Fermions en interaction attractive et état cohérent de paires

DEA de physique quantique 2003-2004

Examen de mécanique quantique I

Y. Castin et I. Carusotto

On considère un ensemble de particules indiscernables fermioniques en interaction. Chaque particule a deux états de spin orthogonaux possibles, notés $|\uparrow\rangle$ et $|\downarrow\rangle$. Les particules de spin opposé $\uparrow$ et $\downarrow$ interagissent par un potentiel attractif, alors que les particules de même état de spin n'interagissent pas. L'objectif du problème est de décrire de façon approchée l'état fondamental du gaz de particules par une approche variationnelle, le vecteur d'essai étant un état cohérent de paires de particules.

La partie 1 construit cet état cohérent de paires et en détermine quelques propriétés générales. La partie 2 identifie l'état cohérent de paires d'énergie minimale pour un Hamiltonien modèle à une dimension d'espace et en précise la signification physique dans le cas d'une attraction très forte. Il est conseillé de traiter les questions et les parties dans leur ordre d'apparition.

1 État cohérent de paires

1.1 Opérateur de création d'une paire

On considère le vecteur d'état à deux particules fermioniques :

$$|\Psi_{12}\rangle = \frac{1-P_{12}}{\sqrt{2}}|\phi_{12}\rangle|\uparrow\downarrow\rangle \tag{1}$$

où P_{12} est l'opérateur de transposition des deux particules, $|\phi_{12}\rangle$ est un vecteur d'état quelconque, *a priori* sans symétrie d'échange particulière, de deux particules fictives sans spin, et l'état de spin $|\uparrow\downarrow\rangle$ est le produit tensoriel de la particule 1 dans l'état de spin $\uparrow$ et de la particule 2 dans l'état de spin $\downarrow$:

$$|\uparrow\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle. \tag{2}$$

a) Le vecteur d'état $|\Psi_{12}\rangle$ est-il correctement antisymétrisé ? Quelle doit être la normalisation de $|\phi_{12}\rangle$ pour que $|\Psi_{12}\rangle$ soit correctement normalisé ?

b) On travaille désormais en seconde quantification. On appelle $C^\dagger$ l'opérateur de création d'une paire de fermions dans l'état $|\Psi_{12}\rangle$, et son hermitien conjugué C l'opérateur d'annihilation correspondant. Montrer que

$$C^\dagger = \int d^d\mathbf{r} \int d^d\mathbf{r}'\, \phi_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')\hat{\psi}^\dagger_\uparrow(\mathbf{r})\hat{\psi}^\dagger_\downarrow(\mathbf{r}') \qquad (3)$$

où d est la dimension de l'espace, $\phi_{12}(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ est la fonction d'onde associée à l'état $|\phi_{12}\rangle$ et $\hat{\psi}_\uparrow$, $\hat{\psi}_\downarrow$ sont les opérateurs champ.

c) On utilise sans la démontrer la décomposition de Schmidt du vecteur d'état de deux systèmes quantiques quelconques, permettant d'écrire ici :

$$|\phi_{12}\rangle = \sum_\alpha \lambda_\alpha |A_\alpha\rangle \otimes |B_\alpha\rangle \qquad (4)$$

où les coefficients λ_α sont réels, l'ensemble des $|A_\alpha\rangle$ est une base orthonormale de l'espace des états d'une particule sans spin, et l'ensemble des $|B_\alpha\rangle$ est aussi une base orthonormale de l'espace des états d'une particule sans spin. On notera que ces deux bases orthonormales sont en général distinctes. Montrer que

$$\sum_\alpha \lambda_\alpha^2 = 1. \qquad (5)$$

d) En utilisant la forme de Schmidt (4), écrire l'opérateur de création d'une paire sous la forme

$$C^\dagger = \sum_\alpha \lambda_\alpha \hat{c}^\dagger_{\alpha\uparrow}\hat{c}^\dagger_{\alpha\downarrow} \qquad (6)$$

où $\hat{c}^\dagger_{\alpha\uparrow}$ est l'opérateur de création d'une particule dans l'état $|A_\alpha\rangle|\uparrow\rangle$ et $\hat{c}^\dagger_{\alpha\downarrow}$ est l'opérateur de création d'une particule dans l'état $|B_\alpha\rangle|\downarrow\rangle$. Expliquer brièvement pourquoi les $\hat{c}$ et $\hat{c}^\dagger$ satisfont aux relations d'anticommutation habituelles.

e) Sachant que $C^\dagger$ crée une paire de fermions, pourquoi est-il naturel physiquement de s'interroger sur la valeur du commutateur de C et $C^\dagger$?

f) À partir des relations d'anticommutation satisfaites par les $\hat{c}$, exprimer le commutateur $[C, C^\dagger]$ comme la somme d'une constante numérique et d'une forme quadratique en les $\hat{c}$ et $\hat{c}^\dagger$ mise dans l'ordre normal (tous les créateurs à gauche, tous les annihilateurs à droite). À quelle conclusion arrive-t-on en général dans le contexte de la question 1.1e ?

1.2 Propriétés de l'état cohérent de paires

L'objectif de cette sous-partie est l'étude des propriétés de l'état quantique d'une assemblée de fermions donné par

$$|\gamma\rangle = \mathcal{N} e^{\gamma C^\dagger}|0\rangle \qquad (7)$$

où γ est un nombre réel, $\mathcal{N}$ est un facteur de normalisation et $|0\rangle$ est le vide des fermions. Il est commode dans toute la suite de poser

$$\Gamma_\alpha \equiv \gamma\lambda_\alpha. \tag{8}$$

a) Par analogie avec le cas d'un champ bosonique, justifier l'appellation d'état cohérent de paires pour $|\gamma\rangle$. De même, justifier l'appellation de condensat de paires pour l'état obtenu en projetant $|\gamma\rangle$ sur un sous-espace à nombre total de particules fixé.

b) À l'aide de (6), montrer qu'une écriture possible de $|\gamma\rangle$ est

$$|\gamma\rangle = \mathcal{N}\left[\prod_\alpha (1 + \Gamma_\alpha \hat{c}^\dagger_{\alpha\uparrow}\hat{c}^\dagger_{\alpha\downarrow})\right]|0\rangle \tag{9}$$

et que l'on peut considérer chaque paire de modes $\{\alpha\uparrow, \alpha\downarrow\}$ comme indépendante des autres.

c) Écrire l'opérateur $\hat{N}$ donnant le nombre total de particules en fonction des $\hat{c}^\dagger$ et des $\hat{c}$. À partir de la forme (9), montrer que le nombre moyen de particules dans l'état $|\gamma\rangle$ vaut

$$\langle \hat{N}\rangle = \sum_\alpha \frac{2\Gamma_\alpha^2}{1+\Gamma_\alpha^2}. \tag{10}$$

On raisonnera indépendamment sur chaque paire de modes.

d) De même, montrer que la valeur moyenne du commutateur de C et $C^\dagger$ dans l'état $|\gamma\rangle$ est donnée par

$$\langle [C, C^\dagger]\rangle = 1 - 2\sum_\alpha \lambda_\alpha^2 \frac{\Gamma_\alpha^2}{1+\Gamma_\alpha^2}. \tag{11}$$

Qu'en déduit-on dans le cas où tous les Γ_α sont beaucoup plus petits que 1 ?

e) Toujours en raisonnant indépendamment sur chaque paire de modes $\{\alpha\uparrow, \alpha\downarrow\}$, montrer que

$$\langle \hat{c}_{\alpha\downarrow}\hat{c}_{\alpha\uparrow}\rangle = \langle \hat{c}^\dagger_{\alpha\uparrow}\hat{c}^\dagger_{\alpha\downarrow}\rangle = \frac{\Gamma_\alpha}{1+\Gamma_\alpha^2}. \tag{12}$$

Que vaudrait $\langle \hat{c}_{\alpha\downarrow}\hat{c}_{\beta\uparrow}\rangle$ dans le cas de deux indices α et β distincts ?

f) On admet que le théorème de Wick est applicable au calcul des valeurs moyennes dans l'état cohérent de paires $|\gamma\rangle$. Déduire des questions précédentes que la variance du nombre de particules dans l'état $|\gamma\rangle$ vaut

$$\mathrm{Var}\,\hat{N} = \sum_\alpha \frac{4\Gamma_\alpha^2}{(1+\Gamma_\alpha^2)^2}. \tag{13}$$

Montrer l'inégalité

$$\mathrm{Var}\,\hat{N} \leq 2\langle \hat{N}\rangle. \tag{14}$$

Qu'en déduire à la limite $\langle \hat{N}\rangle \gg 1$?

g) Que devient l'inégalité (14) dans le cas où tous les Γ_k sont $\ll 1$? Retrouver ce résultat à partir d'une propriété connue de la variance du nombre de particules dans un état cohérent d'un champ bosonique.

2 Application : état fondamental de fermions en interaction attractive

Dans cette partie, on effectue un calcul variationnel de l'état fondamental d'un gaz de fermions à une dimension d'espace avec des interactions binaires attractives en utilisant l'état cohérent de paires $|\gamma\rangle$ comme vecteur d'essai.

2.1 Hamiltonien modèle

a) Les fermions vivent dans un espace à une dimension, sur un intervalle de longueur L avec des conditions aux limites périodiques. Montrer que l'opérateur énergie cinétique du gaz s'écrit en seconde quantification :

$$H_{cin} = \sum_k \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \epsilon_k \hat{a}^\dagger_{k,\sigma} \hat{a}_{k,\sigma} \tag{15}$$

où $\hat{a}^\dagger_{k,\sigma}$ est l'opérateur création d'un fermion de composante de spin σ dans l'onde plane de vecteur d'onde k et

$$\epsilon_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}, \tag{16}$$

m étant la masse d'une particule.

b) Le potentiel d'interaction entre les particules 1 et 2 ne change pas l'état de spin des particules et est de portée nulle :

$$V_{12} = g\delta(x_1 - x_2) \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} |1:\sigma\rangle\langle 1:\sigma| \otimes |2:-\sigma\rangle\langle 2:-\sigma| \tag{17}$$

où la constante g est appelée constante de couplage, δ est la distribution de Dirac, x_1 et x_2 sont les positions des particules 1 et 2. Expliquer pourquoi ce potentiel d'interaction se manifeste dans l'état de spin singulet des deux particules, mais pas dans l'état triplet.

c) V est le Hamiltonien d'interaction entre les particules du gaz. Écrire V en termes des V_{ij} en première quantification. Montrer qu'en seconde quantification, V peut s'écrire sous la forme

$$V = \int_0^L dx\, g \hat{\psi}^\dagger_\uparrow(x) \hat{\psi}^\dagger_\downarrow(x) \hat{\psi}_\downarrow(x) \hat{\psi}_\uparrow(x). \tag{18}$$

d) Comme le calcul variationnel est effectué avec un état à nombre total de particules non fixé, on se place dans l'ensemble grand canonique. Montrer que ceci revient à remplacer ϵ_k par

$$\xi_k = \epsilon_k - \mu \tag{19}$$

dans H_{cin}, où μ est le potentiel chimique.

2.2 Énergie moyenne de l'état cohérent de paires et sa minimisation

Il s'agit maintenant de calculer l'énergie moyenne de l'état cohérent de paires $|\gamma\rangle$. On utilise pour cela plusieurs résultats de la section 1.

a) On s'intéresse à l'état fondamental du gaz. Expliquer pourquoi il est alors naturel de supposer que la fonction d'onde $\phi_{12}(x_1, x_2)$ est (i) une fonction de la coordonnée relative $x \equiv x_1 - x_2$ seulement, (ii) une fonction paire, (iii) une fonction réelle.

b) On décompose cette fonction en série de Fourier :

$$\phi_{12}(x_1, x_2) = \frac{1}{L} \sum_k \phi_k e^{ik(x_1 - x_2)}. \tag{20}$$

Montrer que $|\phi_{12}\rangle$ se met immédiatement sous la forme de Schmidt (4), l'indice α étant identifié dans la suite avec l'indice k. Donner le lien entre λ_k et ϕ_k. Préciser les fonctions d'onde des états $|A_k\rangle$ et $|B_k\rangle$ correspondants. En déduire que

$$\hat{c}_{k\uparrow} = \hat{a}_{k,\uparrow} \qquad \hat{c}_{k\downarrow} = \hat{a}_{-k,\downarrow}. \tag{21}$$

c) En s'inspirant du calcul du nombre moyen de particules de la section 1, montrer que la valeur moyenne de l'énergie cinétique incluant la contribution du potentiel chimique est

$$\langle H_{cin+\mu} \rangle = \sum_k \frac{2\xi_k \Gamma_k^2}{1 + \Gamma_k^2}. \tag{22}$$

d) Quelle est la signification physique de la quantité

$$\rho_\uparrow \equiv \langle \hat{\psi}_\uparrow^\dagger(x) \hat{\psi}_\uparrow(x) \rangle \ ? \tag{23}$$

Dépend-elle de la position x ? À partir d'un résultat de la section 1, obtenir la valeur de $\rho_\uparrow$ sans calcul.

e) Exprimer l'opérateur champ $\hat{\psi}_\uparrow(x)$ en fonction des opérateurs $\hat{a}_{k,\uparrow}$, puis en fonction des opérateurs $\hat{c}_{k\uparrow}$. Faire de même pour l'opérateur champ $\hat{\psi}_\downarrow(x)$. À partir d'un résultat de la partie 1, calculer la quantité

$$\Delta \equiv g \langle \hat{\psi}_\uparrow(x) \hat{\psi}_\downarrow(x) \rangle \tag{24}$$

en fonction des Γ_k. Cette quantité dépend-t-elle de la position x ?

f) Montrer que $\langle \hat{\psi}_\uparrow^\dagger(x) \hat{\psi}_\downarrow(x) \rangle = 0$.

g) En utilisant le théorème de Wick, montrer que l'énergie d'interaction moyenne vaut

$$\langle V \rangle = \frac{g}{L}\left[\left(\sum_k \frac{\Gamma_k}{1+\Gamma_k^2}\right)^2 + \left(\sum_k \frac{\Gamma_k^2}{1+\Gamma_k^2}\right)^2\right]. \tag{25}$$

h) On considère dans cette question le cas sans interaction, $g = 0$. Quel est le choix des Γ_k minimisant l'énergie moyenne totale ? Que vaut alors l'état $|\gamma\rangle$? Coincide-t-il avec l'état fondamental exact du gaz ?

i) On considère désormais le cas d'interactions attractives, $g < 0$. Exprimer le fait que la dérivée première de l'énergie moyenne totale par rapport à chaque Γ_k est nulle. On doit trouver l'équation du second degré suivante, que l'on ne cherchera pas à résoudre :

$$\Gamma_k^2 + 2\frac{\tilde{\xi}_k}{\Delta}\Gamma_k - 1 = 0 \tag{26}$$

où l'on a posé

$$\tilde{\xi}_k = \epsilon_k - \tilde{\mu} \quad \text{et} \quad \tilde{\mu} = \mu - g\rho_\uparrow. \tag{27}$$

Interpréter physiquement ce décalage du potentiel chimique μ.

j) On suppose que Δ est positif. Pourquoi doit-on prendre pour chaque Γ_k la racine positive de l'équation (26) ?

2.3 Étude de la limite fortement attractive

On se place maintenant dans le cas où $g \to -\infty$ à densité du gaz fixée.

a) On suppose que l'état $|\gamma\rangle$ d'énergie minimum a alors des coefficients Γ_k tous beaucoup plus petits que 1. Montrer qu'on peut dans ce cas négliger un terme dans l'équation (26), et exprimer Γ_k en fonction de Δ et $\tilde{\xi}_k$.

b) Δ est à son tour une fonction des Γ_k, que l'on simplifiera à la limite $\Gamma_k \ll 1$. On obtient ainsi une équation fermée portant sur Δ et les $\tilde{\xi}_k$, que l'on précisera. En déduire une condition pour avoir $\Delta \neq 0$. À la limite thermodynamique, et en supposant que $\tilde{\mu} < 0$, cette condition doit s'écrire

$$-\frac{1}{g} = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dk}{2\pi} \frac{1}{2|\tilde{\mu}| + \hbar^2 k^2/m}. \tag{28}$$

c) Calculer l'intégrale (28) précédente et obtenir la valeur de $\tilde{\mu}$ en fonction de m, g et $\hbar$. En déduire que le décalage $g\rho_\uparrow$ de μ est négligeable dans la limite $g \to -\infty$.

d) On donne l'information suivante : deux particules sans spin de masse m interagissant dans l'espace libre à une dimension avec le potentiel d'interaction $g\delta(x)$ possèdent, pour $g < 0$, un et un seul état lié d'énergie

$$\epsilon_0 = -\frac{mg^2}{4\hbar^2} \tag{29}$$

et de fonction d'onde

$$\chi_0(x) = \frac{1}{\sqrt{2l}} e^{-|x|/(2l)} \tag{30}$$

où

$$l = \frac{\hbar^2}{m|g|} \tag{31}$$

est son extension spatiale caractéristique. Vérifier que $\mu \simeq \epsilon_0/2$. Interpréter très soigneusement ce résultat : que suggère-t-il sur la nature de l'état fondamental du gaz ?

e) On a vu dans la question 2.2b le lien entre Γ_k et la composante de Fourier ϕ_k de la fonction d'onde $\phi_{12}(x_1, x_2)$. En déduire que $\phi_{12}(x_1, x_2)$ est proportionnel à $\chi_0(x_1 - x_2)$ à la limite thermodynamique. Conclure alors sur la nature de l'état fondamental du gaz dans le cadre de notre calcul variationnel.

f) $\rho_\uparrow$ est une fonction des Γ_k, que l'on simplifiera à la limite $\Gamma_k \ll 1$. Montrer alors à la limite thermodynamique qu'à un facteur numérique près :

$$\frac{\Delta^2}{\mu^2} \propto \rho_\uparrow l. \tag{32}$$

En déduire que l'hypothèse des Γ_k tous très inférieurs à 1 est valable lorsque la distance moyenne entre particules est beaucoup plus grande que la taille de l'état lié à deux corps. Ce résultat vous paraît-il compatible avec votre conclusion à la question précédente sur la nature de l'état fondamental du gaz ?

g) Tous ces résultats reposent sur l'hypothèse que la fonction d'onde de paire $\phi_{12}(x_1, x_2)$ dépend seulement de $x_1 - x_2$. Cette hypothèse vous paraît-elle *a posteriori* nécessairement correcte ?

2.4 Applicabilité du théorème de Wick

On montre ici que le théorème de Wick est applicable au calcul des valeurs moyennes dans l'état cohérent de paires $|\gamma\rangle$.

a) On introduit dans cette question un intermédiaire de calcul, l'opérateur

$$U_\alpha(\nu) \equiv e^{\nu(\hat{c}^\dagger_{\alpha\uparrow}\hat{c}^\dagger_{\alpha\downarrow} - \hat{c}_{\alpha\downarrow}\hat{c}_{\alpha\uparrow})} \tag{33}$$

où ν est un nombre réel. Montrer que U_α est unitaire. On donne ensuite l'identité suivante :

$$U_\alpha(\nu)|0\rangle = \left(\cos\nu + \sin\nu\, \hat{c}^\dagger_{\alpha\uparrow}\hat{c}^\dagger_{\alpha\downarrow}\right)|0\rangle. \tag{34}$$

Sans faire de calcul entièrement explicite, donner une idée de démonstration de cette identité.

b) Montrer que, pour un choix judicieux du facteur de normalisation $\mathcal{N}$, l'état $|\gamma\rangle$ peut s'écrire :

$$|\gamma\rangle = S|0\rangle \tag{35}$$

où l'on a introduit l'opérateur unitaire

$$S \equiv \prod_\alpha U_\alpha(\nu_\alpha), \tag{36}$$

chaque nombre réel ν_α étant relié à Γ_α d'une façon que l'on précisera.

c) On rappelle que le vide est l'état fondamental de l'opérateur nombre total de particules $\hat{N}$. En déduire que $|\gamma\rangle$ est l'état fondamental d'un certain Hamiltonien $\mathcal{H}$ que l'on exprimera en fonction de S et $\hat{N}$.

d) Expliquer sans calcul explicite pourquoi $S\hat{c}_{\alpha\uparrow}S^{-1}$ est nécessairement une combinaison linéaire des $\hat{c}$ et des $\hat{c}^\dagger$. En déduire que le Hamiltonien $\mathcal{H}$ est un Hamiltonien quadratique en les $\hat{c}$ et $\hat{c}^\dagger$.

e) En déduire que le théorème de Wick est applicable au calcul des valeurs moyennes dans l'état $|\gamma\rangle$.