Bosons en interaction sur un réseau

DEA de physique quantique 2002-2003

Examen de mécanique quantique I

Y. Castin et I. Carusotto

On considère un modèle discrétisé de l'espace des positions à d dimensions, modèle dans lequel les coordonnées cartésiennes du vecteur position d'une particule prennent seulement des valeurs discrètes qui sont les multiples entiers d'une longueur l :

$$r_\alpha = n_\alpha l \tag{1}$$

où α représente la direction de l'espace (α va de 1 à d) et n_α est un entier relatif quelconque.

L'avantage d'un telle formulation discrète est que l'on peut modéliser l'interaction entre deux particules bosoniques sans spin par un potentiel en delta discret :

$$V(\vec{r}) = \frac{g_0}{l^d}\delta_{\vec{r},\vec{0}} \tag{2}$$

où $g_0 > 0$ est appelée constante de couplage nue, $\vec{r} = \vec{r}_1 - \vec{r}_2$ est le vecteur position relative des deux particules et δ est le delta discret de Kronecker. Le pas du réseau introduit en effet une coupure en énergie proportionnelle à $\hbar^2/ml^2$ ce qui rend la théorie exempte de divergence.

L'espace physique en réalité est continu, ce qui oblige à passer à la limite $l \to 0$ à la fin des calculs et ce qui nécessite un choix adéquat de g_0. Nous proposons de mettre ici en œuvre cette procédure. La partie 1 étudie la diffusion d'une onde sur le potentiel en delta discret. La partie 2 calcule l'énergie du fondamental de N bosons en interaction en l'absence de potentiel extérieur, à la limite thermodynamique et dans l'approximation de Bogoliubov. Il est conseillé de traiter les questions et les parties dans leur ordre d'apparition.

1 Diffusion d'une particule sur un delta discret

Dans cette partie, à l'exception de la question 1.1, on traite le cas d'une seule particule sur le réseau, diffusée par le potentiel (2). Cette particule a une masse $m/2$, c'est-à-dire la masse réduite de deux bosons de masse m.

1.1 Bref retour sur le cas continu

Dans cette question, on retourne temporairement au cas habituel de l'espace libre continu.

a) Écrire l'équation de Schrödinger pour l'état stationnaire de diffusion $\phi_0(\vec{r})$ d'énergie nulle d'une particule de masse $m/2$ par un potentiel quelconque $W(\vec{r})$.

b) On suppose que le potentiel W est de portée finie b, c'est-à-dire que W est nul pour $r = ||\vec{r}|| > b$. Donner la forme la plus générale de la fonction d'onde ϕ_0 en dehors du potentiel, dans les cas $d = 1$, $d = 2$ et $d = 3$. On rappelle que ϕ_0, étant un état stationnaire de diffusion d'énergie nulle, dépend, en dehors du potentiel, seulement de la distance à l'origine r. On donne également l'expression du Laplacien à 3D en coordonnées sphériques, et à 2D en coordonnées polaires :

$$\Delta\phi_0(r) = \phi_0''(r) + \frac{d-1}{r}\phi_0'(r) \tag{3}$$

où $d = 2$ ou 3.

c) En déduire que la diffusion à très basse énergie par le potentiel W est caractérisée en dimension quelconque ≤ 3 par un seul paramètre a ayant la dimension d'une longueur. Vérifier dans le cas tridimensionnel que a coincide avec la notion habituelle de longueur de diffusion.

d) Montrer que le fait de prendre pour $W(\vec{r})$ un potentiel en distribution delta de Dirac

$$W(\vec{r}) = g\delta(\vec{r}), \tag{4}$$

où g est une constante, conduit à une divergence dans l'équation de Schrödinger en dimensions $d = 2$ et $d = 3$ mais pas en $d = 1$.

1.2 Matrice T pour un delta discret

Une particule se propage sur le réseau et est diffusée par le potentiel en delta discret de l'équation (2).

a) On représente l'état de la particule localisée au nœud $\vec{r}$ du réseau par le ket $|\vec{r}\rangle$ normalisé comme suit :

$$\langle\vec{r}|\vec{r}\,'\rangle = \frac{\delta_{\vec{r},\vec{r}\,'}}{l^d}. \tag{5}$$

Écrire formellement la relation de fermeture correspondante sur la base $|\vec{r}\rangle$. Comment justifier le choix de normalisation (5)?

b) On représente l'onde plane de vecteur d'onde $\vec{k}$ par le ket $|\vec{k}\rangle$ tel que

$$\langle \vec{r}\,|\vec{k}\,\rangle = e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \tag{6}$$

Montrer que les composantes de $\vec{k}$ ont un sens modulo une période que l'on précisera. Vérifier la relation de fermeture

$$\int_{C_d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d}\, |\vec{k}\rangle\langle\vec{k}| = \mathrm{Id} \tag{7}$$

où C_d représente le domaine

$$C_d = \left[-\frac{\pi}{l}, \frac{\pi}{l}\right]^d. \tag{8}$$

c) On considère la matrice T à l'énergie E :

$$T(E+i\eta) = V + VG(E+i\eta)V \tag{9}$$

où $\eta \to 0^+$, V est le potentiel en delta discret, $G(z)$ est la résolvante du Hamiltonian total somme de l'énergie cinétique et du potentiel V. Vérifier que V peut s'écrire

$$V = g_0|\vec{r} = \vec{0}\,\rangle\langle\vec{r} = \vec{0}\,|. \tag{10}$$

En déduire l'expression de T en terme d'un élément de matrice bien précis de la résolvante G.

d) En utilisant une relation de récurrence sur $G(z)$, calculer l'élément de matrice de G en question et exprimer la matrice T en fonction de g_0 et de l'intégrale

$$I(E) = \int_{C_d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \frac{1}{E + i\eta - \dfrac{\hbar^2 k^2}{m}}. \tag{11}$$

1.3 Limite de basse énergie

On considère ici le cas d'une énergie E positive, que l'on peut donc écrire sous la forme

$$E = \frac{\hbar^2 k_0^2}{m} \tag{12}$$

où k_0 est positif.

a) Si $k_0 l$ est inférieur à une valeur que l'on précisera, montrer que le calcul de la partie imaginaire de $I(E)$ est très simple. Effectuer ce calcul explicitement en dimensions $d = 3$ et $d = 2$.

b) On se place en dimension $d = 3$. Montrer que la partie réelle de $I(E)$ admet une limite finie lorsque $E \to 0^+$, limite dont on donnera la valeur sous forme d'une intégrale que l'on ne cherchera pas à calculer.

c) Dans cette question, on établit le lien avec le cas d'un espace continu. À trois dimensions, la matrice T de diffusion par un potentiel W à courte portée a pour expression approchée à basse énergie :

$$\langle \vec{k}_f | T(E+i\eta) | \vec{k}_i \rangle = \frac{g}{1+ik_0 a} \tag{13}$$

où la constante de couplage effective g vaut $4\pi\hbar^2 a/m$, a est la longueur de diffusion du potentiel W, et les vecteurs d'onde $\vec{k}_i$ et $\vec{k}_f$ sont quelconques. Montrer que si l'on choisit la relation suivante entre g_0 et g :

$$g = g_0 \left[1 + g_0 \int_{C_3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2 k^2} \right]^{-1}, \tag{14}$$

la matrice T du modèle discret reproduit bien la matrice T du cas continu dans la limite des basses énergies. Comment g_0 dépend-il du pas du réseau l ?

d) À partir de la relation (14), justifier l'affirmation qu'"un potentiel en delta de Dirac ne diffuse pas".

e) On se place en dimension $d = 2$. Peut-on prendre directement $E = 0$ dans (11) pour calculer la partie réelle de $I(E)$? Comment la partie réelle de $I(E)$ diverge-t-elle dans la limite de basse énergie ? On pourra décomposer le carré $C_2 = [-\pi/l, \pi/l]^2$ en le disque D_2 de rayon π/l centré à l'origine et son complémentaire dans C_2.

f) À deux dimensions, on donne la limite de basse énergie de la matrice T d'un potentiel W à courte portée pour le cas de l'espace continu :

$$\langle \vec{k}_f | T(E+i\eta) | \vec{k}_i \rangle = -\frac{2\pi\hbar^2/m}{\ln(ak_0/2) + \gamma - i\pi/2} \tag{15}$$

où γ est une constante numérique, la constante d'Euler. Cette forme vous semble-t-elle reproductible par la matrice T du modèle discret pour un choix judicieux de g_0 ? On ne cherchera pas à faire des calculs totalement explicites.

2 Énergie du fondamental dans l'approximation de Bogoliubov

Dans cette partie, on place sur le réseau N bosons de masse m interagissant deux à deux par le potentiel (2). On suppose que le gaz est à température nulle et on souhaite calculer son énergie dans l'approximation de Bogoliubov. Comme d'habitude en physique statistique, on enferme le gaz dans une boîte "cubique" de côté L avec des conditions aux limites périodiques puis on passe à la limite thermodynamique à la fin des calculs :

$$N \to +\infty \quad \text{avec} \quad \rho = \frac{N}{L^d} = \text{cte}. \tag{16}$$

Notons que L doit être ici un multiple entier de l.

a) On définit l'opérateur champ $\hat{\psi}(\vec{r})$ comme l'opérateur d'annihilation d'une particule dans l'état $|\vec{r}\rangle$ normalisé comme dans la partie 1. Donner les relations de commutation de l'opérateur champ. Comparer au cas de l'espace continu.

b) Dans un premier temps, on se place dans l'approximation d'un condensat pur, où les N bosons sont dans le même vecteur d'état $|\phi\rangle$ à une particule minimisant l'énergie moyenne. Donner la fonction d'onde correspondante $\phi(\vec{r}) = \langle \vec{r}|\phi\rangle$. Donner l'énergie du gaz correspondante, E_0^{cm}, l'exposant cm signifiant “champ moyen”.

c) On prend en compte maintenant la première correction à l'approximation du condensat pur. On rappelle pour cela quelques éléments utiles de la théorie de Bogoliubov : l'opérateur $\hat{\Lambda}$ introduit dans le cours de mécanique quantique admet la décomposition de Bogoliubov :

$$\hat{\Lambda}(\vec{r}) = \sum_{\vec{k}} \hat{b}_{\vec{k}} u_{\vec{k}}(\vec{r}) + \hat{b}^{\dagger}_{\vec{k}} v^{*}_{\vec{k}}(\vec{r}). \tag{17}$$

Les fonctions modales sont des ondes planes :

$$u_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{L^{d/2}} U_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}} \tag{18}$$

$$v_{\vec{k}}(\vec{r}) = \frac{1}{L^{d/2}} V_k e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}}. \tag{19}$$

Préciser le domaine de variation de $\vec{k}$ dans la somme (17). Écrire explicitement les équations aux valeurs propres satisfaites par U_k et V_k sans chercher à les résoudre. Rappeler quelle relation sur U_k, V_k est imposée par la normalisation des modes. Les opérateurs d'annihilation de quasi-particule $\hat{b}_{\vec{k}}$ possèdent les relations de commutation bosoniques habituelles. Rappeler comment ils permettent de définir l'état fondamental du gaz dans l'approximation de Bogoliubov.

d) À l'aide de la théorie de Bogoliubov, donner une expression de la fraction d'atomes non condensés en terme des V_k. Montrer que la fraction non condensée admet une limite finie lorsque l'on fait tendre le pas du réseau l vers zéro à g_0 fixé, quelle que soit la dimension de l'espace $d \leq 3$. On rappelle la valeur de V_k :

$$V_k = \frac{1}{2}\left[\left(\frac{q^2}{q^2+2}\right)^{1/4} - \left(\frac{q^2+2}{q^2}\right)^{1/4}\right] \tag{20}$$

où l'on a posé

$$\frac{\hbar^2 k^2}{2m} = \rho g_0 q^2, \tag{21}$$

$\rho = N/L^d$ étant la densité moyenne du gaz. En pratique, au-dessous de quelle valeur de l la fraction de particules non condensées ne dépend-elle plus de l ? On appelle ξ cette valeur critique de l. Vous semble-t-il important de choisir $l < \xi$ dans le modèle discret ? On suppose cette condition satisfaite dans la suite.

e) La fraction non condensée admet-elle une limite finie à la limite thermodynamique ? On distinguera les cas $d = 1, d = 2$ et $d = 3$. Dans les cas où un condensat existe à la limite thermodynamique, donner la condition sur g_0 pour que la fraction non condensée soit faible. Dans le cas $d = 3$, on pourra introduire la longueur a_0 telle que

$$g_0 = \frac{4\pi\hbar^2 a_0}{m}. \tag{22}$$

f) On souhaite calculer la première correction E_0^{Bog} à la prédiction de champ moyen pour l'énergie de l'état fondamental du gaz. On rappelle pour cela l'expression du Hamiltonien de Bogoliubov :

$$H_{\mathrm{Bog}} = \sum_{\vec{r}} l^d \left[\hat{\Lambda}^\dagger \left(\frac{p^2}{2m} + g_0\rho\right)\hat{\Lambda} + \frac{1}{2} g_0\rho \left(\hat{\Lambda}^2 + \hat{\Lambda}^{\dagger 2}\right)\right] \tag{23}$$

et sous forme réduite

$$H_{\mathrm{Bog}} = E_0^{\mathrm{Bog}} + \sum_{\vec{k}} \epsilon_k \hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}}. \tag{24}$$

On notera que l'action de l'opérateur énergie cinétique $p^2/2m$ sur une onde plane de vecteur d'onde $\vec{k}$ se réduit à la multiplication par $\hbar^2 k^2/2m$. Calculer E_0^{Bog}. On pourra éliminer la contribution de U_k en utilisant l'équation aux valeurs propres satisfaite par V_k, pour arriver à une expression contenant seulement ϵ_k et V_k^2. On donnera cette expression dans la limite thermodynamique en remplaçant la somme sur $\vec{k}$ par une intégrale sur un domaine que l'on précisera.

g) On rappelle l'expression du spectre de Bogoliubov

$$\epsilon_k = \left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m}\left(\frac{\hbar^2 k^2}{2m} + 2g_0\rho\right)\right]^{1/2} \tag{25}$$

et le comportement asymptotique de V_k aux grands vecteurs d'onde :

$$V_k \sim -\frac{m g_0 \rho}{\hbar^2 k^2}. \tag{26}$$

En déduire que E_0^{Bog} diverge en dimensions $d = 2$ et $d = 3$ si l'on fait tendre le pas du réseau l vers zéro à g_0 fixé.

h) On prend maintenant en compte la dépendance de g_0 en le pas du réseau. On considère désormais le cas de la dimension $d = 3$, où l'on dispose de l'expression explicite (14). On souhaite se placer dans le régime

$$l \gg a_0 \tag{27}$$

où a_0 est défini par l'équation (22). Montrer que ceci correspond au régime de l'approximation de Born à énergie nulle pour la matrice T du potentiel en delta discret. Montrer que, si l'on choisit l de l'ordre de ξ, la condition (27) est satisfaite automatiquement dans le régime de validité de l'approximation de Bogoliubov.

i) Expliquer pourquoi, sous les hypothèses de la question précédente, on peut remplacer g_0 par g dans E_0^{Bog}, alors qu'il faut utiliser l'expression

$$g_0 = g + g^2 \int_{C_3} \frac{d^3k}{(2\pi)^3} \frac{m}{\hbar^2 k^2} \tag{28}$$

dans l'énergie de champ moyen E_0^{cm}. Vérifier alors que l'énergie totale $E_0 = E_0^{\mathrm{cm}} + E_0^{\mathrm{Bog}}$ ne diverge plus à la limite $l \to 0$. Comment s'appelle la technique de régularisation que nous venons d'utiliser ?

j) Calculer explicitement E_0 à la limite $l \to 0$. On donne l'intégrale

$$J = \int_0^{+\infty} dq\, q^2 \left[1 + q^2 - q\sqrt{2 + q^2} - \frac{1}{2q^2}\right] = -\frac{8\sqrt{2}}{15}. \tag{29}$$

k) Effectuer une discussion qualitative du cas $d = 2$. Le même phénomène de suppression de la divergence vous semble-t-il se produire ?