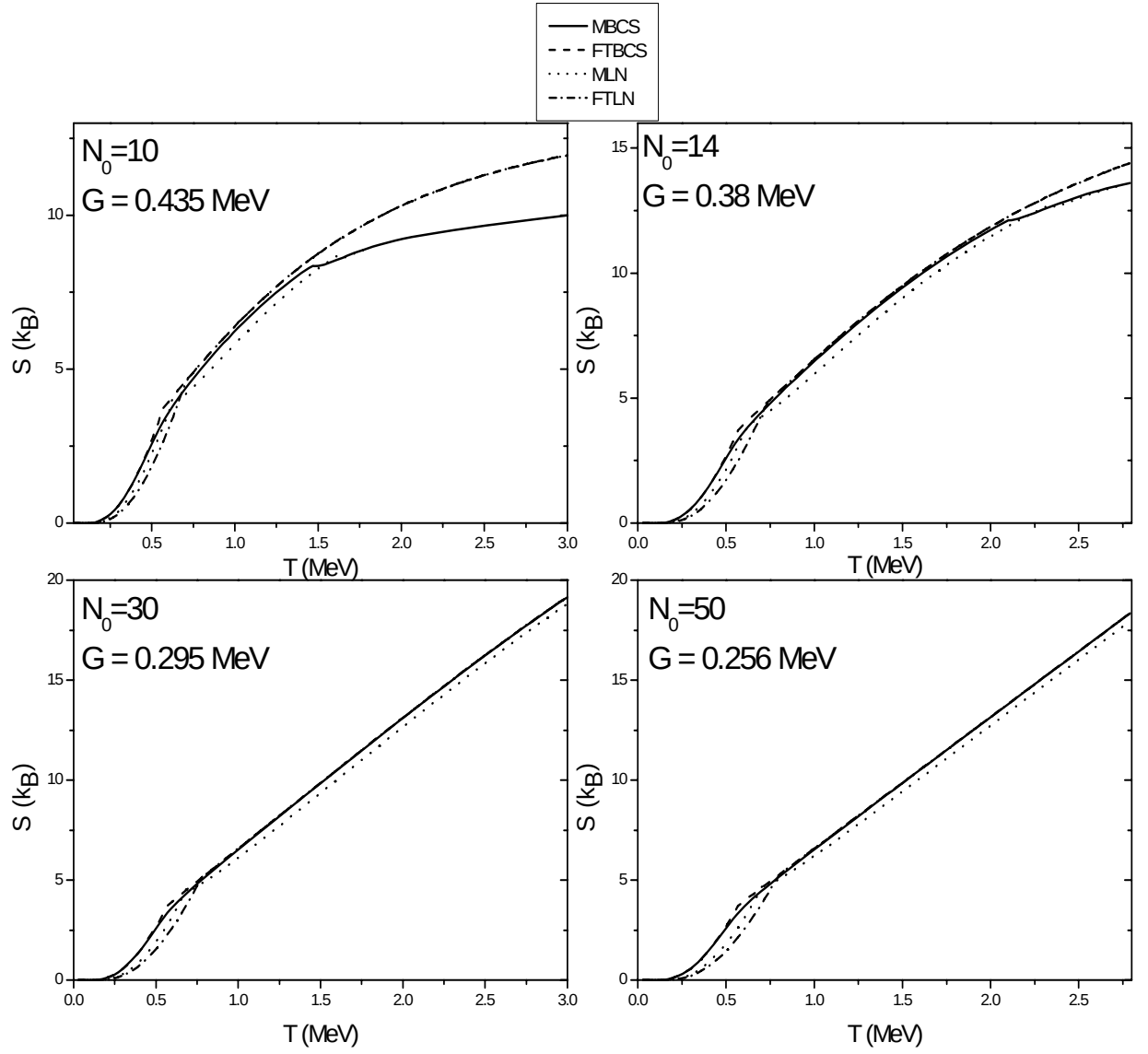


FIG. 4-12 – Variation de l'entropie en fonction de la température, calculée dans le cadre des méthodes FTBCS, MBCS, FTLN et MLN et ce pour quatre systèmes dont $N_0 = 10, 14, 30$ et 50 .

4.2 Le cas réaliste

Les modèles schématiques ont la vertu de nous guider sur le terrain du calcul numérique, et de nous donner un aperçu du comportement des différentes grandeurs établies par les modèles théoriques, néanmoins ils sont insatisfaisant du fait qu'aucune conclusion ne peut en être tirée, pour ce faire une investigation du cas réaliste est nécessaire, et on entend ici par le cas réaliste, une modélisation du champ moyen par un potentiel phénoménologique du type Woods-Saxon [50] pour les énergies à particules indépendantes. C'est un champ réaliste qui a été déduit d'une distribution de la densité nucléaire de type Fermi à symétrie axiale [77]. La déformation est caractérisée par les paramètres d'élongation c et d'étranglement h du noyau [78]. Ces derniers peuvent être reliés par des relations non linéaires aux paramètres habituels β_2 et β_4 de Bohr-Mottelson ou aux paramètres ϵ_2 et ϵ_4 de Nilsson [79] par les conditions habituelles de conservation du volume nucléaire et du rapport des fréquences.

Afin de garantir la stabilité des calculs, nous avons inclus tous les niveaux du champ moyen à particules indépendantes correspondant un nombre maximal de couches $N_{max} = 12$. Nous avons travaillé également avec l'hypothèse que les énergies de ces niveaux sont indépendantes de la température [80], où il a été montré que la variation de ces niveaux d'énergies en fonction de la température est négligeable jusqu'à des températures de l'ordre de $T \lesssim 5MeV$.

Nous avons réalisé une étude systématique dans la région où $20 \leq Z \leq 60$. Afin d'illustrer les résultats obtenus, nous avons choisi quelques isotopes des éléments suivants : Ti, Fe, Zr et Mo (neutrons et protons), à titre indicatif. Les valeurs des paramètres gap à température nulle peuvent être déduites des valeurs des masses expérimentales quant elles sont disponibles. Le calcul de ces paramètres a été effectué à partir des différences de masses paire-impaires [81].

$$\Delta_p^{\text{exp}} = -\frac{1}{8} [M(Z+2, N) - 4M(Z+1, N) + 6M(Z, N) - 4M(Z-1, N) - 4M(Z-2, N)] \quad (4.7)$$

$$\Delta_n^{\text{exp}} = -\frac{1}{8} [M(Z, N+2) - 4M(Z, N+1) + 6M(Z, N) - 4M(Z, N-1) - 4M(Z, N-2)] \quad (4.8)$$

où $M(Z, N)$ est la valeur de la masse expérimentale de la table d'Audi [82].

Notons que les valeurs du paramètre G ont été choisies de manière à reproduire les valeurs des $\Delta_p^{\text{exp}}, \Delta_n^{\text{exp}}$.

4.2.1 Le paramètre du gap

La variation du paramètre gap en fonction de la température a été tracée dans le cas des éléments cités plus haut et ce pour les deux espèces de nucléons, et qu'on a rapporté sur les figures (4 – 13, 4 – 14, 4 – 15 et 4 – 16).

Le gap calculé dans le cadre de la méthode FTBCS, présente un comportement systématique pour tous les éléments traités, à savoir un plateau où la variation du gap est très peu significative, s'ensuit un effondrement rapide jusqu'à s'annuler à la température critique T_c .

Concernant, les résultats de la méthode MBCS, il est signalé que pour tous les cas étudiés, les courbes du gap MBCS, à basse température présentent la même allure que celle tracée par la méthode FTBCS, dans un intervalle de température allant de $[0; 0, 1] \text{ MeV}$ pour le cas du ^{136}Te (neutrons), à un intervalle de $[0; 0, 5] \text{ MeV}$ dans le cas du ^{44}Ti (protons), la largeur de cet intervalle dépend principalement de la valeur du gap à $T = 0 \text{ MeV}$, plus elle est élevée, plus cette largeur est importante. Ensuite, il est noté deux comportements distincts, soit un effondrement brusque vers les valeurs négatives (exemples : ^{42}Ti (neutrons) à $T = 0, 57 \text{ MeV}$), soit une diminution progressive et lisse pour s'annuler à une température bien au delà de la température critique (exemples : ^{86}Mo ou le ^{48}Fe).

Le but de la méthode MBCS, en intégrant les fluctuations statistiques dans le formalisme de la méthode BCS à température finie, cela empêcheraient le gap de s'effondrer rapidement, et d'expliquer sa persistance au delà de la température critique, ceci correspond a priori, plus à la réalité des systèmes finis tels des noyaux atomiques. Or, sur l'ensemble des résultats que nous venons d'exposer, l'allure du gap supposée n'est pas systématiquement trouvée, et le plus souvent, on note l'effondrement de ce dernier vers les valeurs négatives, et ce même aux basses températures.

Nous avons signalé lors de l'étude du cas schématique, en particulier lorsque le nombre total de niveaux est différent de celui du nombre de particules ($\Omega \neq N_0$), la sensibilité de la méthode MBCS au spectre des énergies, ce qui se traduit dans le cas réaliste par un effondrement du

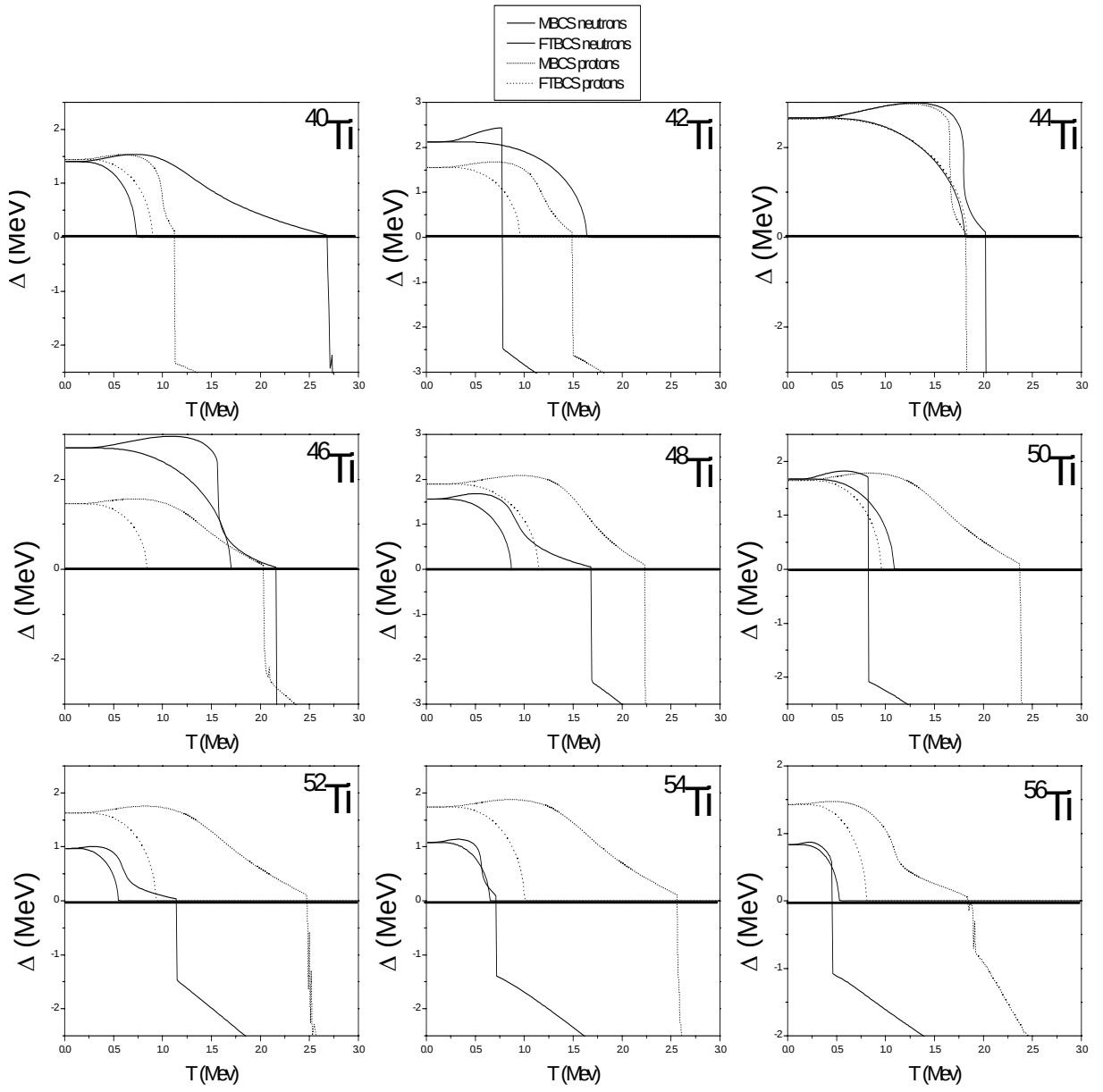


FIG. 4-13 – Variation du paramètre gap en fonction de la température calculé dans le cadre des deux méthodes FTBCS et MBCS pour quelques isotopes de Ti.

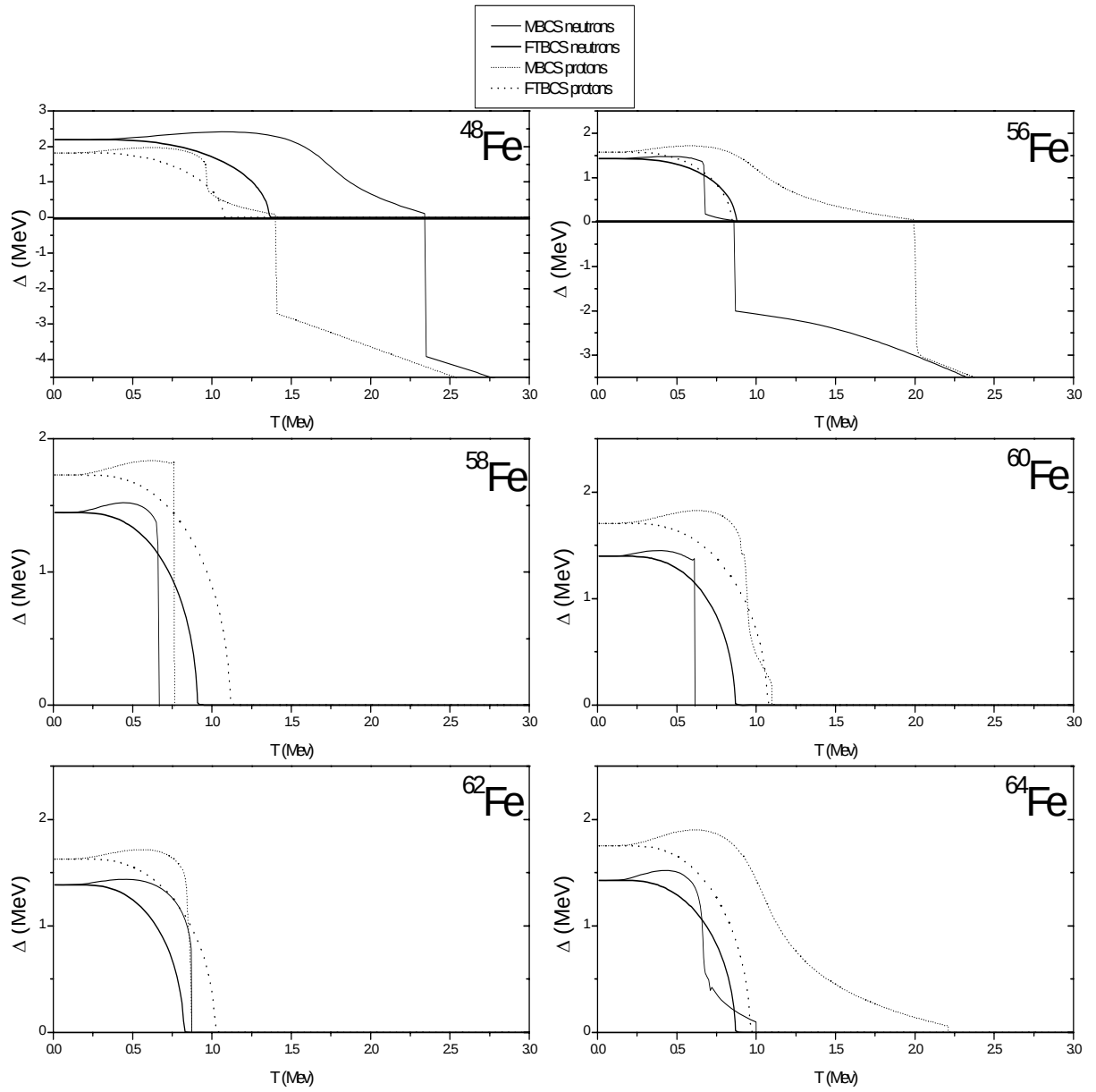


FIG. 4-14 – même commentaire que fig 4-13, dans le cas des isotopes du Fe.

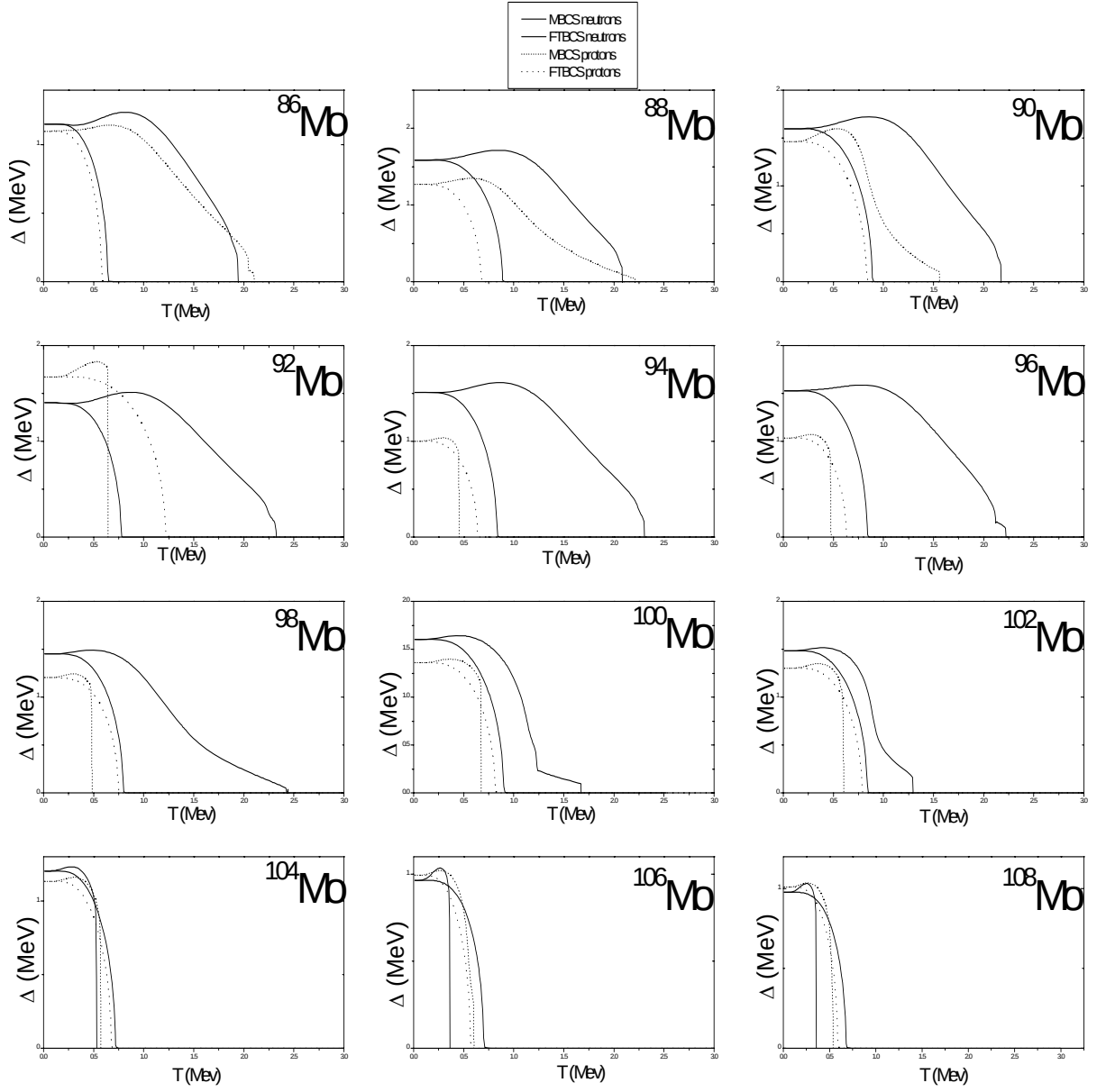


FIG. 4-15 – même commentaire que fig 4-13, dans le cas des isotopes du Mo.

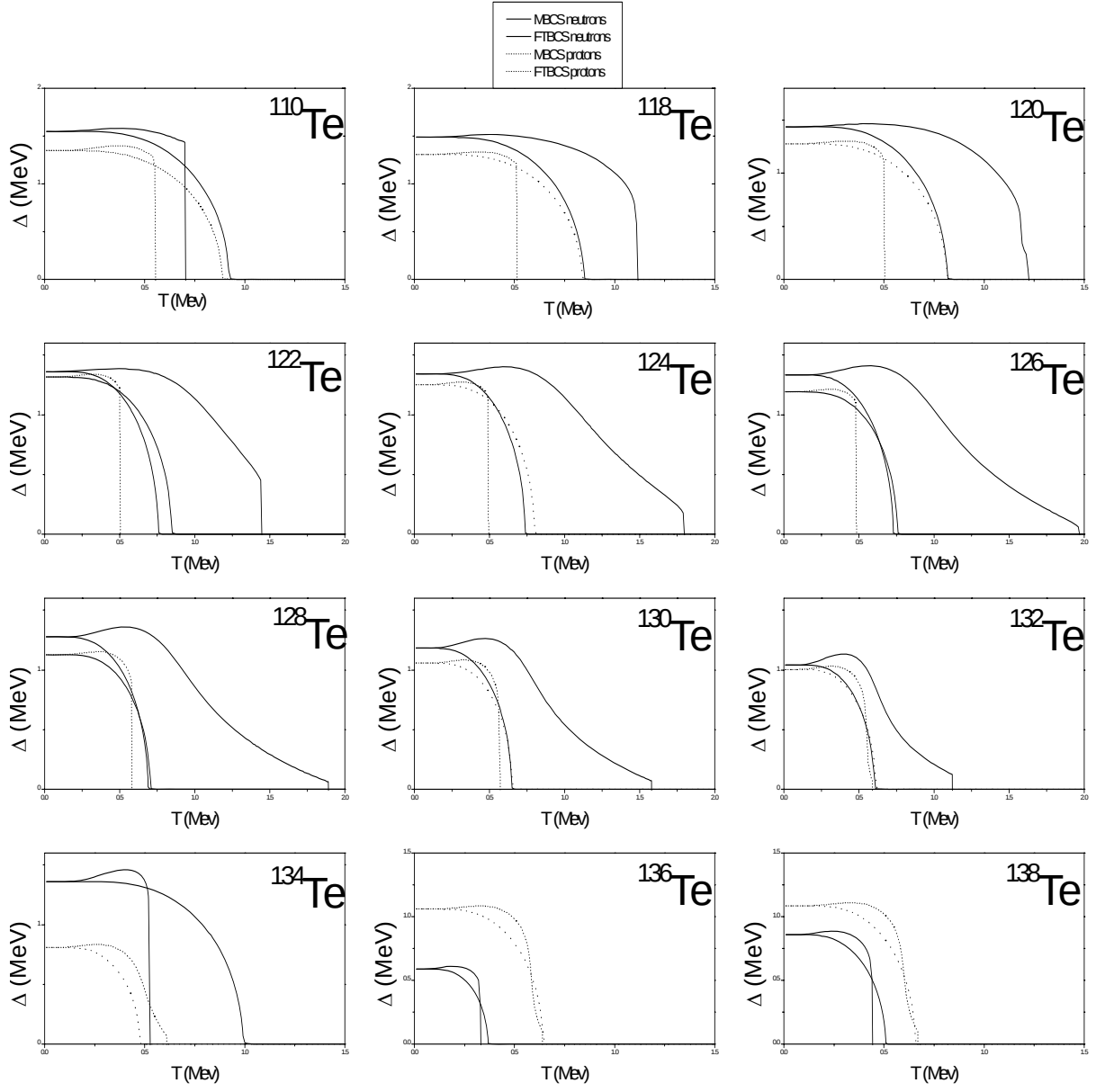


FIG. 4-16 – même commentaire que fig 4-13, dans le cas des isotopes du Te.

gap vers les valeurs négatives, causé par le nombre élevé d'états trous, en effet la contribution négative expression (4.4) de la partie thermique $\delta\Delta$ au gap modifié $\overline{\Delta}$, est très importante faisant chuter le gap vers les valeurs négatives, voir figure (4 – 17), où nous avons tracé la variation de la partie thermique du gap pour les isotopes ^{110}Te , ^{118}Te , ^{126}Te et ^{134}Te en fonction de la température, et en la décomposant en ces deux parties, à savoir la partie états particules $\delta\Delta_p$ et la partie états trous $\delta\Delta_t$, voir expressions (4.3 et 4.4), et on note l'effet directe du comportement des contributions thermiques partie états trous sur celui du paramètre gap, à savoir dans le cas où les valeurs négatives de $\delta\Delta_t$ sont importantes conduisent à l'effondrement du gap vers les valeurs négatives, et dans le cas où $\delta\Delta_t$ reste stable, on note un comportement lissé pour le gap voir figure (4 – 16).

Il en ressort de l'ensemble des résultats obtenus, que la méthode MBCS présente des insuffisances, en particulier sa sensibilité à la configuration du spectre des énergies, où en remarque des comportements différents du gap, et ce même pour des spectres d'énergies comparables et voisins.

Dans une seconde étape, nous avons détaillé le traitement de quatre noyaux qui sont ^{48}Ti , ^{84}Zr , ^{86}Zr et ^{88}Mo , pour les quels l'allure lisse du gap est observée. Nous avons résolu les équations du gap, correspondantes à chaque méthode à savoir FTBCS, MBCS, FTLN et MLN, où on a choisi la valeur de G de manière à reproduire la valeur expérimentale du gap à $T = 0\text{MeV}$ (voir tableau ci dessous).

noyaux	$\Delta_p^{\text{exp}}(\text{MeV})$	$\Delta_n^{\text{exp}}(\text{MeV})$	$G_p(\text{MeV})$	$G_n(\text{MeV})$
^{48}Ti	1.895	1.5913	0.1590291	0.1365584
^{84}Zr	1.4484	1.56141	0.1110395	0.1104069
^{86}Zr	1.50667	1.49192	0.1132578	0.1068911
^{88}Mo	1.58918	1.26702	0.1098148	0.1053501

On a montré que les résultats de la méthode FTBCS, concernant le gap, s'orientent vers un effondrement rapide de ce dernier, un constat pour les quatre éléments présentés plus haut. Théoriquement, on a montré que la méthode FTBCS ne prend pas en compte les fluctuations quantiques et statistiques, ce qui expliquerait ce comportement du gap.

On a éliminé partiellement, les fluctuations d'origine quantique liées à la non conservation du nombre de particules induit par la BCS, en utilisant la méthode de Lipkin Nogami, et

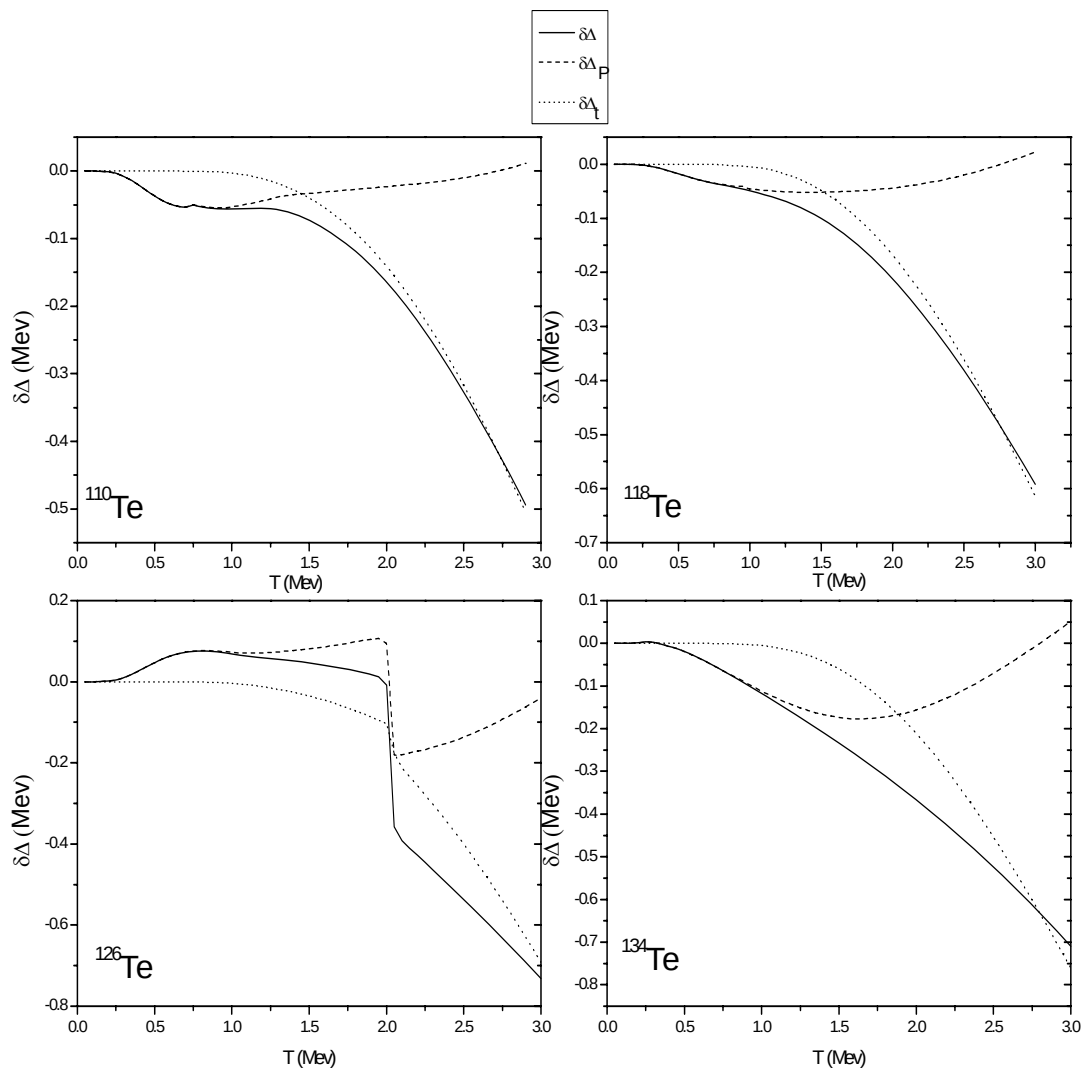


FIG. 4-17 – Evolution de la partie thermique du paramètre gap en fonction de la température pour les isotopes ^{110}Te , ^{118}Te , ^{126}Te et ^{134}Te .

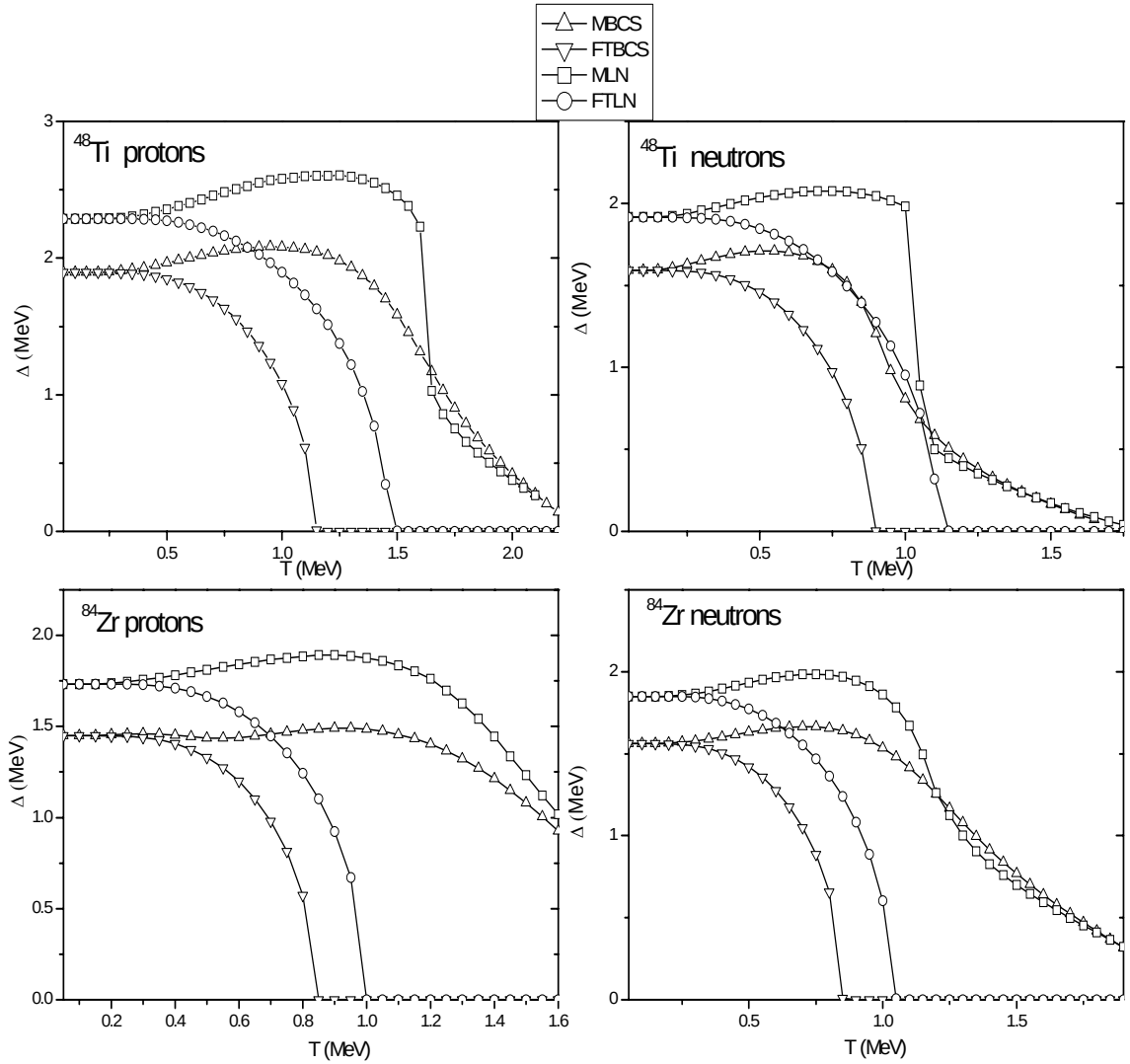


FIG. 4-18 – Evolution du paramètre gap en fonction de la température, calculé par la MBCS, FTBCS, MLN et FTLN pour les éléments ^{48}Ti et ^{84}Zr , cas protons et neutrons.

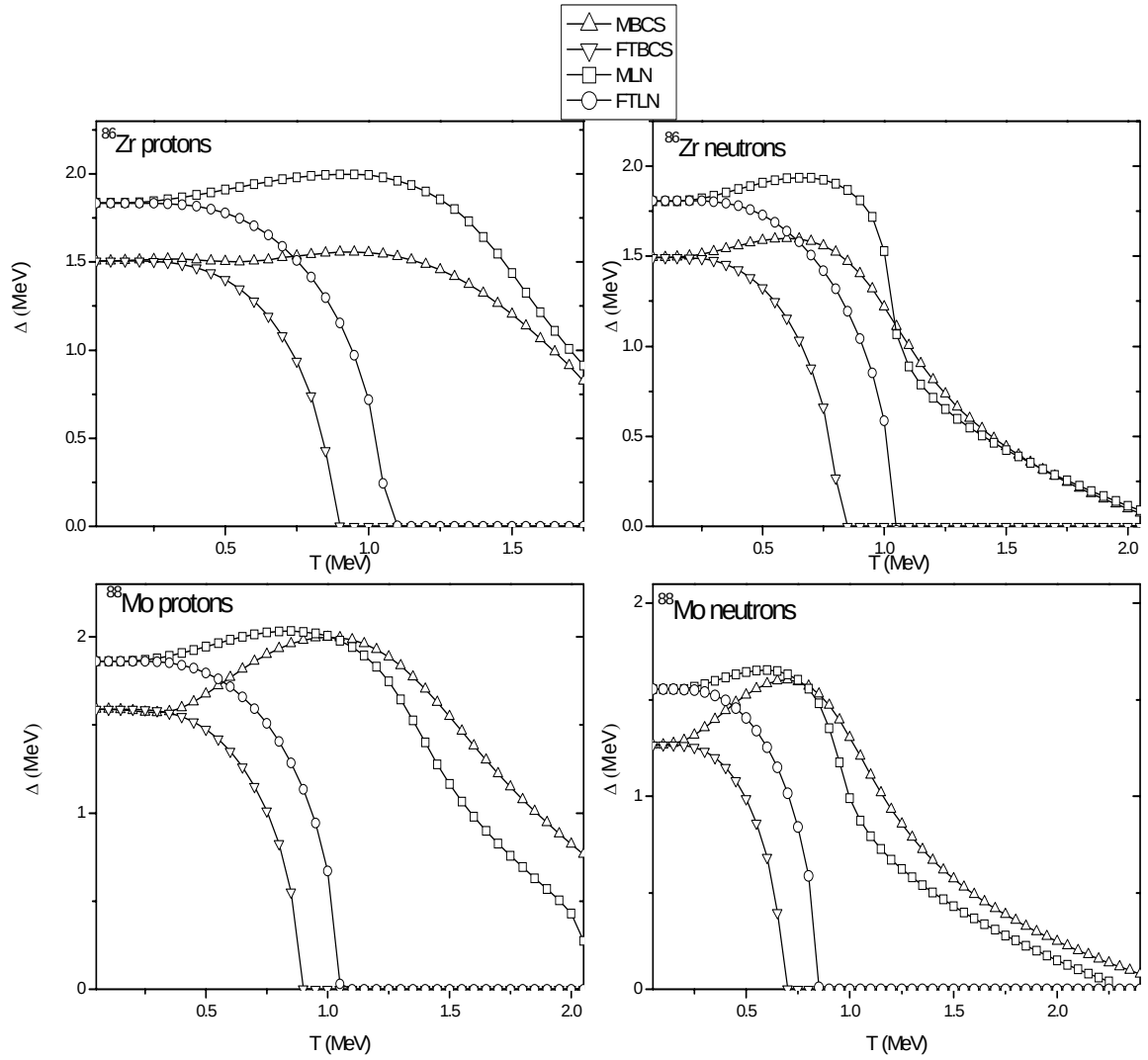


FIG. 4-19 – Evolution du paramètre gap en fonction de la température, calculé par la MBCS, FTBCS, MLN et FTLN pour les éléments ^{86}Zr et ^{88}Mo , cas protons et neutrons.

on constate que ça apporte une correction au gap à basse température. La valeur du gap à $T = 0 \text{ MeV}$, calculé par la LN est supérieure à celle calculée par BCS, (voir tableau ci dessous).

à T=0 (MeV)	Δ_{BCS} Mev	Δ_{LN} Mev	$\frac{\Delta_{LN}-\Delta_{BCS}}{\Delta_{LN}}(\%)$	$T_c(\text{Mev})$	$T_{cLN}(\text{Mev})$	$\frac{T_{cLN}-T_c}{T_{cLN}}(\%)$
^{48}Ti (Z)	1.89500	2.28870	17.20	1.14	1.50	24.00
^{48}Ti (N)	1.59130	1.91656	16.97	0.89	1.14	21.93
^{84}Zr (Z)	1.44840	1.73296	16.42	0.84	0.99	15.15
^{84}Zr (N)	1.56141	1.84893	15.55	0.84	1.04	19.23
^{86}Zr (Z)	1.50667	1.83552	17.92	0.88	1.09	19.26
^{86}Zr (N)	1.49192	1.80598	17.40	0.84	1.04	19.23
^{88}Mo (Z)	1.58918	1.86217	14.66	0.89	1.05	15.24
^{88}Mo (N)	1.26702	1.55630	18.59	0.70	0.85	17.64

Cette différence s'explique par la renormalisation des probabilités u_ν et v_ν et la présence du terme λ_2 dans leurs expressions.

Les courbes FTLN ont un comportement similaire à celles de la méthode FTBCS, mais s'effondrent à des températures supérieures ($T_{cLN} \succ T_c$).

Ces résultats étaient prévisibles, étant donné que l'approche FTLN prend en compte uniquement les fluctuations quantiques, ces dernières ne sont importantes que pour les basses températures [8].

La prise en compte des fluctuations d'origine statistique par la méthode MBCS, permet un adoucissement de la courbe du gap en fonction de la température, et ce pour les quatre éléments présentés. Ces fluctuations augmentent avec la température au delà de T_c , empêchant le gap de s'annuler brusquement, mais de diminuer progressivement avec la température.

L'élimination couplée des fluctuations quantiques et statistiques est opérée par la MLN, et nous obtenons aux basses températures, une allure du gap confondue avec celle de la méthode FTLN, puis un comportement similaire à la méthode MBCS au delà de la température critique T_{cLN} , et nous notons pour la plupart des éléments que les courbes MLN et MBCS se rejoignent à hautes températures, reflétant ainsi le fait que les fluctuations quantiques dominent à basse température et que les fluctuations statistiques apparaissent aux températures élevées.

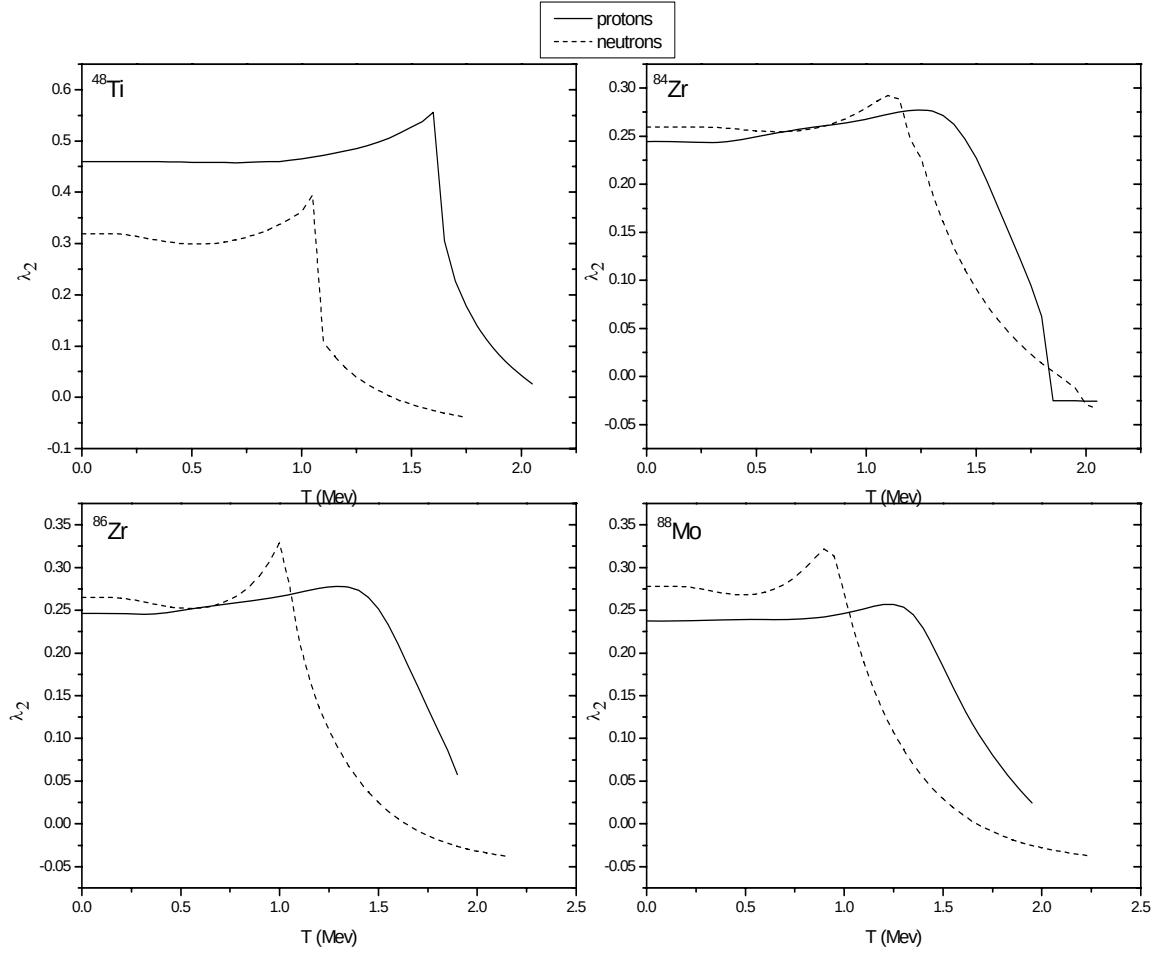


FIG. 4-20 – Evolution du paramètre λ_2 en fonction de la température calculé dans le cadre de la méthode MLN pour les éléments ^{48}Ti , ^{84}Zr , ^{86}Zr et ^{88}Mo .

Notons toute fois, que pour le ^{48}Ti , la valeur du gap dans l'intervalle $[0, T_{cLN}]$ reste importante, puis chute pour rejoindre la courbe MBCS, causant un effondrement au voisinage de T_{cLN} , une allure comparable à celle trouvée pour les cas schématiques.

Les courbes tracées dans le cadre de la méthode MLN, pour le ^{88}Mo sont plus basses que celles de la méthode MBCS à haute température ($T \geq 1\text{MeV}$), mais pour autant elles présentent la même forme que la méthode MBCS.

Ces dernières remarques s'expliquent par le comportement du paramètre λ_2 voir (4-20), qui chute brusquement à la température T_{cLN} , et prend dans quelques cas des valeurs négatives.

4.2.2 Energie d'excitation

L'extraction des grandeurs thermodynamiques, se fait expérimentalement en fonction de l'énergie d'excitation, alors il est plus utile d'étudier le comportement de cette dernière que l'énergie interne puisqu'on la connaît exactement à $T = 0$. L'énergie d'excitation est définie comme suit :

$$E^*(T) = E(T) - E(T = 0) \quad (4.9)$$

Nous avons porté sur les figures (4 – 21 et 4-22) , l'évaluation de l'énergie d'excitation dans le cadre des différentes méthodes développées, et ce pour les quatre éléments traités dans la section précédente.

L'énergie d'excitation tracée dans le cadre des méthodes FTBCS et FTLN, présentent des taux de variation différents avant et après les températures critiques T_c et T_{cLN} respectivement, caractérisant les états avec et sans appariement. Par les approches MBCS et MLN, l'énergie d'excitation reste très faibles pour les basses températures, reflétant le fait que le gap garde des valeurs élevées pour ces températures. On remarque ensuite une augmentation progressive de l'énergie, et les courbes MLN et MBCS sont pratiquement parallèles, avec un accroissement plus prononcé pour les courbes MLN.

Dans le cas où la valeur du gap MLN est inférieure à celle de MBCS, l'énergie d'excitation se trouve supérieure et inversement, qui s'explique par la présence du terme $(-\frac{\bar{\Delta}^2}{G})$ expression (3.116) .

On note aussi un comportement particulier pour le ^{88}Mo , où à basses températures l'énergie

d'excitation décroît vers les valeurs négatives, ce constat se heurte au principe selon lequel la capacité calorifique d'un système ne peut être négative, et marque ainsi une anomalie dans la méthode.

4.2.3 Capacité calorifique

On a tracé sur les figures (4-23 et 4-24), la capacité calorifique calculée par les différentes approches. A cause de la variation importante de λ_2 (4-20), on été amené à faire la dérivation numérique du terme $\lambda_2 \Delta N^2$ présent dans l'expression de l'énergie $\overline{E}_{LN}$ (3.119).

Nous remarquons que les courbes FTBCS et FTLN présentent des discontinuités aux températures critiques T_c et T_{cLN} respectivement. A noter que la hauteur des pics est plus importante dans le cadre de la méthode FTLN.

Ces discontinuités ne sont plus constatées pour les capacités calorifiques MBCS et MLN, où on trouve une allure en forme de S, sauf pour l'élément ^{48}Ti qui présente un accroissement au voisinage de la température critique.

L'étude de la capacité calorifique, renseigne sur la nature et les tendances qui caractérisent le système, et fait apparaître les éventuelles transitions de phases qui peuvent survenir avec l'élévation de la température. Selon la classification moderne des transitions de phases, on parle de transition de phase de second ordre, quand une discontinuité ou une divergence est constatée dans la dérivée seconde de l'énergie libre (ou le grand potentiel dans l'ensemble grand canonique), qui n'est autre que la capacité calorifique, alors les discontinuités trouvées par les méthodes FTBCS et FTLN, pourrait être interprétées comme une éventuelle transition de phase superfluide normale, un cas analogue aux électrons de conduction d'un métal supraconducteur. Une différence néanmoins, doit être signalé, à savoir que le nombre d'électrons participant à la phase supraconductrice est très important, et que la valeur du gap calculée dans ces conditions est à très peu de chose près la valeur la plus probable. Beaucoup de travaux [83][84] ont été effectué pour l'étude des petits grains de métal tel que le nombre d'électrons est inférieur à 100, et ils montrent que le pic dans la courbe de la capacité calorifique n'est plus observé, et l'allure se trouve lissée.

Récemment un groupe norvégien [9], a élaboré une méthode très précise, permettant d'extraire la densité de niveaux expérimentale. La connaissance de cette dernière permet de calculer

les grandeurs thermodynamiques comme l'entropie et la capacité calorifique et ce en utilisant les définitions de l'ensemble canonique. Les résultats obtenus montre clairement la forme S (S shape) pour les courbes de la capacité calorifique. Il a été montré que cette forme est à priori la signature de la transition de phase de seconde ordre dans les noyaux atomiques.

Dans nos résultats, cette forme S est observée sauf pour le ^{48}Ti , et nous notons que la bosse de cette forme S est plus prononcée dans le cadre de la méthode MLN. Un résultat qui rejoint une étude entreprise par Kaneko et Schiller [36], sur l'effet de la conservation du nombre de particules dans le cadre du traitement de l'appariement en fonction de la température par la méthode de l'approximation du chemin statique où ils constatent que l'intégration des fluctuations quantiques permet de mieux reproduire les résultats expérimentaux.

Du point de vue formalisme, la projection sur le bon nombre de particules opérée par la méthode MLN, nous permet de considérer le noyau comme un système dont le nombre de particule est fixé, donc décrit par le formalisme de l'ensemble canonique, et ainsi une comparaison avec les résultats expérimentaux est possible.

4.2.4 Entropie

Nous avons porté sur les (4-25 et 4-26) les résultats obtenus pour l'entropie avec les différentes méthodes développées dans le présent travail.

A basse température, on note des comportements différents selon qu'on a inclut ou pas les fluctuations statistiques. Dans le cadre des méthodes FTBCS et FTLN, on remarque un accroissement rapide aux voisinages des températures critiques, avec un léger sursaut, puis suivie d'une partie qui varie linéairement avec la température, avec le fait que toutes les courbes FTLN se présentent au-dessous de celles de la méthode FTBCS.

Par les approches MBCS et MLN, on constate un comportement différent. En effet l'entropie calculée dans le cadre de ces méthodes augmente progressivement sans sursaut pour rejoindre la partie linéaire trouvée par les méthodes FTBCS et FTLN.

Etant la dérivée première de l'énergie libre, l'entropie n'a pas l'importance qu'a la capacité calorifique pour détecter et classer les transitions de phases, néanmoins elle nous apprend beaucoup sur les comportements macroscopiques du système. On sait que l'entropie est une fonction linéaire de la température pour un gaz de Fermi, elle est de la forme $S = 2aT$ [85],

où a est le paramètre densité de niveaux, et comme nous constatons qu'à haute température la présence d'une partie linéaire en fonction de la température, alors on peut conclure que pour ces températures le noyau est devenu un gaz de Fermi, ce qui rejoint les prédictions des différentes méthodes, mais il reste à savoir la manière de la survenance de cet état.

Aux basses températures, la variation plus au moins rapide de l'entropie, peut s'expliquer par le fait que l'état superfluide est un état de la matière plus ordonné que celui d'un gaz de Fermi, et comme les résultats de la FTBCS et de FTLN indiquent un passage brusque de l'un à l'autre, alors on constate un petit sursaut au voisinage des températures critiques caractérisant chaque méthode. Par contre le gap calculé en tenant compte des fluctuations statistiques, indique une transition de phase plus douce, ce que nous constatons clairement dans les courbes MBCS et MLN.

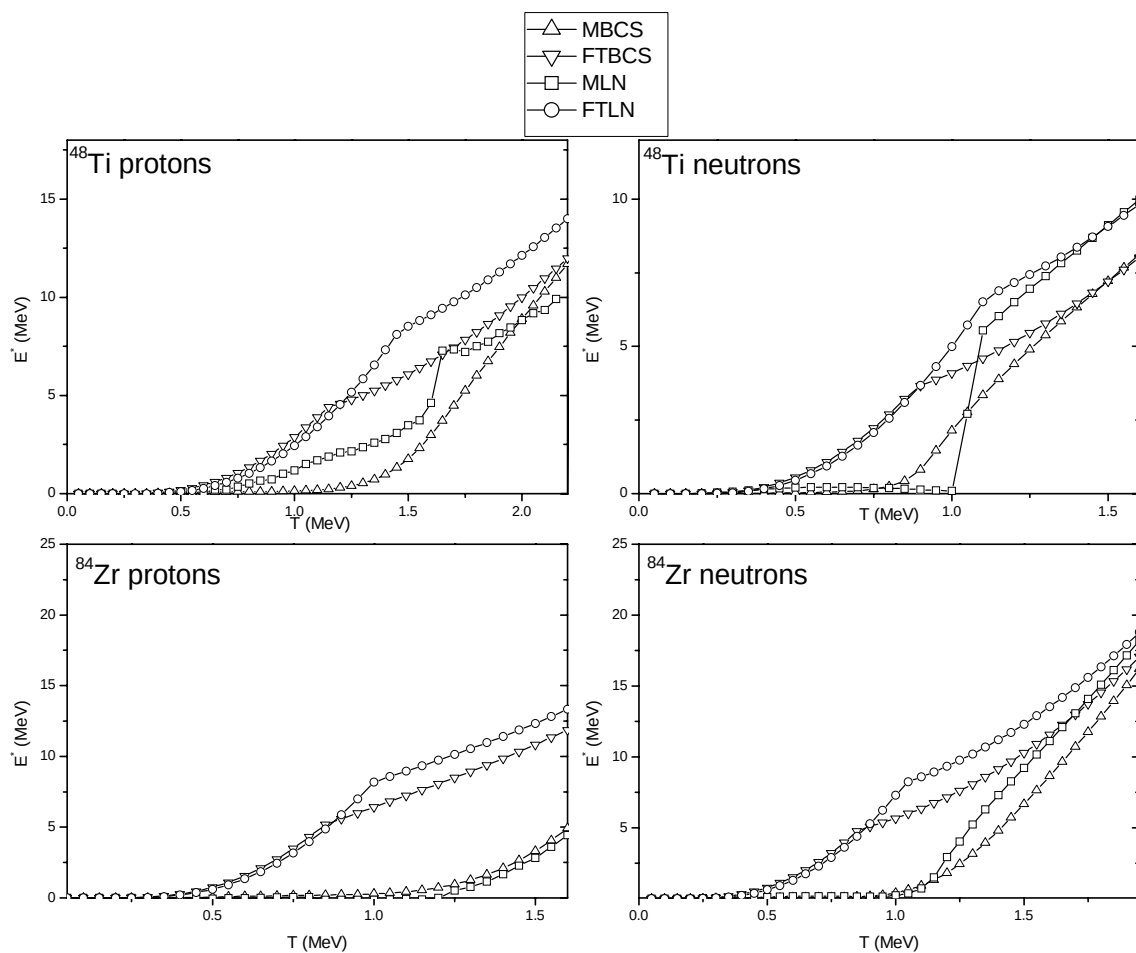


FIG. 4-21 – Evolution de l'énergie d'excitation en fonction de la température, calculée dans le cadre des méthodes MBCS, FTBCS, MLN et FTLN pour les éléments ^{48}Ti et ^{84}Zr , cas protons et neutrons.

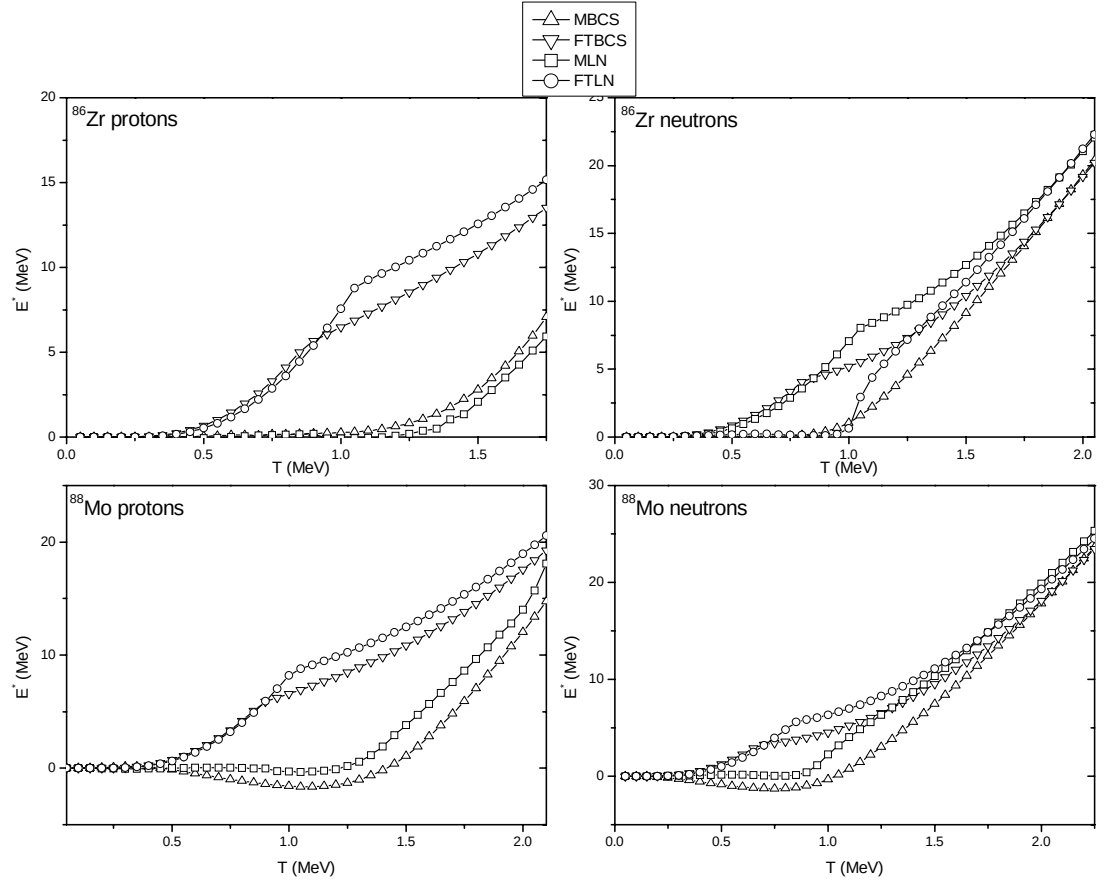


FIG. 4-22 – Evolution de l'énergie d'excitation en fonction de la température, calculée dans le cadre des méthodes MBCS, FTBCS, MLN et FTLN pour les éléments ^{86}Zr et ^{88}Mo , cas protons et neutrons.

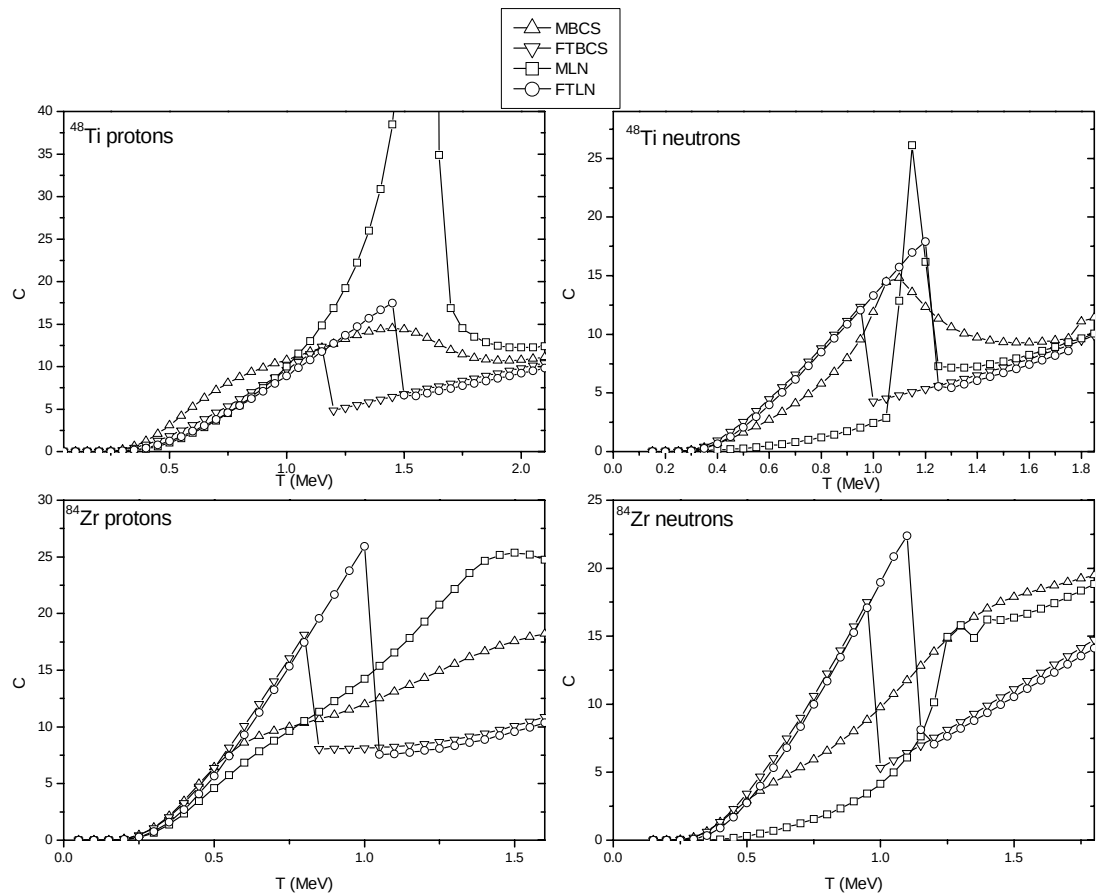


FIG. 4-23 – Evolution de la capacité calorifique en fonction de la température, calculée dans le cadre des méthodes MBCS, FTBCS, MLN et FTLN pour les éléments ^{48}Ti et ^{84}Zr , cas protons et neutrons.

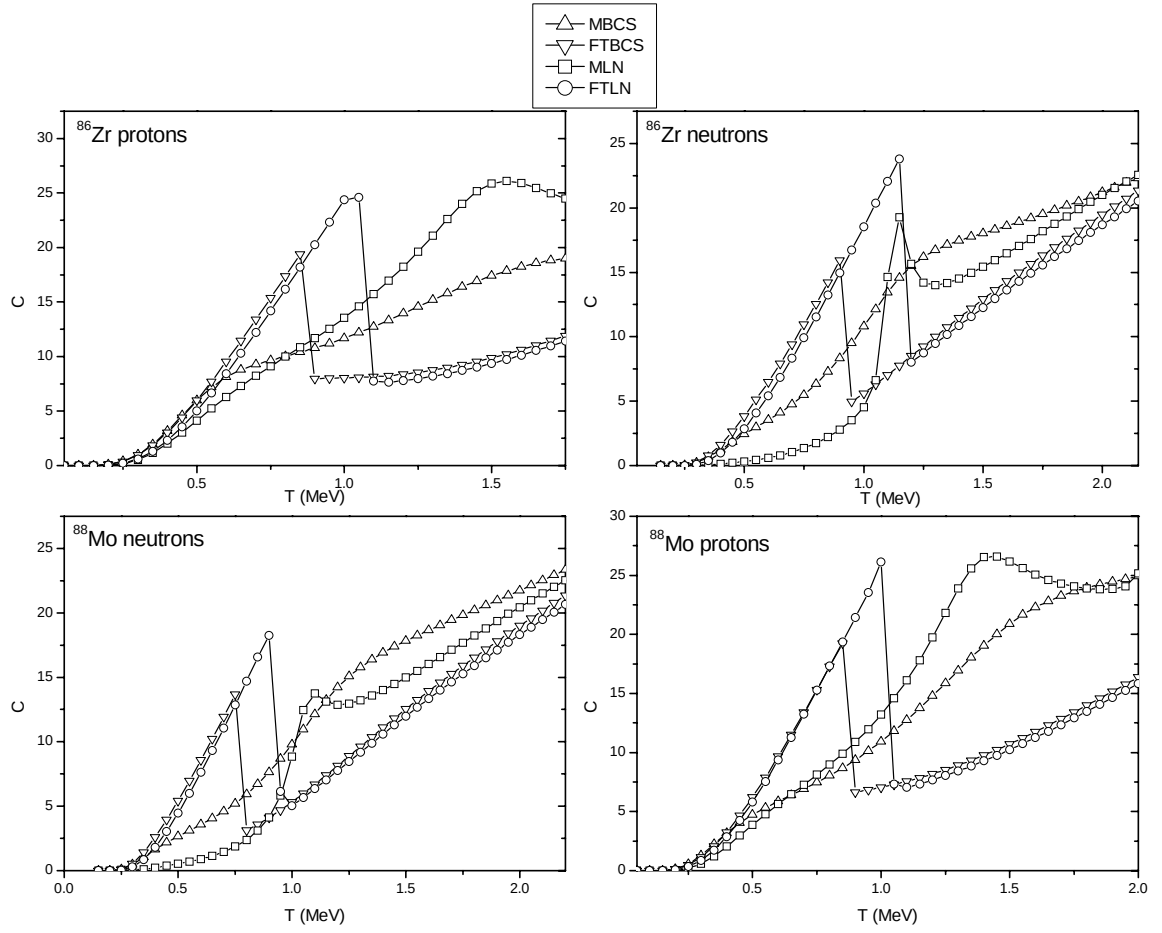


FIG. 4-24 – Evolution de la capacité calorifique en fonction de la température, calculée dans le cadre des méthodes MBCS, FTBCS, MLN et FTLN pour les éléments ^{86}Zr et ^{88}Mo , cas protons et neutrons.

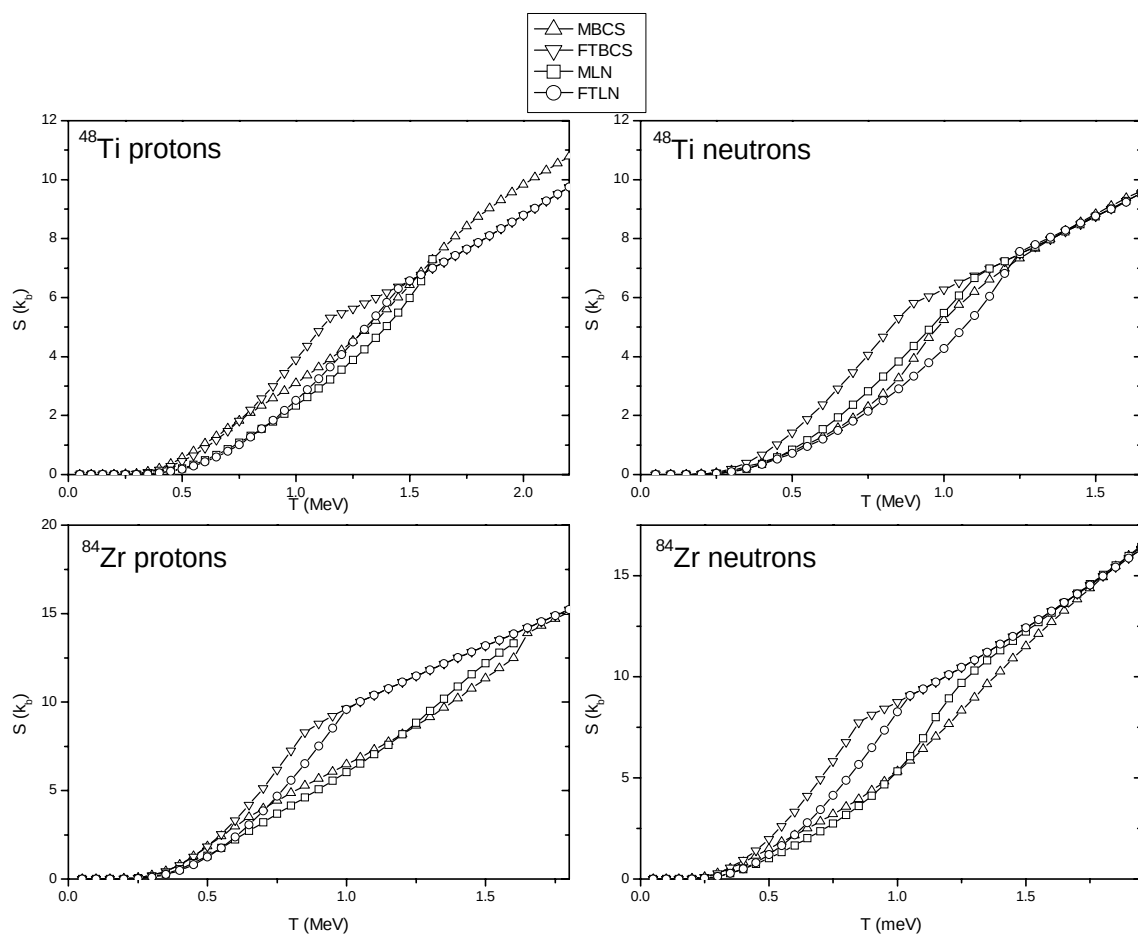


FIG. 4-25 – Evolution de l'entropie en fonction de la température, calculée dans le cadre des méthodes MBCS, FTBCS, MLN et FTLN pour les éléments ^{48}Ti et ^{84}Zr , cas protons et neutrons.

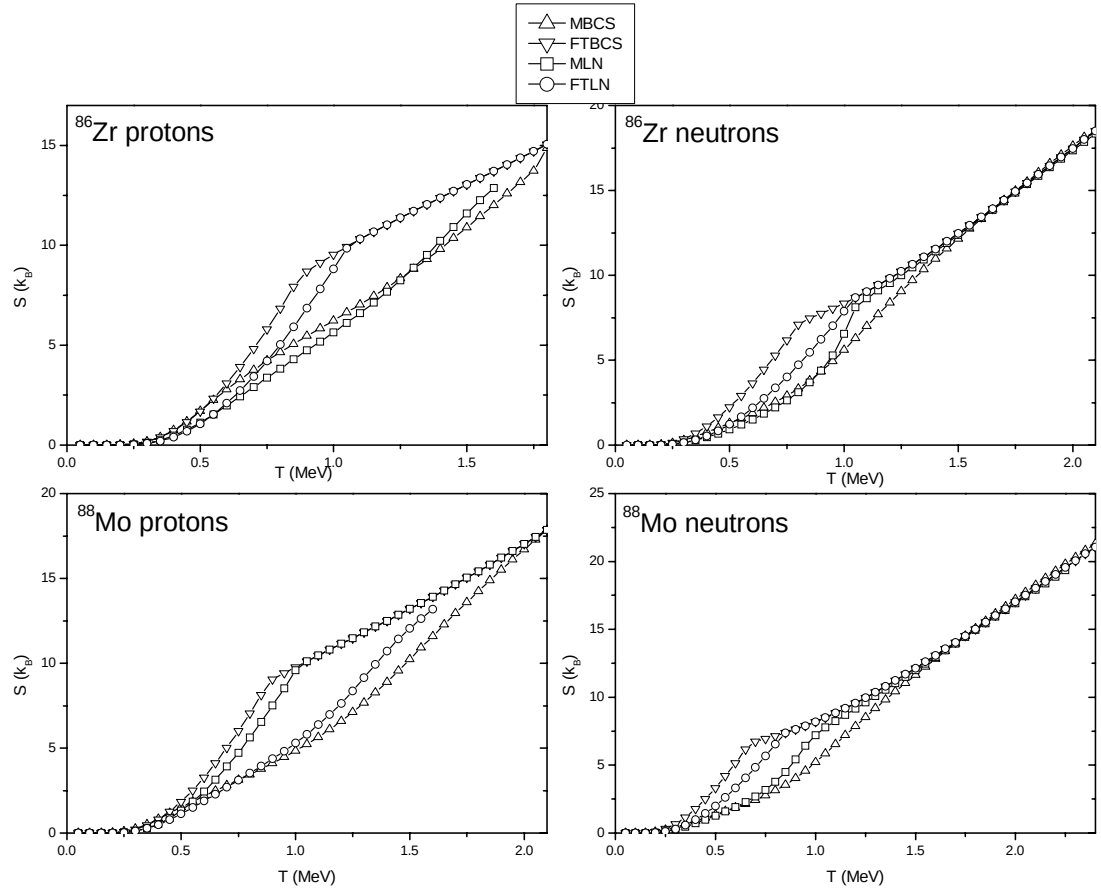


FIG. 4-26 – Evolution de l'entropie en fonction de la température, calculée dans le cadre des méthodes MBCS, FTBCS, MLN et FTLN pour les éléments ^{86}Zr et ^{88}Mo , cas protons et neutrons.

Conclusion

Dans le présent travail, nous nous sommes intéressés à l'étude des propriétés thermodynamiques des systèmes chauds. Dans cet objectif, nous avons utilisé une approche microscopique restaurant quelques symétries brisées par la méthode BCS à température finie (FT-BCS). En effet, cette dernière présente entre autre deux défauts majeurs : la non-conservation du nombre de particules et d'autre part elle viole les relations unitaires des matrices densités de particules, induisant ainsi des fluctuations du type quantiques et statistiques. Pour pallier à ces défauts, la méthode BCS modifiée (dite MBCS), récemment développée, a été utilisée. Aussi, dans une première étape, la méthode a permis de prendre en compte des effets statistiques, prédominant à haute température. De nouvelles équations du gap ont été établies dans le cas des systèmes chauds. Les expressions des grandeurs thermodynamiques à savoir l'énergie du système, la capacité calorifique et l'entropie ont été établies. Cependant, dans le cadre de cette approche le nombre de particules n'est pas conservé. Pour pallier à ce défaut, la méthode de Lipkin-Nogami, qui est une technique de projection dans l'espace nombre d'occupation du type projection avant variation a été utilisée, dans le cadre des méthodes FTLN et MLN. Ces dernières ont permis d'éliminer partiellement les fluctuations d'origine quantique. La correction s'est traduite par la renormalisation des probabilités d'occupation et de nouvelles expressions des grandeurs thermodynamiques sus-citées ont été déduites.

Nous avons ensuite établi notre propre code de calcul que nous avons appliqué dans les deux cas : cas schématique et le cas réaliste. Dans le cas schématique, la résolution des équations du gap dans le cadre des approches FTBCS et FTLN a permis de noter l'existence d'une température critique T_c au delà de laquelle le paramètre du gap s'annule. La valeur T_c dépend de l'approche considérée, ce qui révèle l'importance des fluctuations quantiques et la nécessité de

leur élimination. Concernant, les prévisions des approches MBCS et MLN, les résultats obtenus ont montré la disparition de la transition abrupte de l'état superfluide à l'état normal, observée dans le cas des deux méthodes FTBCS et FTLN. En effet, le paramètre du gap présente une décroissance progressive au voisinage de T_c . La prise en compte des effets statistiques induit donc la disparition de la transition de phase abrupte de l'état superfluide à l'état normal. Ces résultats sont en accord avec les prédictions du modèle macroscopique, se basant sur la théorie des transitions de phases de Landau, qui montre la persistance du gap au delà de la température critique. Notons par ailleurs, qu'à basses températures les prévisions de la méthode MLN sont confondues avec ceux de l'approche FTLN, et ils rejoignent les prévisions de la méthode MBCS à hautes températures. Ce constat montre que la contribution des fluctuations quantiques dominant à basses température contrairement aux fluctuations statistiques qui dominant à hautes températures.

L'évaluation des grandeurs thermodynamiques : l'énergie interne, la capacité calorifique et l'entropie, a permis de confirmer les constatations faites précédemment. En effet, nous avons noté des discontinuités dans les courbes, dans le cas des méthodes FTBCS et FTLN, signalant une transition de phase abrupte, contrairement aux résultats de la méthode MBCS et MLN où on note un comportement lissé indiquant que la transition de phase se produit de manière progressive.

Bien que les méthodes MBCS et MLN semblent donner satisfaction, elles présentent des insuffisances dans la région où $T \gg T_c$. En effet, dans cette région nous avons constaté une augmentation anormale du paramètre du gap au delà d'une température limite T_M . Cette dernière délimite la région de la validité des méthodes. Ces insuffisances sont principalement liées à la configuration du spectre d'énergie. Pour cette raison, la généralisation de ces méthodes aux cas réaliste a été confrontée à ce problème, ce qui a restreint l'applicabilité des deux méthodes à quelques éléments. Aussi, dans le cas réaliste nous avons utilisé les énergies réalistes du champ déformé de Wood-Saxon pour le modèle à particules indépendantes. Dans ce cadre nous avons effectué une étude pour les noyaux ^{48}Ti , ^{84}Zr , ^{86}Zr et ^{88}Mo . Les résultats obtenus, aussi bien pour le cas neutrons que le cas proton, ont permis d'observer là aussi la disparition de la transition de phase abrupte de l'état superfluide à l'état normal, confortant ainsi les prévisions du modèle schématique. L'évaluation des grandeurs thermodynamiques, à savoir l'énergie d'ex-

citation, la capacité calorifique et l'entropie a permis d'affirmer ces constatations. Par ailleurs, l'analyse de la capacité calorifique montre que la prise en compte des fluctuations statistiques avec la méthode MBCS, permet de trouver un comportement lissé des courbes de la capacité calorifique, et que l'inclusion des fluctuations d'origine quantique opérée par la méthode MLN, donnent une forme «S» pour ces mêmes courbes, rejoignant ainsi des résultats expérimentaux récents qui montre que cette forme est la signature des transitions de phases dans les systèmes finies comme les noyaux atomiques et les nanoparticules.

L'ensemble de ces résultats montre l'importance de traiter les fluctuations quantiques et statistiques, pour les systèmes finis comme les noyaux chauds en présence de corrélations d'appariement, et leur influence sur le phénomène des transitions de phases, ainsi que leur important effet sur les grandeurs thermodynamiques.

Notons que la méthode de projection utilisée à savoir la méthode de Lipkin Nogami est une méthode de projection approximative, et que l'élimination des fluctuations quantiques n'est pas totale, et il serait intéressant d'utiliser des méthodes de projection plus exactes, ce qui pourrait faire l'objet de futur étude. Dans ces perspectives le traitement des fluctuations quantiques et statistiques peut être étendu aux systèmes riches en protons dont $N=Z$, et à l'étude d'autres grandeurs sensibles à l'effet d'appariement.

Annexe

Soit

$$S(\beta) = 1 - \int_0^{\beta} H_1(\tau) S(\tau) d\tau \quad (4.10)$$

En étirant successivement $S(\tau)$ par son expression, on obtient :

$$\begin{aligned} S(\beta) &= 1 - \int_0^{\beta} H_1(\tau_1) d\tau_1 + \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} H_1(\tau_1) H_1(\tau_2) d\tau_2 + \dots + \\ &\quad (-1)^n \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n H_1(\tau_1) \dots H_1(\tau_n) \\ &= 1 + \sum_{n \geq 1} (-1)^n \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} d\tau_2 \dots \int_0^{\tau_{n-1}} d\tau_n H_1(\tau_1) \dots H_1(\tau_n) \end{aligned} \quad (4.11)$$

Ce développement correspond au développement d'une exponentielle, qu'on montre comme suit :

Pour ce faire prenant le second terme pour exemple :

$$I = \int_0^{\beta} d\tau_1 \int_0^{\tau_1} H_1(\tau_1) H_1(\tau_2) d\tau_2 \quad (4.12)$$

utilisant le résultat connu suivant :

$$\int_a^b dx \int_a^x f(x, y) dy = \int_a^b dy \int_y^b f(x, y) dx \quad (4.13)$$

ce qui permet d'écrire I comme :

$$I = \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} H_1(\tau_1) H_1(\tau_2) d\tau_2 = \int_0^\beta d\tau_2 \int_{\tau_2}^\beta H_1(\tau_1) H_1(\tau_2) d\tau_1 \quad (4.14)$$

On intervertit les variables d'intégration ($\tau_1 \rightarrow \tau_2$ et $\tau_2 \rightarrow \tau_1$) :

$$I = \int_0^\beta d\tau_1 \int_{\tau_1}^\beta H_1(\tau_1) H_1(\tau_2) d\tau_2 \quad (4.15)$$

En considérant la même contribution des deux termes de l'égalité (4.14) on peut mettre I sous la forme suivante :

$$\begin{aligned} I &= \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^{\tau_1} H_1(\tau_1) H_1(\tau_2) d\tau_2 + \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_{\tau_1}^\beta H_1(\tau_1) H_1(\tau_2) d\tau_2 \\ I &= \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \left[\int_0^{\tau_1} H_1(\tau_1) H_1(\tau_2) d\tau_2 + \int_{\tau_1}^\beta H_1(\tau_1) H_1(\tau_2) d\tau_2 \right] \end{aligned} \quad (4.16)$$

Introduisant, à présent, le produit chronologique de Wick ou T.produit défini par :

$$T_\tau \{A(\tau_1).B(\tau_2)\} = \begin{cases} A(\tau_1)B(\tau_2) & \text{si } \tau_1 \succ \tau_2 \\ -B(\tau_2)A(\tau_1) & \text{si } \tau_1 \prec \tau_2 \end{cases} \quad (4.17)$$

dont les facteurs sont rangés par ordre croissant en fonction du paramètre τ , de droite à gauche.

et comme H_1 est continue quelle que soit la valeur de $\tau \in [0, \beta]$ on trouve :

$$I = \frac{1}{2} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 T_\tau \{H_1(\tau_1) . H_1(\tau_2)\} \quad (4.18)$$

et en généralisant ce résultat pour les autres termes de la somme :

$$\begin{aligned}
S(\beta) &= 1 + \sum_{n \geq 1} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \dots \int_0^\beta d\tau_n T_\tau \{H_1(\tau_1) \dots H_1(\tau_n)\} \\
&= \sum_{n \geq 0} \frac{(-1)^n}{n!} \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \dots \int_0^\beta d\tau_n T_\tau \{H_1(\tau_1) \dots H_1(\tau_n)\}
\end{aligned} \tag{4.19}$$

qu'on peut écrire comme suit :

$$S(\beta) = T_\tau \left\{ \exp \left[- \int_0^\beta H_1(\tau) d\tau \right] \right\} \tag{4.20}$$

Bibliographie

- [1] J. Bardeen, L.N. Cooper, and J.R. Schrieffer, Phys. Rev. **108**, 1175(1957).
- [2] C.NGO, and H.NGO, Physique statistique à l'équilibre et hors équilibre, Masson, Paris(1995).
- [3] A. Schiller, M. Guttormsen, M. Hjorth-Jensen, J-Rekstad, and, S. Siem, Phys Rev, **C66**, 024322 (2002).
- [4] M. D'Agostino and al., Phys. Lett. B **371**, 175 (1996).
- [5] M. D'Agostino and al., Phys. Lett. B **473**, 219 (2000).
- [6] M. Sano and S. Yamazaki, Prog. Theor. Phys. **29**, 397 (1963).
- [7] L.G.Moretto, Nucl.Phys.**A 182** 141(1972);**A 185** 145(1973).
- [8] N.Dinh Dang,Z.Phys.A-Atomic Nuclei **335**,253(1990).
- [9] A. Schiller, A. Bjerve, M. Guttormsen, M. Hjorth-Jensen, F. Ingebretsen, E.Melby, S.Messelt, J. Rekstad, S. Siem, and S. W. Odegard, Phys. Rev. **C 63**, 021306(R) (2001).
- [10] M. Fella, T. F. Hammann and D. E. Medjadi, Phys. Rev. **C8** 1585(1973).
- [11] M. Fella and T.F. Hammann, Nuovo Cimento. **30A** 239(1975).
- [12] H.J. Lipkin, Ann.Phys. **31**, 203(1960)
- [13] Y. Nogami, Phys. Rev. **B 134**, 313, (1964).
- [14] Y. Nogami and I.J. Zucker, Nucl. Phys. **60**, 203, (1964).
- [15] Y. Nogami, Phys.Lett. **15**, 335 (1965).
- [16] H.C. Pradhan, Y. Nogami, and J. Law, Nucl. Phys. **A201**, 357 ,(1973).
- [17] D.J. Rowe, Nuclear collective motion, Methuen, Londre(1970).

- [18] Y.R.Shimizu and R.A. Broglia, Nucl. Phys. **A 515**, 38 (1990).
- [19] K.Hagino and G.F.Bertsch, Nucl. Phys, **A679**, 163, (2000).
- [20] M.Sambataro, and N.Dinh.Dang, Phys.Rev. **C59**, 1422 (1999).
- [21] P. Ring and P. Schuck, The NuclearMany-Body Problem, Springer, Berlin(1980).
- [22] L.G.Moretto, Phys Lett **40B**, 1 (1972).
- [23] A.L.Goodman,Nucl.Phys. **A352**,30 (1981).
- [24] D. J. Dean, S. E. Koonin, K. Langanke, P. B. Radha,and Y. Alhassid, Phys. Rev. Lett. **74**, 2909 (1995).
- [25] H. Nakada and Y. Alhassid, Phys. Rev. Lett. **79**, 2939(1997).
- [26] S. Rombouts, K. Heyde, and N. Jachowicz, Phys. Rev. **C58**, 3295 (1998).
- [27] J. A. White, S. E. Koonin, and D. J. Dean, Phys. Rev. **C 61**, 034303 (2000).
- [28] S. Liu and Y. Alhassid, Phys. Rev. Lett. **87**, 022501(2001).
- [29] R. Rossignoli and P. Ring, Ann. Phys. (N.Y.) **235**, 350(1994).
- [30] Y. Alhassid and J. Zingman, Phys. Rev. **C 30**, 684(1984).
- [31] Y. Alhassid and B.W. Bush, Nucl. Phys. **A549**,43 (1992).
- [32] P. Arve, G. Bertsch, B. Lauritzen, and G. Puddu, Ann.Phys. (N.Y.) **183**, 309 (1988)
- [33] B. Lauritzen, P. Arve, and G.F. Bertsch, Phys. Rev. Lett. **61**, 2835 (1988).
- [34] R. Rossignoli, A. Ansari, and P. Ring, Phys. Rev. Lett.**70**, 1061 (1993).
- [35] P.Arve,G.Bertsch, and G.Puddu,Ann.phys **183**, 309(1988).
- [36] K. Kaneko, and A. Schiller, Phys. Rev. **C 75**, 044304 (2007).
- [37] R. Rossignoli, N. Canosa, and P. Ring, Phys. Rev. Lett **80**, 1853 (1998).
- [38] B. Lauritzen, G. Puddu, P.F. Bortignon, and R.A.Broglia, Phys. Lett. B 246, 329 (1990) ;
B. Lauritzen, A. Anselmino, P.F. Bortignon, and R.A. Broglia, Ann.Phys. (N.Y.) **223**, 216 (1993).
- [39] H. Attias and Y. Alhassid, Nucl. Phys. **A625**, 565 (1997).
- [40] B. K. Agrawal, Tapas Sil, J. N. De, and S. K. Samaddar,Phys. Rev. **C 62**, 044307 (2000).

- [41] B. K. Agrawal, Tapas Sil, S. K. Samaddar, and J. N. De, Phys. Rev. **C 63**, 024002 (2001).
- [42] N.Dinh Dang, and V.Zelevinsky, Phys.Rev.**C64**, 064319(2001).
- [43] N.Dinh Dang, and A.Arima, Phys.Rev.**C 67**, 014304, (2003).
- [44] N.Dinh Dang, and A.Arima, Nucl.Phys.**A722**, 383c (2003).
- [45] N.Dinh Dang, and A.Arima, Phys.Rev.**C68**, 044303(2003).
- [46] N.Dinh Dang, and A.Arima, Phys.Rev.**C68**, 014318(2003).
- [47] N.Dinh Dang, Nucl.Phys.**A** (2006).
- [48] N.Dinh Dang, Phys.Rev.**C76** 064320(2007).
- [49] S.G. Nilsson, Mat. Fys. Medd. Dan. Vid. Selesk. **29** 16(1955).
- [50] R.D Woods, and D.S Saxon, Phys. Rev. **95**, 577(1954)
- [51] S.T. Belyaev, and K. Dan. Selsk, Mat.Fys. Medd, **11**, 31(1959).
- [52] A. Bohr, B. R. Mottelson, and D. Pines, Phys. Rev. **110**, 936 (1958).
- [53] A.Messiah, Mécanique Quantique Tome 2, Dunod, Paris(1964).
- [54] A.Lagoutine. Elements de statistique quantique, OPU, Oran(1987)
- [55] A.I. Vdovin, and A.N. Storozhenko. Eur. Phys. J. **A 5**, 263 (1999).
- [56] R. P. Feynman, Phys. Rev. **90**, 1116(1953) ; R. P. Feynman, Phys. Rev. **91**, 1291(1953) ; R. P. Feynman, Phys. Rev. **91**, 1301(1953)
- [57] J.Hubbard, Phys.Rev, Lett **3**, 77 (1959) ; R.L.Stratonovich, Dokl. Akad. Nauk S.S.S.R **115**, 1097(1957).
- [58] P.Arve, G.Bertsch, G.Puddu, Ann.phys **183**, 309(1988)
- [59] R.Rossignoli, and N.Canosa, J.L.Edigo, Nucl Phys, **A6051**(1996)
- [60] L.P.Kadnoff, and G.Bayam, Quantum Statistical Mecanics, W.A.Benjamin, inc. New York(1962)
- [61] Ait Gougam. L, Mémoire de magister, (U.S.T.H.B 1999)
- [62] Boudali. F, Mémoire de magister, (U.S.T.H.B 2008).
- [63] W.Greiner, and J.Maruhn, Nuclear models, .springer, New York(1995).
- [64] V.Yu. Ponomarev, and A.I. Vdovin, Nucl.Phys, **A 824** 24(2009).

- [65] M.R. Oudih, Thèse de Doctorat, (U.S.T.H.B 2003).
- [66] A.Haddouche, Mémoire de Magister, (U.S.T.H.B 2010).
- [67] W.Greiner,L.Neiser, and H.Stöcker, Thermodynamics and statistical mechanics, Springer-Verlag, New York(1995).
- [68] R.W. Richardson, Phys. Lett. **3**,277 (1963).
- [69] R.W. Richardson, Phys. Lett. **5**,82. (1963).
- [70] R.W. Richardson and N. Sherman, Nucl. Phys. **52**,221 (1964)
- [71] .R.W. Richardson, Phys. Lett. **14**, 325(1965).
- [72] R.W. Richardson, J. Math. Phys. **18**,1802(1977).
- [73] R.W. Richardson, and N. Sherman, Nucl. Phys. **52**, 221 (1977).
- [74] V.Yu. Ponomarev, and A.I. Vdovin, Phys. Rev. **C74**, 059802(2005).
- [75] V.Yu. Ponomarev, and A.I. Vdovin,Nucl Phys, **A 824**,24(2009)
- [76] L.Landau, and E.Lifchitz. Physique statistique,Editions Mir,.Moscou(1994)
- [77] H.C. Pauli, Phys. Rep. **7C**,37(1973).
- [78] N.H. Allal and M. Fellah, Phys. Rev. **C50**, 1404(1994) .
- [79] S. G. Nilsson , C. F. Tsang, A. Sobiczewski, I. L. Lamm, P. Möller and B. Nilsson, Nucl.Phys., **A131**,1(1969).
- [80] M. Brack and P. Quentin, Nucl. Phys. **A361**,35(1981) .
- [81] F.Simkovic, Ch. C. Moustakidis, L. Pacearescu and A. Faessler, Phys. Rev. **C68**, 054319(2003).
- [82] G. Audi, and A.H. Wapstra, Nucl. Phys. **A595**, 409 (1995).
- [83] J. Von Delft, Ann. Phys. **10**, 219 (2001).
- [84] Y.Alhassid, Nucl Phys, **A 788**, 357 (2007).
- [85] Z.Kargar, Phys.Rev, **C75** , 064319 (2007).